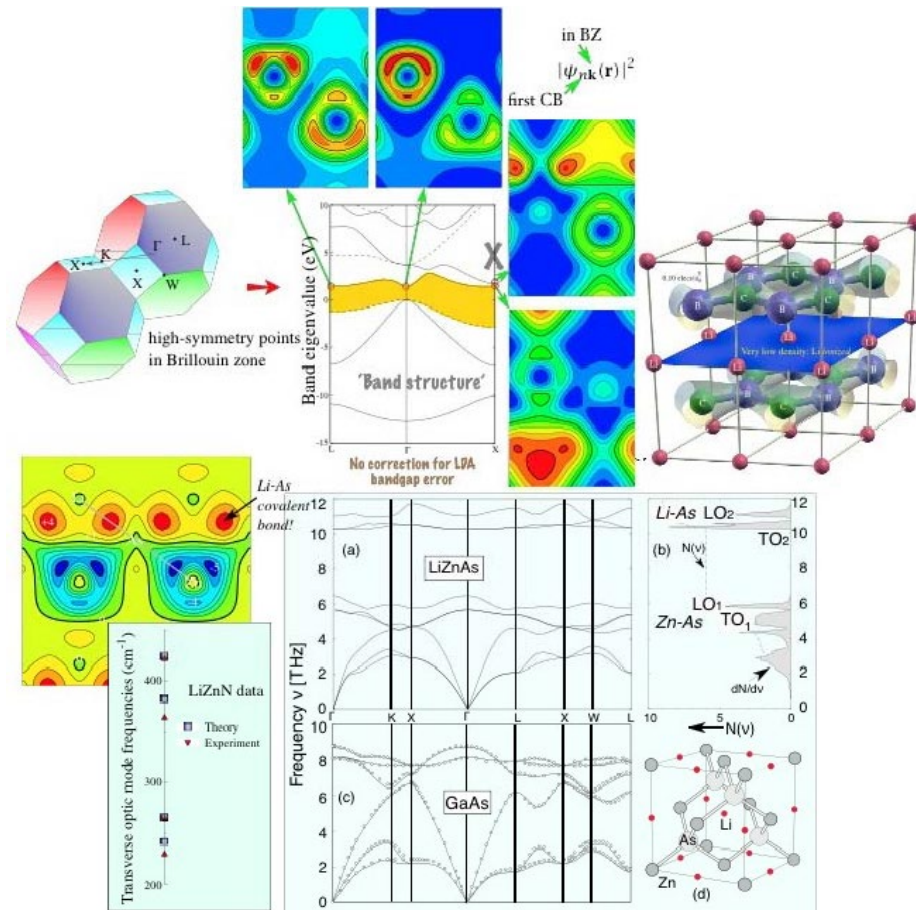


# 固体物理

# Solid State Physics



---

**赵瑾，女，教授博导**

**1994-1998**

**中国科学技术大学，学士学位**

**1998-2003**

**中国科学技术大学，博士学位 (导师: 侯建国, 杨金龙)**

**2004-2010**

**美国匹兹堡大学，博士后 (Hrvoje Petek研究组)**

**2010至今**

**中国科学技术大学，教授**

---

Email: [zhaojin@ustc.edu.cn](mailto:zhaojin@ustc.edu.cn)

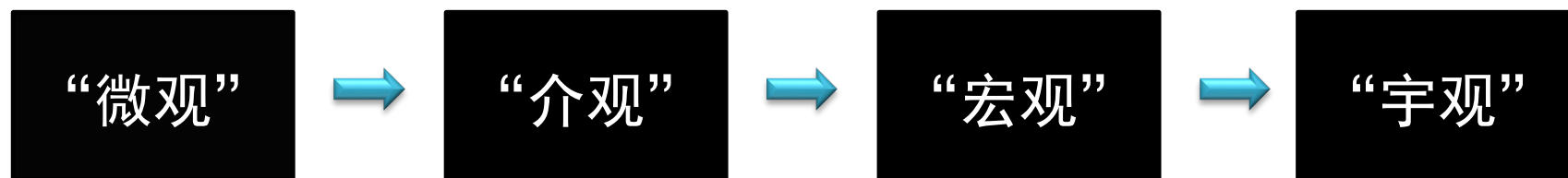
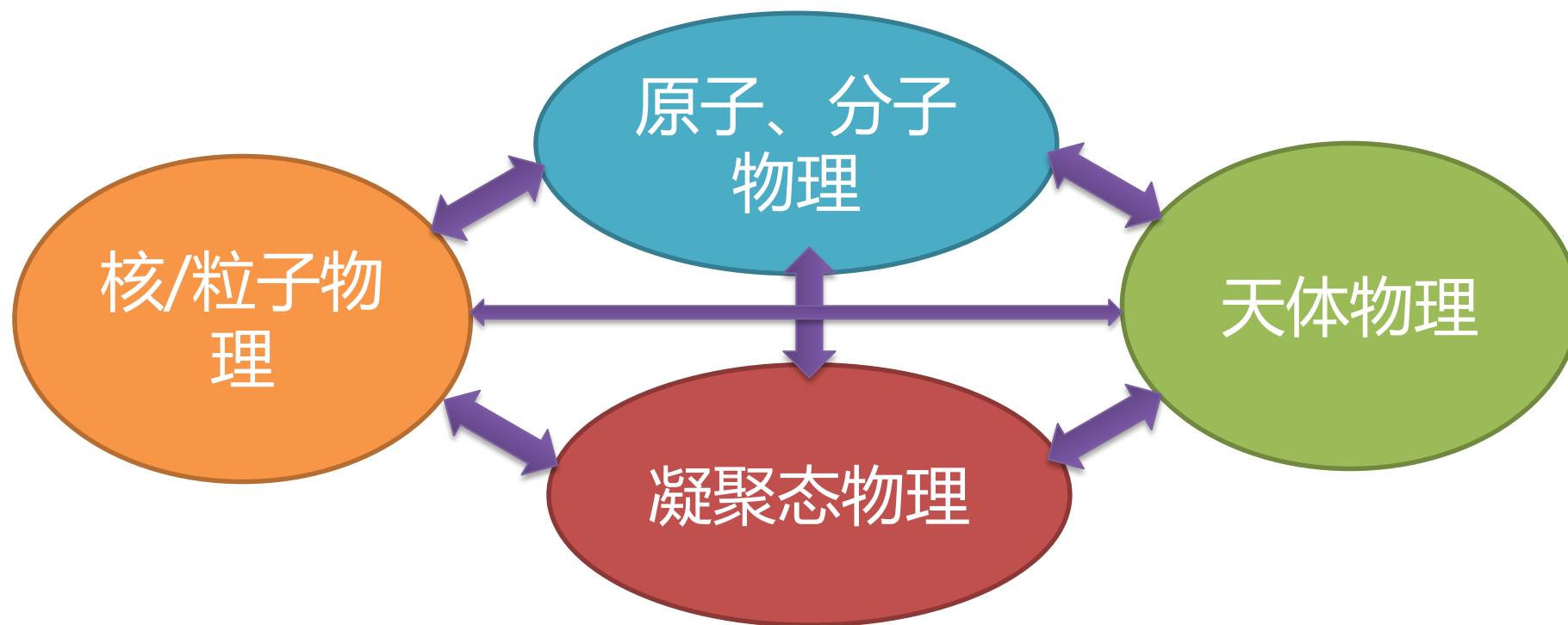
办公室: 物质楼B908

主页: [staff.ustc.edu.cn/~zhaojin](http://staff.ustc.edu.cn/~zhaojin)  
[hefei-namd.org](http://hefei-namd.org)

# 绪论：固体物理的昨天，今天

- 0.1 固体物理的研究对象
  - 0.2 固体物理的发展历程
  - 0.3 固体物理的研究方法
  - 0.4 固体物理的相关教材
-

## 0.1 固体物理的研究对象



什么是凝聚态？什么是凝聚态物理？

什么是固体？什么是固体物理？

# 普通物理

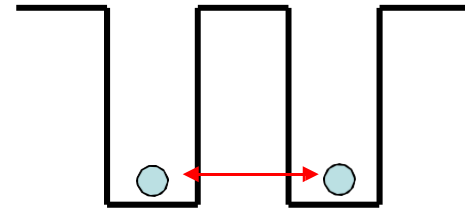
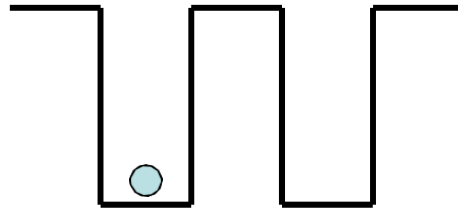
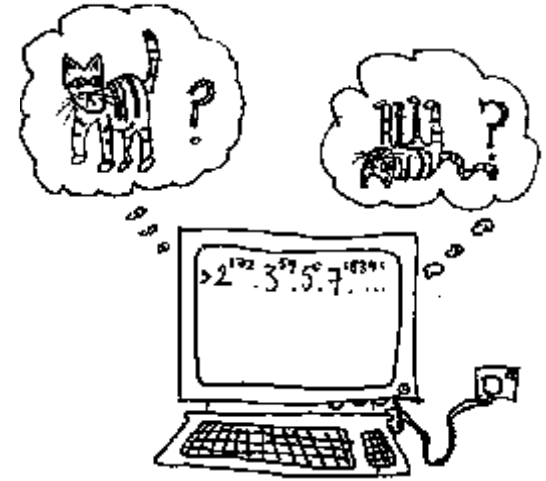
宏观经典世界

