

# 固体物理

## 课程 QQ 群

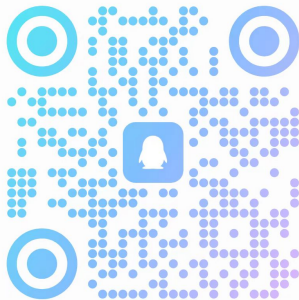
📞 翁明其  
办公室：物质楼 C515  
email: weng@ustc.edu.cn  
主页: <http://staff.ustc.edu.cn/~weng>

📞 助教：王诺严  
电话：15922734747  
email: wny2021@mail.ustc.edu.cn



2024春 固体物理A

群号: 854421724



# 第零章 Introduction

- 0.1 固体物理学的研究对象和方法
- 0.2 固体物理的发展进程
- 0.3 为什么要学凝聚态物理和固体物理
- 0.4 固体物理的研究方法
- 0.5 教材

## 0.1 固体物理学的研究对象和方法

Time comes into it.

Say it. Say it.

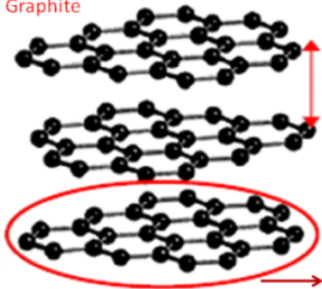
The universe is made of stories,  
not of atoms. — Muriel Rukeyser

- 固体物理学的研究对象是由大量的微观粒子组成的固体。固体物理研究的不是单个原子的性质，而是大量原子组成在一起形成固体后所表现出来的集体性质。
- 原子之间的相互作用对固体性质有更大的影响。固体的性质虽然也和组成固体的原子、分子种类有关，但更主要的是和这些原子采用什么方式结合在一起，他们的空间排列方式、相互作用力类型，特别是和原子形成固体后其价电子的运动状态有关。
- 因此只有通过通过对固体微观结构和组成固体微观粒子之间的相互作用及运动机制的研究才能理解固体的性质。
- 👉 原子之间的故事可能比原子本身更重要。例如同素异形体可以具有非常不同的物理性质。

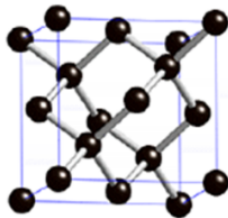
# 碳的同素异形体

石墨、金刚石、碳纳米管、石墨烯等都是由相同的碳原子组成的，但是碳原子空间排列和结合方式的差异导致物理性质的极端不同。

Graphite

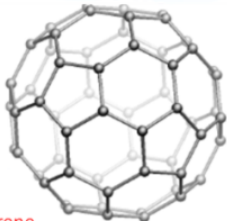


3.4 Å

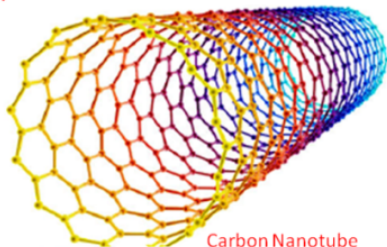


Diamond

Graphene



Fullerene



Carbon Nanotube

# 固体物理学是研究固态物质物理性质的学科

- 固体物理关注的是大量原子组合在一起后所表现出来的集体的、宏观的性质和行为。
- 普物里我们主要是关注对这些宏观性质和行为的描述，引入各唯象的宏观参数（例如电阻、介电常数等）描述这些性质和行为。
- 固体物理主要关注从微观角度去阐明和理解固体的宏观性质，解释形成这些性质的原因，并从微观机制出发计算各种宏观参数，从而找出控制、利用、改善这些性质的方法。

例如：普通物理使我们知道了欧姆定律，固体物理将说明固体电阻的来源并从理论上推导出欧姆定律，分析出不同固体导电性能不同的原因，并用各种模型计算不同情况下电导 / 电阻的数值。

## 固体物理和四大力学的关系

- 四大力学研究物质特定的运动形态，研究对象是理想条件下的特定运动的规律和相应的研究方法，如理论力学研究物体的机械运动等。
- 理论力学、电动力学、量子力学主要研究单体或者少体问题；研究多体问题时一般是从宏观角度研究，通过引入宏观参数来描述体系的某些性质（例如力学、电磁学或者热学性质），而且微观和宏观的联系并非它们的重点。
- 热力学和统计力学同样研究多体系统，也关注微观和宏观之间的联系，但是侧重于方法。
- 固体物理则研究具体的一类系统——固体，它既是力学系统、又是热学系统和电磁系统，而组成固体的微观粒子又必须服从量子力学规律，所以固体物理是一门综合科学，需要我们综合运用各种理论工具，从不同角度、不同侧面去研究实际固体的各种运动形态，从而全面地解释固体的各种性质，以及这些性质之间的关系。所以四大力学都是固体物理的理论基础课。

