

的反铁磁性就是自旋密度波形成的。

(c) $0 < |\varphi_+ - \varphi_-| < \pi$ 。这时将出现电荷密度波和自旋密度波的混合状态。

现在讨论一维导体中电荷密度波的集体激发问题^[129]。前面已经指出,发生佩尔斯相变后,离子发生位移,晶格常数从原来的 a 变为

$$a' = \frac{\pi}{k_F}, \quad (20.100)$$

这时晶格中出现新的周期性势场,电荷密度分布也出现波长为 $\lambda = \frac{\pi}{k_F}$ 的周期分布,即电荷密度波。不同的一维材料 k_F 不同, λ 的数值见表20.2,既然新的晶格常数 a' 和电荷密度的波长 λ 决定于电子的费密动量 k_F ,而与原晶格常数 a 无关,则 $\frac{a'}{a}$ 可能是有理数,这时称之为有公度的;也可能是无理数,这时称之为无公度的(参见§13.13)。

公度性考虑是非常重要的^[130]。一维导体在降温过程中,电子-晶格耦合作用逐步明显,这时可能向新的有序态转变。理论和实验都指出,有两种可能的转变,一种是经历佩尔斯失稳变成绝缘态或半导体状态,还有一种是存在向超导态转变的可能性。这里采用形象的描述。

在考虑晶格畸变和电荷密度可能的集体运动问题时,图20.23示出四个可能性,情况(a)相当于半满能带的二聚化点阵,这个图象意味着正离子畸变以利用电荷密度波形成的负电荷密度区来降低系统的能量;情况(b)明确地等价于情况(a),电荷密度波仅平移一个距离 a ,离子被调整至新的平衡位置。如果我们考虑系统如何从(a)运动至(b),十分明显,必须跨越一个中间位形,也就是一个能量非常高的势垒。结果由于 a' 与 a 是有公度的,电荷密度波不能运动,它是已被锁定的一种相。这就是佩尔斯转变的情况。

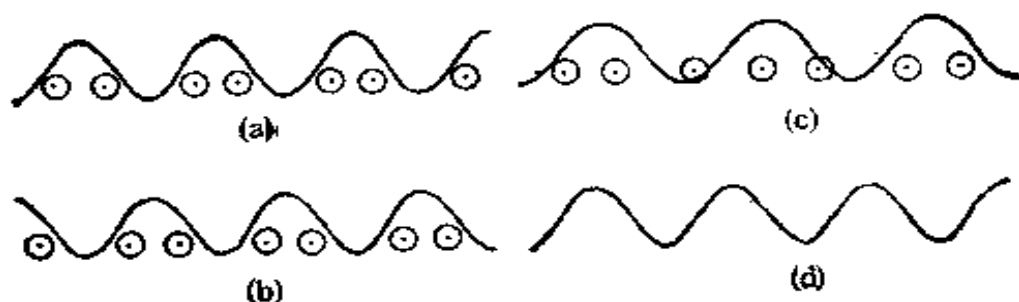


图 20.23 公度和无公度电荷密度波。(a)半满能带；(b)半满能带的一个等价位形；(c)无公度电荷密度波；(d)“凝胶”里的电荷密度波。

图 20.23(c) 说明另一种情况。这时电荷密度波与点阵无公度。这样某些离子受电荷密度波影响容易畸变,另一些则不然。如果平移电荷密度波至新的位置,它与点阵的关系在能量上没有影响。很显然,在无公度情况下,电荷密度不是钉扎在点阵上。相反,它是自由运动的,有如载流子那样运动。它的电荷与质量比如同单个电子那样,但是实际质量比例于链上的全部电子数。如果没有任何东西钉扎这样的载流子于点阵,换言之,它确是无公度的,并且杂质效应可以忽略,这时将产生超导态,因为电荷密度波质量太大,不至于被声子散射。图 20.23(d) 相当于夫留里希考虑的一维凝胶模型^[138],它是无公度情况 (c) 的一个极限情况。可以期望,低温态是一个由 $q_0 = 2k_F$ 畸变调制的正电荷弹性媒质,以及受正电荷分布响应调制的电子电荷密度波的状态。晶格畸变的位置即电荷密度波的相位不影响其能量。忽略弹性振动的阻尼,电子电荷密度自由而无衰减地通过固体运动,即电子形成超电流。

这些初步分析说明,虽然 T_F 以下存在能隙,但较低温度相不一定是绝缘体。在实验室坐标系中,点阵畸变的运动和电荷密度波凝聚将形成电流。对于一个完全平移不变的系统,夫留里希证明这时可能形成超导态。对这一超导机制,夫留里希曾在零温下分析,并被柯柏 (Kuper) 推广至有限温度^[147]。这个一维超导理论在 BCS 理论^[148]问世后已沉默多年,近年来又引起人们的兴趣,尽管其适用程度依然有疑问。实际上线性点阵是分立的,而且杂

质中心和邻近链的存在都将破坏理想的平移不变性。因此电荷密度波将被有效地钉扎在点阵上,阻止了无限直流电导的产生。电荷密度波的钉扎和迁移有许多有趣的性质,可参阅有关文献^[146,149]。

一维系统中电荷密度波的元激发可以用夫留里希哈密顿(20.101)和格林函数方法进行深入地处理^[150]。其结果是,求得在无公度情况下佩尔斯畸变引起 $\omega_{\pm q_0}$ 附近的光频支和声频支声子频率分别为

$$\Omega_+(q) = \omega_{q_0} \sqrt{\lambda \left[1 + \frac{1}{3} \left(\frac{v_F q}{\Delta} \right)^2 \right]} \quad (20.124a)$$

和

$$\Omega_-(q) = \omega_{q_0} \frac{v_F q}{2\Delta} \sqrt{\lambda}, \quad (20.124b)$$

它们分别代表电荷密度波的振幅运动(振幅子)和相位运动(相位子),其中 λ 为无量纲电子-声子耦合常数,其形式与式(20.120)大致相同。

§20.10 佩尔斯相变的产生条件

从§20.7开始我们较为系统地研究了一维导体的佩尔斯相变问题,但是可否将这一问题推广至二维或三维呢?这就涉及到凝聚态物理学中的维度性^[20]。一、二维凝聚态物质中的基本相互作用与三维系统是相同的,仍是电子-电子、电子-晶格、晶格-晶格之间的相互作用。但是低维系统可以具有某些三维系统所没有的宏观现象,其原因是空间的维度性可以通过运动学或动力学过程决定凝聚态的物理性质。

我们知道,对于三维晶格,布里渊区的边界是由平面组成的,而其费密面是个曲面;对于二维晶格,布里渊区的边界是由直线组成的,费密面是条曲线;对于一维晶格,布里渊区的边界只是两点,而且费密面也是两点,参阅图 20.24。

将布里渊区和费密面比较一下,可以看出,对于三维和二维系统,一般情况下,平直的布里渊边界和弯曲的费密面都只能相交或

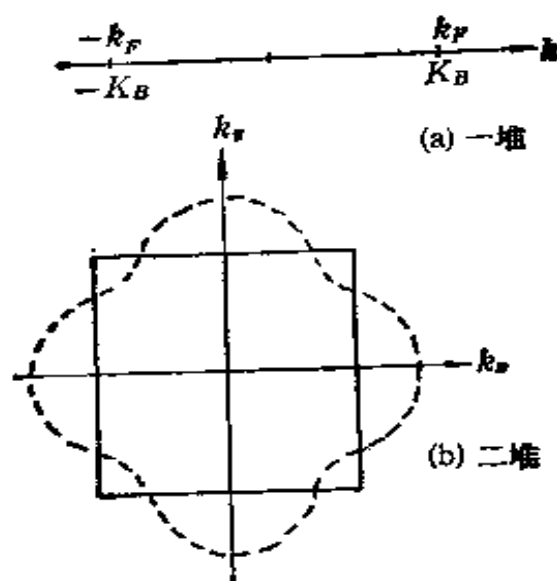


图 20.24 一维和二维晶格的布里渊区和费密面。

相切,不能完全重合;但是,对于一维晶格,布里渊区边界和费密面都退化为两点,两者有可能完全重合。这个差别使得一维晶格容易发生佩尔斯相变,二、三维晶格则可能性很小。

维度性的另一个重要影响是低能激发态的状态密度,这使得各种维度的系统具有不同的序和相变。

温度在绝对零度以上时,热运动使系统以一定的几率处于激发态,其中主要考虑低能激发态。在这些热激发的干扰下,系统的有序化程度降低。系统能否保持有序在很大程度上决定于低能激发态的状态密度 $N(E) = dn/dE$, 即单位能量间隔中的状态数目。低激发态密度越大,则热涨落的干扰越强。下面计算一下各种维度的 $N(E)$ 。设系统的边长为 L ,周期性边界条件要求

$$k_{x,y,z} = \frac{2\pi n}{L}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (20.125)$$

相邻两波矢之间的间隔为 $\frac{2\pi}{L}$, 在倒格矢空间中,壳层 $k \rightarrow k + dk$

范围内的状态数目是

$$dn = \begin{cases} dk / \frac{2\pi}{L} = \frac{L}{2\pi} dk, & (\text{一维}), \\ 2\pi k dk / \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 = \frac{L^2}{2\pi} k dk, & (\text{二维}), \\ 4\pi k^2 dk / \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{L^3}{2\pi^2} k^2 dk, & (\text{三维}). \end{cases} \quad (20.126)$$

若系统的激发能谱是常见的二次型

$$E(k) = \alpha k^2$$

于是态密度

$$\begin{aligned} N(E) &= \frac{dn}{dE} \\ &= \frac{dn}{dk} \cdot \frac{1}{dE/dk} \\ &\sim \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{E}}, & (\text{一维}), \\ \text{常数}, & (\text{二维}), \\ \sqrt{E}, & (\text{三维}). \end{cases} \end{aligned} \quad (20.127)$$

从式(20.127)中容易看出,对于三维系统,低能激发态的态密度趋向于零,因而在低温下热涨落很小,可保持有序,只有在温度足够高时,热涨落才能破坏有序,发生相变;对于一维系统,低能激发态的态密度趋向无限,低温热激发引起的涨落十分强烈,于是在非绝对零度时,一维系统不能保持有序,也就没有相变;对于二维系统,其情况介于一维和三维之间,态密度为常数,总存在着一定的热涨落,故二维系统不能在大范围 ($V \rightarrow \infty$) 内保持有序,只能在一定的小范围内有序,即没有长程序,只有准长程序。

其实,完全根据直观我们也很容易理解,为什么系统的维数越低,涨落就显得越发重要。因为降低维数起了减少绕过局域涨落的路径的作用。在一维系统中,任何局域涨落都把系统分割为不相连通的两部分。正如第十八章所指出的,只有当维数增高时,平均场理论的适用性方始得到改善。而在低维系统中采用平均场理

论,就需要认真考虑其可靠性问题。

前面介绍佩尔斯相变的平均场理论时没有考虑热力学涨落效应。现在知道,严格地讲,一维系统在没有长程力时不存在有限温度下发生相变的可能,而电子-声子相互作用不属于长程作用。但实验上却证实许多一维系统中确实存在佩尔斯相变,另外一些一维系统中仅产生电荷密度波,没有从金属至绝缘体或半导体的转变。这些问题的存在说明上述的理论虽有其成功之处,但也存在严重的不足。

一维系统平均场理论计算结果表明存在相变的理由非常简单,所有的点阵位移分量除 $2k_F$ 之外都已被忽略,故短程的电子-声子相互作用已有效地转变为长程的波矢 $2k_F$ 的正弦型力,如果将所有其他傅里叶分量包括进来,力的短程特征将变得明显,相变受到抑制。

从实际的材料(如 KCP 和 TTF-TCNQ 等)来看,由于电导率的强烈的各向异性,因此可以近似地认为是一维导体。但链间的耦合虽然很弱却依然存在,并且这未尝不是一件好事。只有考虑到链与链之间的耦合,也就是包含了三维效应后才能抑止热涨落的干扰而获得相变。但三维效应如果太强,则会导致一维佩尔斯失稳的现象消失。

有许多不同的方法描述单个线性链受到的三维环境的影响^[37]。一个自然的延拓是在式(20.112)中引入电子在两个垂直于链方向上附加的扩散,即

$$\mathcal{H}_\perp = 2t_\perp \sum_k [\cos(k_x b) + \cos(k_y b)] c_k^\dagger c_k, \quad (20.128)$$

其中 t_\perp 是电子在相邻链最近邻离子间的跃迁矩阵元,产生算符和湮灭算符也推广至三维,可以证明,平均场理论下推得的佩尔斯相变温度 T_P 受到 t_\perp 的影响而降低^[151-153]。在 $t_\perp \sim t_0$ 时,佩尔斯相变消失,而在 $0 < t_\perp < t_0$ 时,佩尔斯相变是可能的。

根据上面的描述,我们知道发生佩尔斯相变的实际上是考虑到链间弱耦合的准一维导体。电子沿链方向是近自由电子,其电

子波矢用 k_z 表示,近似理想情况下,能量不依赖于垂直方向的电子波矢 k_x, k_y ,能级将仅在垂直于 k_z 的平面上被占据,费密面由 $k_x = \pm k_F$ 的两平面构成, k_F 是沿链方向的费密波矢,而且平面在 $k_x = k_y = \pm \frac{\pi}{b}$ 处截止。这个近似平面状的费密面可作为一维导体的判据。附带说,杂质和无序会抑止佩尔斯相变。

佩尔斯相变的概念原则上可以推广到高维的情况,这时要求联系于畸变的波矢必须跨接费密面上大态密度区,即费密面是平行平面情况或者是叠套(nesting)情况,如图20.25,结果使费密面局部出现能隙,并伴随着一种结构畸变。