- 力学
- 电磁学
- 热学
- 光学

原子物理

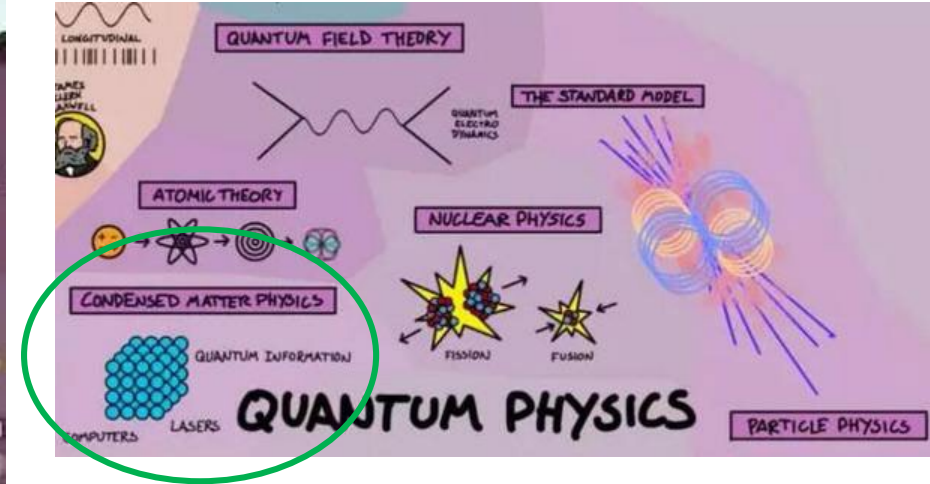
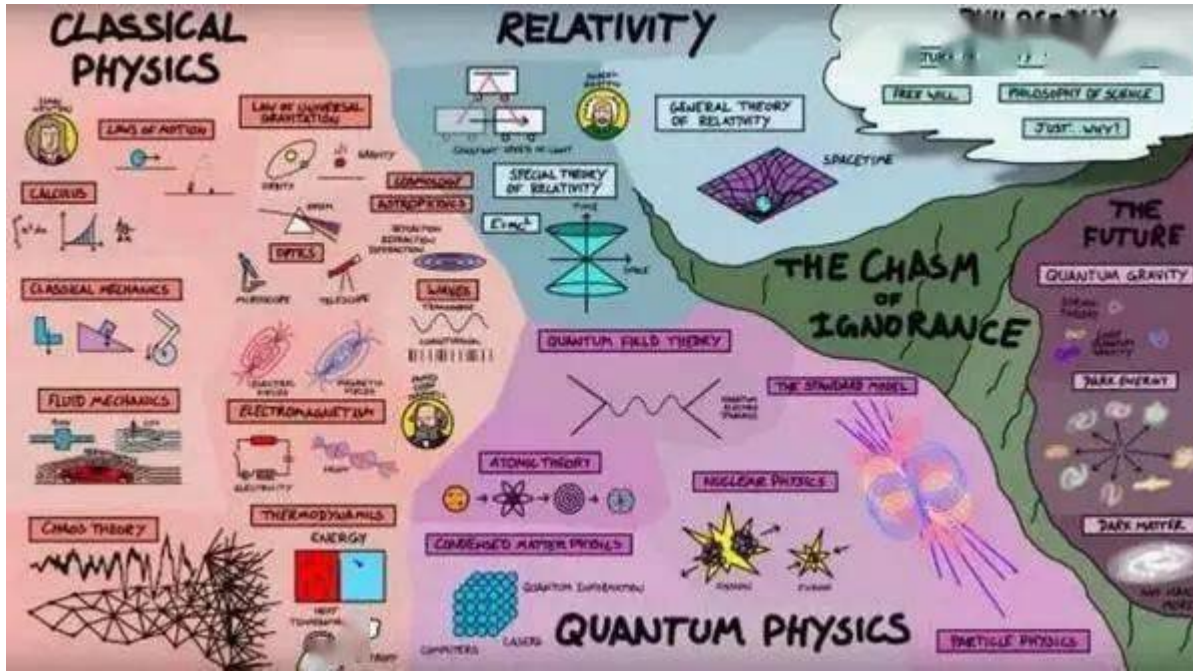
量子力学

微观量子世界



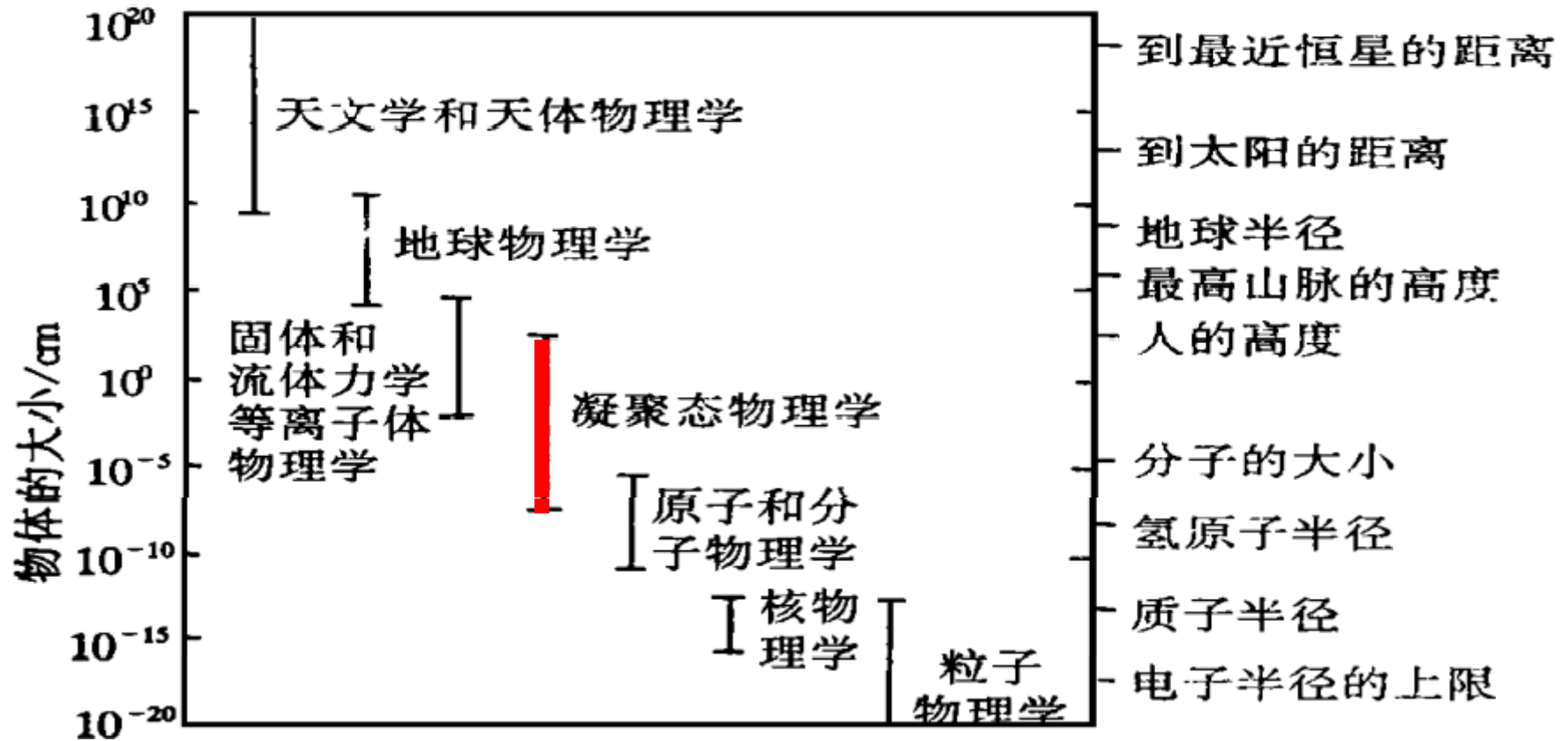
tunneling

# 物理学地图

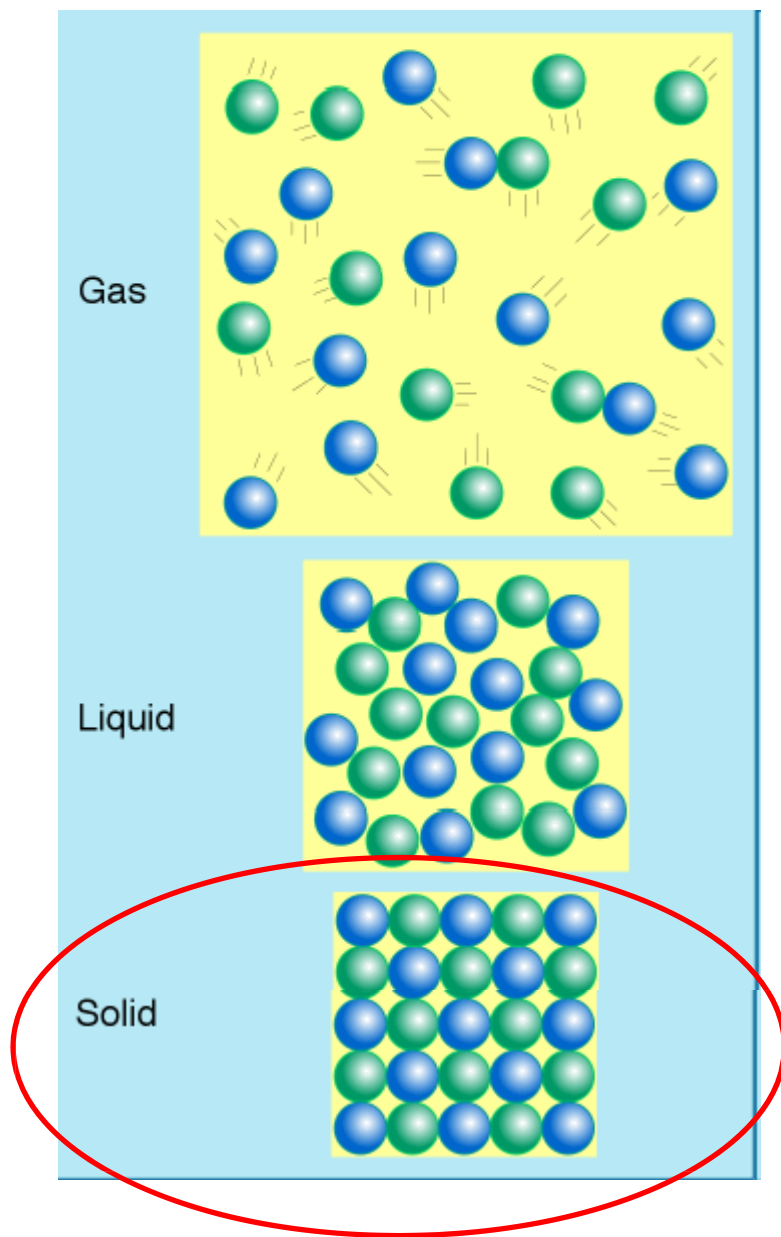


- ✓ **凝聚态**：由**大量粒子**组成，并且粒子间有**很强相互作用**的系统。
- ✓ **凝聚态物理学**：从**微观**角度出发，研究由大量粒子（原子、分子、离子、电子）组成的凝聚态的结构、动力学过程及其与**宏观**物理性质之间的联系的一门学科。

