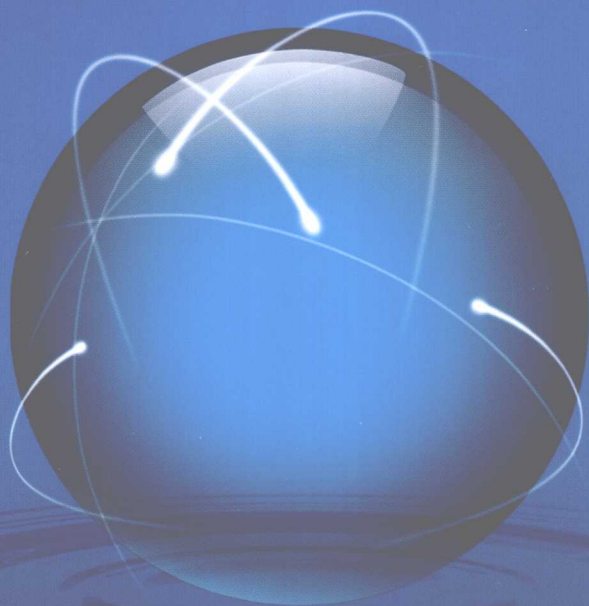



凝聚态物理专题

Special Topic of Condensed Matter Physics

© 徐慧 编著



 中南大学出版社

凝聚态物理专题

编 著 徐 慧

编 委 杨兵初 郭光华 李晓春

朱开成 曹 建 李宏建

周继承 李燕峰

中南大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

凝聚态物理专题/徐慧编著. —长沙:中南大学出版社,2009
ISBN 978-7-81105-922-9

I. 凝... II. 徐... III. 凝聚态—物理学 IV. 0469

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 092322 号

凝聚态物理专题

徐 慧 编 著

责任编辑 邓立荣

责任印制 文桂武

出版发行 中南大学出版社

社址:长沙市麓山南路

邮编:410083

发行科电话:0731-88876770

传真:0731-88710482

印 装 长沙市华中印刷厂

开 本 787×1092 1/16 印张 24.5 字数 625 千字

版 次 2009 年 7 月第 1 版 2009 年 7 月第 1 次印刷

书 号 ISBN 978-7-81105-922-9

定 价 49.80 元

图书出现印装问题,请与出版社调换

序

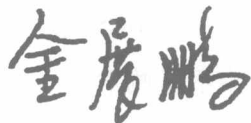
凝聚态物理学，是当今物理学最庞大和最重要的分支之一。它由固体物理学演变而来，业已成为物理学最活跃的前沿领域。凝聚态物理学的发展与时俱进，伴随着实验技术、计算技术和理论概念的不断提升，越来越多地融入到了化学、生物、材料、信息等学科领域，促进了学科的交叉融合，加快了人类文明进化的进程。

凝聚态物理学的研究对象是复杂的，研究过程是艰辛的，但也是充满魅力和激动人心的。在其领域内诞生的很多基础研究成果，为现代社会经济和生活的方方面面带来了巨大的影响与冲击，如：高温超导材料与超导机理的研究，尽管已经存在的 BCS 理论、共价键理论、双极子机制和激子理论等尚未得到统一认识，但并不影响和阻止其应用于实际生产生活，目前超导体的零电阻转变温度已经达到上百开(K)，实用化的项目业已开展；纳米技术自 20 世纪 90 年代兴起，已发展为涵盖纳米生物学、纳米电子学、纳米机械学等领域的研究体系，人们通过对如量子尺寸效应、量子隧道效应、电子反常输运及库仑阻塞等现象的研究，已经实现了可应用于新一代计算机的超微结构量子器件与电路，极大地提升和拓展了计算机的应用能力；此外，还包括 DNA 生物链结构、纳米碳管器件、声子晶体、光子晶体等方面。可以说，凝聚态物理学为促进人类科技进步和提升人民生活水平发挥了巨大的作用。