前面已经指出,二维和三维情况下费密面和布里渊区一般是不重合的,至多在 k 空间的某些部分相切(该处产生能隙压低原来的能带),但不会处处重合,因而不会使导带变为满带,所以尽管在某个方向可以产生超晶格,但不会发生佩尔斯相变。

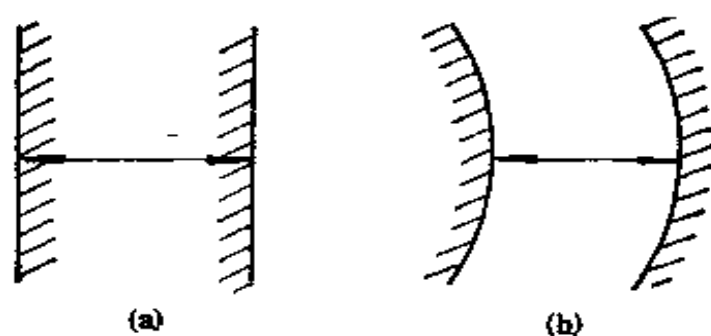


图 20.25 平行费密面和叠套费密面以及产生佩尔斯畸变的跨接波矢。

在准二维的层状过渡金属双硫化合物(如 TaSe_2 和 NbS_2 等)中,已观察到周期点阵畸变、电荷密度波和科恩反常^[154]。这里同样存在由电子-声子相互作用产生的结构相变,因为中子非弹性散射研究证实在出现电荷密度波态的起始点的波矢处 LA 声子存在科恩反常。

传导电子费密面存在平行部分或叠套部分产生的效果正引起人们的关注。它除能导致佩尔斯相变或电荷密度波之外,往往也

是特定的材料在特定的条件下产生自旋密度波、稀土金属螺旋状自旋 (spiral spin) 结构,合金中某些特殊的有序化的原因^[155]。

另一种有趣的准二维情况是,在大多数晶体表面,即使处在最清洁情况下也不保留大块材料本身的周期性,而是出现了新的周期排列,一般称此现象为表面的重构 (reconstruction) (参阅 §8.2)。理解表面重构目前有几种不同的途径,其中在 W, MO, Si 中发生与电荷密度波有关的表面超晶格畸变,是一种表面原子位移型的结构相变,也可以说是一种电子-晶格相互作用的结果。表面问题至今还是有待深入开拓的研究领域^[156]。

IV 金属-非金属转变

我们已经研究过的杨-特勒效应和佩尔斯相变都是在电子-晶格相互作用下发生的结构相变。所谓结构相变都涉及到晶体对称性的破缺。下面所要研究的问题,包括狭能带强关联下的莫特转变和无序系统中的安德森转变却主要是考虑到电子系统本身在特定条件下发生的导电性质的突变。正如本章开始时所指出的,从广义上讲,电子在固体中的运动是受到晶格的制约的,并且电子的关联参数或能量分布也是直接与晶格构形有关的。在这些意义上,我们将固体材料的金属-非金属转变安排在本章介绍。

§ 20.11 金属-非金属转变的几种类型

不同的凝聚态材料在导电行为上表现出金属性或非金属性 (包括绝缘性和半导体性) 这种质的差异,还有在适当的条件下发生金属和非金属性质之间的转变是金属物理学研究的重要对象之一。能带理论可以帮助我们理解为什么不同材料会表现出金属性还是非金属性。传导电子的能量-波矢关系形成能带,不同的能带之间由能隙隔开。如果每一个能带或者被电子全部填满,或者全部空着,材料就是绝缘体 (或半导体); 当存在电子部分填充的能带时,材料显示出金属性。

能带理论虽然在解释固体的电子结构及其导电性质时取得了相当的成功,但并不是在所有的场合都能够提供恰当解释的。在电子-晶格相互作用足够强时,譬如在离子晶体中就不能采用能带理论,而必须建立小极化子的跳跃电导理论^[103,104]。参与导电过程的并不是作共有化运动的能带电子,而是受到激活作用的局域电子。又如过渡金属氧化物中形成狭能带^[157],电子关联作用十分重要。 $3d$ 氧化物 MnO 有 5 个 d 电子, d 带是不满的,按照能带理论,它是金属,实际上是绝缘体;反之,另一氧化物 ReO_3 ,能带理论认为它是绝缘体,实验上被证实是良导体;一些过渡金属氧化物,当温度升高时会发生从绝缘体至金属的转变。还有无序系统中的电子行为,由于不存在晶格周期性,更难以不加修改地使用能带理论。在这里,我们把金属-非金属转变的三种主要机制汇列入表 20.3^[158]

表 20.3 三种金属-非金属转变的主要特征对照表

转变类型	电子波函数状态		特征能量	金属-非金属转变时的特点	局域化判据
	金属方面	非金属方面			
布洛赫	扩展	扩展	能带宽度 Δ	部分填充能带 → 所有能带或者填满或者空着	—
莫特	扩展	局域	电子-电子相关能 U	相关导致局域化	$U > \Delta$
安德森	扩展	局域	无规格点能量分布宽度 W	无规导致局域化	$W > \Delta$

布洛赫型的金属-非金属转变可以用图 20.26 来说明。一块由碱土元素如 Mg, Ca, Ba 等组成的材料、每个原子具有偶数个价电子,整个电子系统恰可占据整数个能带。按照能带理论,它们应该是绝缘体。但是价带和导带有可能在费密面处交叠(如图 20.26(a)),也有可能分开(如图 20.26(b))。温度或压力等参量的改变,可以引起能带结构在两者之间变换。§20.7 中讨论过的佩尔斯相变即是典型的能带图象下与温度变化有关的金属-非金属转变的例子。在金属 Yb 中,已经观察到因压力变化引起的类似于从图

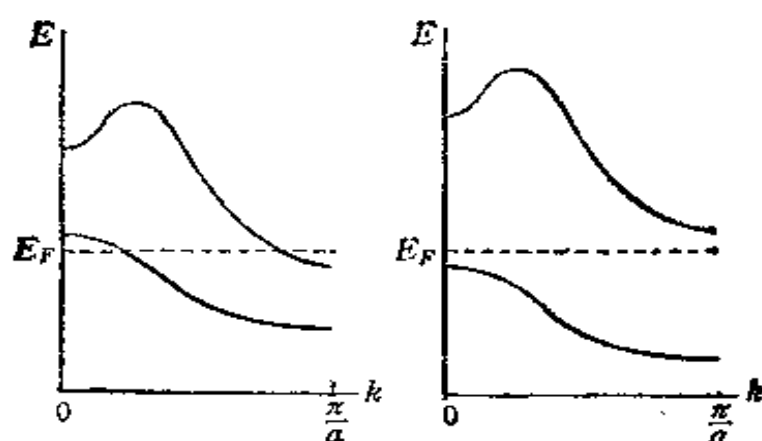


图 20.26 布洛赫理论下晶体中电子的能带结构的改变,使满带和空带重叠程度改变以引起金属-非金属转变。

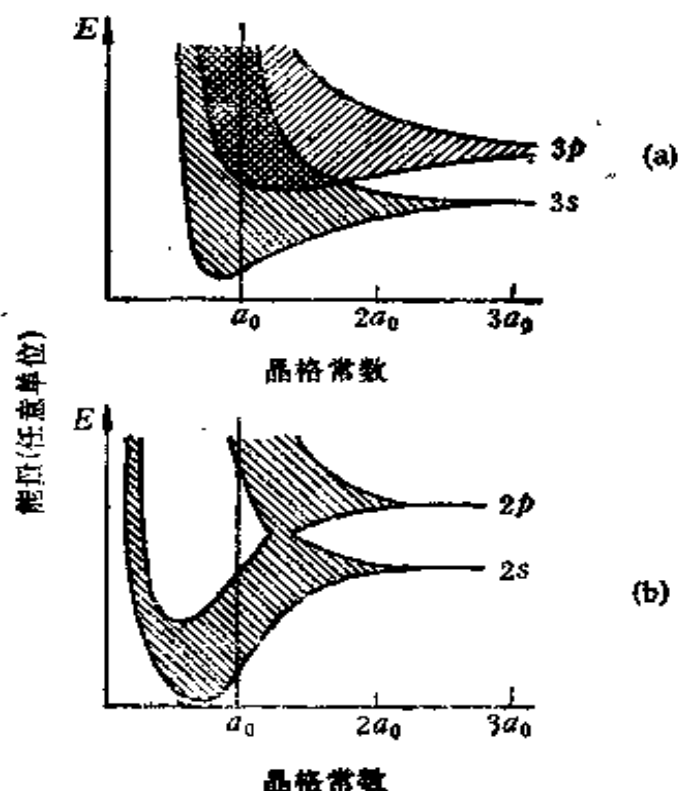


图 20.27 孤立原子聚集成晶体时分裂能级形成能带结构。(a) 钠原子的 s 能级和 p 能级在晶体中变成 s 带和 p 带; (b) 金刚石中 s 能级和 p 能级杂化为 sp_3 态,形成两个 sp_3 能带。

20.26(a)到(b)的金属-绝缘体转变^[39],实际上这种压力效应反映出能带结构形成的一种直观解释。这种解释对于判定材料是金属或非金属是非常有益的,假定一群具有分立能级的全同原子从无

限远处聚集以形成规则排列的晶格,这时相互作用造成简并原子能级的分裂以形成能带。在这种解释中,每个能带对应于孤立原子的一个能级,如 s 带, p 带等。图 20.27(a) 示出 Na 的 $3s$ 带和 $3p$ 带的形成过程。在晶格常数很大时,原子只有分裂能级,在晶格常数减小也就是原子间距缩短时,能带展宽。而达到 Na 晶体的实际晶格常数时,两带交叠。另一个例子是金刚石,孤立 C 原子的外层电子 $2s^2 2p^2$ 在和其它 C 原子结合形成固体时,一个 $2s$ 电子激发到 $2p$ 态,形成 sp_3 杂化轨道,这时它可以和四个最近邻 C 原子结合。在晶格常数较大时 s 带和 p 带保持分离,而在某个晶格常数时能带开始交叠,并通过杂化它们在更小的晶格常数时又分离为混合 s 和 p 特征的两带。由上面的分析可知,Na 是金属。而金刚石是绝缘体。即使 s 带和 p 带不交叠,Na 也是金属,因为 Na 原子只有一个 $3s$ 能级的价电子,所以 $3s$ 带总是半满的,而金刚石 $2s-2p$ 带由交叠又分离为两个新能带,金刚石结构每个原胞具有两个 C 原子,每个能带平均每个原子有四个状态,四个价电子正好填满。故两个新能带将是一个全满,一个全空。至于 Si 和 Ge 元素形成的晶体同样是金刚石结构,不过由于能隙宽度较窄,故形成半导体而不是绝缘体。

实际上我们在能带理论的紧束缚近似^[159]下,已经知道能带宽度

$$B = 2zJ, \quad (20.129)$$

其中 z 是配位数, J 为能量重叠积分,它是晶格常数 a 的函数,即

$$J = \int_V \phi^{a*}(\mathbf{r}) [V(\mathbf{r}) - V^a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)] \phi^a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) d\tau, \quad (20.129a)$$

其中 $V(\mathbf{r})$ 是周期势场, $V^a(\mathbf{r})$ 是原子势场, $\phi^a(\mathbf{r})$ 是原子波函数。现在我们可以清楚地知道,能带宽度 B 是晶格常数 a 的函数。在 $a \rightarrow \infty$ 时,原子波函数无交叠, $B = J = 0$,只有在 $a \rightarrow a_0$ (某个恰当的值)波函数开始交叠、能带逐步展宽,故能带模型下的金属或非金属性质直接与晶格常数有关。当然,布洛赫转变并不

是金属-非金属转变的唯一机制,因此,我们下面将讨论莫特转变和安德森转变。

§ 20.12 狭能带强关联下的电子态: 莫特转变

晶体中电子运动偏离能带理论的一个明显现象是莫特转变^[38],虽然能带理论曾经成功地解释许多晶体的电学和光学性质,但在下面我们将要讨论的狭能带晶体中却是无能为力的,或者定性上会给出错误的结论。这时单电子或者独立粒子的图象不再能使用,而电子之间的相互作用变得十分重要。用量子力学计算固体中多电子系统的电子态时,一种标准的办法是假定原子核固定于晶格的平衡位置上,也就是不考虑电子与晶格的耦合作用,这相当于采用§20.1所讨论的绝热近似。这样由式(20.8a),我们写出周期晶格场中多电子系统的哈密顿量为

$$\mathcal{H} = \sum_i h(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij}, \quad (20.130)$$

$$h(\mathbf{r}_i) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(\mathbf{r}_i), \quad (20.130a)$$

$$v_{ij} = e^2 / |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|. \quad (20.130b)$$

这时在布洛赫表象中哈密顿量的二次量子化形式为

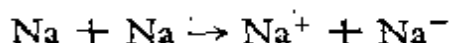
$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \sigma} \sum_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \sigma'} \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | v | \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \rangle c_{\mathbf{k}_1 \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_2 \sigma} c_{\mathbf{k}'_2 \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'_1 \sigma'}, \end{aligned} \quad (20.131)$$

其中 $E_{\mathbf{k}}$ 是能带电子的能量, $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}\sigma}$ 分别代表布洛赫表象中 σ 自旋电子的产生和湮灭算符,而

$$\langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | v | \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \rangle = e^2 \int \frac{\phi_{\mathbf{k}_1}^*(\mathbf{r}) \phi_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}'_1}(\mathbf{r}) \phi_{\mathbf{k}'_2}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (20.131a)$$

