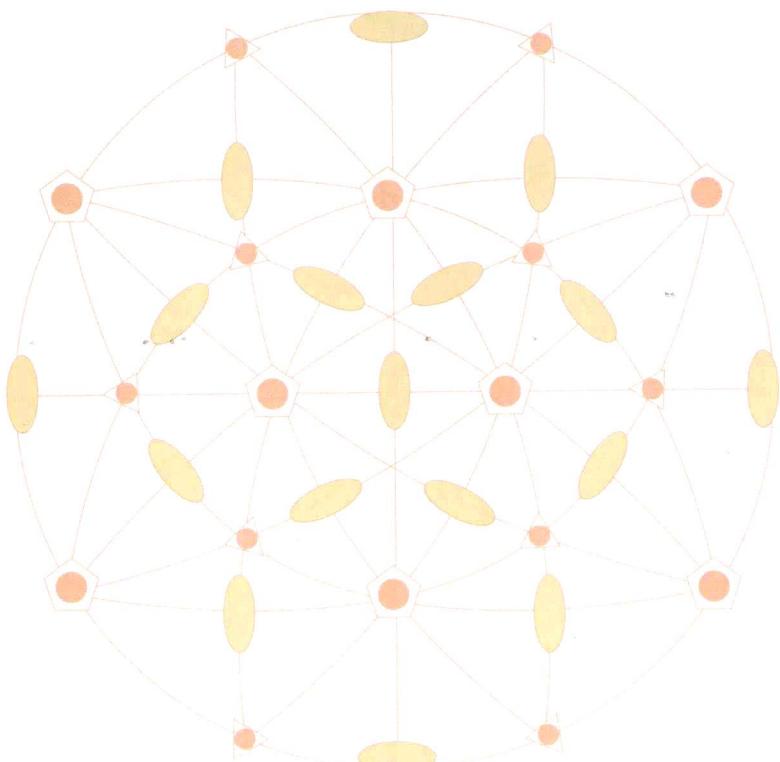


# 凝聚态物理学

(上卷)

Condensed Matter Physics (Volume I)

冯端 / 金国钧



### 图书在版编目(CIP)数据

凝聚态物理学. 上卷 / 冯端, 金国钧著. -- 北京：  
高等教育出版社, 2013.10 (2014.1重印)

ISBN 978 - 7 - 04 - 036757 - 7

I. ①凝… II. ①冯… ②金… III. ①凝聚态－物理  
学 IV. ①O469

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 315871 号

Ningjutai Wulixue

---

出版发行 高等教育出版社  
社址 北京市西城区德外大街 4 号  
邮政编码 100120  
印刷 北京中科印刷有限公司  
开本 850mm × 1168mm 1/16  
印张 39  
字数 780 千字  
购书热线 010 - 58581118

咨询电话 400 - 810 - 0598  
网 址 <http://www.hep.edu.cn>  
<http://www.hep.com.cn>  
网上订购 <http://www.landraco.com>  
<http://www.landraco.com.cn>  
版 次 2013 年 10 月第 1 版  
印 次 2014 年 1 月第 2 次印刷  
定 价 96.00 元

---

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题, 请到所购图书销售部门联系调换  
版权所有 侵权必究  
物料号 36757 - 00

## 内容提要

本书被列入新闻出版总署“十二五”国家重点图书出版规划。本书在把握从固体物理学到凝聚态物理学历史发展脉络的基础上，为凝聚态物理学建立了一个逻辑上合理明晰的概念体系，并对学科涵盖的丰富内容进行了全面系统的论述。全书除一章综览外，共有八编，计三十八章，分两卷出版。本册为上卷。

上卷以综览开头，接下来是前四编。第一编为凝聚物质的结构，论述晶态物质的结构对称性和构筑原理，并延伸至晶体之外，涉及合金、玻璃、液晶和聚合物等，以及非均质物质；第二编为各种物质结构中波的行为，从论述周期结构中波的传播出发，分别加上准周期性、表面和杂质，以及无序带来的影响，特别强调了不同结构和条件下电子的动力学和输运性质；第三编为键、能带及其它，围绕电子结构这一重要主题，分别论述了在不同场合下键和能带途径的有效性，以及在处理强关联电子系统时的局限性，也指出了可能的改进方案，进而对纳米结构的电子性质进行了论述；第四编为相变和有序相，首先利用唯象的 Landau 理论，突出对称性破缺这一核心概念，为各种不同的相变类型建立了统一的理论框架，进而分别论述了结构相变、磁有序相变和超导、超流相变，兼顾到宏观和微观的描述，最后考察了与更广义的遍历性破缺有关的相变。