同时，凝聚态物理学作为新材料、新能源等学科领域的理论基础之一，在今后一段时期更凸显了其重要性及广阔前景。鉴于此，《国家中长期科学和技术发展规划纲要(2006—2020 年)》中，就明确地把“凝聚态物质与新效应”作为重要的发展研究目标之一(科学前沿问题)，重大科学研究计划等很多内容也都显现了凝聚态物理学的“身影”。作为物理教学和科研工作者，应抓住这一千载难逢的好时机，紧密围绕国家战略需求，面向世界科学研究前沿，努力培养一批凝聚

态物理及相关领域高水平的年轻科学家和学术骨干，形成一支精于科研、勤于奉献的研究和教学队伍。

中南大学是国家“985 工程”和“211 工程”重点高校，通过多年来的积淀和建设，在材料、冶金和生物等学科领域形成了鲜明的学科特色和优势；作为这类学科的基础学科，凝聚态物理在提高工科学科的基础理论研究能力上具有重要的作用，其发展可以更好地提升学校的学科特色和优势。徐慧等教育工作者以学校实际教学和科研需求为出发点，紧密结合自身学科特点及所取得的科研成果，以培养本专业和学校相关专业高层次创新型人才为目的，从内容浩瀚、纷繁复杂的凝聚态物理世界里，提取专题，凝练内容，编撰了此书。该书以各自相对独立的章节，较为详细地介绍了材料计算、无序体系、超导体、磁性物质、声子晶体、光子晶体、半导体微电子器件、有机电致发光、纳米器件和功能薄膜材料等，体现了作为研究生教学用书和相关专业学生读物的实用性和针对性，对从事凝聚态物理教学和科研人员也具有一定的指导和参考价值。



中国科学院院士

2009 年 6 月

前 言

凝聚态物理学是研究凝聚态物质的微观结构、运动状态、物理性质及其相互关系的科学。目前自然科学研究领域很多分支,如金属物理学、半导体物理学、磁学、低温物理学、电介质物理学、表面物理学、非晶态物理学及低维固体物理学等都属于该科学领域,可以说,凝聚态物理是当今物理学中最庞大,同时也是发展最为迅速的一个学科。其不但涵盖了物理和材料等众多基础学科的理论知识,也包括了当前最先进的实验技术和高精尖科研器件作为研究手段,研究内容从传统的晶体材料、功能材料,到独具特性的特种材料,如氧化物超导体、 C_{60} 、纳米管、光子晶体等。

目前世界上对其研究已处于非常活跃的时期,新的现象和概念不断涌现,其理论的深度和广度不断得到拓展,可以说许多重要的研究成果和尖端科技都从属于凝聚态物理学,如临界现象、低维无序体系、超导体、量子相干现象、非线性现象等。我国在这一前沿领域的研究也蓬勃开展起来,人们对其的理解也不断深化。为配合我校研究凝聚态物理的学科需要,为培养高水平凝聚态物理学和材料物理学人才,建设好适应形势发展需要的凝聚态物理学科以及相关学科课程和教材体系,这就要求对教材不断更新,吸收最新的研究成果,用更合理简洁的结构组织材料,阐述理论,以期适应社会和经济建设发展需要。

本书在体系上进行了全新的调整,从理论计算体系出发,延伸到相对独立的各个研究领域。第1章为计算材料学,介绍了凝聚态物理学和材料科学的发展框架,讲解了计算材料学的研究范畴、基本思想和研究方法。第2章为无序系统电子输运,介绍了无序系统的概念、经典模型、计算方法及其成功应用。第3章为超导电性,介绍了超导电性的基本模型及效应,以及高温超导体等研究热点。第4章为物质磁性,系统介绍了磁性物质基本性质、效应及电子理论。第5章为声子晶体,介绍了声子晶体的概念以及弹性波理论,声子晶体的带隙分析法、缺陷结构分析,并介绍了局域共振声子晶体和声子晶体的制备及测试。第6章为光子晶体,介绍了光子晶体概念、制备以及应用等。第7章为半导体微电子器件原理与工艺,介绍了半导体材料应用和制备技术。第8章为有机电致发光器件原理与制备,介绍了有机电致发光材料的发展、工作原理及制备等。第9章为纳电子原型器件特性与模拟,介绍了纳电子器件的实验模型、工作原理和应用等。第10章为功能薄膜材料,介绍了薄膜的形成及导电机