# 凝聚态物理的研究对象尺寸






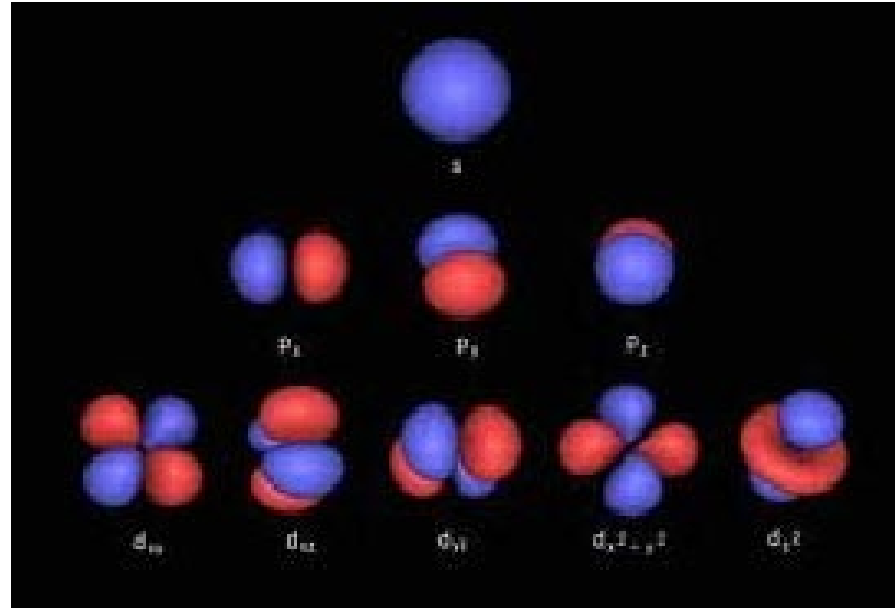


Condensed matter

固体物理

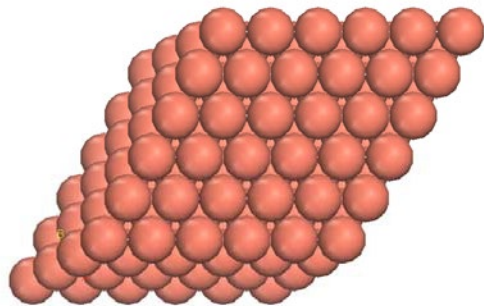
# Quantum mechanics - Atomic orbitals

  
atom

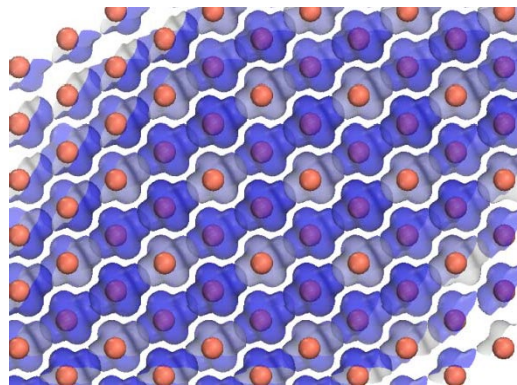


## Solid state physics – energy bands

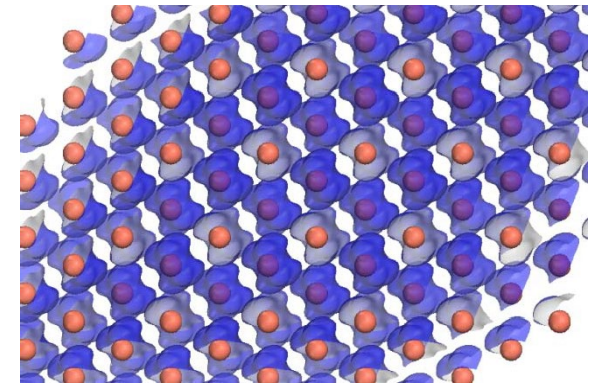
- Biggest branch of condense matter physics



solid



d bands in Cu



# What is solid state physics?

**Solid-state physics** is the study of rigid matter, or solids, through methods such as quantum mechanics, crystallography, electromagnetism, and metallurgy. It is the largest branch of condensed matter physics. Solid-state physics studies how the **large-scale properties of solid materials result from their atomic-scale properties**. Thus, solid-state physics forms the theoretical basis of materials science.

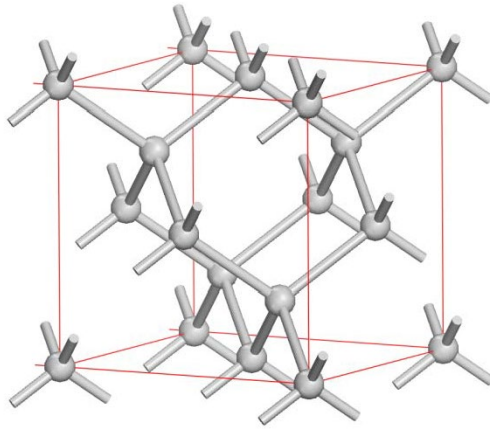
From Wiki

- Solid state physics, also known as **condensed matter physics**, is the study of the behaviour of atoms when they are placed in close proximity to one another.
- In fact, condensed matter physics is a much better name, since  
for example.

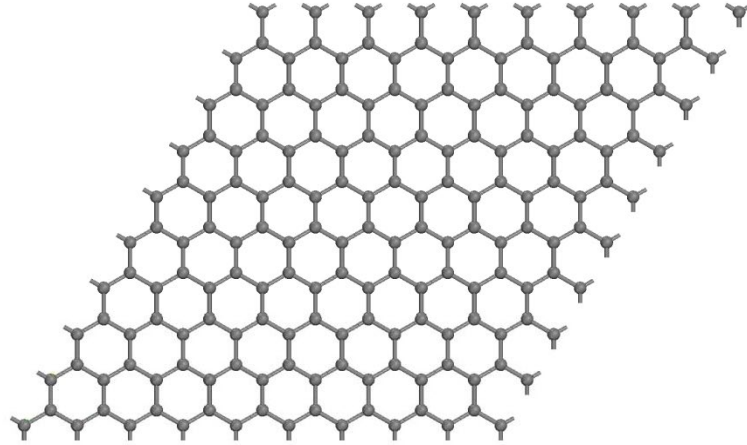
固体物理研究的不是单个原子的性质，而是大量原子组成在一起形成固体后所表现出来的集体性质。

固体是由大量原子和分子组成的，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。

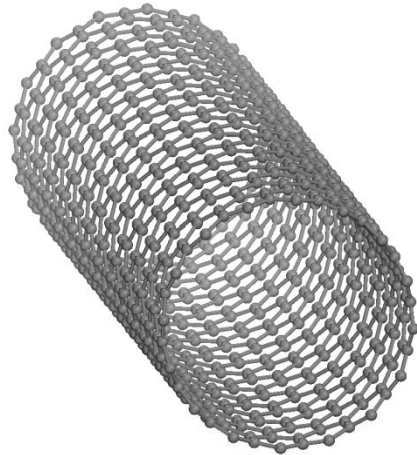
# Carbon materials



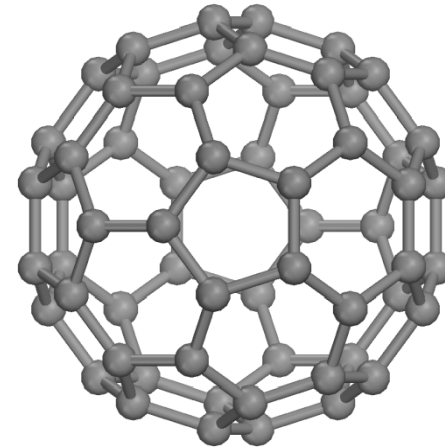
diamond Insulator 绝缘体



graphene Metallic properties 金属性

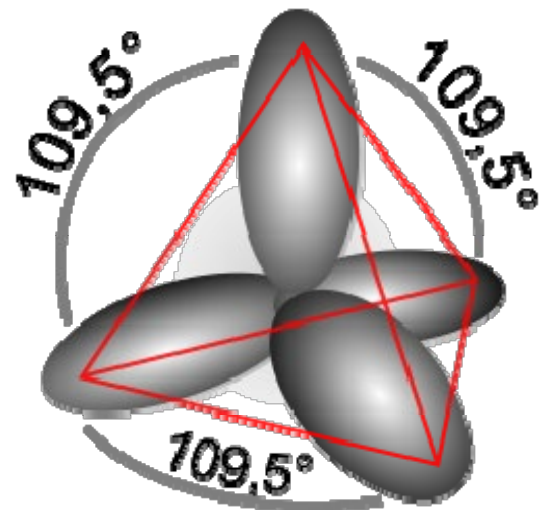
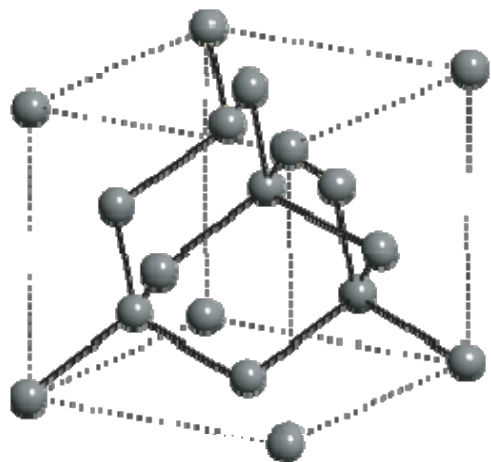


Nanotube Semiconductor or metallic  
半导体或金属性

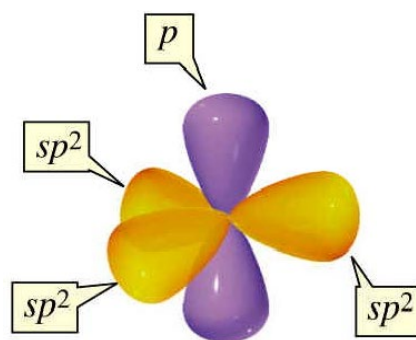
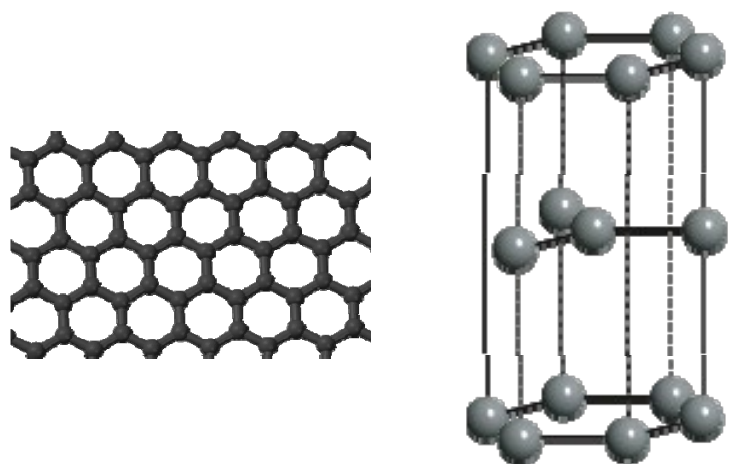