由于下面涉及到泡利原理,故自旋标号 σ 明确写出。

莫特曾经强调指出了能带理论计算中蕴含着的不同晶格常数 a 这个基本问题。这在上一节我们已经初步讨论过，现在仍以钠为例^[160]。假定一开始我们取 Na 原子形成的固体，其原子间距非常大（譬如 1 米）来进行计算。因为存在平移对称性，故单电子解应是布洛赫函数式(20.9)。在 $T = 0\text{K}$ 时，单价原子的固体能带是半满的。因此材料应该是金属，但这并不符合实际，现在碰到的只不过是一群孤立原子，也就是中性无相互作用的 Na 原子，其中我们感兴趣的只是最外层 $3s$ 电子。每个原子有一个，且只有一个 $3s$ 电子。这时电子都是局域化的。上面的讨论说明，在原子极限 ($a \rightarrow \infty$) 能带理论失效。这种失效的理由在于独立电子图象是采用平均场近似，把电子系统不同的构形看作具有相同能量。实际上，在适当的晶格常数，两个原来属于不同原子的价电子有可能聚集在一个原子周围，这种电荷分布形式用局域态描述更为有利。如果在—对孤立中性原子间发生电子的转移



将需要相当大的能量

$$U = I - A,$$

其中 I 是从一个中性原子上转移一个电子 ($\text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + e^-$) 时的电离能，而 A 是一个电子附着于另一个原子时小量的亲和能。图 20.28 描述了这种孤立原子系统电子转移引起的能量增益。由于两个电子靠近时的库仑作用，图 20.28(b) 示出的势能应该大于图 20.28(a)。这种由于电子非均匀聚集而产生的能量增益，是一种多体效应。它在单电子理论中是用哈特里-福克近似来抹平的，这时单电子理论对 a 构形和 b 构形能量上的差异不加区别。

在实际的固体中，电子运动明显地相关，库仑作用和泡利原理都尽量避免电子之间的靠近。电子之间的相关能对固体的性质是有明显影响的。在莫特转变的基本概念里包含着电子的相关能。在适当的条件下，固体具有绝缘性的基态，而在忽略这种相关能的能带图象里可能错误地认为是金属。这种固体(如 NiS_2) 被称之为莫特绝缘体^[161]。

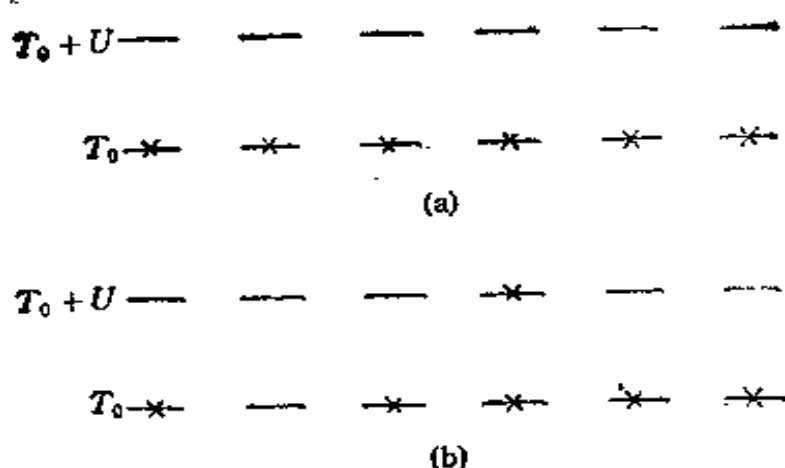


图 20.28 相邻原子之间无交叠的能级图。(a) 基态;(b) 第一激发态。

莫特曾经采用如研究合金理论时(参阅§ 5.9)相同的电子屏蔽模型来处理金属-非金属转变与晶格间距的关系^[162]。

假定从固体中一个原子的局域轨道上取走一个电子，放到另一个原子的附近，这时留下一个带正电荷的离子，或者说产生一个空穴。电子和空穴间相互吸引，有可能形成束缚，或称作“激子”，这时就不可能由于自由电子或自由空穴的移动在晶体中形成电流。但是假定有大量这种离域的电子存在，它们将屏蔽离子电荷，这时电子与空穴之间的相互作用势是屏蔽势，也就是汤川势，其形式为

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} e^{-qr}, \quad (20.132)$$

而

$$q^2 = 4\pi e^2 N(E_F), \quad (20.132a)$$

其中 $N(E_F)$ 是费密面处的态密度，在自由电子近似下可以写为

$$N(E_F) = \frac{3mn^{1/3}}{\hbar^2(3\pi^2)^{2/3}}, \quad (20.132b)$$

这时求得托马斯-费密屏蔽常数 q 为

$$q^2 \approx \frac{4me^2}{\hbar^2} n^{1/3}. \quad (20.132c)$$

屏蔽形式的吸引势式 (20.132) 能否束缚电子，在于屏蔽半径 $1/q$ 的大小，最低情况下是氢原子的基态，其半径为玻尔半径，即

$$a_H = \frac{\hbar^2}{mc^2}.$$

如果 $1/q$ 小于 a_H , 即使这个态也不能被束缚住。这样带有屏蔽势(20.132)的离子可以束缚住电子的条件大致为

$$1/q > a_H, \quad (20.133a)$$

或

$$n^{-\frac{1}{3}} > 4a_H. \quad (20.133b)$$

因为 $n = N/V$, 故 $n^{-\frac{1}{3}} = (V/N)^{\frac{1}{3}}$, 相当于原子的平均间距。式(20.133b)告诉我们, 在晶格常数大于四个原子单位时, 材料不能保持金属态, 而变成绝缘态, 而且这是一个合作效应, 因为电子密度的变化直接影响金属-绝缘态之间的转变。上式中数值因子 4 并不一定十分精确, 不过现在至少在原则上说明了金属-绝缘态之间的转变可能是十分陡峭的。

自莫特之后, 赫伯德曾经详细地研究了这一多电子系统的问题^[164-165]。利用式(20.130)来研究问题, 数学处理非常困难, 因此必须适当地简化。这里简单地给出赫伯德哈密顿量的推导^[164]。

由于狭能带关联问题与电子的局域态有关, 应该采用瓦尼尔表象讨论问题。利用式(20.19), 可以容易地把式(20.131)变为下式:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_i \sum_{\sigma} T_{ii} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{ijlm} \sum_{\sigma\sigma'} \langle ij|v|lm \rangle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma'}^{\dagger} c_{m\sigma'} c_{l\sigma}, \end{aligned} \quad (20.134)$$

其中 $c_{i\sigma}^{\dagger}$ 和 $c_{i\sigma}$ 是 i 格点上 σ 自旋电子的产生及湮灭算符。单粒子项中, 有

$$\begin{aligned} T_{ij} = & \int a^*(r - R_i) h(r) a(r - R_j) d\tau \\ = & N^{-1} \sum_k e^{i\mathbf{k} \cdot (R_j - R_i)} E_k, \end{aligned} \quad (20.134a)$$

相互作用项中, 有

$$\langle ij|v|lm\rangle = e^2 \int \frac{a^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)a^*(\mathbf{r}'-\mathbf{R}_j)a(\mathbf{r}-\mathbf{R}_l)a(\mathbf{r}'-\mathbf{R}_m)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}', \quad (20.134b)$$

式(20.134b)一般涉及到不同格点的积分。由于我们只关心狭带电子的相关问题,不同格点的电子波函数交叠可以忽略,故只取同一格点上电子库仑作用

$$U = \langle ii|v|ii\rangle = e^2 \int \frac{a^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)a^*(\mathbf{r}'-\mathbf{R}_i)a(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)a(\mathbf{r}'-\mathbf{R}_i)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}'. \quad (20.134c)$$

在紧束缚近似下, $a(\mathbf{r})$ 可以用原子在单格点上波函数代替。从自由原子的电离势可以估计对 d 电子, U 的数量级约为 10eV, 比最近邻、次近邻格点上电子之间相互作用项要大得多。作为一个简单的模型,略去这些不同格点电子之间的相互作用积分,只保留单格点上两电子相互作用项,这就是赫伯德模型。这时

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (20.135)$$

其中

$$n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}, \quad (20.135a)$$

代表在 i 格点上 σ 自旋的电子数算符。而 $n_{i\uparrow}$ 与 $n_{i\downarrow}$ 的自旋恰好相反,这是考虑到泡利原理,在同一格点上两个电子自旋不能相同。正是在赫伯德模型中计入的自旋相反两电子的排斥势 U 对于金属-非金属相变有重要影响。根据式(20.134a),单粒子项中 $j=i$ 时的系数为

$$T_{ii} = N^{-1} \sum_k E_k = T_0. \quad (20.136)$$

它代表能带电子的平均能量;当 $\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i = \mathbf{R}_l$ 为最近邻格点位置差时, $T_{ij} \equiv T_1$ 。在式(20.135)中, $U=0$ 时,我们得到

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{ij\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}. \quad (20.137)$$

再利用式(20.20)将 \mathcal{H}_0 变回布洛赫表象去,则有

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &\approx \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(T_0 + T_1 \sum_i^{(n,n)} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \right) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \end{aligned} \quad (20.138)$$

其中

$$E_{\mathbf{k}} = T_0 + T_1 \sum_i^{(n,n)} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}, \quad (20.138a)$$

这就是紧束缚近似下能带电子能量, (n,n) 代表最近邻格点. 当 z 为晶格配位数时, 能带宽度

$$\Delta = 2z|T_1|.$$

$U \approx 0$ 时将引入新的物理内容. 这里 T_0 , Δ (或 T_1) 和 U 是赫伯德模型的三个重要参数.

利用已经求得的系统的哈密顿量 (20.135), 可以按照标准的双时格林函数方法来求出系统的能级、态密度以及金属-非金属转变的条件等. 具体运算并不难, 只是稍繁些. 这里为清楚理解电子相关的基本物理过程, 宁愿采取物理图象的描述.

现在讨论一下莫特转变的条件. 如图 20.29 所示, 原子位置用势阱来表示. 每个原子有一个价电子, 在孤立原子极限下占有一个束缚能级, 这在每个原子阱中用一短水平线表示. 在 N 个原子组成的晶体中, N 重简并能级受到晶体势场的影响而产生宽度 Δ 的能带. 取孤立原子价电子能级为能量零点, 晶体能带的能量分布范围从 $-\Delta/2$ 到 $\Delta/2$. 因为能带是半满的, 故晶体中价电子的平均能量大致为

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= 1 / \frac{\Delta}{2} \int_{-\frac{\Delta}{2}}^{\frac{\Delta}{2}} E dE \\ &= -\frac{\Delta}{4}, \end{aligned} \quad (20.139)$$

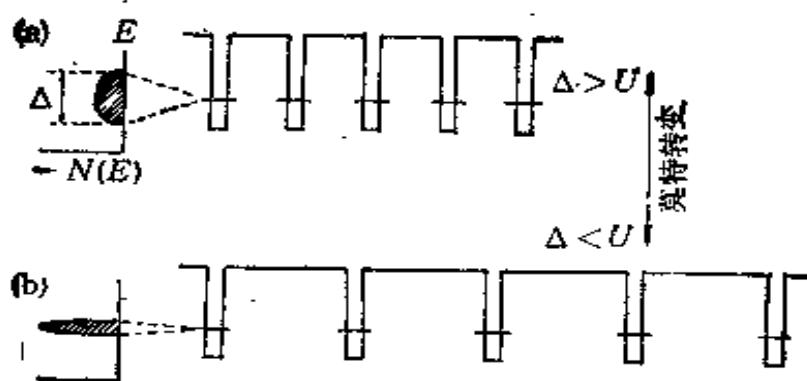


图 20.29 莫特转变示意图. 当原子间距增加时电子能带宽度 Δ 下降, 当 Δ 降至小于同格点电子-电子相互作用能 U 相关引起局域化.

这个能量低于孤立原子中价电子能量, 它是由于大量原子的凝聚过程引起的, 因为动能在电子从局域变为扩展态时降低. 电子在从局域态变成扩展态的过程中, 其波函数将从振荡变得平缓, 而动能项比例于 $\nabla^2 \psi$, 所以相邻原子间轨道交叠越大, 波函数变得越平缓, 则能量降低就越大; 相反, 如果增加晶格常数, 则波函数重叠减少, 能带宽度 Δ 就减少. 图 20.29(a) 和(b) 示出这种区别. 带宽在原子极限在 $a \rightarrow \infty$ 时消失.