本书体系精审、视野开阔、论述融贯、内容新颖，对于从事凝聚态物理学及相关学科的研究工作者是一本富有启发性且便于阅读的科学论著，也可以作为攻读凝聚态物理学与相关学科学位的研究生的入门参考书。

## 序　　言

凝聚态物理学已经成为当代物理学中最重要和最丰产的分支学科。它的特征在于研究人员众多，研究结果丰富多彩，对技术发展影响广泛，与其它学科相互渗透迅速。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。但是，由于人们对两者的学科分野缺乏明晰的认识，再加上不熟悉凝聚态物理学所引入的用以统一理论框架的新概念体系，因而，虽然已有不少优秀的固体物理学教科书，对于凝聚态物理学的教材也有一些卓有特色的尝试，但覆盖全面且条理清晰、便于理解的凝聚态物理学入门著作尚付阙如。这一令人遗憾的情况特别清楚地表现在传统的固体物理学著作与当代凝聚态物理学研究前沿之间出现的巨大鸿沟。很多学生，学过固体物理学甚至固体理论，在接触到这一领域中的前沿问题（例如翻阅近期的 *Physical Review Letters*）时，却总感到困惑不解。理解上困难的关键并不在于对公式的推导或实验的过程不明，而在于思想准备不足，不知为何挑选这些课题，以及基本概念从何而来。

针对上述情况，国际上有一些知名学者提出了建议：应该有一本著作来填补传统固体物理学领域与当代凝聚态物理学研究前沿之间的鸿沟。这一著作应该处于两个极端之间：一方面是传统的专著或教科书，其内容包括一些久已确立的题材，诸如周期结构、能带论、晶格动力学等，如不理解其意义、不掌握其语言将无从进行科学交流；另一方面是当今的课题，如高温超导电性、定域化、量子 Hall 效应、巨磁与庞磁电阻、量子点、Fuller 烯与纳米碳管、光子晶体等，如不涉及这类课题则无从开展其科研工作。我们这本书的目标即在于填补两者之间的空白，将固体物理学开拓、延伸和深化为凝聚态物理学，且仍然保持入门著作的特色：既保持学科的整体性，也容纳许多新近的进展，并使得这些新进展不像从天上掉下来似的，而是学科本身概念体系延伸发展的必然后果。虽则当代凝聚态物理学内容丰富，显得纷纭复杂，光怪陆离，但由于物质结构在概念上的统一性，凝聚态物理学还是可以被组织成自洽的逻辑结构，因而撰写一本系统论述其理论框架和主要内容的著作的时机业已成熟。

P. W. Anderson 在其专著《凝聚态物理学的基本概念》（*Basic Notions of Condensed Matter Physics*, 1984）中对凝聚态物理学的许多基本概念做了精辟的分析。我们从这本富有创见的书中得到许多启示。但这本书是为行家里手而写的，对于初学的研究生显得高不可攀。我们的工作在于澄清固体物理学与凝聚态物理学在概念体系上的共同之点和差异之处，并对它们作清晰的表述，使得这些基本概念具体化，再用实例阐述，放到合适的上下文之间。我们面对了极其艰巨的工作：根据物质结构统一性的概念线索来建立循序渐进的理论框架，再将从篇幅浩瀚的资

料中提炼出来的内容充实其中，组织成为具有系统性和可读性的文本。如果读者已经学过固体物理学，当然驾轻就熟，即使未学过的，读来也无大碍；这里我们假定读者已初通量子力学和统计物理。由于凝聚态物理学与技术进展关系密切，也与交叉学科渗透频繁，我们希望这本书除了供从事凝聚态物理学研究的工作者参考外，也对从事化学、材料科学、电子科学与技术等方面研究的人士有所助益。