理、典型应用等。

为了建设我校具有特色的研究生专业基础课教材,该书各章均挑选在其领域内从事多年教学科研工作的学者、教授编著,选取适合自身情况的内容,在总结研究讲义等基础上,本着“内容先进,体例完善,集成优势,体现特色”的原则,分类整理撰写,每章均力求抓住其领域内的发展趋势和研究热点,以达到新颖实用的目的。此教材内容翔实,系统性强,弥补了我校凝聚态物理等专业研究生课程在此领域的一个空白。

考虑到材料科学等专业实际教学情况,在内容安排上,尽量做到深入浅出,使学生可以抓住主要理论基础,配合以相应的理论教科书,以适应实际的教学需要。

在本书的写作过程中,获得了多方面的支持和协助,杨兵初、郭光华、李晓春、朱开成、曹建、李宏建、周继承教授根据研究组多年的教学科研经验总结编写了部分章节,李燕峰、刘小良和马松山老师编写了本书部分章节。由于我们的知识和水平有限,编写教材的时间仓促,许多地方会有错误和不妥之处,敬请读者批评指正。

编者

2009年6月

目 录

第 1 章 计算材料学	(1)
1.1 凝聚态物理与材料计算	(1)
1.1.1 凝聚态物理理论与应用概述	(1)
1.1.2 材料科学技术发展现状及趋势	(5)
1.1.3 计算机与材料设计学	(7)
1.2 经典的材料计算方法	(12)
1.2.1 材料计算的主要方法和应用范围	(12)
1.2.2 微观领域三种主要的计算方法	(13)
1.3 计算科学在材料学中的应用	(23)
1.3.1 半导体超晶格	(23)
1.3.2 团簇体系	(25)
1.3.3 金属中的缺陷	(28)
1.3.4 金属化合物掺杂	(29)
1.3.5 超硬材料	(31)
1.4 第一性原理的相图热力学计算应用	(34)
1.4.1 相图计算的发展概述	(34)
1.4.2 相图计算及常用相模型	(36)
1.4.3 第一性原理计算相图热力学初探	(38)
参考文献	(39)
第 2 章 无序系统电子输运	(41)
2.1 无序系统的分类	(41)
2.2 无序系统模型	(43)
2.2.1 无序系统的哈密顿量	(43)
2.2.2 Anderson 模型	(44)
2.2.3 Mott 模型	(44)
2.2.4 纳米材料无序模型	(44)
2.2.5 DNA 分子无序模型	(45)
2.2.6 无序格点振动模型	(46)
2.3 无序系统的处理方法	(47)
2.3.1 负本征值理论	(47)
2.3.2 无序阶微扰理论及本征矢的计算	(48)

2.3.3	多对角全随机厄米矩阵本征问题求解	(49)
2.3.4	雁式矩阵本征问题求解	(51)
2.3.5	转移矩阵方法	(52)
2.4	无序系统电子局域态和振动局域模	(52)
2.4.1	电子态密度	(52)
2.4.2	无序系统电子波函数局域态	(54)
2.4.3	无序系统电子波函数局域长度	(57)
2.4.4	局域态和扩展态的转变	(59)
2.4.5	准一维无序系统电子态	(61)
2.4.6	无序系统格点振动局域模	(63)
2.5	无序系统中的电子输运	(65)
2.5.1	无序体系电子输运研究进展	(65)
2.5.2	无序体系电导模型	(68)
2.5.3	无序体系电子跳跃输运电导公式	(69)
2.6	纳米材料中的电子输运特性	(71)
2.6.1	纳米材料结构与电子输运特性的关系	(72)
2.6.2	纳米材料电子输运与温度的关系	(73)
2.7	DNA 分子中的电子输运	(73)
2.7.1	DNA 分子电导特性	(74)
2.7.2	DNA 分子器件的应用	(75)
	参考文献	(76)

第3章 超导电性 (78)