## 0.2 固体物理的发展进程

- 对固体的各种性质的研究，如力学、热学、光学和电磁学性质，历史非常久远。但在 20 世纪之前主要用连续介质模型从宏观角度理解物性。从微观角度研究物性并不是主流。
- 固体具有多种不同的形态，按其构成原子空间排列的特点大致可以分为晶体和非晶体。现代固体物理的研究首先是从简单的、有规律的晶体开始的。
- 19 世纪中后叶原子论慢慢开始被科学家接受，对固体特别是晶体的微观结构提出各种猜想，并建立了完整的晶体对称性理论。
- 1912 年 Laue 发现了晶体的 X 射线衍射现象，从实验上证实了晶体的微观结构，从此具备了实验研究固体微观结构的条件。
- 从 20 世纪初量子论和量子力学的建立和成熟让人们可以从微观角度正确地解释已经发现的固体性质。自此之后的几十年是创立固体理论的辉煌时期。固体物理也成为应用和促进量子理论发展的新领域。

# 固体物理和量子力学

- Einstein 1907 和 Debye 1912, 建立了固体比热的量子理论, 解释了低温下固体比热为什么低于经典 (Dulong-Petit) 值。
- Born 和 Kármán 1912 首次采用周期性边界条件处理了三维晶格振动问题, 建立了晶格动力学理论。
- Sommerfeld 1928 采用 Fermi 统计, 用量子论的观点修正了经典电子论。
- Bloch 1928 近似求解周期势场中的 Schödinger 方程, 引入了能带的概念。Wilson 1931 利用能带观点解释了半导体的导电现象, 提出了空穴的概念。Brillouin, Seitz, Slater 等人相继进行研究, 从而逐步完善了能带论。
- 与此同时, Heisenberg, Wigner, Mott, Landau, 夫伦克尔, 佩尔斯, 肖特基, 范弗莱克等当时一流的理论物理学家都曾投入到固体理论的研究中并取得了丰富的成果。



# 新型材料

上世纪六七十年代后，固体物理的发展更为迅速，不但晶体材料的研究更加完美，而且逐渐走出大块晶体的范畴，开始了对微细材料和无序固体的开发和利用，新发现、新进展接踵而来，

- 1973 年非晶态金属薄膜商品化；
- 1982 年在人工合成材料中发现准晶体；
- 1985 年发现了以 C60 为代表的团簇化合物；
- 1986 年新型高温超导材料的发现；
- 1988 年发现巨磁电阻效应 (GMR)；
- 1991 年发现碳纳米管；
- 1994 年发现庞磁电阻效应 (CMR)；
- 1995 年隧穿磁阻 (TMR) 的发现；
- 2004 年发现石墨烯 (graphene)
- 2007 年发现拓扑绝缘体 (topological insulator)
- 2008 年发现铁基超导体 (pnictide superconductors)

## 人工结构

最近几十年来人工微结构材料和微器件研究取得重大进展。过去，新材料制造方面的工作虽然也包括人工合成、人工提纯和人工拉制单晶等，但所得到的材料还是自然界中可能存在的，只是通过人工条件得到比自然条件下某种性能更优异的材料。20世纪70年代开始的人工超晶格材料的研究，则开创了完全由人工设计和制备全新材料的新纪元，这些材料的性能往往可以从理论上预先估计，从而有目的的进行研究，由此得到的是全新的材料。这完全是人类智能的结晶。比如目前应用广泛的二维量子势阱和巨磁电阻效应就是在超晶格材料中发现的。

1959年，著名的诺贝尔奖得主费曼（Richard Feynman）就设想如果我们可以自由安排原子的话那么可以获得物性的范围将被极大的扩充。如今，费曼的预言已经初步实现：我们已能够制备包括几十个到几万个原子的纳米粒子（量子点），并把它们作为基本构成单元，适当排列成一维量子线、二维量子面和三维纳米固体。