本书将凝聚态物理学丰富的内容组织成为八编，各编分别论述凝聚态物理学的某一侧面，融贯汇总起来才能够突现整体的面貌。第一编到第三编乃是全方位地将传统的固体物理学进行开拓延伸，从而使其面目焕然一新，构成了凝聚态物理学的重要组成部分。在第一编中，从晶体出发，走向晶体之外；从硬物质出发，延伸到软物质。在第二编中，一方面用新内容充实波在周期结构中传播这一传统固体物理学的主题，然后再延伸到周期结构之外，论述定域态及定域化等新问题。第三编则紧扣物质电子结构这一主题，在横向将键与能带对照起来探讨，而在纵深方向则关注电子关联性的增强，从单电子近似逐步逼近关联电子态这一凝聚态物理学尚未彻底解决的核心问题。第四编到第七编的主题为对称破缺与有序化。在第四编中根据 Landau 相变理论框架来理解不同类型的相变，涉及晶体、准晶、液晶、颗粒物、铁电体、磁有序相及超流体与超导体，再用遍历破缺来补充对称破缺，涵盖了另外一些相变。在第五编中则越出平均场理论的框架来处理临界现象和相关问题。第六编和第七编则分别论述激发态问题，显示了对称破缺相中存在恢复失去的对称性的倾向，从而影响到一些物理性质，论述分为元激发和拓扑缺陷两个层次来进行。第八编讨论了非平衡态的众多现象，与物理动理学和非线性科学交叉，终而引导读者面向复杂性这一具有挑战性的科学领域。

全书分为上下两卷出版，上卷包括前四编，下卷包括后四编。一般而言，我们假定读者已初通量子力学和统计物理的基础部分，但上述各编对基础的要求不尽相同。例如阅读第一、七与八等编或第四编的前半部，即使未学过量子力学亦无大碍。尽管各编之间彼此呼应又相互联系，但各编仍然可以单独阅读。

对如何使用本书作为研究生教材，这里我们先对上卷作以下说明。从我们在南京大学多年教学实践来看，上卷可用作一学期，每周 4 学时，共 72 学时的教学。由于本书涉及的内容丰富，对上卷要进行全部课堂讲授，72 学时是不够的。考虑到研究生应具有一定的自学能力，故相当一部分内容，特别是直接与固体物理学相衔接的那些章节可略讲或不讲。另外，各编有相对的独立性，故如总课时有较大限制时，也可选择第一、二、三编或第一、三、四编实施教学。

从 1983 年起，作者之一（冯端）即开始关注凝聚态物理学的概念体系方面的问题，并写出一些文章（刊登在《物理》等杂志上）加以阐述；又于 1989 年在南京召开的全国凝聚态理论与统计物理学术会议的一次学术报告上，根据提出的概念体系对凝聚态物理学的新近进展进行了总结概括。随后，另一作者（金国钧）参与整理、充实、增补与撰写等工作，大部分文稿曾以《凝聚态物理学的新进展》为题在《物理学进展》杂志上刊登（1990—1991），加以修订之后以专著形式出版，即《凝聚态物理学新论》（上海科技出版社，1992）。自 1990 年以来，本书作者即

在南京大学物理系为研究生开设“凝聚态物理学导论”课程，后来这一课程由作者之一（金国钧）单独承担。作者还先后在两次全国性的凝聚态物理学暑期讲习班（1996 年由清华大学和北京大学联合在北京举办，1998 年由南京大学在南京举办）上讲授了和本书有关的内容。本书的文稿是在历年的讲课笔记和讲义基础之上，经过大量的补充和改写而成的。

在漫长的教学和撰写过程中，作者要特别感谢南京大学物理系、研究生院和固体微结构物理国家重点实验室以及教务处和学生处所给予的支持。作者也要感谢龚昌德、李正中、翟宏如、江元生、邢定钰、董锦明、胡安、章维益、李建新、叶维江等教授对本书文稿的部分篇章进行了审阅，并提出了宝贵的修改意见。当然本书中存在的任何错误或者不妥之处，完全由本书的作者负责。另外，作者还要感谢赵忠贤、甘子钊、于渌、苏肇冰、李华钟、邹广田、欧阳钟灿、李振亚、田德诚、王仁卉、闻海虎、吕力、汪子丹、金晓峰、侯建国、朱劲松、王牧、王炜、马余强、施毅等教授。他们有的曾经对本书的撰写作过有益的讨论，有的则提供过有用的参考资料。作者也要感谢南京大学物理系历届研究生和几位本科生在整理文稿中给予的协助。赵玉达、杨晨为本书插图的绘制和文稿的编排付出了劳动。金达飞在此二人之后做了设计、修改与完善工作。程胜峰通读全书，为统一使用 SI 提供了帮助。