3.1	超导电性的基本现象和性质	(78)
3.1.1	基本的实验现象	(78)
3.1.2	超导电性的其他性质	(81)
3.1.3	两类超导体	(82)
3.2	传统超导体的唯象模型	(84)
3.2.1	二流体模型	(84)
3.2.2	伦敦方程	(84)
3.2.3	金兹堡-朗道理论	(86)
3.2.4	磁通量子化	(88)
3.3	BCS 理论	(88)
3.3.1	电子-电子有效吸引作用	(89)
3.3.2	库柏对	(89)
3.3.3	BCS 理论的结论	(90)
3.3.4	微观理论与持续电流	(91)
3.4	超导隧道效应	(92)
3.4.1	超导体和正常金属之间的隧道效应	(93)

3.4.2	两个相同超导体间的隧道效应	(94)
3.4.3	约瑟夫森效应	(95)
3.4.4	超导量子干涉器	(98)
3.5	高 T_c 氧化物超导体	(99)
3.5.1	高温超导体的发现	(99)
3.5.2	高温超导体的特征	(100)
3.5.3	几种氧化物超导体的晶体结构	(101)
3.5.4	超导态的性质	(103)
3.6	几个高温超导机制模型	(105)
3.6.1	极化子 - 双极化子模型	(105)
3.5.2	以费米液体理论为基础的超导机制	(107)
3.5.3	吸引 Hubbard 模型	(108)
	参考文献	(109)
第 4 章	物质的磁性	(110)
4.1	原子的磁矩	(110)
4.1.1	电子的轨道磁矩	(110)
4.1.2	电子的自旋磁矩	(111)
4.1.3	多电子原子的磁矩	(111)
4.1.4	原子核的磁矩	(113)
4.2	物质的磁性	(114)
4.2.1	抗磁性物质	(114)
4.2.2	顺磁性物质	(116)
4.2.3	铁磁性物质	(117)
4.2.4	反铁磁性物质	(121)
4.2.5	亚铁磁性物质	(125)
4.2.6	非共线性磁结构	(127)
4.3	磁有序物质的局域电子理论	(127)
4.3.1	海森堡交换相互作用理论	(128)
4.3.2	间接交换相互作用理论	(131)
4.3.3	RKKY 交换作用理论	(135)
4.4	磁有序的巡游电子理论	(139)
4.4.1	斯托纳模型	(139)
4.4.2	哈特利 - 福克 - 斯托纳理论	(141)
	参考文献	(147)
第 5 章	声子晶体	(149)
5.1	引论	(149)
5.1.1	声子晶体概念	(149)

5.1.2	声子晶体研究概况	(150)
5.1.3	声子晶体研究意义	(152)
5.2	弹性波理论	(153)
5.3	声子晶体带隙分析方法	(158)
5.3.1	常用方法简介	(158)
5.3.2	平面波展开法	(159)
5.3.3	双组元复合介质	(163)
5.3.4	两种类型的声子晶体	(165)
5.3.5	常见的晶体排列	(166)
5.3.6	二维声子晶体带结构的计算实例	(168)
5.4	声子晶体缺陷结构分析	(171)
5.4.1	平面波超元胞法	(172)
5.4.2	点缺陷	(174)
5.4.3	线缺陷	(179)
5.4.4	无序结构	(185)
5.5	局域共振声子晶体	(192)
5.5.1	局域共振机制提出的背景	(192)
5.5.2	局域共振机制	(192)
5.5.3	组合宽带隙结构	(195)
5.6	声子晶体的制备与性能测试	(198)
5.6.1	声子晶体的制备	(198)
5.6.2	声子晶体性能测试	(198)
	参考文献	(202)
第6章	光子晶体	(205)
6.1	基本概念	(205)
6.2	光子晶体的物理特征	(207)
6.3	光子晶体的理论与分析方法	(209)
6.3.1	平面波方法(PWM)	(211)
6.3.2	差分或有限差分法	(212)
6.3.3	转移矩阵方法	(212)
6.3.4	N 阶(Order N)法	(213)
6.3.5	散射矩阵法	(213)
6.3.6	一维光子晶体中的光子带隙讨论	(213)
6.3.7	一维光子晶体透、反射系数的传输矩阵方法计算	(216)
6.4	光子晶体的制备	(217)
6.4.1	一维光子晶体的制作	(218)
6.4.2	二维光子晶体的制作	(218)
6.4.3	三维光子晶体的制作	(219)