Fullerenenes Superconductor 超导体

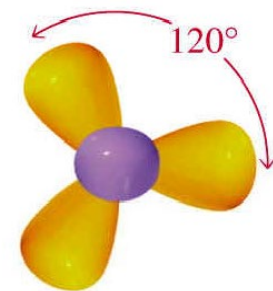
## $sp^3$ 杂化轨道



## $sp^2$ 杂化轨道



side view



top view

自然界中的固体，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**。

固体物理的研究首先是从晶体开始的：

1. 在自然界的矿物中，晶态物质占到**98%**以上，人类最早研究和使用的材料也大都是晶态物质，是各类晶态物质特有的性质引起了研究兴趣和开发利用。
2. 晶态物质原子排列的周期性使的固体理论得以顺利进行，**如今已经成熟并获得巨大成功的固体理论只是建立在对晶体研究的基础上。严格说来应该叫做晶体物理学。**但基于上述原因，过去很长一段时间里，人们把“固体”与“晶体”看成同义词，并不区别它们间的差别，所以早期**Kittel**说：固体物理研究**晶体和晶体中的电子**。

固体物理和四大力学也不同，后者分别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，如理论力学研究物体的机械运动等，固体物理则不同，它研究的对象是一类物质——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，所以四大力学都是固体物理的理论基础课。



## The scope of solid state physics

*Solid state physics studies physical properties of materials*

| <u>Material</u>  | <u>Structure</u>                | <u>Shape</u>  | <u>Properties</u>   |
|--|---------------------------------|---|---|
| metal<br>semiconductor<br>insulator<br><i>superconductor</i><br><i>magnetic</i><br>... etc | crystal<br>amorphous<br>... etc | bulk<br>surface<br>interface<br>nano-cluster<br>... etc | electrical<br>optical<br>thermal<br>mechanical<br>... etc |

$$\text{Solid state physics} = \{A\} \times \{B\} \times \{C\} \times \{D\}$$

Always try to understand a physical phenomenon from the microscopic point of view (atoms plus electrons)!

## 0.2 固体物理学的发展历程

固体物理学作为一门近代科学始于**20**世纪初，虽然晶体学的研究有着悠久的历史，**19**世纪末就已经建立起了完整的对称性理论，但只是在**1912**年\***Laue**发现了晶体的**X**射线衍射现象后，晶体结构的研究才得以证实，并从此具备了实验研究固体微观结构的条件。

**20**世纪初量子论，特别是量子力学的逐步建立使正确解释已经发现的关于固体性质的规律成为可能。

自此之后的几十年是创立固体理论的辉煌时期：

\*Einstein 1907 和Debye 1912,建立了固体比热的量子理论，解释了低温比热为什么低于Dulong-Petit 值。

\*Born和Karman 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, \*朗道，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。

赛兹1940年出版的《现代固体理论》一书，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。（**建立在对晶体认识的基础上**）

Seitz F, Modern Theory of Solids  
McGraw-Hill 1940

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**。（适用条件，使用方法，局限性等），

固体理论的第一个范式：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变换而得到的波矢空间的重要性就被突出出来，波矢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能量波矢关系就成为解决具体问题的关键。**

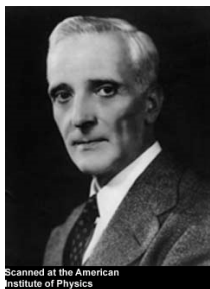
有人（Hall）比喻：

倒易空间和布里渊区是固体物理的  
**Maxwell**方程

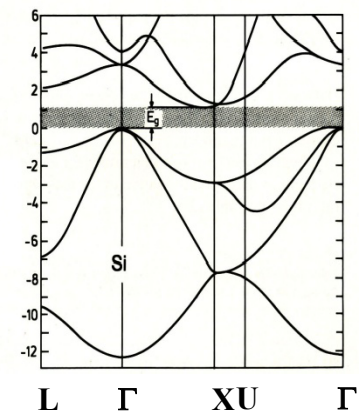
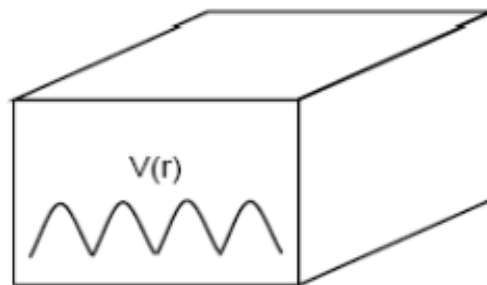
# 固体物理：周期结构中波的传播



F. Bloch



L. Brillouin



该理论体系研究的主要成果：

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。

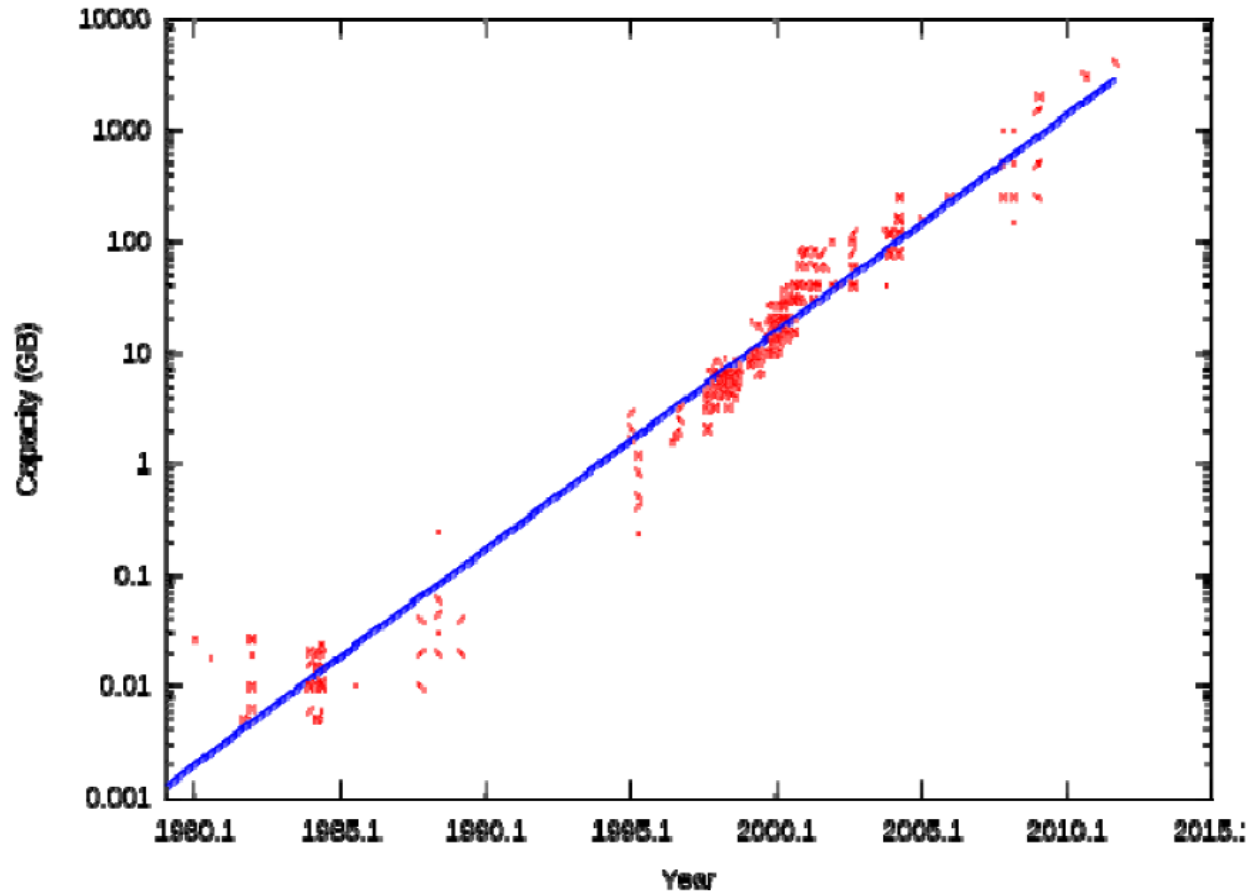
---

今天可以毫不夸大地说：已经成为当代科学重要支柱、高科技源泉的固体物理学是二十世纪物理学中发展最快、影响最大、领域最广的一门学科。统计表明，现今四分之一的物理工作者从事固体物理研究，每年发表的物理科学论文中三分之一属于固体物理领域。



Shockley, Bardeen, Brattain 1947年12月23日发现了半导体晶体管的放大效应，由此带来的巨大影响是固体物理和高科技发展关系的最典型的说明。1950年晶体三极管，1954年硅晶体管，1959年集成电路，之后大规模集成电路，超大规模集成电路相继问世，极大地推动了计算机的发展，促成了人类历史上的第3次技术革命。

