

高等学校教学参考书

固体理论

李正中 编

高等教育出版社

高等学校教学参考书

固体理论

李正中 编

高等教育出版社

内 容 简 介

本书系统地介绍了固体量子论的基本概念、方法和模型。全书共分十章，内容侧重于固体中的元激发，包括：声子、磁振子(自旋波量子)、等离激元、极化激元、准电子、极化子和激子等。对于超导电性的微观理论，能带论方法，局域态和无序态也分别作了专章介绍。此外，还简要地介绍了巡游电子磁性、近藤效应、电子-空穴液体和一维铁磁链中孤波等新课题。在附录中引入了双时推迟格林函数，书末附有习题。

本书可作综合大学及高等师范院校物理系高年级学生和研究生固体理论教材，也可供固体物理学工作者参考用。阅读本书需要具备固体物理学和高等量子力学的基础知识。

高等学校教学参考书

固 体 理 论

李正中 编

高等教育出版社出版

新华书店北京发行所发行

通县觅子店印刷厂印装

开本 850×1168 1/32 印张 15.75 字数 379,000

1985年10月第1版 1985年10月第1次印刷

印数 00,001—4,800

书号 13010·01104 定价 3.60 元

出版者前言

为适应高等学校固体物理学及各分支学科课程教学的需要，高等学校理科物理学教材编审委员会固体物理编审小组和高等教育出版社组织编写了一套固体物理学学科的教学参考书，其中包括固体物理学及其各分支学科的基础课程和实验课程用的教学参考书和一部《固体物理学大辞典》。这些书将由高等教育出版社陆续出版。

本书是这套书中的一本，由复旦大学谢希德教授和陆栋副教授审订。

序 言

本书是根据作者在南京大学物理系多年开设固体理论课程的讲义加以修改和补充而成的。作为大学物理系高年级学生和研究生掌握固体理论的入门指导，本书主要介绍固体量子论的基本模型，近似处理方法和各类元激发的物理图象。学习本书需要具备固体物理学和高等量子力学的基础知识。

从五十年代以来，应用场论方法成功地解决了金属中等离子集体振荡和超导电性等问题之后，人们开始在固体中系统地引进元激发概念，使大部分理论问题得以用统一的观点和方法描述，从而形成了固体理论的特色。

固体是由数量级为 10^{23} 个粒子所结合成的宏观体系，是一个复杂的多体系统。固体理论的基本任务在于要从微观上解释固体的各种特性，阐明其规律性。固体的基态（即 $T = 0\text{K}$ 时状态）不仅是能量最低的状态，而且还是某种有序状态。从微观角度分析，实验上所测得的宏观属性是固体在外扰动作用下从基态跃迁到激发态时所产生的响应。对于能量靠近基态的低激发状态，往往可看成是一些独立基本激发单元的集合，它们具有确定的能量和波矢，这些基本激发单元就是元激发，有时也称为准粒子。

元激发大体可以分为两类：一类是集体激发的准粒子，例如声子。此外，磁性材料中的自旋波量子（磁振子），金属中的等离子集体振荡量子（等离激元）也都是集体激发的准粒子。它们主要表现为序参量的微小涨落。这类元激发一般是玻色子。另一类元激发是个别激发。例如，在离子晶体中由于慢电子与光学模纵声子相互作用所形成的极化子就是这种个别激发的准粒子，它是离子

晶体中的基本载流子。对于金属中相互作用的电子，在元激发图象中可看作是每个电子带着正电空穴云一起运动的准粒子系统，在这里其他电子的相互作用由正电空穴云代替，此即金属中的屏蔽电子或准电子。它也是个别激发的典型例子。这样，借助于元激发的引入，可以使复杂的多体问题简化为接近于理想气体的准粒子系统，从而使低激发态的描述变得十分简单。因此，解释固体的实验测量特性问题归结为求解在给定外扰动作用下互作用系统的元激发问题，这是固体量子论的中心课题。