<https://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>

<http://calteches.library.caltech.edu/1976/>

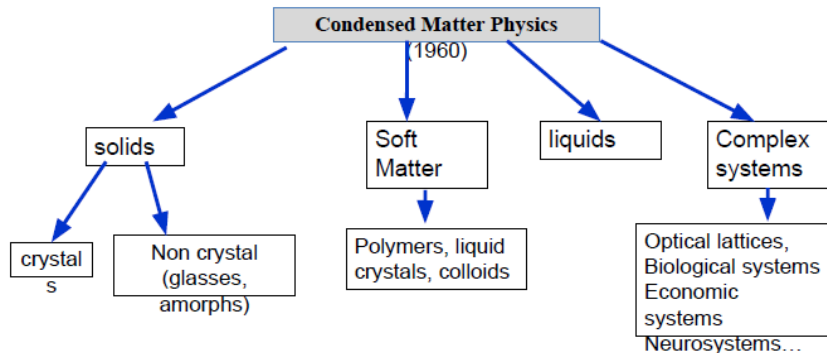
## 从固体物理到凝聚态物理

上世纪六七十年代后的发展，极大地扩展了固体物理的研究对象和研究领域，丰富了固体理论的内容。这些发展一方面是传统固体物理的研究领域和对象向外扩展，使研究对象不再局限于晶体，还包括非晶态、超晶格、液态物质如：液氦，液晶，液态金属，电解液等。另一方面这种扩展也是传统固体物理学中一些基本概念深化的结果，这些深化了的概念对传统固体物理学的内容做了更高度的概括，可以推广应用于比晶态物质更复杂的体系中。有些概念和方法甚至已经扩展到生物、社会学等更为复杂的领域。

再这种情况下继续使用已经当作晶体同义词的“固体”一词表述该领域显然是不妥当的，以 P. W. Anderson 为代表的一群物理学家提出了“凝聚态物理”的概念。

这一段历史可以参考：J. D. Martin, “Solid State Insurrection: How the Science of Substance Made American Physics Matter”, University of Pittsburgh Press (2018)

# 凝聚态物理



凝聚态物理强调了固体物理里最重要的特点：系统里的粒子数和自由度数目非常大，而且这些粒子和自由度由于相互作用互相影响。为了处理这种复杂系统，物理学家发展了各种实验、理论方法以及哲学思想。其中最重要的就是所谓的“More is different”。

# 凝聚态物理中的物理思想

凝聚态物理中最重要的一个思想就是：More is different

P. W. Anderson, “More is different”, Science **177**, p363-296 (1972)

- 现代物理是建立在还原论 (reductionism) 基础上的：即宏观物体由微观粒子组成，微观粒子服从确定的普适规律。
- 1970 年代有一批物理学家认为只有基础物理/粒子物理才是真正的物理，其它领域都可不过是基础物理的应用。他们认为真正的物理问题是寻找微观粒子服从的规律，尽管当时固体物理和应用物理已经取得了很多重大成果，从业人员也超过粒子物理学家。
- Anderson 指出还原论不等于构造论 (constructionism)，即便我们知道了所有的基本粒子服从的微观规律，不等于我们可以从这些基本规律中推导出具有众多自由度的体系的运动规律（例如宏观系统）。
- 大量基本粒子的复杂聚集体的行为并不能依据少数粒子的性质作简单外推就能得到理解。多粒子系统可以涌现出和底层物理完全不同的新性质，具有全新的规律。对这些新规律的研究，同样属于基础物理。

# 凝聚态物理中的物理思想

More is different 的几个例子：

- 相变：系统行为呈现奇异性，略微改变参数可能导致系统行为非连续改变
- 对称自发破缺
- 费米气体里的波色型激发：超导中的 Cooper 对、等离激元 …。
- 分数激发：在分数量子 Hall 效应里，可以出现带电量为  $-e/3$  激发，尽管参与的电子带电量都是  $-e$ 。

Anderson 指出寻找更基本的微观理论或者 TOE (theory of everything) “理论” 物理不应该成为唯一的基础物理研究，探索复杂系统中涌现出来的物理规律同样是基础研究。从对研究世界以及对物理思想的发展上看，凝聚态物理的重要性不亚于“理论”物理。

# 凝聚态物理中的物理思想

凝聚态物理和“理论”物理之间关系非常紧密，二者常常互相影响和促进

- 重整化群理论在场论和凝聚态领域同时发展起来
- Anderson 的超导理论启发了 Higgs boson 理论
- 超导中的 Cooper 对概念可以延伸到原子核理论以及超高密度恒星系统。
- 凝聚态物理发展起来的超流体理论可能被用于理解暗能量和暗物质
- 弦论里为了处理量子引力而引入的量子拓扑场论在凝聚态物理里实现和模拟