## 固体物理促进高技术发展的实例：硬磁盘的发展



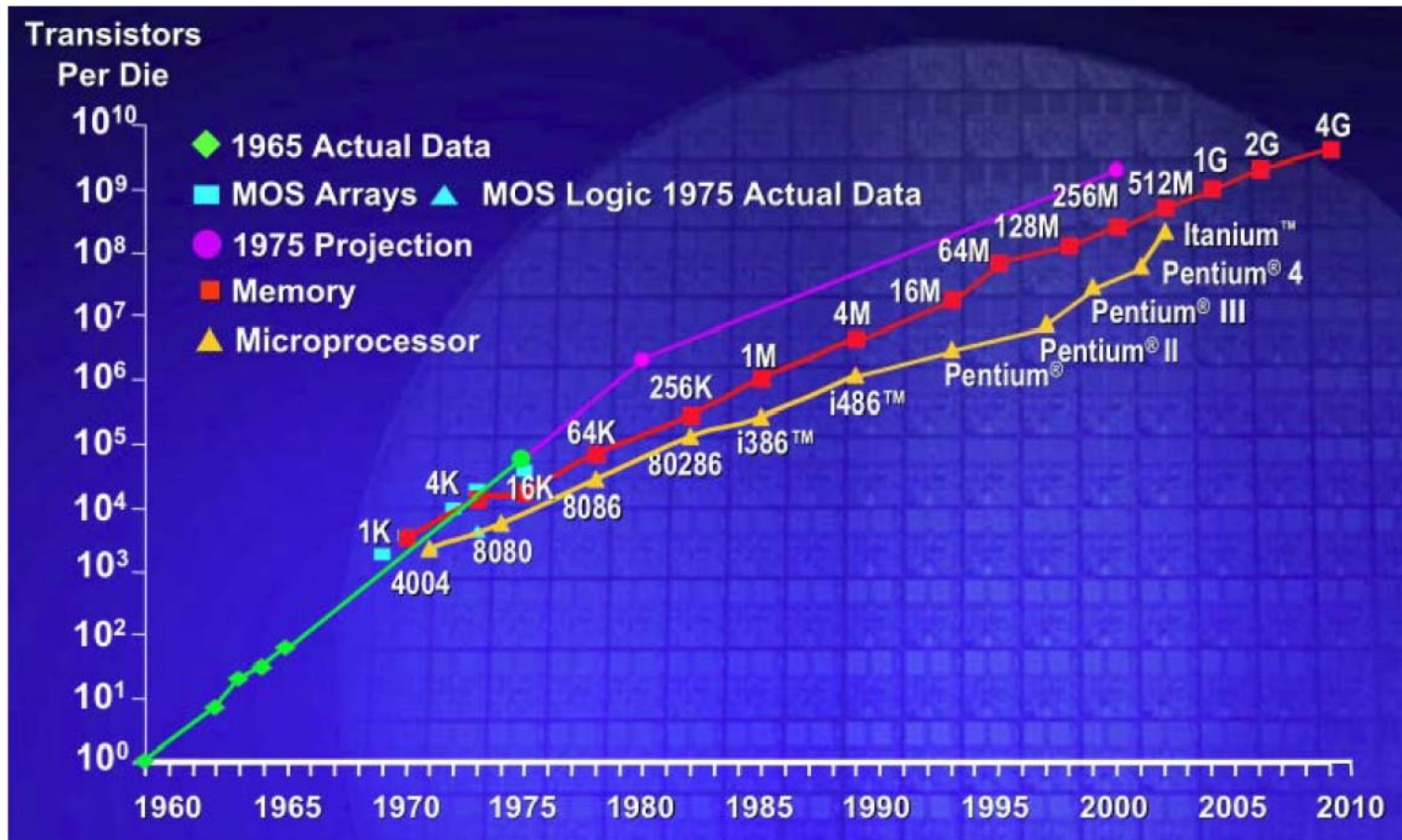
**2011年**

**存储密度 >  
600Gbit/in<sup>2</sup>**

**1G = 10<sup>9</sup>**

**1T = 10<sup>12</sup>**

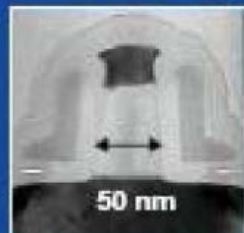
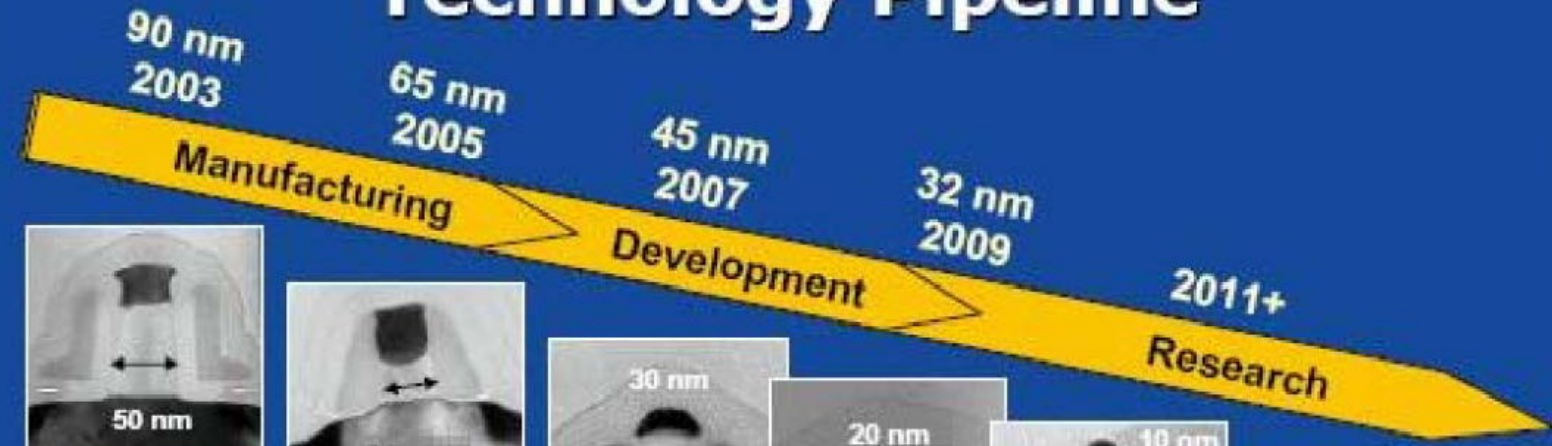
**in = 2.54cm**



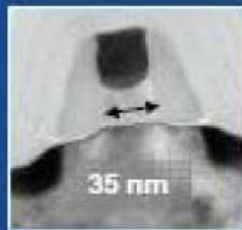
## Moore's Law

The law is named after Intel co-founder Gordon E. Moore, who described the trend in his 1965 paper. The paper noted that the number of components in integrated circuits had doubled every year from the invention of the integrated circuit in 1958 until 1965 and predicted that the trend would continue "for at least ten years". His prediction has proven to be uncannily accurate, in part because the law is now used in the semiconductor industry to guide long-term planning and to set targets for research and development.

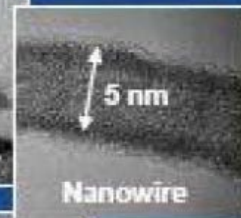
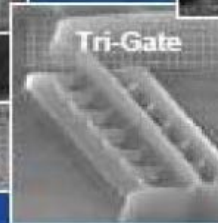
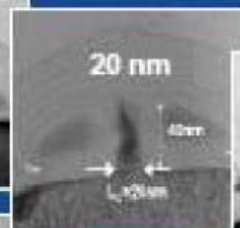
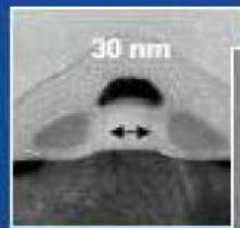
# Innovation-Enabled Technology Pipeline



SiGe S/D  
Strained Silicon



SiGe S/D  
Strained Silicon



Future options subject to change

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C<sub>60</sub>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)

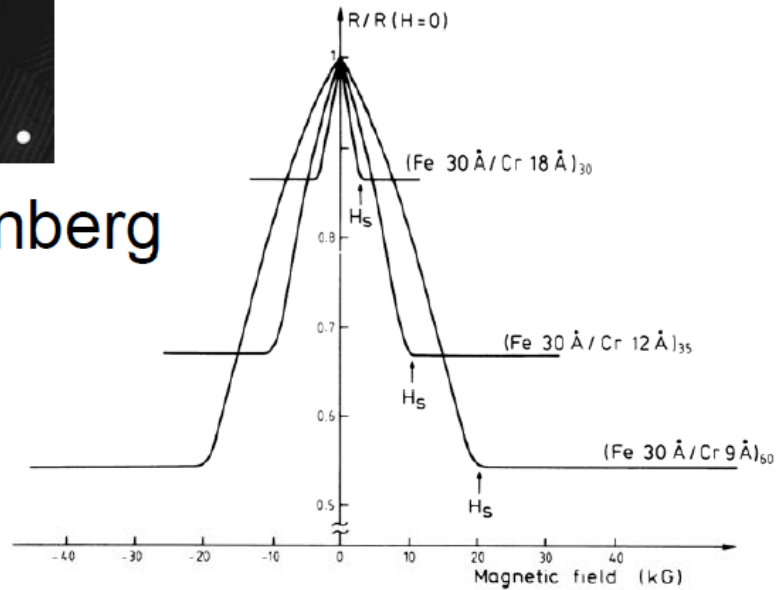
2007年发现**拓扑绝缘体**(topological insulator)

2008年发现**铁基超导体**(pnictide superconductors)

# 巨磁电阻效应(GMR): 1988年发现，2007年获诺贝尔物理学奖

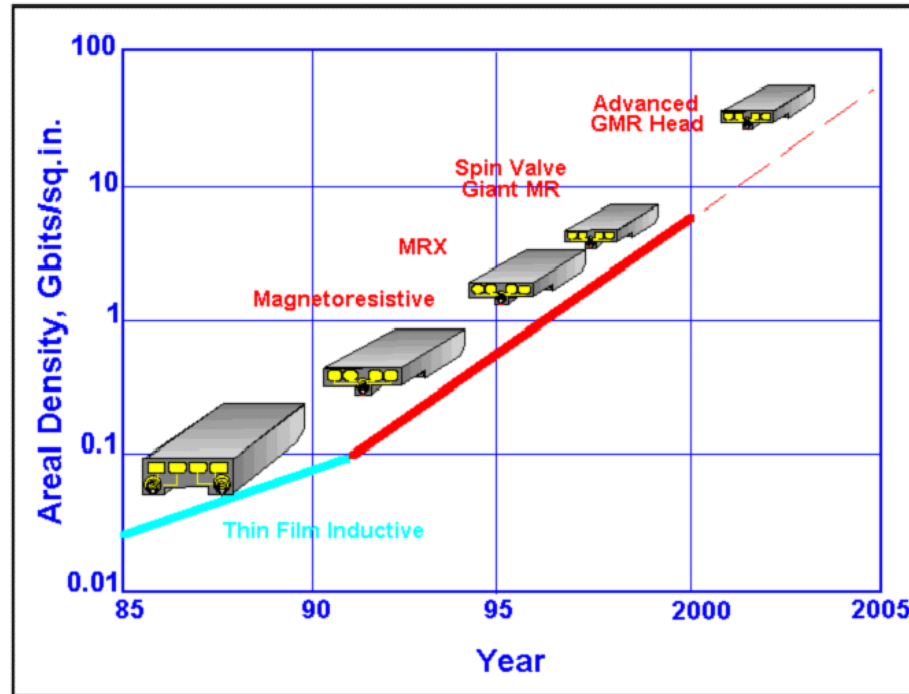


Albert Fert Peter Grünberg

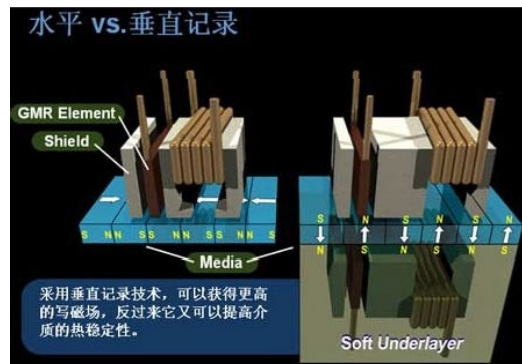


Phys. Rev. Lett. 61, 2472 (1988), Fert et al.