作者之一（金国钧）还要感谢胡皎瑜先生在本书草创时期提供了个人计算机；感谢汪子丹教授两次邀请访问香港大学，除开展合作研究外，也提供了收集资料及部分写作的机会；感谢鞠国兴教授在中文 \LaTeX 使用上的帮助；感谢彭茹雯博士近年来参与教学辅导工作。

本书在撰写过程中得到南京大学创建高水平大学教改项目和国家自然科学基金委员会的资助。

最后，我们将此书奉献给南京大学的百年校庆（1902—2002）。

冯 端 金国钧  
2002 年 7 月 5 日

在这次重印之前，我们对全书进行了认真校订，改正了文字和插图中一些明显的错误和疏漏。作者之一（金国钧）感谢兰州大学物理科学与技术学院的邀请，部分校订工作是于 2005 年秋天在兰州大学授课期间完成。本工作得到国家自然科学基金科学出版资助项目 10424401 的支持。

作者谨识  
2006 年 1 月 2 日

本书上卷已出版多年，在下卷完稿和交付高等教育出版社之后，我们再次对上卷进行了系统的修订，包括部分的补充，以使其表述更为准确和符合学科当前的发展状况。

作者之一(金国钧)感谢武汉大学物理科学与技术学院(2006年秋天)、河南大学物理与电子学院(2008年夏天)和郑州大学物理工程学院(2012年夏天)的邀请,在以上三所大学给研究生和青年教师的每次授课过程中对上卷字斟句酌地校读是这次修订的基础。

我们期望,更新过的上卷和即将面世的下卷能够珠联璧合、交相辉映,比较完整地给出凝聚态物理学的全貌。我们谨将本书献给具有110年(1902—2012)悠久历史的母校——南京大学。

作者再记

2012年12月6日

# 目 录

综览 . . . . .	1
§0.1 物质世界的层次化 . . . . .	1
§0.1.1 20世纪的物理学 . . . . .	1
§0.1.2 简单性与复杂性 . . . . .	3
§0.1.3 层展现象 . . . . .	5
§0.2 凝聚态物理学的范围 . . . . .	8
§0.2.1 理论方法: 量子力学与经典物理 . . . . .	8
§0.2.2 凝聚现象 . . . . .	9
§0.2.3 有序化 . . . . .	11
§0.3 凝聚态物理学的历史透视与概念框架 . . . . .	12
§0.3.1 固体物理学的范式 . . . . .	13
§0.3.2 键与能带——从单电子近似走向关联电子态 . . . . .	15
§0.3.3 合作现象及其它 . . . . .	17
§0.3.4 凝聚态物理学的范式 . . . . .	18
参考文献 . . . . .	22

## 第一编 凝聚物质的结构

第一章 结构的对称性 . . . . .	27
§1.1 关于对称性的基本概念 . . . . .	27
§1.1.1 对称及对称操作 . . . . .	27
§1.1.2 对称元素的组合定理 . . . . .	30
§1.1.3 对称群 . . . . .	32
§1.1.4 对称群的表示 . . . . .	33
§1.2 有限结构与点群 . . . . .	34
§1.2.1 对称轴的组合规则 . . . . .	35
§1.2.2 循环群与二面体群 . . . . .	35
§1.2.3 正多面体与立方点群 . . . . .	36
§1.3 周期结构和空间群 . . . . .	39
§1.3.1 周期结构和晶格 . . . . .	40
§1.3.2 Bravais 格 . . . . .	41