6.5 光子晶体的应用	(224)
6.5.1 光波控制光学元件设计中的应用	(224)
6.5.2 发光器件中的应用	(227)
6.5.3 非线性光子晶体器件	(230)
6.6 展望	(230)
参考文献	(231)
第7章 半导体微电子器件原理与工艺	(234)
7.1 绪论	(234)
7.1.1 信息处理技术和材料	(235)
7.1.2 信息传递技术和材料	(237)
7.1.3 信息存储技术和材料	(237)
7.1.4 信息显示技术和材料	(238)
7.1.5 获取信息的技术和材料	(239)
7.1.6 小结	(240)
7.2 半导体物理学	(240)
7.3 半导体材料	(243)
7.4 化合物半导体微电子器件及集成电路	(247)
7.5 半导体光电子器件	(251)
7.6 电力电子器件	(253)
7.6.1 应用领域	(253)
7.6.2 电力电子器件的发展现状与趋势	(254)
7.7 微电子制造工艺	(256)
7.7.1 半导体制造中的化学品	(257)
7.7.2 硅片制造中的沾污控制	(259)
7.7.3 氧化	(260)
7.7.4 淀积	(262)
7.7.5 金属化	(264)
7.7.6 光刻	(265)
7.7.7 刻蚀	(269)
7.7.8 掺杂	(270)
7.8 微机电系统与敏感器件	(273)
7.8.1 敏感器件	(273)
7.8.2 微电子机械系统	(275)
参考文献	(277)
第8章 有机电致发光器件原理与制备	(278)
8.1 有机电致发光的特点	(278)
8.1.1 有机电致发光颜色的丰富性	(278)

8.1.2	有机电致发光器件结构的多样性	(279)
8.1.3	有机电致发光注入电极的重要性	(281)
8.2	有机电致发光的基本理论	(282)
8.2.1	不同材料界面的接触效应	(282)
8.2.2	有机电致发光机理	(287)
8.3	有机电致发光器件的制备	(297)
8.3.1	小分子材料器件的制备	(297)
8.3.2	聚合物器件的制备	(297)
8.4	金属/有机界面修饰	(298)
8.4.1	阴极界面修饰	(298)
8.4.2	阴极界面修饰作用机理	(298)
8.4.3	阳极界面修饰	(300)
8.5	有机电致发光器件的效率及寿命	(302)
8.5.1	发光效率及其影响因素	(302)
8.5.2	电致发光器件的寿命	(303)
8.6	有机电致发光器件的驱动方式	(303)
8.7	优势与挑战	(304)
	参考文献	(305)

第9章 纳电子原型器件特性与模拟 (309)

9.1	实验研究进程及器件模型的提出	(309)
9.2	微电子学技术及超大规模集成电路的发展限制	(310)
9.3	单电子晶体管和电子存储器	(311)
9.3.1	库仑堵塞和量子隧穿	(312)
9.3.2	单电子晶体管的基本结构	(312)
9.3.3	纳米尺度的单电子晶体管	(313)
9.3.4	纳米尺度的单电子存储器	(315)
9.3.5	分子尺度的单电子晶体管	(316)
9.3.6	单原子尺度的单电子晶体管	(316)
9.3.7	单电子晶体管的用途	(317)
9.4	基于量子元胞自动机的逻辑电路	(318)
9.4.1	量子元胞自动机概论	(318)
9.4.2	门电路的设计	(319)
9.4.3	实现方法	(322)
9.5	碳纳米管的实验与理论研究	(323)
9.5.1	碳纳米管的形貌	(323)
9.5.2	碳纳米管的微观结构	(324)
9.5.3	碳纳米管特性的理论研究	(326)
9.5.4	碳纳米管特性的实验研究	(326)