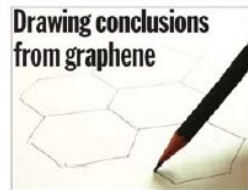
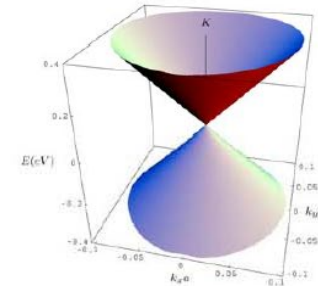
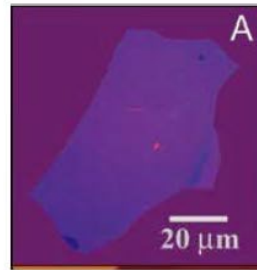
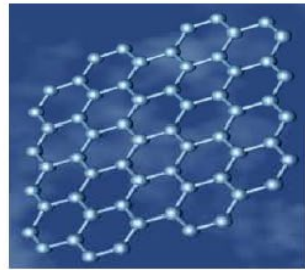
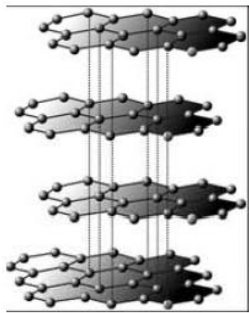
# GMR和TMR效应在存储技术中的应用



- 1988年：发现单晶薄膜中的GMR
- 1991年：发现多晶薄膜中的GMR（IBM）
- 1994年：IBM制造基于GMR的磁头
- 1997年：IBM制造基于GMR的16.8GB硬盘（ $2.69\text{Gbits/in}^2$ ）
- 2010年：日立发布3TB硬盘（ $> 600\text{Gbits/in}^2$ ）

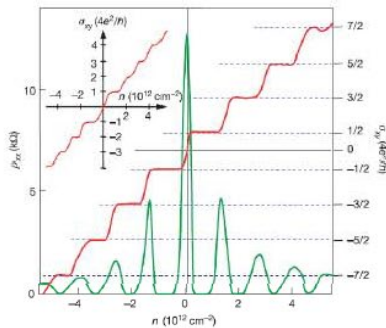


# 石墨烯(graphene): 2004年制备成功, 2010年获诺贝尔物理学奖



用铅笔和胶带制作graphene的视频:

[http://v.youku.com/v\\_show/id\\_XMjl4NDI0MDE2.html](http://v.youku.com/v_show/id_XMjl4NDI0MDE2.html)



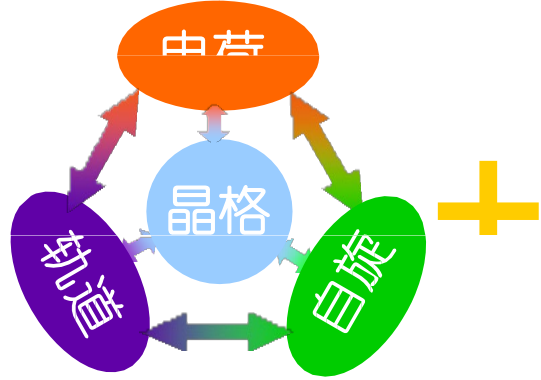
Andre Geim and Konstantin Novoselov





还应特别指出：这个期间中，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。它得到的是全新的材料——人类智能的结晶，一维量子势阱和巨磁电阻效应就是在超晶格材料中发现的。

---



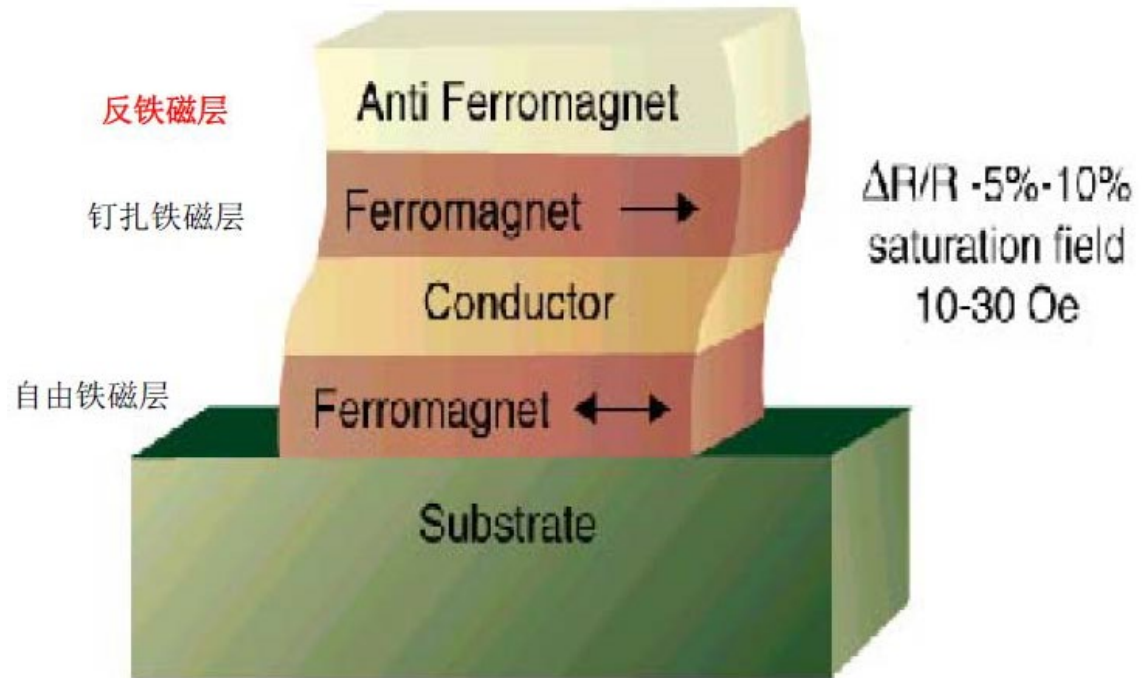
晶格、对称性、电  
极性、化学势等序  
参量在界面不连续



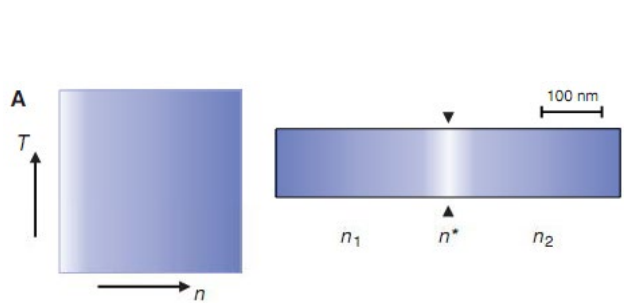
不同于单相材料  
的新量子效应



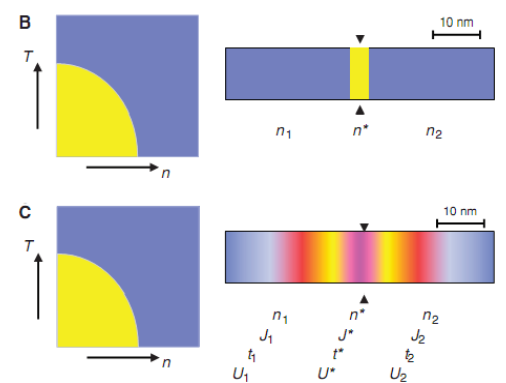
### GMR Spin Valve



# 电子形变 (electron metamorphosis)



常规半导体界面



关联氧化物界面

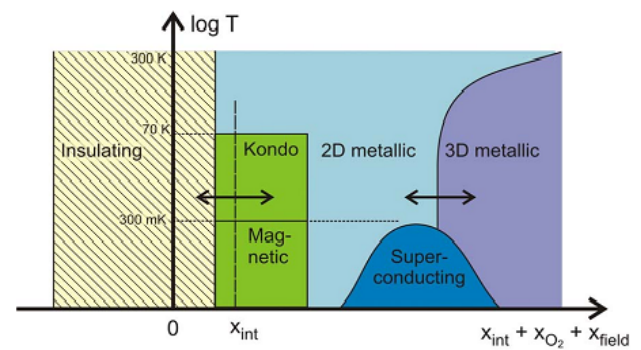


Mannhart *et al.*, Science 327, 1607 (2010)

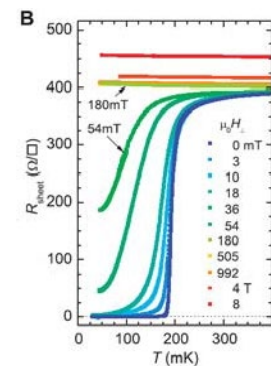
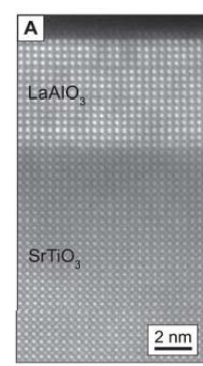
## LaAlO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub>界面新奇特性

界面相图：二维电子气、铁磁、超导

界面电阻



Huijben *et al.*, Adv. Mater. 21, 1 (2009)



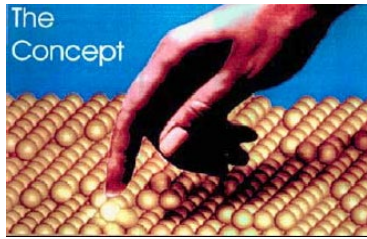
Reyren *et al.*, Science 317, 1169 (2007)

1959年，著名的诺贝尔奖得主费曼（Richard Feynman）就设想：

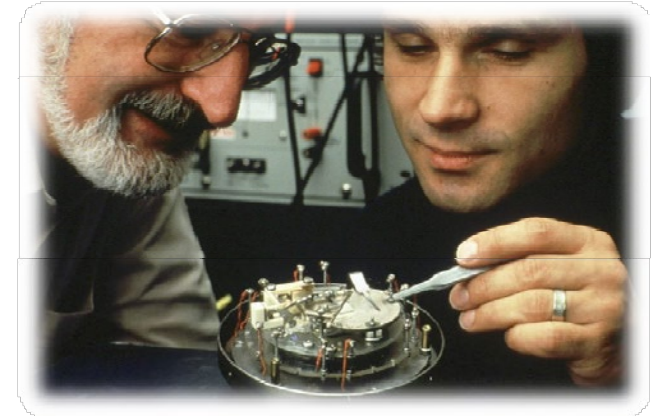
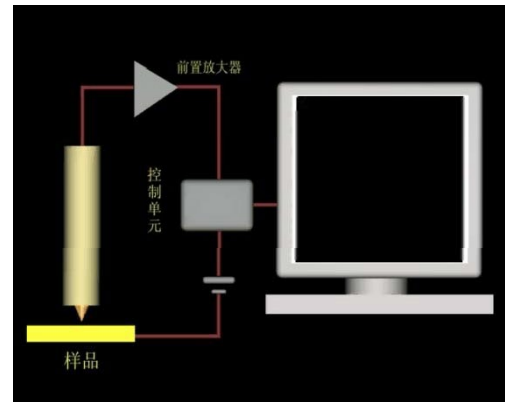
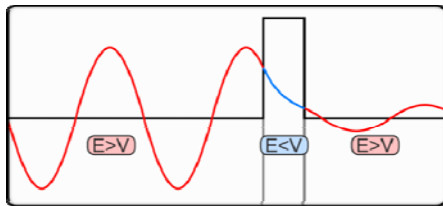
“如果有一天人们可以按照自己的意志排列原子和分子，那会产生什么样的奇迹！”，