# 凝聚态物理为基础物理提供实验平台

- 凝聚态物理发展使得一些基础物理实验设备成为可能。例如没有成熟的超导体技术就不肯能有射电望远镜、LHC 和 LIGO。
- 粒子物理实验中唯一可控的参数是能量，实验上进一步研究基本粒子只能通过制造更大的加速器来实现。某些凝聚态系统和基础物理系统具有相同形式的 Hamiltonian，因此可以预期这两类系统具有类似的物理行为。但是凝聚态系统具有更多的可调参数，可以更方便、便宜的实现和改变系统。因此可以用这些凝聚态系统来模拟基础物理，为理解基础物理提供线索。例如近期的一些标题：
  - Dirac/Weyl fermions 模拟引力  
“Big Bang gravitational effect observed in lab crystal”, Nature News, 20 July, 2017.
  - 量子多体系统模拟黑洞  
“Mimicking black hole event horizons in atomic and solid-state systems”, Marcel Franz & Moshe Rozali, Nature Reviews Materials **3**, pp491–501 (2018)



## 0.3 为什么要学凝聚态物理和固体物理

- 我们生存的世界是凝聚态的
- 多年来的新发现不断涌现，使之对高新技术发展的推动势头不但不减，反而变得更加突出。
  - 衣食住行
  - 计算机、手机：CPU、存储
  - 医疗仪器
- 深刻的物理
  - 固体物理正在向凝聚态物理的范畴扩展。
  - 固体物理是物质结构中最丰富的层次，因而构成了对于人类智力的巨大挑战。
  - 固体物理的基本概念和实验技术已在非固体学科中得到广泛应用，成为众多学科的共同财富。

# 为什么要学习固体物理?

- 凝聚态物理范围实在太大，无法一个学期/学年学完。
- 凝聚态物理里的很多概念根源于固体物理，是固体物理里一些概念的深化和概括的结果，因此我们不能认为由于研究范围的扩展，传统固体物理的方法就过时了，恰恰相反，只有学好传统固体物理的内容，才能进入凝聚态物理的研究中。
- 尽管凝聚态物理研究范围是固体物理的扩展，固体物理目前仍然是凝聚态物理里的最大子领域。
- 目前也仍然是最有用的子领域。

## 0.4 固体物理的研究方法

- 固体物理是一门“横向”科学。
- 是一门理论与实践密切结合的科学。
- 固体里包含大量粒子，粒子间相互作用很强，因此固体物理是一个非常复杂的多体问题，无法严格求解。
- 即便某一天我们可以借助计算机来完整地、严格地解出某个系统的运动方程，得到的结果也无助于我们理解该系统。

Very often such, a simplified model throws more light on the real workings of nature than any number of “ab initio” calculations of individual situations, which even where correct often contain so much detail as to conceal rather than reveal reality. It can be a disadvantage rather than an advantage to be able to compute or to measure too accurately, since often what one measures or computes is irrelevant in terms of mechanism. After all, the perfect computation simply reproduces Nature, does not explain her. —  
P. W. Anderson’s Nobel Lecture

# 固体物理的研究方法

- 对理解系统行为来说，各种简单模型和近似远比复杂的计算有用。
- 因为不同系统具有非常不同的行为，因此不同系统的模型和处理方式非常不同，因此固体物理中的模型和方法相对其他学科多，而且很多模型之间关系不是太大。这导致我们学习上比较困难。
- 幸运的是，我们更关心原子之间的故事。在固体（特别是晶体里），这些原子的集体行为具有某些共性，可以用相同的概念和方法来理解这些故事。
- 🔑 固体物理中的物理过程多是低能过程，以系统基态能量为零点，涉及的能量多在  $1\text{meV}-10\text{eV}$  之间，偏离基态不远。
- 🔑 因此固体物理或者说凝聚态物理中一个非常重要的主题：寻找系统的基态和低能激发态。二者是紧密相关的，系统基态决定了低能激发态的行为；低能激发态反映了基态性质。
  - 固体系统中典型的基态是晶体，具有周期性。对这种系统的研究最好方法是利用 Fourier 变换，引入倒易空间的概念。
  - 低能激发态的研究的工具则是元激发和准粒子的概念

## 固体物理中的最重要概念之一：倒易空间和布里渊区

赛兹 1940 年出版了《现代固体理论》(F. Seitz, “Modern Theory of Solids”, McGraw-Hill, 1940), 这标志着固体物理的成熟并形成了固体物理理论的第一个范式。

这本书是固体物理学作为独立学科出现的奠基性著作, 目前我们固体物理课程所讲述的固体理论依然处在该书建立的体系中, 它处理问题的基本方法取得了辉煌的成就, 并一直普遍使用到今天, 而且还将会继续使用下去, 因此理解并掌握好这种方法是学好固体物理课的关键之处。

