固体理论

李正中　著

高等教育出版社

需要全本请访问 www.ertongbook.com

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．全书共分十二章，内容侧重于固体中的元激发，包括：声子、磁振子
元、准电子、极化子和激子等．对于常规超导体的微观理论，铜氧化合物高温超导体和各向异性超导理论，能带论方法和局域密度泛函理论，强关联电子体系和无序系统的理论方法也分别作了专章介绍．此外，还重点介绍了处理多体系统的傅里叶变换和玻戈留玻夫变换，双时间热力学格林函数和介电函数方法，以及处理强关联电子体系的投影算子法和隶玻色子技巧等有效的理论方法．在附录中系统地引入了双时间格林函数的理论框架，书末附有习题．

本书的系统性强、讲解透彻、便于自学，可作为高等院校物理类专业研究生和高年级本科生的固体理论教材，对于凝聚态物理及相关学科的研究人员也是一本有用的参考书．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．

图书在版编目

固体理论/李正中著．—2版．—北京：高等教育出版社，2003.1
ISBN 7-04-011576-X

Ⅳ.0481

中国版本图书馆CIP数据核字

出版发行	高等教育出版社	购书热线	010-64054588
社　　址	北京市东城区沙滩后街55号	免费咨询	800-810-0598
邮政编码	100009	网　　址	http://www.hep.edu.cn
传　　真	010-64014048		p://www.hep.com.cn
经　　销	新华书店北京发行所		
印　　刷			
		版　　次	1985年10月第1版
开　　本	787×960　1/16		年　月第　版
印　　张	37.5	印　　次	年　月第　次印刷
字　　数	640 000	定　　价	51.00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

责任编辑　陶　铮
封面设计　李卫青
责任绘图　尹文军
版式设计　史新薇
责任校对　王效珍
责任印制

第二版说明

注与厚爱．借此机会谨表谢意．在该书出版的 16 年间，虽曾多次重印，但仍不能满足广大读者的需求．另外，正是在此世纪之交的十数年间，一系列令人惊异的新实验发现接踵而至，特别是高温超导体的问世将强关联电子体系的研究推向了本学科的前沿阵地．现在应该是对
论》
态物理学科发展和人才培养的需要，教育部高等学校物理学与天文学教学指导委员会建议作者对
到教育部高教司和高等教育出版社以及南京大学物理系的大力支持，还获得了南京大学研究生院的资助，特此致谢．

和科研的空余时间进行修订和更新．在修订过程中，作者力求保持第一版中被广大读者认同的特点：继续采用易于读者理解的完整体系，力求在讲述中有尽可能清楚和准确的图像，以期教会读者如何抓住物理过程的主导方面来构造简化模型和进行理论处理，并希望能帮助读者深入思考问题和提高他们解决问题的能力．

其一是传统的基础性内容
量子、等离激元、极化激元、极化子与激子，以及常规超导体的微观理论等)
础性内容，将根据作者多年的教学实践和经验，对内容进行修改、删节和必要的补充，以求在保持原有风格的基础上，使内容更为充实．在这里作者对“等离激元”
“能带方法”
子系统中“存在费密面”的论证、“超导体中的相位”、“约瑟夫森效应”和“能带论的局域密度泛函理论”等重要的基础性内容．为了反映凝聚态物理学中有关基础性的新成就，作者有选择地新增了“铜氧化合物高温超导体和各向异性超导理论”、“强关联电子体系”和“无序系统”等三章
子法”和“隶玻色子技巧”等处理强关联的有效工具，以及处理无序系

统的“平均 t 矩阵近似”、“相干势近似”和“无序系统的标度理论”等方法．为了便于读者查阅，还对第一版附录中的“双时间热力学格林函数”作了更全面的介绍．新增加的氧化物高温超导体部分侧重于实验研究新进展的阶段性总结，使读者对这一新领域中存在的问题有较明确的感性认识．其它的新增内容则是根据作者近年来指导研究生进行强关联电子体系研究的专题报告和在国内外所作邀请报告，经反复提炼而写成的，在一定程度上反映了作者的科研心得．

本书的第二版希望继续能得到广大读者的欢迎．不足之处还希读者和专家能惠予指正．

最后，作者对邢定钰、董锦明、金国钧、许望和肖明文等教授在本书修订过程中的有益讨论和热情帮助表示由衷的感谢．

作者

2001 年 10 月

需要全本请访问 www.ertongbook.com

郑 重 声 明

高等教育出版社依法对本书享有专有出版权。任何未经许可的复制、销售行为均违反《中华人民共和国著作权法》。行为人将承担相应的民事责任和行政责任，构成犯罪的，将被依法追究刑事责任。社会各界人士如发现上述侵权行为，希望及时举报，本社将奖励举报有功人员。