---

§1.3.3 空间群 . . . . .	42
§1.3.4 晶体结构的描述 . . . . .	44
§1.4 物质结构和其 Fourier 变换 . . . . .	46
§1.4.1 普遍情形 . . . . .	46
§1.4.2 倒格 . . . . .	47
§1.4.3 周期结构的 Fourier 变换 . . . . .	48
§1.5 广义对称性 . . . . .	49
§1.5.1 高维空间群 . . . . .	49
§1.5.2 色群 . . . . .	49
§1.5.3 倒空间的对称性 . . . . .	50
§1.5.4 对称性的其它推广 . . . . .	51
参考文献 . . . . .	51
<b>第二章 晶态结构及其构筑原理 . . . . .</b>	<b>52</b>
§2.1 堆积结构与相关问题 . . . . .	52
§2.1.1 二维空间的拼砌、堆积和覆盖 . . . . .	52
§2.1.2 三维空间的堆积和覆盖 . . . . .	54
§2.1.3 结构中的空隙和相关问题 . . . . .	55
§2.2 键连结构和相关问题 . . . . .	59
§2.2.1 键连结构 . . . . .	59
§2.2.2 氧化物的结构 . . . . .	60
§2.2.3 结构族 . . . . .	61
§2.3 曲面与曲率 . . . . .	62
§2.3.1 曲面的曲率 . . . . .	63
§2.3.2 Euler 公式与 Gauss–Bonnet 公式 . . . . .	63
§2.3.3 曲面概述 . . . . .	65
§2.3.4 Fuller 烯和相关的结构 . . . . .	66
§2.4 准周期结构 . . . . .	68
§2.4.1 无理数与准周期函数 . . . . .	69
§2.4.2 一维准周期结构 . . . . .	69
§2.4.3 二维周期结构的投影 . . . . .	71
§2.4.4 二维准周期结构 . . . . .	73
§2.4.5 三维准周期结构 . . . . .	75
§2.4.6 基本概念的讨论 . . . . .	77
参考文献 . . . . .	78

---

<b>第三章 晶态之外</b>	<b>79</b>
§3.1 合金与取代无序	79
§3.1.1 有序与无序的合金	79
§3.1.2 分布函数与关联函数	81
§3.2 液体与玻璃	82
§3.2.1 概述	82
§3.2.2 统计描述	83
§3.2.3 非晶态的结构模型	86
§3.3 液晶	89
§3.3.1 概述	89
§3.3.2 向列相和胆甾相	89
§3.3.3 近晶相和柱状相	92
§3.3.4 溶致液晶及其它	93
§3.4 聚合物	95
§3.4.1 结构和构型	95
§3.4.2 无规线团与溶胀线团	97
§3.4.3 单链的关联函数及其实验测定	99
§3.4.4 有序与部分有序结构	101
§3.5 生物聚合物	103
§3.5.1 核酸的结构	103
§3.5.2 蛋白质的结构	104
§3.5.3 信息与结构	106
参考文献	106
<b>第四章 非均质结构</b>	<b>108</b>
§4.1 复相结构	108
§4.1.1 结构层次与多层次结构	108
§4.1.2 非均质材料的微结构特征	111
§4.1.3 有效介质近似: 二相合金微结构与物性关联问题处理实例	114
§4.2 结构的几何相变: 逾渗	116
§4.2.1 键逾渗与座逾渗	116
§4.2.2 逾渗理论概述	117
§4.2.3 逾渗的实例	119
§4.3 分形	120
§4.3.1 理想分形与分形维数	121
§4.3.2 实际的分形	122
§4.3.3 自仿射分形	124
§4.3.4 多重分形的基本概念	125