这本书指出了周期结构中波传播的共同点。固体物理研究周期结构中波的传播问题, 无论是弹性波、电磁波, de-Broglie 波相关理论的共同点是: 充分利用了晶体结构中的平移对称性, 使问题得到简化, 因此作为实空间 Fourier 变换而得到的倒易空间(波矢空间)的重要性就被突出出来, 倒易空间的基本单位是布里渊区, 因此了解布里渊区内部和边界上的色散关系(即波矢—能量/频率关系)就成为解决具体问题的关键。

# 主要成果

- 弹性波在周期势场中的传播 - - 晶格动力学
- X 射线在周期势场中的传播 - - X 射线衍射学
- 电子在周期势场中的传播 - - 能带论

应用上述理论可以正确地阐明晶体的电性质、磁性质、光学性质，热性质、超导性等各种物理性质，并开启了晶体材料在各种新技术中，特别是信息技术中的应用，使固体物理在二十世纪后半叶得到了飞速的发展。

## 固体物理中的最重要概念之二：元激发 / 准粒子

- 低能激发态可以用元激发（又称准粒子）来描述。
- 元激发是传统固体物理给出的最重要的概念，并在凝聚态物理得到推广应用。这个概念具有非常重要的意义。
  - 严格的基态的计算非常困难，而且很多时候基态只是提供一个准粒子活动的背景，某些描述基态行为的物理量（例如其结合能）并不重要，和人们关注的物理系统的行为没有很大关系。物理上重要的是相对于基态的偏离，也就是低激发态的行为。这些态可以在相对低的温度和微弱的外场下就会被激发，是它们决定着固体的很多性质。
  - 这些低激发态往往具有特别简单的性质，可以用一些所谓的“元激发”组合出来。这些元激发表现的很象粒子，可以用类似于动量和能量等物理量来描述，因此被成为准粒子。而且很多情况下，这些元激发 / 准粒子的定性行为只和基态的对称性有关，因此数学上可以做严格处理，而且物理上也容易被理解。
  - 例如原子振动的格波和晶体中运动的电子都可以归结为元激发，即声子和准电子。

# 基态和准粒子的例子

场论里也存在基态和元激发。不过在场论里把基态称为真空，元激发称为粒子。

## 晶格系统

- 基态 / 真空：完美晶格
- 低能激发：格波，晶格的集体激发
- 准粒子：声子

## 晶体中的“独立”电子系统

- 基态：Bloch 电子组成的 Fermi 球
- 低能激发态：Fermi 面附近的粒子 - 空穴对激发（单粒子）
- 准粒子：电子、空穴

## 考虑电子间相互作用

- 基态：Fermi 球（无能隙情况）
- 准粒子：电子、空穴（单粒子激发）； 等离子元（集体激发）
- 基态：BCS 基态（超导）
- 准粒子：BCS 准粒子（单粒子激发）； vortex（集体激发）



## 0.5 教材

- 📖 黄昆，韩汝琦，《固体物理学》，高等教育出版社 1988 第 1 版，（根据黄昆，《固体物理学》人民教育出版社 1966 版扩充改编）
- 阎守胜，《固体物理基础》，北大出版社 2000
- C. Kittel, “Introduction to Solid State Physics” (8th ed.), John Wiley & Sons Inc., 2005
- N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, “Solid State Physics”, Cengage Learning, 1976
- S. Simon, “The Oxford Solid State Basics”, Oxford Univ. Press, 2013
- J. S. Blakemore, “Solid State Physics” (2nd ed.), Cambridge Univ. Press, 1986
- M. A. Omar, “Elementary Solid State Physics: Principle and Applications” (4th ed.), Addison-Wesley, 1994

## 更高阶教材

- 冯端，金国钧，《凝聚态物理学（上卷）》，高等教育出版社，2003
- 冯端，金国钧，《凝聚态物理学（下卷）》，高等教育出版社，2012
- J Callaway, “Quanyum Theory of The Solid State”, Academic Press, 1976
- O Madelung, “Introduction to Solid State Theory”, Springer, 1978
- J M Ziman, “Principles of the Theory of Solid”, Cambridge University Press, 1972
- 李正中，《固体理论》，高等教育出版社，1985

# 课程主要内容

## ● 晶体

### ● 晶体：固体的基态？

- 晶体周期性结构的数学描述：晶格、点阵…
- 晶体的分类：对称性…
- 典型的晶体结构
- 倒易空间：晶体里的动量 / 波矢空间
- 晶体结构的实验测量

### ● 格波与声子：固体的低能激发态

### ● 晶体的结合方式

## ● 晶体里的电子

### ● Drude 模型：经典自由电子模型

### ● Sommerfeld 量子自由电子模型

### ● Bloch 电子：能带理论

### ● Bloch 电子在电、磁场作用下的运动