现公布举报电话及通讯地址：

电　　话：(010) 84043279　13801081108

传　　真：(010) 64033424

E - mail：dd@hep．com．cn

地　　址：北京市东城区沙滩后街 55 号

邮　　编：100009

初 版 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像．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 20 世纪 50 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} 的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．固体的基态　　$T = 0$ K 时状态)
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
子
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，在元激发图像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，在这里其它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玻夫变换方法，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
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：准一维导体中孔恩异常、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

$\boldsymbol{A}$	矢量势
$A>$	统计平均
a_{H}	玻尔半径
a_{ex}	激子半径
$\boldsymbol{a}_i\ (i=1,2,3)$	正点阵基矢
$\boldsymbol{b}_i\ (i=1,2,3)$	倒点阵基矢
BZ	第一布里渊区
$a^+,\ b^+)$	玻色子产生算符
$a,\ b)$	玻色子消灭算符
$C^+\ (C)$	费密子产生
$c_{\mathrm{L}}\ (c_{\mathrm{T}})$	纵
c_{es}	超导电子比热容
c_{m}	磁振子比热容
$\boldsymbol{D}$	电位移矢量
D	扩散系数
$D_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k})\quad D_{\alpha\beta}(\overset{\boldsymbol{k}}{s,s'})$	动力矩阵
e	电子电荷
$\boldsymbol{e}_{\mathrm{k}\sigma}$	格波的极化矢量
E_{F}	费密能
E_{ex}	交换能
E_{corr}	相关能
E_{k}	动能
$E_n\ (-\mathrm{i}\quad)\quad E(-\mathrm{i}\quad)$	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
$G_{\mathrm{r}}(t-t')\quad G_{\mathrm{a}}(t-t')]$	双时推迟
$G_{\mathrm{r}}(\omega)\equiv\ll A\mid B\gg_{\omega+\mathrm{i}\eta},\ \eta=+0$	双时推迟格林函数的傅里叶变换

$G_a(\omega) \equiv \ll A \mid B \gg_{\omega - i\eta}$，$\eta = +0$	双时超前格林函数的傅里叶变换
H，H	哈密顿量
H_{BCS}	BCS 约化哈密顿量
h	普朗克常量
$\hbar$	$\hbar = h/2\pi$
I（I_{NN}，I_{SS}）	隧道电流
j（$\boldsymbol{r}$）	电流密度
$\boldsymbol{K} \equiv \boldsymbol{K}_n = \sum_{i=1}^{s} n_i \boldsymbol{b}_i$	倒格矢
$\boldsymbol{k}$	波矢量
k_B	玻耳兹曼常量
k_F	费密波数
L	拉氏量密度
M	原子
$\boldsymbol{M}$（T）	磁化强度
m_e^*（m_h^*）	电子
n	粒子数
$\hat{n}$	粒子数算符
N	元胞
$\boldsymbol{p}$	动量
$\boldsymbol{P}$	极化矢量
$P_{k\sigma}$（$P_{k\sigma}^*$）	广义动量
$Q_{k\sigma}$（$Q_{k\sigma}^*$）	广义坐标
$\boldsymbol{q}$	波矢量
$\boldsymbol{R}_l = \sum_{i=1}^{s} l_i \boldsymbol{a}_i \equiv \boldsymbol{l}$	正格矢
$\boldsymbol{S}_l = (S_l^x, S_l^y, S_l^z)$	自旋算符
S_l^+（S_l^-）	自旋上升
$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{q})$	自旋密度算符
S_{es}	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
$\boldsymbol{u}_l$，$\boldsymbol{u}_l(s)$	晶格位移
v	速度
V	体积，势能
W，w	跃迁概率
Z	配分函数，配位数，离子价数
α	极化子的量纲为 1 的耦合常数
β	$\beta=(k_B T)^{-1}$
Δ	能带宽度
$\Delta(T)$	超导能隙
$\Delta(\boldsymbol{r})$	超导能隙函数，晶体体积的相对变化
$\varepsilon(\infty)$ $\varepsilon(0)]$	高
$\varepsilon(\boldsymbol{q},\omega)$	介电函数
ε_k	从费密能算起的自由电子能量
ζ	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_k	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
σ^z，σ^+，σ^-	泡利矩阵
τ	寿命，弛豫时间
Φ	晶格振动位能
$\Phi_0=\frac{2\pi\hbar c}{2e}$	超导磁通量子
$\Phi_{\alpha\beta}(\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}')$ $\Phi_{\alpha\beta}$ $\boldsymbol{l}_{s,}-\boldsymbol{l}_{s}'$	晶格弹性力系数的张量
	方位角，电子波函数
$(\boldsymbol{r})$	位能密度
Ψ Ψ^+)	二次量子化态向量