9.5.5 碳纳米管的应用	(327)
9.6 碳纳米管及其量子原型器件特性模拟	(328)
9.6.1 碳纳米管电学特性模拟的扩展 SSH 模型	(328)
9.6.2 碳纳米管电学特性模拟的计算方法	(329)
9.6.3 碳纳米管量子原型器件特性模拟	(330)
参考文献	(332)
第 10 章 功能薄膜材料	(336)
10.1 薄膜制备工艺的研究进展	(336)
10.2 PVD 法制备信息薄膜材料成膜机理研究	(340)
10.2.1 亚单层薄膜的成膜机理	(340)
10.2.2 三维生长薄膜的成膜机理	(341)
10.3 信息薄膜导电机理研究	(343)
10.4 压敏薄膜	(345)
10.5 温敏薄膜	(349)
10.6 湿敏与气敏薄膜	(351)
10.7 绝缘薄膜	(353)
10.7.1 氮化铝薄膜	(354)
10.7.2 Al_2O_3 薄膜	(355)
10.7.3 MgO 薄膜	(356)
10.7.4 有机绝缘薄膜	(356)
10.8 高 k 栅介质薄膜	(359)
10.9 第三代半导体薄膜	(363)
10.10 集成电路 Cu 互连阻挡层薄膜	(367)
参考文献	(372)

第1章 计算材料学

1.1 凝聚态物理与材料计算

1.1.1 凝聚态物理理论与应用概述

凝聚态物理学是从微观角度出发,研究由大量粒子(原子、分子、离子、电子)组成的凝聚态的结构、动力学过程及其与宏观物理性质之间的联系的一门学科。凝聚态物理学的研究对象除晶体、非晶体与准晶体等固相物质外,还包括稠密气体、液体以及介于液态和固态之间的各类凝聚相,例如液晶、熔盐、液态金属、电解液、玻璃、凝胶等。

凝聚态物理学已经成为当代物理学中最重要和最丰富的分支学科。从历史来看,凝聚态物理学是由固体物理学逐渐演变而来的,从古老的晶体学研究开始,对称性的提出,发现晶体学的X射线衍射现象,固体比热的概念以及自由电子理论的建立,进而发展到铁磁性研究,以及建立能带理论,可以说,经过近一个世纪的发展,目前已形成了比固体物理学更广泛更深入的理论体系。它既涵盖传统的内容,如周期结构、能带论、晶格动力学等,又涉及当今的新课题,如高温超导电性、无序体系、定域化、量子Hall效应、巨磁与庞磁电阻、Fuller烯与纳米碳管、光子晶体等。

具体说来,其发展源头可以上溯到17世纪经典物理学的开端——牛顿力学。到19世纪,经典力学新的发展表现为一些科学家重新表述了牛顿定律。还重新表述了拉格朗日(Lagrange)方程组、哈密顿(Hamilton)方程组。这些重新表述形式不一,实质并没有改变。同时,科学家们将牛顿定律推广到连续介质的力学问题中去,提出了弹性力学、流体力学,以及20世纪的流体力学、空气动力学等理论。其次,凝聚态物理的发展得益于电磁学的发展,从最初的库仑定律、奥斯特的电流磁效应和法拉第的电磁感应定律,发展至19世纪中叶麦克斯韦统一的电磁场理论,使得电学、磁学、光学得到了统一。而且,凝聚态物理的发展还得益于热力学领域的发展,首先是根据热学研究总结出的热力学两大基本规律:能量守恒律和熵恒增律,进一步就是玻尔兹曼与吉布斯所发展的经典统计力学。热力学与统计物理的发展,促使物理学家接触到具体的物性问题,加强了物理与其他学科的交叉。

相对论和量子论的两场物理学的革命,为物理学、尤其是凝聚态物理学的发展也起到了至关重要的作用,进一步为现代凝聚态物理和材料科学奠定了基础。凝聚态物理学的发展还极大地依赖于两方面的进展,一方面就是实验手段的提高,随着加速器技术、红外技术、X射线和 γ 射线技术、超高真空技术和低温技术在粒子实验、光学望远、物性探测等领域的逐步应用,许多新的物理效应的发现,显示了凝聚态物理大有可为;另一方面,在量子力学建立之后,计算机技术的发展,使得量子化学与凝聚态电子理论的从头算(ab initio)方案变得切实可行,从而促进了计算材料科学这门新的交叉学科的发展。分子动力学、蒙特卡罗方法,