“毫无疑问，如果我们对细微尺度的事物加以控制的话，将大大扩充我们可以获得物性的范围”，

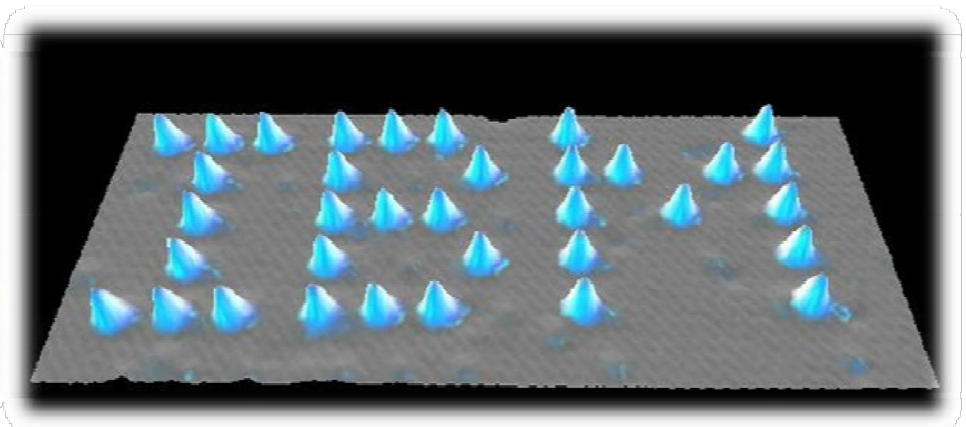
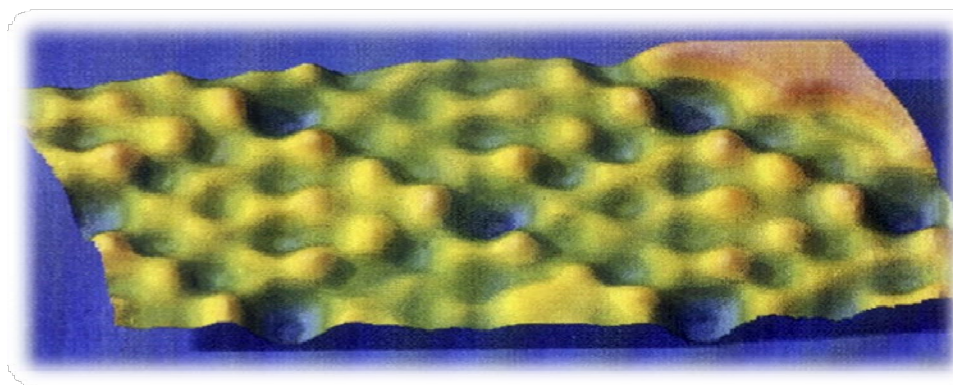
如今，费曼的预言已经初步实现：我们已能够制备包括几十个到几万个原子的纳米粒子，并把它们作为基本构成单元，适当排列成一位量子线、二维量子面和三维纳米固体。



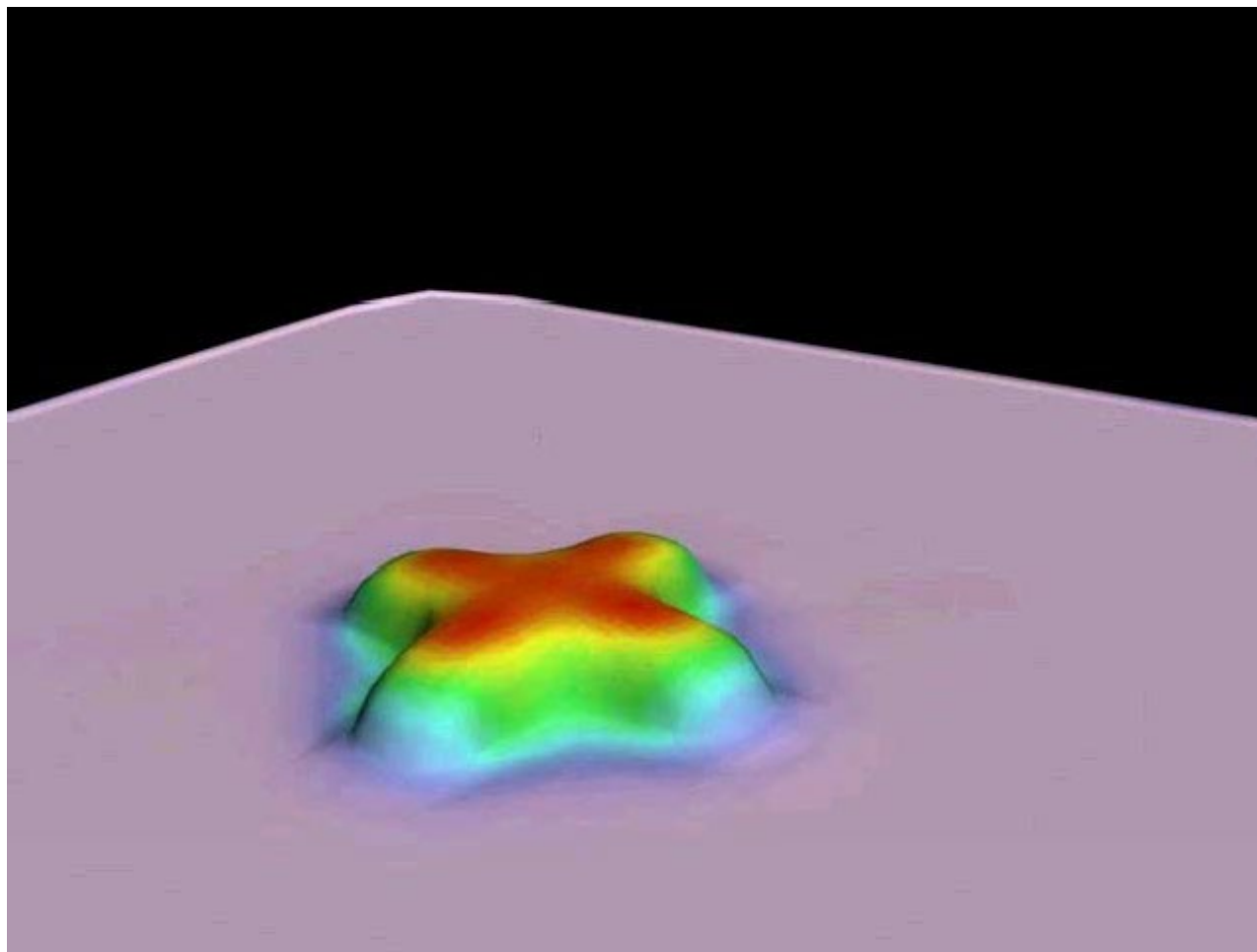
## 扫描隧道显微镜 (STM)



G. Binnig和H. Rohrer  
1986年诺贝尔物理系奖



## 单分子手术控制分子的磁性



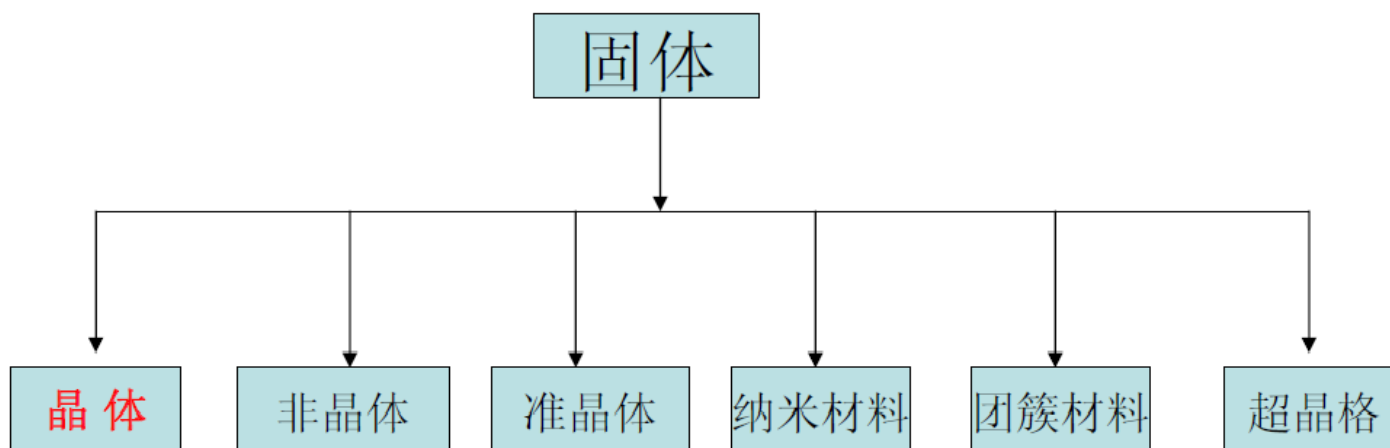
2005年中国十大科技进展

A. D. Zhao *et al.*, *Science* 309, 1542 (2005)

从二十世纪固体物理发展中得到的几点认识：

1. 固体物理正在向凝聚态物理的范畴扩展。
2. 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。
3. 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，**60**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，在世纪交接之际反而变得更加突出。

## 固体物理正在向凝聚态物理的范畴扩展



目前固体物理的研究已经从传统的晶状固体拓展到非晶固体、薄膜和细小粒子体系、以及量子流体，这一更宽的研究领域人们称之为凝聚态物理学



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。这时再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，人们提出了“凝聚态物理”的概念。然而至目前为止，已经成熟并获得巨大成功的固体理论体系仍然还是建立在对晶体研究的基础上，只完全适用于对**晶态块状**物质的讨论。无序、纳米体系材料物理性质的理论研究显然不能沿用上述理论体系，它们的理论研究仍处在起步和发展阶段，其理论体系尚在建立之中，因此至目前为止，虽已有凝聚态物理的论著，但真正建立起**对所有固体普遍适用的统一理论**还有很大困难。

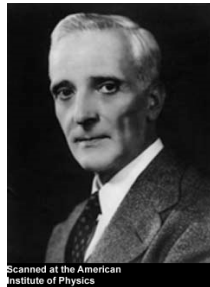
---

# 凝聚态物理的范式

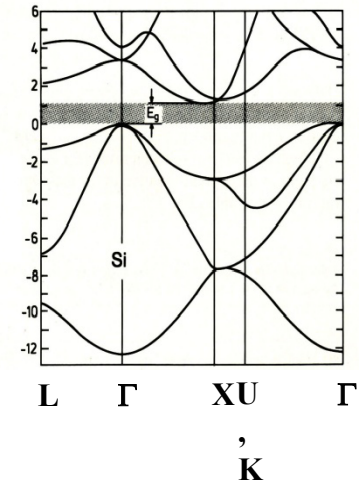
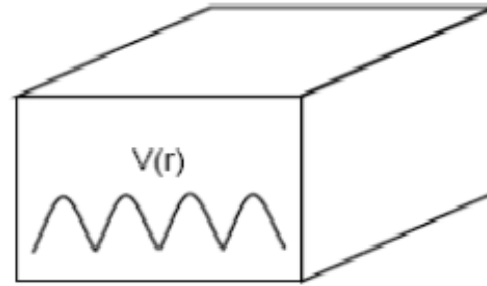
固体物理：周期结构中波的传播