需要全本请访问 www.ertongbook.com

ψ	电子波函数
χ	自旋波函数
$\chi^{(k)}$	特征标
χ_P	泡利磁化率
$\chi^{-+}(\boldsymbol{q},\omega)$	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
$\mathrm{d}\Omega$	立体角

ii iii iv

目　　录

第一章　周期性结构 …… 1

§1　正格矢与倒格矢 …… 1

§2　平移对称性 …… 3

§3　布洛赫定理 …… 4

§4　布里渊区和晶体对称性 …… 9

1.BZ 中 $E_n(k)$ 的对称性 …… 9

2. $E_n(k)$ 的简并度 …… 11

3. 时间反演对称性 …… 13

§5　点阵傅里叶级数 …… 14

1. 点阵傅里叶级数 …… 14

2. 周期函数的格林定理 …… 16

参考文献 …… 17

第二章　声子 …… 18

§1　晶格动力学 …… 18

§2　格波特性 …… 22

1. $\omega_s(k)$ …… 22

2. 声学模与光学模 …… 23

3. 格波频率计算 …… 24

§3　简正坐标 …… 29

§4　声子 …… 31

§5　长波方法 …… 36

§6　长波方法 …… 40

1. 介电函数 …… 42

2. 横波及纵波振动方程 …… 43

§7　极化激元 …… 44

§8　态密度 …… 47

§9　范·霍夫奇点 …… 51

§10　晶格振动的局域模 …… 55

1. 单个缺陷对振动频率的影响 …… 56

2. 局域模 …… 58

参考文献 …… 61
第三章 磁振子 …… 62
§1 自旋波图像 …… 62
§2 海森伯模型及其严格推导 …… 63
1. 海森伯模型 …… 63
2. 海森伯哈密顿量的推导 …… 65
§3 铁磁自旋波理论 …… 67
1. 铁磁体的基态 …… 67
2. 霍斯坦因 - 普里马可夫变换 …… 68
3. 低激发态——自旋波 …… 70
§4 铁磁体的低温磁化强度 …… 73
§5 反铁磁自旋波理论 …… 76
1. 双子格模型 …… 77
2. 玻戈留玻夫正则变换 …… 79
3. 磁振子的零点运动 …… 81
4. 外场影响 …… 82
§6 铁氧体中的自旋波 …… 83
§7 一维铁磁链中的孤波 …… 86
参考文献 …… 89
第四章 等离激元 …… 90
§1 等离激元和准电子 …… 90
§2 互作用电子系统的哈密顿量 …… 93
§3 电子集体振荡的经典理论 …… 94
§4 量子运动方程的无规相近似 …… 96
§5 线性响应理论 …… 98
§6 介电函数 …… 101
§7 电子系统的元激发谱 …… 105
§8 静电屏蔽 …… 109
1. 屏蔽势 …… 109
2. 孔恩异常 …… 110
3. 夫里德耳振荡 …… 112
§9 基态能 …… 113
1. 哈特利 - 福克近似的基态能 …… 114
2. 相关能的二阶微扰计算 …… 116
3. 基态能的严格公式——费因曼定理 …… 118

4. 无规相近似的基态能 …… 120
§10 维格纳晶格 …… 126
§11 准粒子寿命和费密面 …… 128
1. 准粒子寿命 …… 129
2. 费密面 …… 132
参考文献 …… 136
第五章 电子 - 声子相互作用 …… 138
§1 互作用过程 …… 138
§2 电子与声频支声子的相互作用 …… 140
§3 声子的自能修正 …… 146
§4 电子与光频声子的相互作用 …… 148
§5 有效电子 - 电子相互作用 …… 152
1. 电子 - 电子有效互作用的微扰估计 …… 153
2. 正则变换方法——中岛变换 …… 155
参考文献 …… 158
第六章 超导电性的微观理论 …… 159
§1 基本性质 …… 159
1. 超导态是一种新的凝聚态 …… 159
2. 存在能隙 …… 160
3. 迈斯纳效应 …… 161
§2 BCS 约化哈密顿量 …… 161
§3 库柏对 …… 164
§4 BCS 超导理论 …… 166
1. 能隙 Δ 的计算 …… 170
2. 凝聚能 $\Delta E(0)$ …… 171
3.BCS 基态 …… 172
4. 超导体中的元激发 …… 174
5. 超电流 …… 175
§5 有限温度情况 …… 177
1. 确定 T_c …… 178
2. 能隙与温度关系 …… 179
3. 热力学量 …… 182
4. 超导相变 …… 185
§6 单粒子隧道效应 …… 188
§7 伦敦 - 皮帕的唯象理论 …… 192