参考文献 . . . . .	128
----------------	-----

## 第二编 各种物质结构中波的行为

<b>第五章 周期和准周期结构中波的传播 . . . . .</b>	<b>133</b>
§5.1 波传播概念的统一性 . . . . .	133
§5.1.1 波方程和周期势 . . . . .	133
§5.1.2 Bloch 波 . . . . .	135
§5.1.3 经典波研究的复兴 . . . . .	136
§5.2 晶体中的电子 . . . . .	137
§5.2.1 自由电子气模型 . . . . .	137
§5.2.2 近自由电子模型 . . . . .	138
§5.2.3 紧束缚电子模型 . . . . .	140
§5.2.4 超晶格的 Kronig–Penney 模型 . . . . .	142
§5.2.5 态密度和维度性 . . . . .	143
§5.3 格波与弹性波 . . . . .	145
§5.3.1 格波的色散关系 . . . . .	145
§5.3.2 格波的频谱 . . . . .	148
§5.3.3 周期复合介质中的弹性波 – 声子晶体 . . . . .	150
§5.4 周期结构中的电磁波 . . . . .	151
§5.4.1 层状周期介质中的光子带隙 . . . . .	151
§5.4.2 X 射线动力学衍射 . . . . .	153
§5.4.3 光子晶体的能隙 . . . . .	156
§5.4.4 非线性光学晶体的准相位匹配 . . . . .	160
§5.5 准周期结构中的波 . . . . .	162
§5.5.1 一维准晶的电子能谱和波函数 . . . . .	162
§5.5.2 人工 Fibonacci 结构中波的透射 . . . . .	164
§5.5.3 实际准晶的赝能隙 . . . . .	166
参考文献 . . . . .	168
<b>第六章 Bloch 电子动力学 . . . . .</b>	<b>169</b>
§6.1 能带电子的基本性质 . . . . .	169
§6.1.1 电子速度和有效质量 . . . . .	169
§6.1.2 金属和非金属 . . . . .	171
§6.1.3 空穴 . . . . .	173
§6.1.4 金属中电子的比热容 . . . . .	174

---

§6.2 电场中电子的运动 . . . . .	175
§6.2.1 Bloch 振荡 . . . . .	175
§6.2.2 负微分电阻 . . . . .	177
§6.2.3 Wannier–Stark 梯 . . . . .	178
§6.3 磁场中电子的运动 . . . . .	180
§6.3.1 回旋共振 . . . . .	181
§6.3.2 Landau 量子化 . . . . .	183
§6.3.3 de Haas–van Alphen 效应 . . . . .	186
§6.3.4 传导电子磁化率 . . . . .	189
参考文献 . . . . .	192
<b>第七章 表面和杂质效应 . . . . .</b>	<b>194</b>
§7.1 表面电子态 . . . . .	194
§7.1.1 金属表面的电子能量和密度 . . . . .	194
§7.1.2 半导体表面态 . . . . .	199
§7.2 电子杂质态 . . . . .	200
§7.2.1 带电中心的屏蔽效应 . . . . .	201
§7.2.2 电子局域模 . . . . .	203
§7.2.3 电子自旋密度振荡 . . . . .	205
§7.3 与表面及杂质相关的振动 . . . . .	206
§7.3.1 表面振动 . . . . .	206
§7.3.2 杂质振动模 . . . . .	208
§7.4 光子晶体中的缺陷模 . . . . .	211
§7.4.1 层状周期结构中的电磁表面模 . . . . .	211
§7.4.2 点缺陷 . . . . .	212
§7.4.3 线缺陷 . . . . .	214
参考文献 . . . . .	215
<b>第八章 电荷输运和自旋输运 . . . . .</b>	<b>216</b>
§8.1 正常输运 . . . . .	216
§8.1.1 Boltzmann 方程 . . . . .	216
§8.1.2 直流和交流电导率 . . . . .	218
§8.1.3 金属电阻率的微观机制 . . . . .	220
§8.1.4 半导体中的电输运 . . . . .	223
§8.1.5 其它的输运系数 . . . . .	225
§8.2 磁场中的电荷输运与自旋输运 . . . . .	226
§8.2.1 经典 Hall 效应 . . . . .	226
§8.2.2 Shubnikov-de Haas 效应 . . . . .	228