F. Bloch



L. Brillouin



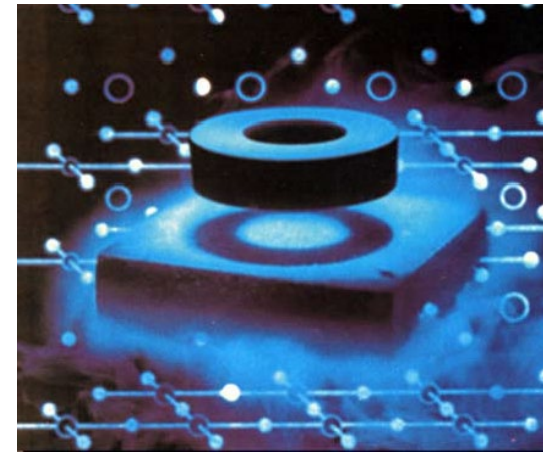
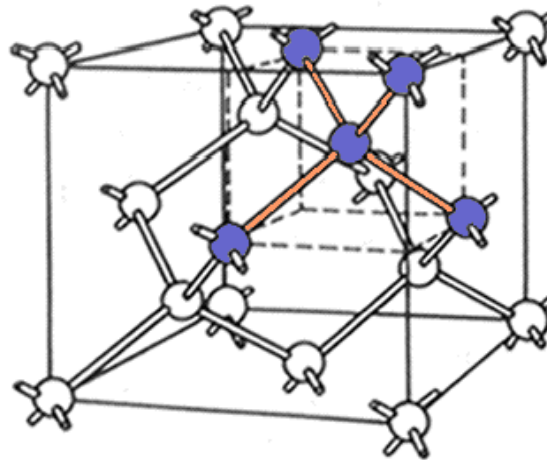
凝聚态物理：对称破缺



L. Landau



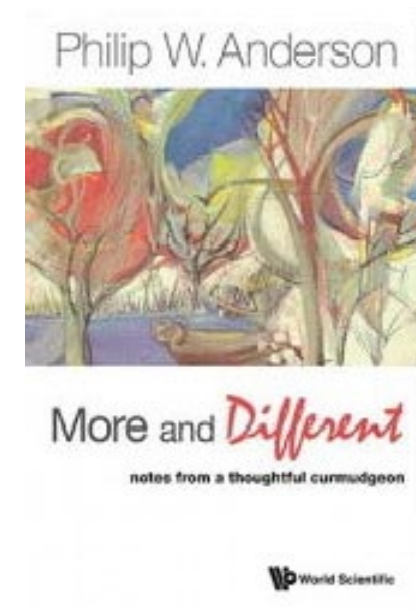
P. W. Anderson



四个层次, 相互关联: 基态, 元激发, 缺陷和临界区域

# More is different

将万事万物还原成简单的基本规律的能力 ,并不蕴含着具备可以从这些规律重建宇宙的能力 .....。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。取而代之的是在每一复杂性的发展层次之中呈现了全新的性质 ,从而我认为要理解这些新行为所需要作的研究 ,就其基础性而言 ,与其它相比也毫不逊色。——P. W. Anderson



P. W. Anderson, “More Is Different”  
Science 177, 393 (1972)

从固体物理到凝聚态物理一方面是传统固体物理的向外扩展，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，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。

凝聚态物理：

高等固体物理 — 杨金龙教授

## 0.3 固体物理的研究方法

1. 固体物理是一门“横向”科学；
2. 是一门理论与实践密切结合的科学；
3. 固体理论中充满了各种近似方法：1立方厘米中含有 $10^{23}$ 个原子，相互作用是极其复杂的多体问题，只能近似求解。
4. 固体物理中的两类问题：  
理想完整晶体； 近完整晶体；  
基态问题； 低激发态问题；

## 难点1：多体问题



如果要认为星空中的每颗星都存在相互作用, 要严格求解其运动方程是不可能的。

- 牛顿

固体理论的第一个范式：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**变换而得到的波矢空间的重要性就被突出出来，波矢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能量波矢关系就成为解决具体问题的关键。**

有人（**Hall**）比喻：

倒易空间和布里渊区是固体物理的  
**Maxwell**方程

---

固体物理中的处理方式：周期场近似，绝热近似，平均场近似等



固体理论的第一个范式. 从头计算

Ab initio quantum chemistry methods 从头计算  
First principle calculations 第一性原理计算

从最基本的物理定律出发，不依靠任何参数拟合来计算物质的电子结构

**\*Anderson:**

一个简化模型对于自然界实际状况的见解，远胜于个别情况的从头计算，这些计算即便是对的，也往往包含了过多的细节，以至于掩盖了而不是显示了现实，计算或测量的过于精细有时不一定是优点，反而可能是缺点，因为人们精确测量或计算出的结果往往是与机制无关的事情，总之，完美的计算可以重视自然，但不能解释它。

## 难点2：激发态的处理

### 固体物理中的处理方式：元激发

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。它有两层含义：**1. 基态的总结合能并不是一个很重要的物理量，和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低激发态行为**，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性质；**2. 这些低激发态往往（几乎确是如此）具有特别简单的性质，比起其他状态来说，数学上可以做严格处理，而且物理上也容易被理解。所以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。**——摘自冯端文章

光子 ————— 电磁波

## 固体中的元激发 (excitation)

Bloch电子 ————— 周期势场中的电子

声子 ————— 弹性波

等离子激元 ————— 集体电子波

磁振子 ————— 自旋波

极化子 ————— 电子 + 弹性波

激子 ————— 电极化强度波

轨道子 ————— 轨道波

[http://en.wikipedia.org/wiki/List\\_of\\_quasiparticles#](http://en.wikipedia.org/wiki/List_of_quasiparticles#)

## 0.4 教材与内容

### 国内教材与参考书

1. 阎守胜, 固体物理基础\* 北大出版社2000
2. 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)
3. 方俊鑫, 陆栋, 固体物理学(上, 下两册) 上海科技出版社 1980, 1981  
(根据谢希德, 方俊鑫, 固体物理学1965版扩充改编)
4. 顾秉林, 王喜坤, 固体物理学清华大学出版社1990
5. 陈长乐, 固体物理学西北工大出版社1998
6. 王矜奉, 固体物理教程(4版) 山东大学出版社2004  
(1999年初版)
7. 朱建国等固体物理学科学出版社2005 (四川大学)
8. 韦丹, 固体物理 (清华大学2007)

## 国外教材与参考书

**Kittel C. Introduction to Solid State Physics, 8th ed.**

John Wiley & Sons Inc.,2005

（作者是在固体物理研究领域有过重要贡献的美国加州大学Bekeley分校物理学教授，该书1953年首次出版后受到广泛重视，后于1956，1966，1971，1976，1986，1996年不断修订再版，成为大学固体物理的标准教材之一，2005年是第8版。我国曾先后翻译出版了1956年的第2版和1976年的第5版。）固体物理导论化学工业出版社，2005

**Busch G. Schade H. 固体物理学讲义高等教育出版社1987**

(原文为德文，瑞士联邦技术学院教材，1972)

**M A Omar Elementary Solid State Physics: Principle and Applications**

中译本：固体物理学基础北京师范大学出版社1987

**H E Hall Solid State Physics John Wiley & Sons Ltd 1974**

(英国曼彻斯特大学教材)

**Ashcroft, Mermin Solid State Physics 1976**

（康乃尔大学，公认为世界最权威的固体物理教材）

**Blakemore , Solid State Physics, Cambridge University Press,1986**

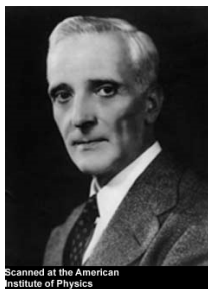
## 更深入的教材

1. 阎守胜, 现代固体物理学导论, 北京大学出版社
2. 冯端, 金国钧, 凝聚态物理学新论, 上海科学技术出版社
3. 美国物理学评述委员会. 90年代物理学——凝聚态物理学. 科学出版社
4. 张礼, 近代物理学进展, 清华大学出版社
5. **P.W.Anderson, Basic notions of condensed matter physics, Benjamin-Cummings, Menlo Park (1984)**
6. **P.M.Chaikin & T.C. Lubensky, Principles of condensed matter physics, Cambridge (1995).**
7. 李正中, 固体理论, 高等教育出版社

# 固体物理：周期结构中波的传播

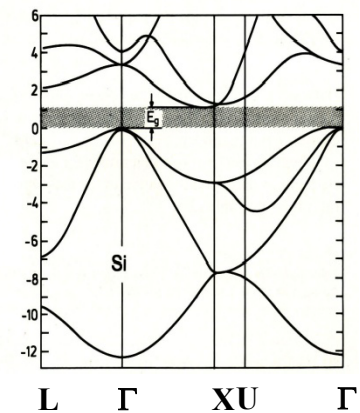
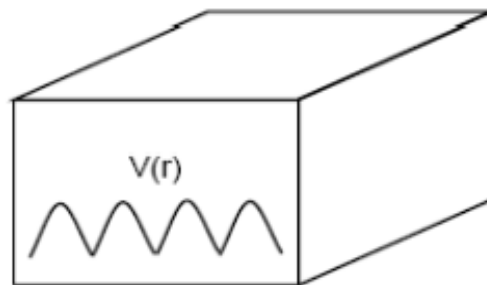


F. Bloch



L. Brillouin

凝聚态物理：对称破缺



# CONTENT

- **Chapter 1. Crystal Structure** 晶体结构  
理解周期性边界条件，建立倒易空间的概念
- **Chapter 2. Crystal Binding** 晶体的结合  
为什么会形成晶体？
- **Chapter 3. Lattice Vibration** 晶格振动  
振动波在固体中的传播
- **Chapter 4. Free electron Theory** 近自由电子理论
- **Chapter 5. Energy band** 能带结构
- **Chapter 6. Electron motion in Crystal** 晶体中电子的运动  
de Broglie波在晶体中的传播



# Auguries of Innocence

To see a world in a grain of  
sand  
and a heaven in a wild  
flower  
Hold infinite in the palm of  
your hand  
and eternity in an hour

一粒沙里有一个世界  
一朵花里有一个天堂  
把无穷无尽握于手掌  
永恒宁非是刹那时光

William Blake (1757-1827)