全书共分十章，重点在于向读者系统介绍完整晶体的元激发理论。前九章介绍完整晶体中各类互作用系统的元激发。

在安排顺序方面，我们将先介绍集体激发，后引入个别激发，因为存在集体激发是固体的主要特征，其处理方法也更有代表性。为此，我们将能带论安排在第七章。

第一章简短总结周期性与宏观对称性对固体能谱的影响。第二至第四章介绍声子、磁振子和等离激元。它们分别是离子-离子、自旋-自旋以及电子-电子互作用系统的集体激发。此外，还介绍了光子与光学模横声子的耦合型元激发——极化激元。在理论处理方法上，第二、三章介绍了二次量子化表象中的傅里叶变换和玻戈留波夫变换方法，第四章介绍求解元激发谱的介电函数方法，并在附录(A)及(B)中引入了双时格林函数，导出了介电函数与格林函数的严格关系。前四章作为固体量子论的最基本内容，也可供理论物理专业四年级学生学习之用。第五章给出了电子-声子相互作用的几种模型，为第六章系统介绍BCS超导理论作准备。在第四至第九章中所涉及的个别激发准粒子有：能带电子，极化子，激子，准电子和超导元激发(又称玻戈子)。第十章介绍有关杂质、缺陷、局域态和无序态的一些著名的工作。重点是介绍几种重要模型，如 $s-d$ 交换模型，安德逊模型和赫伯德模型等。在这一章

中我们将普遍运用格林函数方法处理问题。此外，在本书中还简要介绍了：准一维导体中孔氏异常，二维电子气，激子分子，电子-空穴液体，巡游电子磁性，以及与非线性元激发有关的一维铁磁链中孤波和准一维极化子等新课题。限于篇幅，对于表面和界面，临界现象和重正化群理论等问题未作介绍，留待读者参阅这方面的专著。书末附有一定数量的习题，供选做。

作者感谢冯端教授的热情指导，本书正是在他的建议和关心下写成的。作者对谢希德教授和陆栋副教授审阅本书并提出宝贵意见表示感谢。在修改整理过程中还得到南京大学物理系龚秀芬、胡安、许望等同志的热情帮助，谨此致谢。限于水平，错误与不妥之处请读者指正。

作 者

1984年7月

重要符号表

A	矢量势
$\langle A \rangle$	统计平均
a_H	玻尔半径
a_{ex}	激子半径
$a_i (i=1,2,3)$	正点阵基矢
$b_i (i=1,2,3)$	倒点阵基矢
BZ	第一布里渊区(简约区)
$a^+, (b^+)$	玻色子产生算符
$a, (b)$	玻色子消灭算符
$C^+(C)$	费密子产生(消灭)算符
$C_L(C_T)$	纵(横)波声速
C_{el}	超导电子比热
C_m	磁振子比热
D	电位移向量
D	扩散系数
$D_{\alpha\beta}(k), D_{\alpha\beta}(k, \omega)$	动力矩阵
e	电子电荷绝对值
$e_{k\sigma}$	格波的极化向量
E_F	费密能
E_{ex}	交换能
E_{corr}	相关能
E_K	动能
$E_n(-i\nabla), \mathcal{E}(-i\nabla)$	有效哈密顿量

F	自由能
f	费密分布
G	吉布斯函数
g	朗德因子
$g(E)$	一种自旋取向的电子态密度
$G_r(t-t')[G_a(t-t')]$	双时推迟(超前)格林函数
$G_r(\omega) \equiv \langle\langle A B \rangle\rangle_{\omega+i\eta, \eta=+0}$	双时推迟格林函数的傅氏变换
$G_a(\omega) \equiv \langle\langle A B \rangle\rangle_{\omega-i\eta, \eta=+0}$	双时超前格林函数的傅氏变换
$H, \mathcal{H}$	哈密顿量
$\bar{H}$	BCS 约化哈密顿量
h	普朗克常数
$\hbar$	$\hbar = h/2\pi$
$I (I_{NN}, I_{sN})$	隧道电流
$\vec{j}(\mathbf{r})$	电流密度
$\mathbf{K} \equiv \mathbf{K}_n = \sum_{i=1}^n n_i \mathbf{b}_i$	倒格矢
$\mathbf{k}$	波矢量
k_B	玻尔兹曼常数
k_F	费密波数
$\mathcal{L}$	拉氏量密度
M	原子(分子)质量
$M(T)$	磁化强度
$m_e^*(m_h^*)$	电子(空穴)有效质量
n	粒子数
$\hat{n}$	粒子数算符
N	元胞(格点)数
p	动量
P	极化向量