---

§8.2.3 正常磁电阻及其各向异性 . . . . .	231
§8.2.4 自旋极化与自旋输运 . . . . .	234
§8.2.5 铁磁金属的电阻率与磁电阻 . . . . .	237
§8.3 隧穿现象 . . . . .	239
§8.3.1 势垒透射 . . . . .	239
§8.3.2 半导体超晶格的共振隧穿 . . . . .	241
§8.3.3 电击穿和磁击穿 . . . . .	243
§8.3.4 隧道磁电阻 . . . . .	246
§8.3.5 扫描隧道显微术 . . . . .	247
参考文献 . . . . .	250
<b>第九章 无序系统中波的定域化 . . . . .</b>	<b>252</b>
§9.1 定域化的物理图像 . . . . .	252
§9.1.1 波定域化的简单演示 . . . . .	252
§9.1.2 特征长度和特征时间 . . . . .	253
§9.1.3 粒子扩散和定域化 . . . . .	255
§9.2 弱定域化 . . . . .	256
§9.2.1 增强背散射 . . . . .	256
§9.2.2 依赖于尺寸的扩散系数 . . . . .	258
§9.2.3 电导的干涉修正 . . . . .	260
§9.3 强定域化 . . . . .	262
§9.3.1 连续渗流模型 . . . . .	262
§9.3.2 Anderson 模型 . . . . .	263
§9.3.3 迁移率边 . . . . .	265
§9.3.4 Edwards 模型 . . . . .	267
§9.3.5 跳跃电导 . . . . .	268
§9.3.6 光的强定域化 . . . . .	269
参考文献 . . . . .	272
<b>第十章 介观量子输运 . . . . .</b>	<b>273</b>
§10.1 介观系统的特点 . . . . .	273
§10.1.1 介观结构的界定 . . . . .	273
§10.1.2 不同的输运区 . . . . .	274
§10.1.3 量子通道 . . . . .	275
§10.2 Landauer–Büttiker 型电导 . . . . .	277
§10.2.1 Landauer 公式 . . . . .	277
§10.2.2 两端单通道电导 . . . . .	279
§10.2.3 两端多通道电导 . . . . .	280

---

§10.3 回路中的电导振荡 . . . . .	282
§10.3.1 电子波函数的规范变换 . . . . .	282
§10.3.2 金属环中的 Aharonov–Bohm 效应 . . . . .	283
§10.3.3 持续电流 . . . . .	285
§10.3.4 Altshuler–Aronov–Spivak 效应 . . . . .	288
§10.3.5 静电 Aharonov–Bohm 效应 . . . . .	289
§10.4 电导涨落 . . . . .	290
§10.4.1 电导的非局域性 . . . . .	290
§10.4.2 磁场反转的倒易性 . . . . .	292
§10.4.3 普适电导涨落 . . . . .	293
参考文献 . . . . .	296

### 第三编 键、能带及其它

第十一章 键途径 . . . . .	299
§11.1 原子与离子 . . . . .	299
§11.1.1 氢原子 . . . . .	299
§11.1.2 多电子原子中的单电子近似 . . . . .	300
§11.1.3 原子内的交换作用 . . . . .	303
§11.1.4 Hund 定则和离子磁矩 . . . . .	304
§11.2 双原子分子 . . . . .	307
§11.2.1 氢分子离子 $H_2^+$ 的精确解 . . . . .	307
§11.2.2 分子轨道法 . . . . .	309
§11.2.3 Heitler–London 法 . . . . .	312
§11.2.4 自旋 Hamilton 量和 Heisenberg 模型 . . . . .	314
§11.3 多原子分子 . . . . .	315
§11.3.1 多原子分子问题的分子轨道法 . . . . .	315
§11.3.2 价键轨道 . . . . .	316
§11.3.3 分子轨道方法的 Hückel 近似 . . . . .	318
§11.3.4 一些分子的电子结构 . . . . .	320
§11.4 各向异性环境中的离子 . . . . .	322
§11.4.1 三种晶体场 . . . . .	322
§11.4.2 过渡金属离子的晶场效应 . . . . .	323
§11.4.3 Jahn–Teller 效应 . . . . .	324
§11.4.4 配位场中的离子 . . . . .	325
参考文献 . . . . .	327

---

<b>第十二章 能带途径</b>	<b>329</b>
§12.1 能带计算的各种方法	329
§12.1.1 正交平面波	329
§12.1.2 贲势	331
§12.1.3 糕模势与缀加平面波	333
§12.1.4 能带的对称性和 $k \cdot p$ 方法	334
§12.2 从多粒子 Hamilton 量到自洽场方法	335
§12.2.1 多粒子 Hamilton 量	336
§12.2.2 价电子近似和绝热近似	336
§12.2.3 Hartree 近似	338
§12.2.4 Hartree–Fock 近似	339
§12.3 电子结构取径于密度泛函	341
§12.3.1 从波函数到密度泛函	341
§12.3.2 Hohenberg–Kohn 定理	342
§12.3.3 自洽 Kohn–Sham 方程	344
§12.3.4 局域密度近似及其它	345
§12.3.5 Car–Parinello 方法	347
§12.4 若干材料中的电子结构	348
§12.4.1 金属	348
§12.4.2 半导体	353
§12.4.3 半金属	355
§12.4.4 分子晶体	358
§12.4.5 表面和界面	360
参考文献	363
<b>第十三章 关联电子态</b>	<b>365</b>
§13.1 Mott 绝缘体	365
§13.1.1 理想化的 Mott 转变	365
§13.1.2 Hubbard 模型	367
§13.1.3 动态交换和超交换	369
§13.1.4 轨道序和自旋序	372
§13.1.5 Mott 绝缘体的分类	374
§13.2 掺杂 Mott 绝缘体	376
§13.2.1 Mott 绝缘体的掺杂	376
§13.2.2 铜氧化物	377
§13.2.3 锰氧化物与双交换作用	380
§13.2.4 电荷序和电子相分离	383