1. 伦敦方程 …… 193
2. 皮帕公式 …… 194
§8 迈斯纳效应 …… 196
1. 互作用哈密顿量 H …… 197
2. 电流密度算符 …… 197
3. 弱磁场中的电流响应 …… 199
4. $K(q)$的计算 …… 201
5. 有限温度时的伦敦穿透深度 …… 204
§9 BCS 超导体中的粒子数和相位 …… 207
§10 金兹堡 - 朗道方程 …… 210
1. G - L 自由能 …… 210
2. G - L 方程 …… 212
3. G - L 参数 κ …… 213
4. 磁通量子化 …… 216
5. 约瑟夫森效应 …… 219
参考文献 …… 227
第七章 氧化物高温超导体和各向异性超导电性 …… 229
§1 高 T_c——超导电性研究的重大突破 …… 229
§2 结构与相图的共同特征 …… 234
1. 存在 CuO_2 导电层——铜氧化合物结构的共同特征 …… 234
2. 存在绝缘性的反铁磁母体化合物——相图的共同特征 …… 238
§3 高温超导体中超导态的基本属性 …… 241
1. 超导态仍然是库柏对的相干凝聚态 …… 241
2. 配对的对称性——主要是各向异性的 d 波配对 …… 242
3. 极端的Ⅱ类超导体 …… 245
4. 复杂的同位素效应 …… 246
5. 不同于 BCS 超导体的低温特性 …… 250
§4 各向异性配对的超导电性 …… 251
1. 广义库柏对 …… 252
2. 各向异性能隙函数 …… 255
§5 各向异性超导体的态密度特征和重费密子超导体 …… 260
1. 各向异性超导体的态密度特征 …… 260
2. 重费密子超导体的低温特性 …… 263
§6 高温超导体的异常低温特性 …… 265
1. $d_{x^2-y^2}$ 波的低频准粒子态密度 …… 265

2．$d_{x^2-y^2}$波超导态的低温特性 …… 266
3．$d_{x^2-y^2}$波超导态的零温能隙与 T_c 之比值 …… 267
§7 高温超导体正常态的反常特征 …… 269
1．ρ_{ab}普遍地具有线性温度行为 …… 270
2. 解释光电导率反常的一个唯象公式 …… 272
3. 核自旋 - 点阵弛豫率的反常 …… 275
4. 反铁磁费密液体模型 …… 278
§8 弱掺杂区正常态赝隙的发现 …… 279
1. 弱掺杂区存在赝隙的间接证据 …… 280
2. 弱掺杂区存在赝隙的直接证据 …… 281
3. 小结与讨论 …… 284
参考文献 …… 285
第八章 能带论 …… 287
§1 平面波法的困难 …… 287
§2 正交化平面波法 …… 290
§3 赝势方法 …… 294
1．OPW 赝势 …… 294
2. 赝势法的非唯一性特征 …… 295
3. 赝势计算方案 …… 296
§4 近自由电子方法的赝势证明 …… 299
§5 元胞法 …… 300
1. 维格纳 - 赛茨的计算 …… 302
2．$\boldsymbol{k}=0$ 点附近有效质量的计算 …… 304
§6 缀加平面波法 …… 308
§7 KKR 方法 …… 313
§8 布洛赫表象和瓦尼尔表象 …… 316
1. 布洛赫表象 …… 316
2. 瓦尼尔表象 …… 317
3. 布洛赫与瓦尼尔表象中的二次量子化算符 …… 319
4. 瓦尼尔函数方程 …… 319
§9 有效哈密顿量 …… 321
§10 紧束缚近似法及其二次量子化表示 …… 325
1. 紧束缚近似 …… 325
2. 紧束缚近似哈密顿量的二次量子化表示 …… 327
§11 单电子近似的理论基础——密度泛函理论 …… 329

需要全本请访问 www.ertongbook.com