乃至元胞自动机为物理学的各个分支提供了鲜明生动的物理图像和信息,以至于有些科学家认为计算和计算机模拟已成为凝聚态物理领域中可与实验和理论并立的科学研究的第三个支柱。

纵观凝聚态物理学的基本理论,如固体能带理论、点阵动力学理论、对称破缺的相变理论、缺陷理论等,都非常有效。它们解释和指导了材料的生产,如:说明了铜、铝等金属的导电性;锗、硅及砷化镓等材料的半导体性质;铁、钴、镍及一些稀土金属的铁磁性;锡、铌等金属与合金的超导电性;钛酸钡、铌酸锂、磷酸二氘钾等晶体的铁电性。可以说,现代科学研究,尤其是材料研发越来越依赖于物理理论的发展和指导,即在理论研究的方向指引下,有目的地研制和开发新型材料,如半导体及超晶格、强关联电子体系、纳米材料和有机聚合物材料等。

需要说明的是,下面的几类材料虽然在材料领域有着广泛的应用和发展前景,也具有深刻的传统材料学基础理论背景;但在其发展过程中,其物理意义更加明晰,或者说理论指导背景更加深刻和浓厚,从而可以更加清晰地看出物理学,尤其是近代凝聚态物理的发展,对新型材料的研究开发具有决定性的作用。

(1) 半导体及超晶格

从凝聚态物理理论的发展来看,其在现代半导体材料技术的发展中起到了至关重要的作用。1958年江琦等发现了夹层超结构中的隧穿电流(进而发明了隧道二极管);1960年, I. Giever 发现正常金属-绝缘层-超导体的隧道效应;1962年,约瑟夫森从理论上预言了超导体-绝缘层-超导体中电子对的隧道效应,即约瑟夫森效应;1980年,我国学者就利用铌酸锂规则的畴结构来取得激光倍频增强效应,实现了非线性光学晶体的准位相匹配,使得半导体在高频超声换能、电光效应等领域发挥了巨大作用。

可以说,隧道效应、激光倍频增强效应等凝聚态物理理论的研究,为后来的半导体电子学和超导电子学产生了深远的影响,表明了半导体材料正在从20世纪50年代块体材料向薄膜材料的过渡,转变为向铁电、压电材料和非线性光学材料过渡。

当前,现代电子元器件90%以上都是由硅材料制备的,为了进一步提高硅集成电路的速度、集成度和集成电路的成品率,半导体生产研发工作正逐步向硅微技术方向发展。随着集成电路尺寸和线宽的减小,硅微电子技术必然要遇到许多物理问题。如栅极绝缘层超高电压、沟道掺杂原子的统计分布涨落、功耗剧增和光刻技术等。可以断言,要完全解决由此带来的信息量瓶颈问题,还要继续依赖于凝聚态物理的发展,探索新原理、开发新技术。

同时,随着凝聚态物理在低维体系中理论研究的深入,人们逐渐认识到,当材料的特征尺寸在一个维度上比电子的平均自由程相比更小的时候,电子在这个方向上的运动会受到限制,电子的能量会量子化,电子的态密度函数也会发生巨大变化,其态密度函数就像是单个的分子、原子那样完全孤立的函数分布,这类材料称之为超晶格、量子线或量子阱(点)材料。

自江琦与朱兆祥于1970年首次提出了半导体超晶格的概念后,各国均开展了半导体超晶格的研究,制备了能隙高低不同的半导体多层膜,在实验中实现了量子阱、多量子阱和超晶格,观察到了极其丰富的物理效应。这类融物理理论、材料制备表征和器件设计为一体的研究,不但为半导体凝聚态物理学的发展打开了局面,而且在制出新器件上也卓有收获,制出了超快速的场效应管和高效率的半导体激光器等。目前,超晶格技术还在不断发展:正统