$P_{k\sigma}(P_{k\sigma}^*)$	广义动量
$Q_{k\sigma}(Q_{k\sigma}^*)$	广义坐标
q	波矢量
$\mathbf{R}_l = \sum_{i=1}^3 l_i \mathbf{a}_i \equiv l$	正格矢
$\hat{S}_l = (\hat{S}_l^x, \hat{S}_l^y, \hat{S}_l^z)$	自旋算符
$\hat{S}_l^+ (\hat{S}_l^-)$	自旋上升(下降)算符
$\hat{S}(\mathbf{q})$	自旋密度算符
S_{ee}	超导电子熵
t	时间
T	温度
T_c	临界温度
T_F	费密温度
U	电子库仑排斥势能
$U(T)$	内能
$u_l, u_l(s)$	晶格位移
v	速度
V	体积, 势能
W, w	跃迁几率
Z	配分函数, 配位数, 离子价数
α	极化子的无量纲耦合常数
β	$\beta = (k_B T)^{-1}$
Δ	能带宽度
$\Delta(T)$	超导能隙
$\Delta(\mathbf{r})$	超导能隙函数, 晶体体积的相对变化
$\epsilon(\infty) [\epsilon(0)]$	高(低)频介电常数

$\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$	介电函数
ϵ_F	从费密能算起的自由电子能量
$\zeta(3)$	黎曼函数
θ	角度
Θ_D	德拜温度
λ	波长
$\lambda(T)$	穿透深度
μ	化学势, 迁移率
ξ_0	BCS 相干长度
ξ_h	超导元激发能量
ρ	密度, 电阻率
$\rho(\omega)$	态密度
σ	电导率, 自旋取向标号
$\hat{\sigma}^z, \hat{\sigma}^+, \hat{\sigma}^-$	泡利矩阵
τ	寿命, 弛豫时间
Φ	晶格振动位能
$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{2e}$	超导磁通量子
$\Phi_{\alpha\beta}(l-l'), \Phi_{\alpha\beta}(l-l')$	晶格弹性力系数的张量
ϕ	方位角, 电子波函数
$\phi(\mathbf{r})$	位能密度
$\Psi(\Psi^+)$	二次量子化态向量
ψ	电子波函数
χ	自旋波函数
$\chi^{(k)}$	特征标
χ_F	泡利磁化率
$\chi^{-+}(\mathbf{q}, \omega)$	横向动态磁化率

ω	频率
ω_D	德拜频率
ω_P	电子的等离子振荡频率
Ω_P	离子的等离子振荡频率
Ω	正点阵元胞体积
Ω^*	倒点阵元胞体积
$d\Omega$	立体角

目 录

重要符号表

第一章 周期性结构	1
§1 正格矢与倒格矢	1
§2 平移对称性	4
§3 布洛赫定理	6
§4 布里渊区和晶体对称性	11
(1) BZ 中 $E_n(k)$ 的对称性	12
(2) $E_n(k)$ 的简并度	14
(3) 时间反演对称性	17
§5 点阵傅里叶级数	18
(1) 点阵傅里叶级数	18
(2) 周期函数的格林定理	20
参考文献	22
第二章 声子	23
§1 晶格动力学	23
§2 格波特性	27
(1) $\omega_o(k)$ 的共性特征	27
(2) 声学模与光学模	28
(3) 格波频率计算	30
§3 简正坐标	36
§4 声子	39
§5 长波方法(一)——声学模	44
§6 长波方法(二)——光学模	50
(1) 介电函数	52
(2) 横波及纵波振动方程	53
§7 极化激元	54