---

§13.3 磁性杂质、近藤效应及相关问题 . . . . .	385
§13.3.1 Anderson 模型与局域磁矩 . . . . .	385
§13.3.2 间接交换作用 . . . . .	387
§13.3.3 近藤效应 . . . . .	388
§13.3.4 重电子金属和相关材料 . . . . .	391
§13.4 展望 . . . . .	394
§13.4.1 一些经验规则 . . . . .	394
§13.4.2 理论方法 . . . . .	396
参考文献 . . . . .	397
 第十四章 量子限制纳米结构 . . . . .	398
§14.1 半导体量子阱 . . . . .	398
§14.1.1 电子能带 . . . . .	398
§14.1.2 空穴子能带 . . . . .	401
§14.1.3 光吸收 . . . . .	403
§14.1.4 耦合量子阱 . . . . .	405
§14.2 磁量子阱 . . . . .	406
§14.2.1 金属量子阱中的自旋极化 . . . . .	406
§14.2.2 振荡磁耦合 . . . . .	408
§14.2.3 巨磁电阻效应 . . . . .	411
§14.3 量子线 . . . . .	415
§14.3.1 半导体量子线 . . . . .	415
§14.3.2 碳纳米管 . . . . .	417
§14.3.3 金属台阶 . . . . .	419
§14.4 量子点 . . . . .	421
§14.4.1 金属团簇的幻数 . . . . .	421
§14.4.2 半导体量子点 . . . . .	424
§14.4.3 Fock–Darwin 能级 . . . . .	426
§14.4.4 Coulomb 阻塞效应 . . . . .	428
§14.4.5 近藤效应 . . . . .	431
§14.5 耦合量子点系统 . . . . .	433
§14.5.1 双量子点 . . . . .	433
§14.5.2 半导体量子点超晶格 . . . . .	437
§14.5.3 金属量子点列阵 . . . . .	438
参考文献 . . . . .	439

## 第四编 相变和有序相

<b>第十五章 Landau 相变理论</b>	<b>443</b>
§15.1 两个重要概念	443
§15.1.1 对称破缺	443
§15.1.2 序参量	445
§15.1.3 统计模型	447
§15.2 二级相变	449
§15.2.1 自由能的级数展开	449
§15.2.2 热力学量	451
§15.2.3 具有复序参量的系统	452
§15.3 弱一级相变	453
§15.3.1 外场影响	453
§15.3.2 Landau–Devonshire 模型	454
§15.3.3 Landau–de Gennes 模型	457
§15.3.4 序参量和应变的耦合	458
§15.4 结构相变中对称性的改变	460
§15.4.1 密度函数和表示理论	460
§15.4.2 自由能泛函	462
§15.4.3 Landau 判据	463
§15.4.4 Lifshitz 判据	464
参考文献	466
<b>第十六章 晶体、准晶和液晶</b>	<b>467</b>
§16.1 液–固相变	467
§16.1.1 基于密度波的自由能展开	467
§16.1.2 结晶	469
§16.1.3 准晶	471
§16.2 固体中的相变	473
§16.2.1 无序–有序转变	473
§16.2.2 顺电–铁电转变	476
§16.2.3 无公度–公度转变	478
§16.3 软物质中的相变	481
§16.3.1 液晶相变的 Maier–Saupe 理论	482
§16.3.2 液晶相变的 Onsager 理论	484
§16.3.3 硬球系统的相分离	486
参考文献	488