现在我们考虑在能带理论中忽略的相关能. 一个原子占有一对价电子的能量变化用符号 U 表示. 它等于电子 1 和电子 2 在同一原子轨道上的平均库仑能 $\langle e^2/r_{12} \rangle$. 它的意义可参阅图 20.28. 在图 20.29(a) 和 (b) 中, 每个阱里单个水平线标出孤立原子价电子的能级, 这个能级是二重简并的, 能够容纳自旋相反的两个电子. 同一能级可以空着, 或占据一个电子, 还可以占据两个电子. 但这种看法忽略了库仑相互作用. 在同一原子中占据两个价电子的情况下, 我们知道存在排斥相互作用 $\langle e^2/r_{12} \rangle$, 并提高能量. 这就形成了图 20.28 中的二能级图形. 同一位置上存在两个能级, 较低的能级必定先被占据, 而上面的能级必须在低能级填充后方能被占据. 两个电子占据同一原子两个能级后提高能量 U . 图 20.28 示出基态和第一激发态的电子分布情况. 当然, 区分第一和第二电子仅为叙述方便, 因为能量贡献 U 代表的是它们的相互作

用 $\langle e^2/r_{12} \rangle$ 。如前面已经提到，在原子极限里， $U = I - A$ 。

在独立电子处理中，忽略 U 的存在，波函数是布洛赫函数，故每个电子可以用同等几率出现于任何格点，不管这一格点上有无其他电子占据。出现空格点，单占据和双占据的几率分别为 $\frac{1}{4}$ ， $\frac{1}{2}$ ， $\frac{1}{4}$ ，考虑到实际上每个双占据状态增加能量 U ，故将使每个电子平均增加势能 $U/4$ ，而能带形成引起的平均动能降低为 $\Delta/4$ 。可以想象得到，电子究竟处于局域态还是扩展态，应该与平均能量改变

$$\langle E \rangle = \frac{U}{4} - \frac{\Delta}{4} \quad (20.140)$$

有关。如果 $\Delta > U$ ，则固体形成能带而成为金属，能量上有利；相反， $\Delta < U$ ，则固体倾向于成为绝缘体。这就是电子相关引起的局域化。我们可以引入比例参数 $(\Delta/U)_c$ ，即

$$\left(\frac{\Delta}{U}\right)_c < 1. \quad (20.141)$$

只要这不等式判据满足，电子是局域的。从图 20.29 (a) 和 (b) 可以看到，电子系统两个特征参量，即带宽 Δ 和电子相关能 U 在原子间距改变时相对比重的变化。

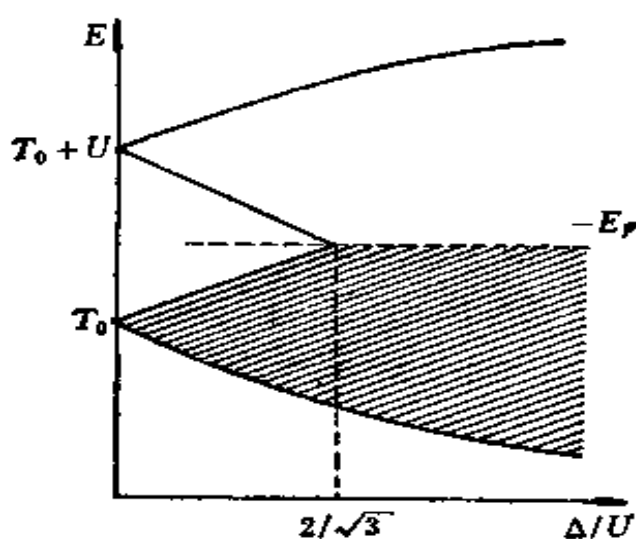


图 20.30 赫伯德模型里局域态-扩展态的转变。

用赫伯德哈密顿量直接进行严格的数学计算所得的结果示于下图,金属-绝缘体转变判据为

$$\left(\frac{\Delta}{U}\right) < \frac{2}{\sqrt{3}}. \quad (20.142)$$

从图 20.30 中可以看出,在 $(\Delta/U) < 2/\sqrt{3}$ 时存在两个子带,一个填满,一个空着,系统表现出绝缘特性;相反当 $(\Delta/U) > 2/\sqrt{3}$ 时,能带不分裂,并且半满,故系统出现金属性。定性描述的结果式(20.141)和(20.142)是相符的。

莫特转变是凝聚态物理学中一个传统的定理的例证。在低密度极限,势能超过动能时,电子发生局域化。一个早期的例子是维格纳晶格。维格纳 (Wigner) 提出,在低温低密度情况下,存在库仑相互作用的电子气体经过局域化形成电子晶格;在相反的高密度极限,动能超过势能,电子波函数平滑化而形成扩展态。理论上高压下氢可能形成金属固体,虽然至今实验上尚未实现,但金属氢仍然是高压下研究高密度状态物理性质及可能的金属-绝缘体转变的一个激动人心的课题^[166]。

§ 20.13 无序系统的电子态: 安德森转变

理想晶体由原子排列成规则点阵构成,也就是具有严格周期性。它反映出等格点的物理环境存在平移不变性。这种长程序对于能带理论是相当重要的。当这种严格周期性被破坏时,系统成为无序的。自然界中广泛存在的各种玻璃或非晶材料都属于无序系统。图 20.31 表现出二维正方点阵畸变时所可能具有的几种无序排列形式。

无序系统大致有两类:

(a) 成分无序(或替代无序) 基本规则点阵依然存在,但两种或更多种不同的原子在这些格点上统计分布。可以想象从图 20.31(a) 的理想二维正方点阵出发,用不同的原子去随机地置换基质的原子而得到一种二维合金系统。

(b) 拓扑无序(或位置无序、结构无序) 规则的晶格已不复

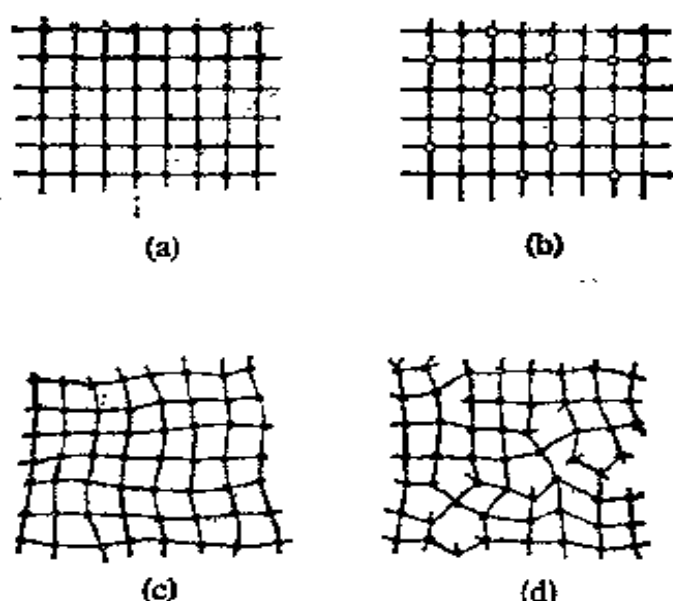


图 20.31 二维点阵可能的无序类型。(a)有序晶格；(b)两种不同原子在格点上无规分布而得到的成分无序；(c)点阵畸变而得的位置无序(拓扑无序)；(d)形成悬挂键的结构无序(拓扑无序)。

存在，也就是原子的排列有一定的随机性，甚至出现配位数的变化，形成悬挂键等。可以想象，从图 20.31(a) 经过晶格畸变而变成位置无序的图 20.31(c)，或者同时经过晶格畸变和价键的改变而形成结构无序的图 20.31(d)。

顺便指出，固态无序系统虽然长程序被破坏，但在几个原子的尺度内，短程序还是存在的，这主要表现在原子之间的键长，键角和配位数大致接近。

无序系统物理学包含着崭新而引人注目的广泛物理内容，无论是实验上或理论上都在继续发展之中^[167-170]。特别是金属玻璃^[171,172]更与金属物理学关系密切。在本书的第一卷中的 §1.6 及 §4.11 中曾讨论过非晶态金属及合金的问题^[171,172]，这里限于介绍无序系统的电子局域化和金属-非金属转变，即安德森转变^[158,167]。

如表 20.3 第一行所指出，在布洛赫型的金属-非金属转变的两边，能量在费密面 E_F 附近的电子波函数都是扩展态。它的波函数以明显空间周期重复的振幅展布在固体中，其形状示于图 20.32 (a) 中。其中实线代表 ψ 的实部，而破折线标明了波矢 k 的平面波包络。

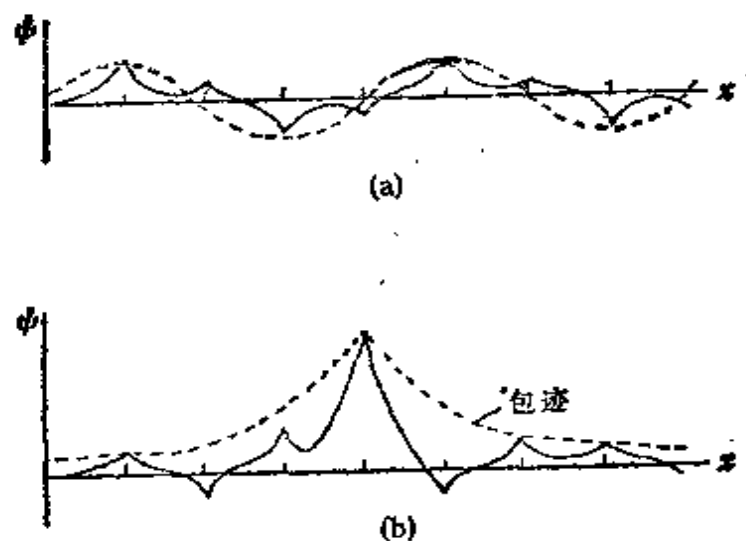


图 20.32 扩展态和局域态电子波函数的比较。(a)扩展态；
(b)局域态。

对于无序系统，波矢 k 不是一个标志电子态的好量子数，因为布洛赫函数的适用条件依赖于晶体长程序，而现在缺少这种长程序，因此能带理论对于无序系统的电子态是显然不完全适用的。虽然在这种材料中扩展态可能仍然存在，并有重要作用。

无序系统中发生的金属-非金属转变被称之为安德森转变^[273]。参阅表 20.3 中最后一行，转变的非金属一方并非如晶体中布洛赫型转变那样是能带填满的扩展态，而是局域化的电子态。局域态的意义示于图 20.32(b)，波函数集中于几个原子范围内，在固体的其他地方，振幅以指数衰减，即距离某个局域中心 R 的地方有 $\psi \sim e^{-R/\xi}$ ，其中量 ξ 被称为局域长度。这样几率积分 $\int |\psi|^2 d\tau$ 集中于一个小区域，其他地方的贡献可忽略不计。

晶态中的局域态一般是由化学杂质引入的，一个熟悉的例子是磷原子以施主杂质掺入晶体硅中。这时在基质晶体能隙中可能形成分立能级的杂质态。这时基质晶体依然存在布洛赫函数的本征态。但是，无序系统与此不同，无序产生的局域态是系统的内禀特性。

无序系统电子态的经典性工作是在安德森的紧束缚近似下能量

无序单电子模型^[25], 其单电子哈密顿量由式 (20.130a) 表示. 因为涉及到局域态, 应该取瓦尼尔表象, 可以得到二次量子化形式下的哈密顿量为

$$\mathcal{H} = \sum_i E_i c_i^\dagger c_i + \sum_{i \neq j} T_{ij} c_i^\dagger c_j, \quad (20.143)$$

自旋标号因与讨论问题无关, 已被省略. 其中

$$E_i = \int a^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathcal{H} a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) d\mathbf{r} \quad (20.143a)$$

代表 i 格点附近局域电子能量. 而 T_{ij} 是交叠积分

$$T_{ij} = \int a^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathcal{H} a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) d\mathbf{r} \quad (20.143b)$$

在紧束缚情况下, 有

$$T_{ij} = T_i \delta_{j, i+l},$$

T_i 就是 i 格点处的近邻交叠积分, 而 l 是近邻格点标号.

当系统为有序晶格时, 由于平移对称性可以引入波矢 \mathbf{k} 描述电子状态, 并利用式 (20.20), 将式 (20.143) 换至布洛赫表象去. 由于平移对称性, 各格点上的 E_i 和 T_i 与 i 无关, 故可令 $E_i = E_0$, $T_i = T$. 这时得到对角形式的哈密顿量为

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}, \quad (20.144)$$

其中

$$E_{\mathbf{k}} = E_0 + T \sum_l^{(n, n)} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l}, \quad (20.144a)$$

这就是紧束缚能带电子能量, 形式与式 (20.138) 是一样的, 其能带宽度为

$$\Delta = 2z|T|. \quad (20.145)$$

z 为配位数. 若取能带中心能量 $E_0 = 0$, 则有序晶格电子态能量为

$$E_{\mathbf{k}} = T \sum_l^{(n, n)} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l}.$$

对于无序系统, E_i 随格点位置作随机变化, 这时就不能令 E_i

$= 0$ 。安德森假定 E_i 在宽度 W 内连续均匀分布, 各格点上 E_i 是独立无规变量, 它反映了系统中原子环境随格点而不同, 其分布几率为

$$P(E_i) = \begin{cases} \frac{1}{W}, & -\frac{W}{2} \leq E_i \leq \frac{W}{2}, \\ 0, & \text{其他值.} \end{cases} \quad (20.146)$$

对于有序晶格和无序系统电子能量在格点上的分布示于图 20.33 中。

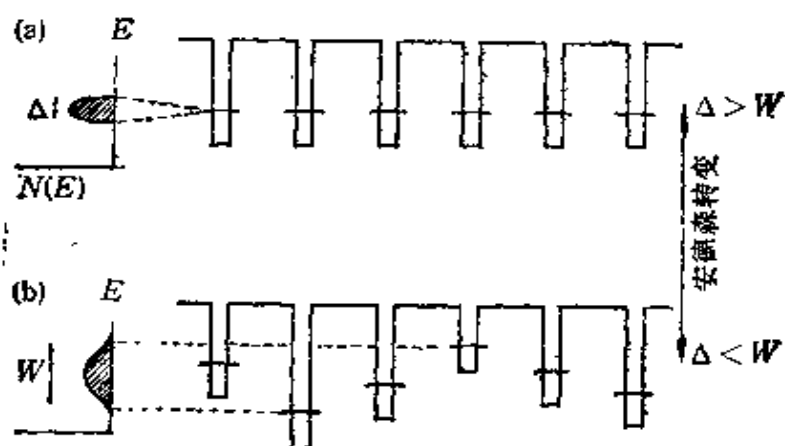


图 20.33 安德森转变的单电子紧束缚图象, 当无序宽度 W 超过能带宽度 Δ , 无序引起局域化。

为讨论问题的方便, 对于近邻交叠积分, 仍假定它与 i 无关, 这就是安德森设计的无序模型。在安德森模型中哈密顿量成为

$$\mathcal{H} = \sum_i E_i c_i^\dagger c_i + T \sum_{i,j} c_i^\dagger c_{i+j}, \quad (20.147)$$

这个模型概括了无序系统的主要特点, 其中变化宽度为 W 的无规变量 E_i 反映了系统的无序程度, 而各格点近邻交叠积分取相同值反映了无序系统的短程有序特征。

利用哈密顿量式 (20.147), 根据标准的双时格林函数方法可以推导出局域化条件和迁移率边缘等无序系统的重要特征参量^[23,108]。这里如上节一样, 仍不准备循此较繁复的数学推导过程, 而仅从量子力学考虑给出简明的物理图象^[153]。