§8 态密度	59
§9 范·霍夫奇点	64
参考文献	69
第三章 磁振子(自旋波量子)	70
§1 自旋波图象	70
§2 海森伯模型及其严格推导	71
(1) 海森伯模型	71
(2) 海森伯哈密顿量的推导	74
§3 铁磁自旋波理论	76
(1) 铁磁体的基态	77
(2) 霍斯坦因——普里马可夫变换	78
(3) 低激发态——自旋波	80
§4 铁磁体的低温磁化强度	85
§5 反铁磁自旋波理论	88
(1) 双子格模型	89
(2) 玻戈留波夫变换	91
(3) 磁振子的零点运动	94
(4) 外场影响	95
§6 铁氧体中的自旋波	97
§7 一维铁磁链中的孤波	99
参考文献	103
第四章 等离子激元	105
§1 等离子激元和准电子	105
§2 相互作用电子气体的哈密顿量	108
§3 电子集体振荡的经典理论	110
§4 量子运动方程的无规相近似	112
§5 线性响应理论	115
§6 介电函数	119
§7 电子气体的元激发谱	122
§8 静电屏蔽	127

(1) 屏蔽势	127
(2) 孔氏异常	129
(3) 夫里德耳振荡	131
§9 基态能	133
(1) HFA 的基态能	133
(2) 电子气体的基态能公式	137
§10 维格纳晶格	142
参考文献	145
第五章 电子-声子相互作用	146
§1 相互作用过程	146
§2 电子与声频支声子的相互作用	149
§3 声子的自能修正	156
§4 电子与光频声子的相互作用	159
§5 有效电子-电子相互作用	164
(1) 电子-电子有效相互作用的微扰估计	165
(2) 正则变换方法	167
参考文献	170
第六章 超导电性的微观理论	172
§1 基本性质	172
(1) 超导态是一种新的凝聚态	172
(2) 存在能隙	173
(3) 迈斯纳效应	173
§2 BCS 约化哈密顿量	175
§3 库柏对	178
§4 BCS 的超导理论	181
(1) 能隙 Δ 的计算	186
(2) 凝聚能 $\Delta E(0)$	187
(3) BCS 基态	188
(4) 超导体中的元激发	190
(5) 超电流	192

§5 有限温度情况	194
(1) 确定 T_c	195
(2) 能隙与温度关系	197
(3) 热力学量	201
§6 单粒子隧道效应	205
§7 伦敦-皮帕的唯象理论	211
(1) 伦敦方程	211
(2) 皮帕公式	213
§8 迈斯纳效应	216
(1) 互作用哈密顿量 H	216
(2) 电流密度算符	217
(3) 弱磁场中的电流响应	219
(4) $K(q)$ 的计算	221
§9 金兹堡-朗道方程	226
(1) $G-L$ 自由能	226
(2) $G-L$ 方程	228
(3) $G-L$ 参数 $\kappa(T)$	229
(4) 磁通量子化	234
参考文献	237
第七章 能带论	238
§1 平面波法的困难	238
§2 正交化平面波法(OPW)	242
§3 赝势方法	246
(1) OPW 赝势	247
(2) 赝势法的非唯一性特征	248
(3) 赝势计算方案	250
§4 近自由电子方法的赝势证明	253
§5 元胞法	255
(1) 维格纳-赛茨的计算	258
(2) $k=0$ 点附近有效质量的计算	260
§6 缀加平面波法(APW)	264

§7 KKR 方法	271
§8 布洛赫表象和瓦尼尔表象	276
(1) 布洛赫表象	276
(2) 瓦尼尔表象	277
(3) 布洛赫与瓦尼尔表象中的二次量子化算符	279
(4) 瓦尼尔函数方程	280
§9 有效哈密顿量	282
§10 TBA 法及其二次量子化表示	287
(1) 紧束缚近似(TBA)	287
(2) TBA 哈密顿量的二次量子化表示	290
参考文献	292
第八章 极化子理论	294
§1 大极化子与小极化子	294
§2 大极化子的弗留里希哈密顿量	295
§3 LLP 中间耦合理论	297
(1) 消去电子坐标的正则变换	297
(2) 位移振子变换	299
(3) 极化子的自能 $E(P)$	301
(4) LLP 理论的适用范围	304
§4 大极化子的迁移理论	307
(1) Chew-Low 的散射理论	307
(2) 极化子的迁移率	310
§5 小极化子理论	315
(1) 小极化子的哈密顿量	316
(2) 位移振子变换	318
(3) 小极化子的能带理论	320
(4) 小极化子的跳跃运动	323
(5) 两种导电机制的转变温度 T_t	326
§6 一维极化子理论	327
参考文献	332
第九章 激子理论	333