的超晶格是以Ⅲ—V族化合物为主；应变超晶格则扩大了应用材料的范围，诸如Ⅳ族的硅—锗合金的量子阱与超晶格，由于可和硅基的大规模集成电路相匹配而受到重视；Ⅱ—Ⅳ族的ZnSe等具有宽的能隙，以制出发射蓝光的激光器而引人注目。

随着研究尺寸的减小，巨磁阻效应也引发了人们浓厚的兴趣。半导体超晶格的周期要求小于电子的平均自由程，因而局限于几十纳米的量级；而磁性交互相互作用的范围不过几个纳米，因而相应多层膜的周期就要更短。磁电子学的研究可以追溯到1970年与自旋有关的隧道效应的实验。随后，Baibich等于1988年发现在反平行耦合的Fe—Cr多层膜中，加磁场引起的电阻的变化率 $\Delta R/R$ 达到60%。而在当时，一般材料中磁电阻的变化量级仅为1%~2%，因而这种异常的磁电阻效应被称为巨磁电阻。这一发现引起了学术界和技术界的广泛重视，1992年，两个研究组同时发现在颗粒膜中也存在巨磁阻效应。美国IBM公司的Almaden实验室利用磁电阻器件作为磁存储盘的读出磁头，存储量提高了17倍之多。巨磁电阻元件也可用作磁随机存储器、磁传感元件等，揭开了富有应用前景的磁电子学的序幕。

(2) 强关联电子体系材料

凝聚态理论的长足进展已经弄清楚了许多材料的物性问题，但是对于强关联电子体系的科学认识尚不完备，其中最突出的莫过于强关联电子体系的问题。所谓电子关联，就是意味着电子和电子之间存在库仑相互作用。传统的能带理论在处理固体中的电子系统时，首先忽略了电子之间的相互作用，将电子系统视为相互独立的理想气体，考虑单电子与晶体的周期结构之间的相互作用，从而得到了固体的能带结构，然后再引入电子间的相互作用加以修正。这样的理论处理显然适用于弱关联的电子体系，即高浓度的电子体系，其电子简并能大大超过了电子之间库仑相互作用的势能，也就是通常的宽能带物质的情况。能带理论的巨大成功往往掩盖了这一理论的不足之处，即它并不适用于强关联的电子体系，即电子浓度甚小的物质，标志电子之间库仑相互作用的关联能的重要性被凸显出来了。这类材料往往具有很窄的能带，只比完全局域化的能级略宽一点。

其实早在1937年，科学家们就发现NiO, MnO, CoO等氧化物并不是能带理论所预言的金属，而是能隙甚大的绝缘体。莫特引进关联能来解释这一物理问题，认为d电子间库仑相互作用抑制了极化涨落，产生了关联能隙，后来这一类绝缘体即被称为莫特绝缘体。莫特还进一步讨论了VO₂, V₂O₃等材料因温度或压力改变所引起的绝缘体到金属的相变，认定它们也是电子关联导致的相变，即莫特转变。

莫特绝缘体为数不少，几乎占了3d过渡金属二元氧化物中的一半，还有难以计数的多元复杂氧化物和4f稀土化合物及5f锕系化合物。强关联物质往往处于金属与绝缘体的界限附近，即电子处于完全离域化的扩展态和完全局域化的局域态能级之间。要判断电子是离域化还是局域化，就要看f电子或d电子波函数的分布范围是否和近邻产生重叠。研究表明，电子壳层体积以4f为最小，5f次之，其后乃是3d, 4d与5d。可以确认，电子态局域化程度的顺序大致为4f>5f>3d>4d>5d；换言之，电子态形成的能带宽度按此顺序增加，而关联性则按此顺序递减，且从左往右穿过周期表，部分填充电子壳层的半径逐步降低，而关联性则逐步增强。

进一步研究发现，具有强铁磁性的金属Fe, Co, Ni等的d能带具有强关联性，它们的电子巡游相互作用是其铁磁性的根源；但由于窄的d带和宽的s带交叠，因而它们的导电性仍接近于正常金属，在低温下具有反铁磁性；而以Fe₂O₃为重要成分的铁氧体，如尖晶石型的