讨论无序模型的最简单办法是对电子波函数采用紧束缚展开

$$\psi = \sum_i a_i \phi_i, \quad (20.148)$$

ϕ_i 是在 i 格点上的原子轨道。若 ψ 是能量为 E 的本征函数, 满足

$$\mathcal{H} \psi = E \psi,$$

其中 \mathcal{H} 由式(20.147)表示, 则可推出几率幅 a_i 的矩阵方程

$$E a_i = E_i a_i + T \sum_l a_{i+l}, \quad (20.149)$$

这是定态解。含时的运动方程应是

$$i\hbar \frac{da_i}{dt} = E_i a_i + T \sum_l a_{i+l}. \quad (20.150)$$

安德森对于无序系统中电子的局域态和扩展态作了严格的定义。在无限大系统中, 假定在 $t = 0$ 时, 一个电子位于格点 i

$$a_i(t=0) = 1,$$

$$a_j(t=0) = 0, \quad \text{当 } j \neq i \text{ 时.}$$

如果可以解出系统的方程组(20.150), 来研究 $t \rightarrow \infty$ 极限时 $a_i(t)$ 的行为, 若

$$a_i(t \rightarrow \infty) = 0,$$

说明电子 e 离开此格点在系统中传播; 若

$$a_i(t \rightarrow \infty) = \text{有限值},$$

则电子在此格点的邻近运动, 电子处于稳定的局域态。

从式(20.147)中我们知道, 无序系统的重要参量是 E_i 和 T , 或者更明确一些是无规势宽度 W 和不考虑无序时的能带宽度 Δ 。这两个特征能量参数已经示于图 20.33 中。在两个极端情况, 即 (i) $W = 0$, 这相当于有序晶格, 电子处于扩展态; (ii) $\Delta = 0$, 也就是 $T = 0$, 相当于电子处于完全局域态。从式(20.150)也可得到 $|a_i| = 1$ 或 0, 不随时间演化。下面来分析一下 Δ 和 W 都不为零时电子处于金属或绝缘态的条件。

如同在上节提到的莫特转变或维格纳晶格一样, 安德森转变时的电子局域化也表示电子经受的势能超过其动能, 从而影响到

波函数的形式。在图 20.29 中电子从扩展态至局域态的转变是由于在低密度时动能降低,能带宽度减少,而在图 20.33 反映的安德森转变中,它是由于无序产生的足够强的势能叠加引起的。

在图 20.33(b) 中,代表原子位置的势阱的深度是不同的,其变化幅度为 W 。动能和势能之间竞争对电子态的影响表现在

$$\delta = W/\Delta \quad (20.151)$$

上。这里对无序参数 δ 的临界值作一粗略的讨论。我们从强无序极限 $W \gg \Delta$ 出发,在 $\Delta = 0$ 的完全局域态上加上交叠积分 T 的影响,然后用微扰理论来处理这个耦合参数问题。考虑一个局域于 i 格点 ($a_i = 1, a_j = 0, j \neq i$) 的未微扰态。一级微扰理论^[105]使这个态混合了相邻格点的态,其比例因子为 $T/E_i - E_j$,而高阶微扰相应于这个基本比例因子的高次幂。问题在于: T 或者说 Δ 达到多大时系统将发生局域态的破坏和扩展态的形成。

因为格点能量 E_i 和 E_j 以宽度 W 分布,假定 E_i 位于分布的中心,而 z 个最近邻格点能量 E_j 以能量间隔 W/z 等间距分布。这样微扰因子 $T/E_i - E_j$ 的最小能量分母是 $|E_i - E_j| = W/2z$,故它的最大值是 $2z|T|/W$ 。对于波函数的微扰展开,相当于存在一个 $2z|T|/W$ 的幂级数,其收敛条件应为 $(2z|T|/W) < 1$ 。我们可以认为扩展态产生于收敛条件开始破坏的地方,也就是说

$$\begin{aligned} W &= 2z|T| \\ &= \Delta \end{aligned} \quad (20.152)$$

是发生局域-扩展的转变条件。这样我们求得了无序参数 δ 的临界值

$$\begin{aligned} \delta_c &= W/\Delta \\ &= 1, \end{aligned} \quad (20.153)$$

而安德森的局域化判据成为

$$\delta > 1. \quad (20.154)$$

用格林函数进行严格数学推导得到的临界值大约在 $2 \sim 3$ 之间^[23,168]。但近年来在新发展的局域化的标度理论中所求得的 δ_c 值

大致为 $1^{[174]}$ ，同时计算机模拟的数值计算也给出相近的结果^[175]。人们认为这个值可能更为合理，故以上的初步讨论还是得到了可信的结果。

无序导致局域的概念由莫特等人进一步发展^[176-178]，它对当代非晶半导体电子态的理论研究有重要影响。在无序足够强以致满足安德森判据时，三维系统中所有的态都是局域态。而在 $\delta < \delta_c$ 时，莫特指出，这时在系统中既存在扩展态，又存在局域态。扩展态在紧束缚能带中心部分，局域态在带尾部分，并有一个划分扩展态与局域态的能量分界 E_c 。如图 20.34 所示。阴影区表示的局域态相当于价带顶或导带底的尾部，而每个能带的主体仍旧是扩展态。莫特称 E_c 为迁移率边缘 (mobility edge)。于是安德森转变就涉及到由成分、压力和外场等因素改变引起费密面越过迁移率边缘而导致的局域-扩展态转变。

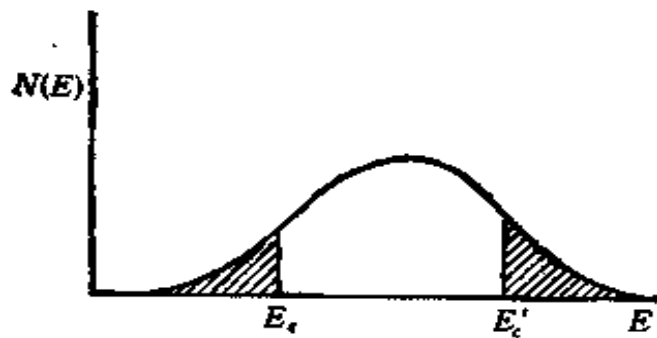


图 20.34 安德森模型里的态密度，能带中部是扩展态，阴影区是局域态。 E_c 和 E'_c 划分了局域和扩展态的能量界限。

安德森转变的概念可以在经典极限下用渗流图象来得到说明^[103]。这相当于一个给定能 E 的粒子在如图 20.35 描绘的二维无规势场 $V(\mathbf{r})$ 中运动。这时不考虑粒子的隧道过程。可以形象地将势场 $V(\mathbf{r})$ 比作湖泊、陆地和山峰，而粒子漂浮在高度为 E 的水面上运动。 $V(\mathbf{r}) < E$ 是粒子的运动区域，而 $V(\mathbf{r}) > E$ 是粒子的禁止区域。在水面较低时，只有湖泊存在，粒子是局域化的；水面上升时，湖泊开始连通起来直至形成大洋，粒子运动区域

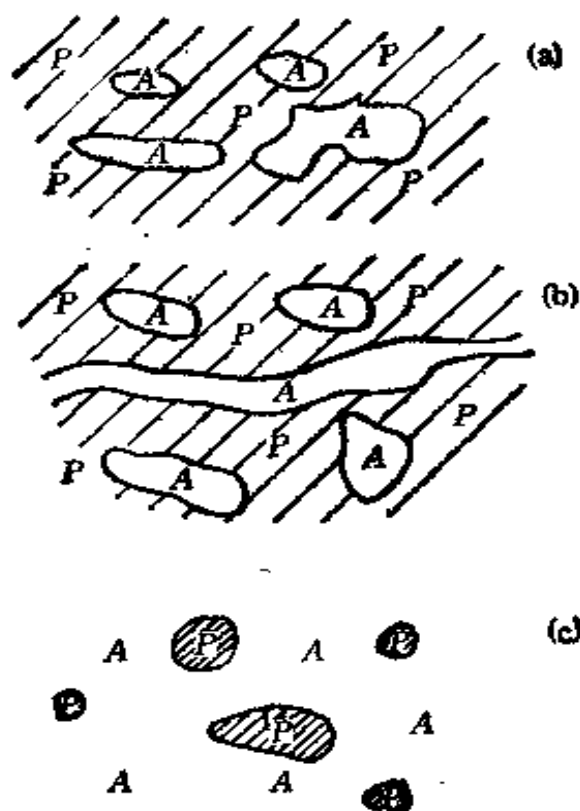


图 20.35 无规势场中经典粒子运动的渗流图象。能量增加将使粒子从局域态转变至扩展态。(a) $E < E_c$, 粒子在局域范围; (b) $E \geq E_c$, 粒子开始出现扩展态; (c) $E \gg E_c$, 粒子处在扩展态。

延伸至无限。在粒子从局域态转变为扩展态的过程中, 能量 E 将经过某个临界值 E_c , 此即迁移率边缘。严格地说, 电子运动遵循量子力学规则, 它可以用隧道过程透入 $V(\mathbf{r}) > E$ 区域, 故不会像经典粒子那样存在尖锐的运动区域和禁止区域的分界。但上面经典形式的分析还是合理的, 只要势场 $V(\mathbf{r})$ 变化的平滑部分的特征长度大于电子的德布罗意波长。

在图 20.33(b) 中, 态分布的两翼对局域化特别敏感, 其原因可以用现代渗流理论^[179]来给出适当的解释。当我们考虑无序格点间电子的迁移性质时, 可以想象得出, 一个电子只有在它所在格点和邻近格点能级差小于能带宽度的某个分量, 譬如说 Δ/z 时, 它才容易在两格点间进行转移。假如我们用 Δ/z 作为能量尺度来分割无规参数 W , 并标明每个格点上电子所属的能量范围(相当于着色)。每个格点易于和具有同样能量范围(相当于同色)的

近邻格点建立联系，而不和能量悬殊的格点交往。这种情况相当于多色渗流过程。对位于图 20.33(b) 中态密度丰厚的中心部分这一能量片断上的格点来说，其空间分布浓度也是高的，故渗流就很容易，但对于带尾分布这种能量片断来说，同色格点很少，空间上散布很远，故没有渗流通路，局域化就容易形成。这就说明无序最容易使处在态密度分布末端的电子局域化。由此可以明确地说，安德森局域化是低密度状况(带尾对应于低浓度的格点分布)下无规势场强迫电子局域化。

作为本节结尾，简单介绍一下莫特-安德森转变问题^[180]。图 20.36 是晶体硅中掺入杂质磷在低温下电导率的实验结果^[181]。在 Si:P 系统中，磷原子替代了部分硅原子。磷原子的五个外层电子中的四个以共价键与相邻四个硅原子结合。第五个电子不能进入晶体价带，而只能进入略低于导带边缘的施主能级上。这时电子与 P^+ 离子松散地结合着，在低浓度下，束缚电子是孤立的，系统为绝缘体。增加掺杂浓度，由波函数之交叠，电子态成为扩展的，整个杂质系统出现“金属性”。其临界浓度为 $n_c = 3.7 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ，相应于 $\text{Si}_{1-x} \cdot \text{P}_x$ 中， $x = 7.5 \times 10^{-5}$ 。

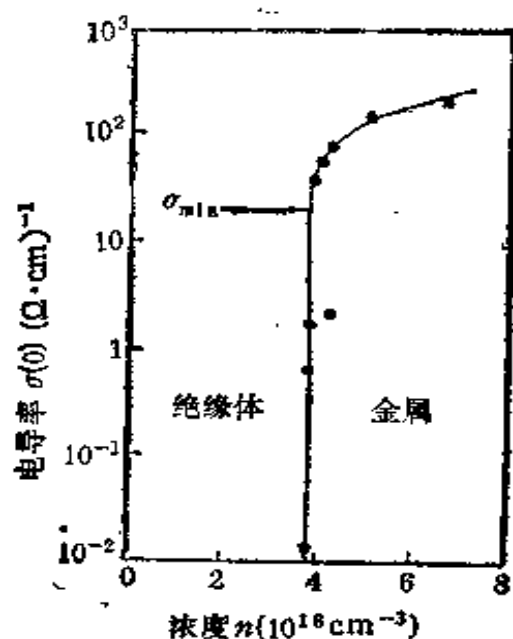


图 20.36 Si:P 系统随掺磷浓度增加发生金属-非金属转变。

应该指出,掺杂硅中的金属-绝缘体转变是兼有安德森和莫特转变特征的。虽然安德森转变和莫特转变在物理图象上是完全不同的,但在实验过程中往往纠缠在一起。这并不奇怪。当涉及到非晶系统中的多电子问题时,无序将导致安德森局域化,而电子-电子存在相互作用,也会附加上莫特形式的影响。在低密度状态,两个效应会合作产生局域化。在 Si:P 系统里,莫特转变的特点反映在金属-绝缘体的转变是浓度的函数,而安德森局域化来自施主杂质上的电子运动受到掺杂引起的无规势场分布的影响。我们可以定义莫特-安德森转变是,存在电子相互作用的无序系统里的金属-非金属转变。

§ 20.14 金属氧化物中的金属和非金属态

金属特别是过渡金属氧化物在进行固体材料导电性质的研究中有其特殊的重要地位^[39,182]。这一节我们准备联系实验事实来简单介绍几种氧化物的金属或非金属特性,以及两者之间在特定条件下的转变。

过渡金属除具有一般金属原子的 s 电子和 p 电子之外,它们的原子占有 1 至 9 个 d 电子。当一种过渡金属元素形成固体时, d 电子轨道扩展为比较窄的 d 能带。电子在 d 带上部分填充。另外高一级的 s 带较宽,和 d 带发生交叠,故 s 带也是部分填充,结果产生金属导电性。至于它的氧化物,在简单的未饱和情况下,过渡金属离子总存在未配对的 d 电子,晶体由 O^{2-} 阴离子以及金属 M^{++} 离子组成。这时外层 s 和 p -轨道形成填满的价带和空的导带,两者之间是大的能隙 ($\sim 5-10\text{eV}$)。费密能级附近是较窄的 d 带,它对材料的电和磁性质起重要作用。

氧化物是研究金属-非金属转变的一个内容丰富的对象。由于它们结构性质决定了原子波函数交叠比较弱,这时一些参量(如温度、压力,成分上的)看来微不足道的改变,足以对费密面附近的电子能量状态产生显著影响,从而使许多物理性质发生改变。这里给出几个例子:

(i) 压力效应 一个熟知的材料是 NiO ，在外加压强达兆巴时，它从绝缘态变为金属态；

(ii) 成分效应 VO_x 在 x 从小于 1 增大到超过 1 时，从金属变为半导体。这个实验事实一般解释为，当 x 增加时 V^{4+} 离子数增加、引起势场的涨落、从而感生安德逊局域化；

(iii) 温度效应 TiO_2 和 VO_2 在温度变化时引起金属-非金属转变。

除此之外，影响金属-非金属转变的因素还有二维效应，离子变价，正离子自旋改变以及铁磁性等。

下面我们准备分别介绍简单氧化物 V_2O_3 系统和具有钙钛矿结构的复杂氧化物材料的金属-非金属性质。

(a) 倍半氧化钒 (V_2O_3) 人们长期对 V_2O_3 系统感兴趣，是因为它包含着丰富的金属-非金属转变的内容。利用压力的改变，可以获得 V_2O_3 系统的相图，如图 20.37(a) 所示。如果将压力换至赫伯德参数，则可以和理论结果进行比较。

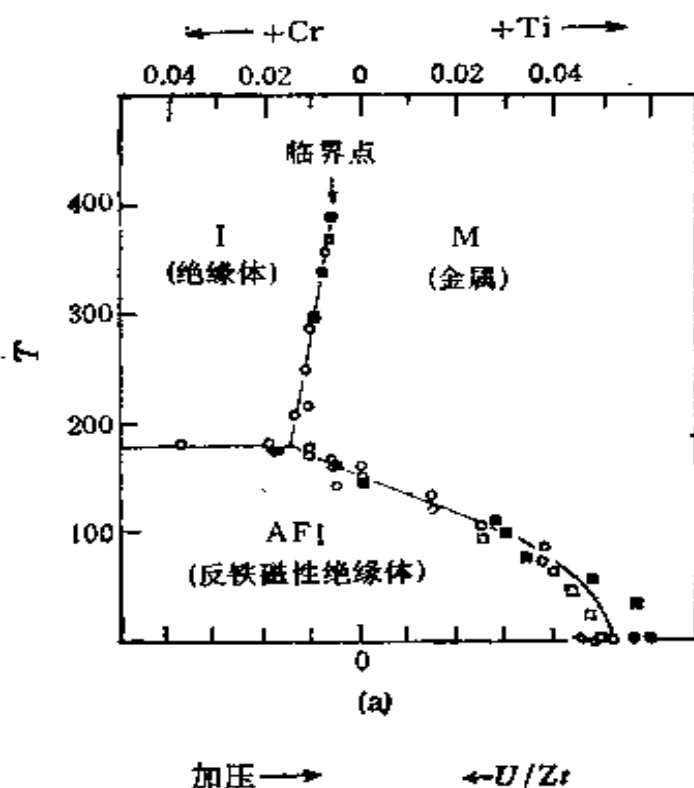


图 20.37(a) V_2O_3 系统的实验相图， T - P 关系以及 T 与 C_{Cr} 、 T 掺杂关系。压强可以换至赫伯德参数。

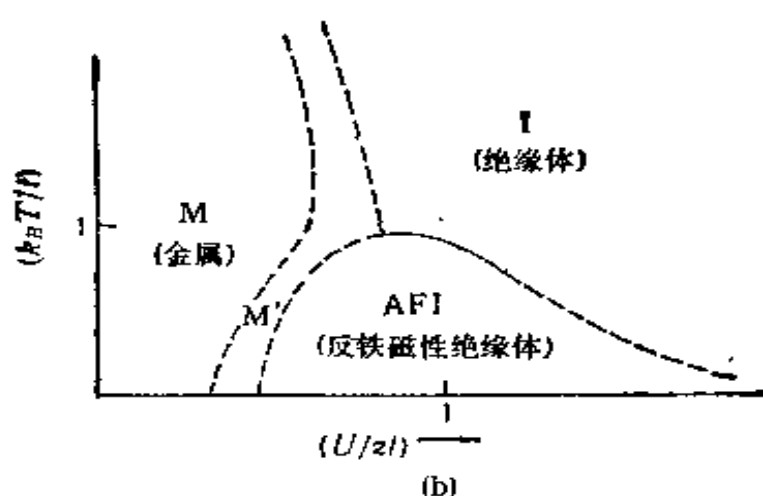


图 20.37(b) 赫伯德模型在自洽场近似下的理论相图， $T-U$ 关系相变除在实线处外均是连续的。

对赫伯德哈密顿式(20.135)取平均场近似，即

$$U n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} \simeq U \langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + U \langle n_{i\downarrow} \rangle n_{i\uparrow} - U \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle, \quad (20.155)$$

其中 $\langle n_{i\sigma} \rangle$ 是在 i 格点 σ 自旋的热平均电子数，这时单体哈密顿与安德森模型是相似的，可以采用相干势近似来求出理论相图。它表示在图 20.37(b)。它与实验相图是大致吻合的。

图 20.38 同时给出了成分和温度对 V_2O_5 系统导电性质的影响。 ρ 为电阻率， T 为绝对强度。

图 20.38 (a) 是 $V_2O_5(98.5\%) - Cr_2O_3(1.5\%)$ 合金系统，在温度从致冷区至 1000K 之间，系统经过三次相变。低温下材料是反铁磁绝缘体(AFI)；在 150K 处经过一级相变成为顺磁金属(PM)；在 $T > 250K$ 的更高温度区系统变至顺磁绝缘体 (PI)；继续加温，系统逐渐转换至高温金属态 (PM')。合金成分稍作变化，这些转变过程可以发生相当大的改变。如图 20.38(b) 所示，这时系统是 $V_2O_5(97\%) - CrO_3(3\%)$ ，中间 PM 相已完全消失。而对于强的 V_2O_5 系统的图 20.38(c)，我们只能见到低温的 AFI-PM 转变。

从上面的介绍中可看出，系统随温度变化发生相变的次数与特征是与成分细节有关的。曾有几种不同的解释对上面的现象的进行过分析，一个比较成功的解释是莫特转变，但是并不是所有的

带图^[183]。这些能带图的一个共同特征是在氧原子的 $2p$ 轨道和正离子的 ns, np 轨道间有大的能隙 ($\sim 5-10\text{eV}$)。由这个方法给出的具有图 20.39 所示的钙钛矿结构的 ReO_3 的能带结构示于图 20.40。必须注意的是, ReO_3 是一种约化的钙钛矿结构, 因为实际上缺少 A 离子。 ReO_3 的研究是有基本意义的。譬如说, 钨青铜 M_xWO_3 可以描述为用金属离子 M 掺入 WO_3 点阵中去而得。

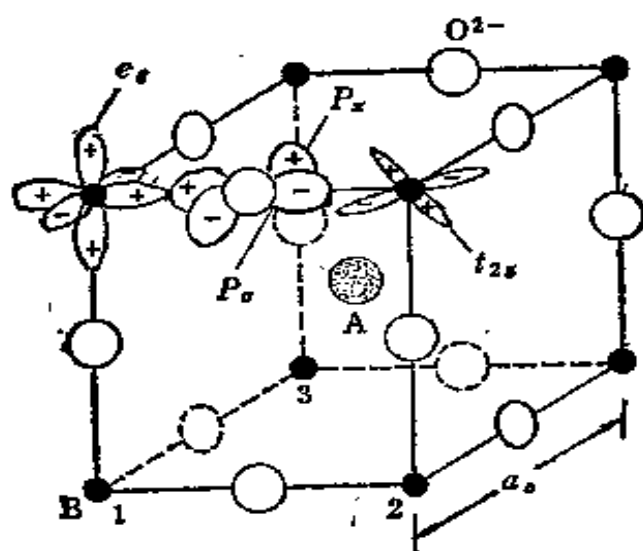


图 20.39 钙钛矿结构 ABO_3 , 同时画出 B 离子和氧离子的键合示意图。

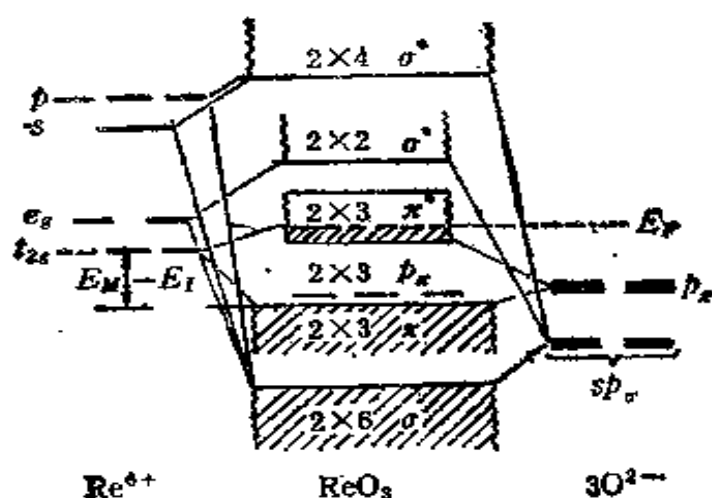


图 20.40 ReO_3 的能带结构。

WO₃ 可从图 20.39 所示的结构(注意少 A) 进行变换而得。钨青铜中一个主要的研究对象是 Na_xWO₃, 它的晶体结构属畸变钙钛矿型的。这里最关键的参量是 x 。当 x 达到某个临界浓度 x_c 时, 发生金属-非金属的转变。其它氧化物也有类似特征, 一些实验结果列入表 20.4。

表 20.4 钙钛矿结构和钨青铜结构材料金属-非金属转变的临界成分

系 统	x_c	每个单胞的 d 电子数
Na _x WO ₃	0.25	0.25
	<0.22	<0.22
	0.17	0.17
	0.16	0.16
	0.12	0.12
Li _x WO ₃	0.25	0.25
Ba _x WO ₃	<0.10	<0.20
H _x WO ₃ (非晶)	0.10	0.10
WO _{3-x}	~0.10	~0.20
WO _{3-x} F _x	0.09	0.09
Na _x WO _{3-x} F _x	0.02	~0.40
Na _x Ta _y W _{1-y} O ₃	$(x-y)_c = 0.30$	0.30
	0.18	0.18
La _{1-x} Sr _x VO ₃	0.22	0.22
NaNb _{1-x} W _x O ₃	0.44	0.44
Na _{1-x} Sr _x NbO ₃	>0.50	>0.50

一般认为, 在钨青铜结构的材料中, 主要存在安德森转变。莫特考虑了三种可能的安德森转变: (a) Na⁺ 离子的随机分布在导带尾产生安德森局域化; (b) 杂质带形成, 其状态在 $x = x_c$ 处局域化; (c) 杂质带分离为两个赫伯德带。局域化发生于两个赫伯德的腰能隙中。这三种情况已表示在图 20.41 中。

最近的研究工作支持莫特提出的这三种安德森转变的基本设想。理论和实验结果认为, 这三种情况都有可能存在, 从而影响金

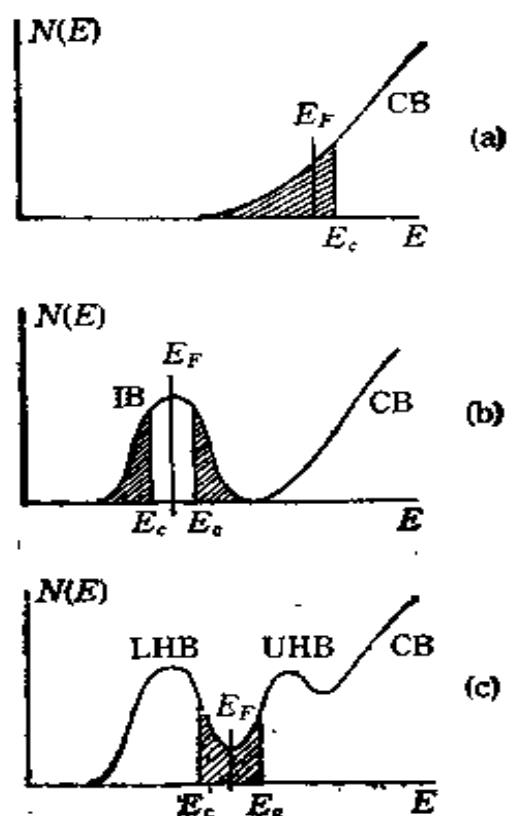


图 20.4 Na_xWO_3 中三种可能的安德森局域化。

属-非金属的转变。

另一种具有钙钛矿结构 ABO_3 的重要氧化物 LaCoO_3 ，它的电阻 ρ -温度 T 关系可参阅图 20.42。电阻在 400—650K 之间迅速下降。

其他钙钛矿结构材料还有 LaSrCoO_3 ， $\text{La}_{1-x}\text{SrVO}_3$ ， $\text{LaNi}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_3$ ($\text{M} = \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}$) 等。它们都在适当的条件下表现出金属-非金属的转变。

由于 $(\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x)_2\text{CuO}_{4-x}$ 和 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ 等化合物在 30K 以上乃至液氮温区超导电性的新近进展^[184-186]，这些具有层状或畸变钙钛矿结构的三元、四元甚至五元氧化物的研究前景是非常吸引人的。可以相信，研究氧化物材料的金属-非金属转变过程以及其结构相变（可能和佩尔斯相变、杨-特勒相变或有序无序相变有关）。

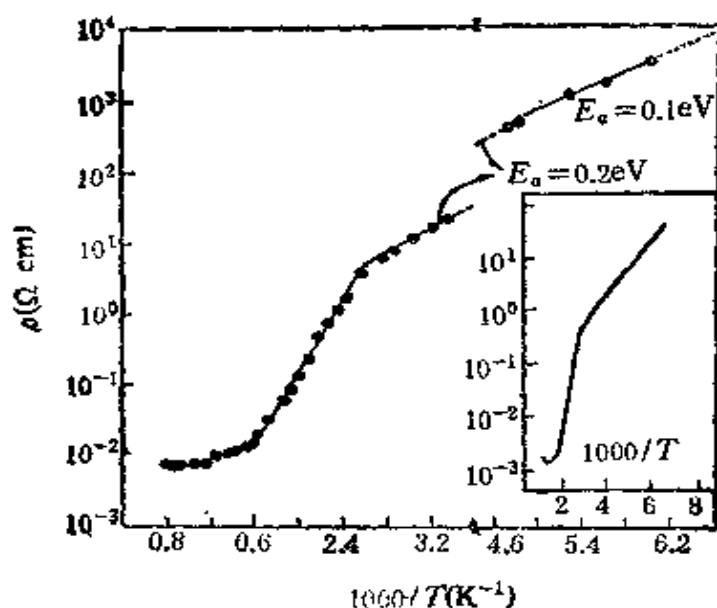


图 20.42 多晶 LaCoO_3 的电阻温度关系。

将有助于进一步探索新型高温超导材料。还应该指出的是，电子-声子相互作用也是 BCS 超导理论的基础^[148]。用这一理论来解释新近发现的高临界温度超导体的超导电性，还存在有一定的困难。1987 年以来，科学家已经提出了许多不同的理论模型和新的机制，但目前实验工作所达到的水平，尚不足以判断它们的优劣。不过它们之间还存在有共同点，即都是建立在电子-晶格相互作用的框架内的，因而与本章所涉及的许多问题密切相关。关于超导电性及其有关的材料物理学方面的问题，将留待本书第三卷中进行讨论。

第九编 参考文献

- [1] Ising, E., *Z. Physik*, **31**, 253(1925).
- [2] Onsager, L., *Phys. Rev.*, **65**, 117(1944).
- [3] Bragg, W. L. and Williams, E. J., *Proc. Roy. Soc.*, **A145**, 699(1934).
- [4] Weiss, P. J., *J. de Phys.*, **6**, 667(1907).
- [5] van der Waals, *Over de Continuïteit Van den Gas-en Vloeistand*, A. W. Sihthoff, Leiden (1873).
- [6] Bethe, H. A., *Proc. Roy. Soc.*, **A150**, 552(1935).
- [7] Kikuchi, R. and Brush, S. G., *J. Chem. Phys.*, **28**, 802, (1963).
- [8] Domb, C. A., *Adv. Phys.*, **9**, 149(1960).

- [9] Fisher, M. E., *Repts. Progr. Phys.*, **30**, 310(1967).
- [10] Kadanoff, L. P., *Physics*, **2**, 263(1966).
- [11] Wilson, K. G., *Phys. Rev. Lett.*, **26**, 584(1972).
- [12] Born, M. and Oppenheimer, R., *Ann. Phys.*, **84**, 457(1927).
- [13] Born, M. and Huang, K. (黄昆), *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Clarendon Press, Oxford (1954).
- [14] Cochran, W., *Phys. Rev. Lett.*, **3**, 412(1959).
- [15] Anderson, P. W., in "Fizika Dielektrikov" (ed. Skavani, G. I., Akad. Nauk SSSR, Moscow (1959).
- [16] Fröhlich, H., *Theory of Dielectrics*, Clarendon Press, Oxford (1949).
- [17] Lydanne, R. H., Sachs, R. G. and Teller, E., *Phys. Rev.*, **58**, 673(1941).
- [18] Jahn, H. A. and Teller, E., *Proc. Roy. Soc.*, **A161**, 220(1937).
- [19] Peierls, R. E., *Quantum Theory of Solids*, Clarendon Press, Oxford, (1955).
- [20] 孙鑫, 低维凝聚态物理的进展, 物理学进展, **5**, 467(1985).
- [21] Wigner, E. P., *Trans. Faraday Soc.*, **34**, 678(1938).
- [22] Mott, N. F., *Proc. Phys. Soc.*, **A62**, 416(1949).
- [23] Anderson, P. W., *Phys. Rev.*, **109**, 1492(1958).
- [24] Münster, A., *Statische Thermodynamik*, vol. I-II., Springer, Berlin (1974).
- [25] 伍法岳, 杨展如, 相变与临界现象, 物理学进展, **1**, 100(1981).
- [26] Baxter, R. J., *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, New York (1982).
- [27] Ma, S. K. (马士庚), *Modern Theory of Critical Phenomena*, Benjamin (1976).
- [28] Fisher, M. E., *Rev. Mod. Phys.*, **46**, 597(1974).
- [29] Amit, D. J., *Field Theory, The Renormalization Group and Critical Phenomena*, McGraw-Hill, New York (1978).
- [30] Domb, C. and Green, M. S., *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 1—11, Academic Press, New York (1972—1987).
- [31] 于渌, 郝柏林, 相变与临界现象, 科学出版社, 北京(1984).
- [32] Blinc, R. and Žeks, B., *Soft Modes in Ferroelectrics and Antiferroelectrics*, North Holland, Amsterdam, (1974).
中译本: 铁电体和反铁电体中的软模, 刘长乐等译 科学出版社, 北京(1981).
- [33] Müller, K. A. and Thomas, H. (ed.), *Structural Phase Transitions*, Vol 1; 2. Springer, Berlin (1981).
- [34] Riste, T., *Electron-Phonon Interactions and Phase Transitions*, Plenum (1977).
- [35] Engelman, R., *Jahn-Teller Effect in Molecules and Crystals*, John Wiley, New York (1972).
- [36] Gehring, G. A. and Gehring, K. A., *Repts. Prog. Phys.*, **38**, 1(1975).
- [37] Toombs, G. A., *Phys. Rep.*, **40c**, 181(1978).
- [38] Mott, N. F., *Metal-Insulator Transitions*, Taylor & Francis, London (1974).
- [39] Edwards, P. P., and Rao, C. N. R., *The Metallic and Nonmetallic States of Matter*, Taylor & Francis, London (1985).
- [40] Kramers, H. A. and Wannier, G. H., *Phys. Rev.*, **60**, 252, 263(1941).
- [41] Wannier, G. H., *Rev. Mod. Phys.*, **17**, 50(1945).
- [42] Newell, G. F. and Montroll, E. W., *Rev. Mod. Phys.*, **25**, 353(1953).

- [43] Thoulless, D. J., *Phys. Rev.*, **187**, 732(1969).
- [44] Fan, C., *Phys. Lett.*, **39A**, 136(1972).
- [45] de Fontaine, D. and Kulik, J., *Acta Met.*, **33**, 145(1985).
- [46] Selke, W., in "Modulated Structure Materials" (ed. Tsakalakos, T.) M. Nijhoff, Dordrecht (1984).
- [47] Rushbrooke, G. S., *J. Chem. Phys.*, **39**, 842(1963).
- [48] Griffiths, R. B., *J. Chem. Phys.*, **43**, 1958(1965).
- [49] Stanley, H. E., Chang, T. S., Harbus, F. and Liu, L. L., in "Local Properties at Phase Transitions", (ed. Muller, K. A. and Rigamonti, A.), North-Holland, Amsterdam (1976).
- [50] 史美伦, 固体统计力学, 科学技术文献出版社, 重庆, (1984).
- [51] Maris, H. J. and Kadanoff, L. P., *Amer. J. Phys.*, **46**, 652(1978).
- [52] Raman, C. V. and Nedungadi, T. M. K., *Nature (Lond.)*, **145**, 147(1940).
- [53] Cochran, W., *Adv. Phys.*, **9**, 387(1960).
- [54] Cochran, W., *Adv. Phys.*, **10**, 401(1961).
- [55] Scott, J. F., *Rev. Mod. Phys.*, **46**, 83(1974).
- [56] Axe, J. D. and Shirane, G., *Phys. Rev.*, **B1**, 342(1970).
- [57] Shirane, G. and Yamada, Y., *Phys. Rev.*, **177**, 858(1969).
- [58] Worlock, J. M., Scott, J. F. and Fleury, P. A., in "Light Scattering Spectra of Solids", (ed. Wright, G. B.), Springer-Verlag, New-York, (1969).
- [59] Blinc, R., *Ferroelectrics*, **16**, 33(1977).
- [60] Лаандау, Л. Д. и Халатников, И. М., *Док. Акад. Наук, СССР*, **96**, 469(1954).
- [61] Cowley, R. A., *Adv. Phys.*, **12**, 421(1963).
- [62] Dorner, B. and Comes, R., in "Dynamics of Solids and Liquids by Neutron Scattering", p. 127, (ed. Lovesey, S. W. and Springer, T., Springer-Verlag (1977)).
- [63] Grimm, H. and Dorner, B., *J. Phys. Chem. Solids*, **36**, 407(1975).
- [64] Subbaswamy, K. R. and Mills, D. L., *Phys. Rev.*, **B18**, 1446(1978).
- [65] Frazer, B. C. and Pepinsky, R., *Acta Cryst.*, **6**, 273(1953).
- [66] Kobayashi, K. K., *J. Phys. Soc. Japan.*, **24**, 497(1968).
- [67] Kobayashi, K. K., Blinc, R., Cevc, P. and Shara, M., *Phys. Rev.*, **159**, 411 (1967).
- [68] Blinc, R., Pinter, M. and Zupancic, I., *J. Phys. Chem. Solids*, **28**, 405(1967).
- [69] Chen, Jun (陈峻), Fan, Chan-gao (范成高), Li, Qi (李齐) and Feng, Duan (冯端), *J. Phys. C*, **21**, 2255(1988).
- [70] Gills, N. S. and Koehler, T. R., *Phys. Rev.*, **B7**, 4980(1973).
- [71] Gills, N. S. and Koehler, T. R., *Phys. Rev.*, **B9**, 3806(1974).
- [72] Gills, N. S., *Phys. Rev.*, **B11**, 309(1975).
- [73] Aubry, S., *J. Chem. Phys.*, **62**, 3216(1975).
- [74] Stamenkovic, S., Plakide, N. M., Aksienov, V. L. and Siklos, T., *Ferroelectrics*, **14**, 635(1976).
- [75] Schneider, T., Stoll, E. and Beck, H., *Physica*, **79A**, 201(1975).
- [76] Riste, T., Samuelson, E. J. and Otnes, K., in "Structural Phase Transitions and

- Soft Modes", ed. Samuelson, E. J., Anderson, E. and Feder, J., (Universitetsforlaget, Oslo, 1971).
- [77] Blinc, R., *Ferroelectrics*, **20**, 121(1978).
 - [78] Shapiro, S. M., Axe, J. D. and Shirane, G., *Phys. Rev.*, **B6**, 4332(1972).
 - [79] Krumhansl, J. A. and Schrieffer, J. R., *Phys. Rev.*, **B11**, 3535(1975).
 - [80] Aubry, S., *J. Chem. Phys.*, **64**, 3392(1976).
 - [81] Schneider, T. and Stoll, E., *Phys. Rev.*, **B10**, 2004(1974).
 - [82] Schneider, T. and Stoll, E., *Phys. Rev.*, **B13**, 1216(1976).
 - [83] Schneider, T. and Stoll, E., *Phys. Rev.*, **B17**, 1302(1978).
 - [84] Halperin, B. I. and Varma, C. M., *Phys. Rev.*, **B14**, 4030(1976).
 - [85] Höck, K. -H. and Thomas, H., *Z. Phys.*, **B27**, 267(1977).
 - [86] Schmidt, H. and Schwabl, F., *Phys. Lett.*, **61A**, 476(1977).
 - [87] Yagi, T., Tanaka, H. and Tatsuzaki, I., *Phys. Rev. Lett.*, **38**, 609(1977).
 - [88] Courtens, E., *Phys. Rev. Lett.*, **41**, 1171(1978).
 - [89] Hastings, J. B., Shapiro, S. M. and Frazer, B. C., *Phys. Rev. Lett.*, **40**, 237(1978).
 - [90] Zener, C., *Elasticity and Anelasticity of Metals*, Univ. of Chicago Press, Chicago, (1956), 中译本: 金属的弹性和滞弹性, 孔庆平等译, 科学出版社, 北京(1965).
 - [91] Nakanishi, N., *Prog. Mater. Sci.*, **24**, 145(1979).
 - [92] Nagasawa, A. and Ueda, Y., *J. Phys. Soc. Japan*, **45**, 1249(1978).
 - [93] Clapp, P. C., *Phys. Stat. Sol.*, (b)**57**, 561(1973).
 - [94] Clapp, P. C., *Ferroelectrics*, **16**, 89(1977).
 - [95] Nagasawa, A., *J. Phys. Soc. Japan*, **40**, 93(1976).
 - [96] Nagasawa, A., *J. Phys. Soc. Japan*, **40**, 1021(1976).
 - [97] Suzuki, T. and Wuttig, M., *Acta Met.*, **23**, 1069(1975).
 - [98] Seitz, F., *The Modern Theory of Solids*, Mc Graw-Hill, New York (1940).
 - [99] Ziman, J. M., *Electron and Phonons*, Clarendon, Oxford (1960).
 - [100] Callaway, J., *Quantum Theory of the Solid State*, Academic Press, New York (1976).
 - [101] Thouless, D. J., *The Quantum Mechanics of Many-Body Systems*, 2nd ed., Academic Press, New York (1972).
 - [102] Grimvall, G., *The Electron-Phonon Interaction in Metals*, North-Holland, Amsterdam (1981).
 - [103] Madelung, O., *Introduction to Solid-State Theory*, Springer (1978).
 - [104] 李正中, 固体理论, 高等教育出版社, 北京, (1985)
 - [105] 曾谨言, 量子力学, 科学出版社, 北京, (1981).
 - [106] Schiff, L., *Quantum Mechanics*, 3rd ed., McGraw-Hill, New York (1968).
 - [107] Keller, H. J. (ed.), *Low-Dimensional Cooperative Phenomena*, Plenum Press (1975).
 - [108] March, N. H. and Parrinello, M., *Collective Effects in Solids and Liquids*, Adam Hilger, London (1982).
 - [109] Kohn, W., *Phys. Rev. Lett.*, **2**, 393(1959).
 - [110] Yamada, Y., in *Dynamical Properties of Solids 5*, ed. by Horton, G. K. and Maradudin, A. A., North-Holland, Amsterdam (1984).

- [111] Jahn, H. A., *Proc. Roy. Soc.*, **164**, 117 (1938).
- [112] Perlín, Y. E. and Wagner, M., *The Dynamical Jahn-Teller Effect in Localized Systems*, North-Holland (1984).
- [113] Melcher, R. L., in *Physical Acoustics XII*, ed. by Mason, W. P. and Thurston, R. N., Academic Press (1976).
- [114] Dunitz, J. D. and Orgel, L., *J. Phys. Chem. Solids*, **3**, 20(1957).
- [115] Kanamori, J., *J. Appl. Phys.*, **31**, 14s(1960).
- [116] Testardi, L. R., in *Physical Acoustics*, **10**, ed. by Mason, W. P. and Thurston, R. N., 193(1973).
- [117] Sturge, M. D., in *Solid State Physics*, **20**, ed. by Seitz, F., Turnbull, D. and Ehrenreich, H. (1967).
- [118] Elliott, R. J., Gehring, G. A., Malozemoff, A. P., Smith, S. R. P., Staudé, W. S., and Tyte, R. N., *J. Phys. C: Solid St. Phys.*, **4**, L179(1971).
- [119] Stinchcomb, R. B., in *Polymers, Liquid Crystals, and Low-Dimensional Solids*, ed. by March, N. and Tosi, M., Plenum Press (1984).
- [120] Stinchcomb, R. B., in Ref. [34].
- [121] Bleaney, B. and Bowers, K. D., *Proc. Phys. Soc.*, **A65**, 667(1952).
- [122] Abragam, A. and Pryce, M. H. L., *Proc. Phys. Soc.*, **A63**, 409(1950).
- [123] Cooke, A. H., Swithenby, S. T. and Wells, M. R., *Solid State Comm.*, **10**, 265 (1972).
- [124] Segmüller, A., Melcher, R. L. and Kinder, H., *Solid State Comm.*, **15**, 101 (1974).
- [125] Melcher, R. L., in *Proc. IEEE, Ultrasonic Symp.*, 293(1973).
- [126] Becker, P. J., Leask, M. J. M. and Tyte, R. N., *J. Phys., C: Solid State Phys.*, **5**, 2027(1972).
- [127] Pál, L., Grüner, G., Jánosy, A. and Sólyom, J. (ed.), *Organic Conductors and Semiconductors*, Springer, Berlin (1977).
- [128] Barišić, S., Bjeliš, A., Cooper, J. R. and Leontic (ed.), *Quasi One-Dimensional Conductors I, II*, Springer Berlin (1979).
- [129] Berlinsky, A. J., *Rep. Prog. Phys.*, **42**, 1241(1979).
- [130] Berlinsky, A. J., *Contem. Phys.*, **17**, 331(1976).
- [131] Heger, G., Renker, B., Deiseroth, H. J., Schulz, H. and Scheiber, G., *Mat. Res. Bull.*, **10**, 217(1975).
- [132] Minot, M. J. and Perlstein, J. H., *Phys. Rev. Lett.*, **26**, 371(1971).
- [133] Zeller, H. R. and Beck, A., *J. Phys. Chem. Solids*, **35**, 77(1974).
- [134] Comès, R., Lambert, M., Launois, H. and Zeller, H. R., *Phys. Rev.*, **B8**, 571 (1973).
- [135] Renker, B., Rietschel, H., Pintschovius, L., Gläser, W., Brüesch, P., Kuse, D. and Rice, M. J., *Phys. Rev. Lett.*, **30**, 1144(1973).
- [136] Kistenmacher, T. J., *Solid State Comm.*, **19**, 319(1976).
- [137] Stenad, S., *Phys. Rev.*, **B13**, 2254(1976).
- [138] Fröhlich, H., *Proc. Roy. Soc.*, **A228**, 296(1954).
- [139] Renker, B., *Phys. Rev. Lett.*, **30**, 1141(1973).
- [140] Möck, H. and et al, *Phys. Rev. Lett.*, **36**, 804, (1976).

- [141] Inkson, J., *Many-Body Theory of Solids*, Plenum Press (1984).
- [142] Berlinsky, A. J. and et al, *Solid State Comm.*, **15**, 795(1974).
- [143] Su, W. P., (苏武沛) Schrieffer, J. R. and Heger, A. J., *Phys. Rev.*, **B22**, 2099(1980).
- [144] Schrieffer, J. R., in *Highlights of Condensed-Matter Theory*, ed. by Bassani, F., Fumi, F. Tosi, M., North-Holland, 1985.
- [145] Disalvo, F. J., *Sur. Sci.*, **58**, 301(1976).
- [146] Bassani, F., Fumi, F. and Tosi, M. (ed), *Highlights of Condensed-Matter Theory*, North-Holland, Amsterdam (1985).
- [147] Kuper, C. G., *Proc. Roy. Soc.*, **A227**, 214(1955).
- [148] Bardeen, J., Cooper, L. N. and Schrieffer, J. R., *Phys. Rev.*, **106**, 162(1957).
- [149] Schuster, H. G. (ed), *One-Dimensional Conductors*, Springer-Berlin (1975).
- [150] Lee, P. A., Rice, T. M. and Anderson, P. W., *Solid State Comm.*, **14**, 703(1974).
- [151] Rice, M. J. and Strässler, *Solid State Comm.*, **13**, 1389(1973).
- [152] Horowitz, B., Gutfreund and Weger, M., *Phys. Rev.*, **B12**, 3174(1975).
- [153] Wang, Z., Wu, C. and Sun, X., *Chin. Phys. Lett.*, **2**, 141(1985).
- [154] Wilson, J. A., Disalvo, F. J. and Mahajam, S., *Adv. Phys.*, **24**, 117(1975).
- [155] Chan, S. K. and Heine, V., *J. Phys. F: Metal Phys.*, **3**, 795(1973).
- [156] Tosatti, E., in *Modern Trends in the Theory of Condensed Matter*, ed. by Pe-kalski, A., and Przytawka, J., Springer-Verlag (1980).
- [157] Rao, C. N. R. and Rao, K. J., *Phase Transitions in Solids*, McGraw-Hill (1978).
- [158] Zallen, R., *The Physics of Amorphous Solids*, John Wiley & Sons (1983).
- [159] 方俊鑫、陆栋, 固体物理学, 上册, 上海科学出版社(1981).
- [160] Adler, D., in *Handbook on Semiconductors*, **I**, ed. by Paul, W., North-Holland, Amsterdam (1982).
- [161] Adler, D., *Rev. Mod. Phys.*, **40**, 714(1968).
- [162] Mott, M. F., *Proc. Phys. Soc.*, **A62**, 416(1949).
- [163] Hubbard, J., *Proc. Roy. Soc.*, **A276**, 238(1963).
- [164] Hubbard, J., *Proc. Roy. Soc.*, **A277**, 237(1964).
- [165] Hubbard, J., *Proc. Roy. Soc.*, **A281**, 401(1964).
- [166] Metz, W. D., *Science*, **180**, 398(1973).
- [167] Mott, N. F. and Davies, E. A., *Electronic Processes in Non-crystalline Materials*, Clarendon, Oxford (1971).
- [168] Ziman, J. M., *Models of Disorder*, Cambridge (1979).
- [169] Brodsky, M. H., (ed), *Amorphous Semiconductors* Springer-Verlag (1979).
- [170] Böttger, H., *Principles of the Theory of Lattice Dynamics*, Akademie-Verlag (1983).
- [171] Güntherodt, H.-J. and Beck, H. (ed.), *Glassy Metals I*, Springer, Berlin, (1981).
- [172] Beck, H. and Güntherodt, H. J. (ed.), *Glassy Metals II*, Springer-Berlin (1983).
- [173] Mott, N. F., *Proc. Roy. Soc.*, **A 345**, 169(1975).
- [174] Abrahams, E., Anderson, P. W., Licciadello, D. C. and Ramakrishnan, T. V., *Phys. Rev. Lett.*, **42**, 673(1979).
- [175] Weaire, D. and Srivastava, V., *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **10**, 4309(1977).
- [176] Mott, N. F., *Adv. Phys.*, **16**, 49(1967).

- [177] Mott, N. F., *Phil. Mag.*, **17**, 1259(1968).
- [178] Cohen, M. H., Fritzsche, H. and Ovshinky, S. R., *Phys. Rev. Lett.*, **22**, 1063 (1969).
- [179] Deutscher, G., Zallen, R. and Alder, J. (ed.), *Percolation Structure and Processes*, Adam Hilger, London (1983).
- [180] Efros, A. L. and Pollak, M. (ed.), *Electron-Electron Interactions in Disordered Systems*, North-Holland, Amsterdam (1985).
- [181] Rosenbaum, T. F., Andres, K., Thomas, G. A. and Bhatt, R. N., *Phys. Rev. Lett.*, **45**, 1723 (1980).
- [182] Adler, D., in *Solid State Physics*, **21**, ed. by Seitz, F., Turnbull, D. and Ehrenreich, H., Academic Press, New York 1(1968).
- [183] Goodenough, J. B., *Prog. Solid State Chem.*, **5**, 145(1971).
- [184] Bednorz, J. G. and Müller, K. A. *Z. Phys* **B64**, 189(1986).
- [185] Zhao, Z. X. (赵忠贤) and et al., *Kexue Tongbao*, **32**, 661(1987) (In English).
- [186] Chu, C. W. (朱经武) et al., *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 405(1987).

人 名 索 引

二 至 三 画

八木 T. Yagi 426
于渌 5,305
马上庚 S.K.Ma 6,305
马丁 J.W.Martin 180
小林 K.K.Kobayashi 402

四 画

丹尼尔 V. Daniel 188
贝克 R. Becker 2,111
贝茵 E.C.Bain 3,20
贝特 H.A.Bethe 303,323
夫兰克 F.C.Frank 2,149
夫伦克耳 Я. И. Френкель 2
夫里德耳 J. Friedel 472
夫留里希 H. Fröhlich 304,479
瓦达万 V.K.Wadhawan 5
瓦尼尔 G.H. Wannier 315,447
瓦尔玛 G.M.Varma 425
瓦格纳 C.Wagner 112,170
巴克斯脱 R.J. Baxter 306
巴什 G.R. Barsch 84
中谷 U.Nakaya 221
厄任费斯特 P.Ehrenfest 8
切尔诺夫脱 A. A. Чернов 257

五 画

布喇格 W.L.Bragg 302
布林斯 R. Blinc 4,305
布洛赫 F. Bloch 44,178

布尔旦 M.H. Butten 274
布厄格 M.J. Bueger 14
布鲁斯 A.D.Bruce 4
布拉德莱 A.J. Bradley 188
卡恩 J.W.Cahn 2,132,234
卡恩 R.W. Cahn 113
卡丹诺夫 L.Kadanoff 303,355
皮帕德 A.B.Pippard 12
外斯 P. Weiss 3
永泽耿 A. Nagasawa 432
史密斯 S.Smith 161
古斯特 W.Gust 166
古德伊纳夫 J.B.Goodenough 522
尼古尔斯 F.A.Nichols 175
约翰逊 W.A.Johnson 180,182
龙德曼 K.B.Rundman 201

六 画

伍法岳 305
西山 403
吉尔斯 N.S. Gills 403
吉布斯 J.W. Gibbs 2,31,112
托马斯 G. Thomas 202
托马斯 H. Thomas 425
考莱 R.A. Cowley 4,375
伊辛 E.Ising 302
安德森 P.W. Anderson 4,304,498
多尔蒂 R.D. Doherty 180
多纳 B. Dorner 378
米尔斯 D.L. Mills 400
伍尔曼 D.R. Uhlmann 186
伍蒂格 M. Wuttig 433
亨特 J.D. Hunt 274,285

亚历山大 S. Alexander 102
 纪尼埃 A. Guinier 123
 迈尔 R.F.Mehl 2,180
 则尼克 F. Zernicke 67

七 画

克喇末 H.A. Kramers 315,327
 克纳勃 P.L. Clapp 430,432
 克鲁姆汉斯尔 J.A. Krumhansl 84
 克里斯青 J.W. Christian 4,222
 克莱因 H. Cline 175,285
 苏武沛 W.P. Su 487
 希拉特 M. Hillert 2,112,155
 希利阿德 J.E. Hilliard 137,188
 库兹 W. Kurz 274
 库尔久莫夫 Г.В. Курдюмов 5,25
 库克 H. E.Cook 135,204
 麦克塔格 J.P. McTague 102
 伯格 W.F. Berg 267
 伯格斯 W.G. Burgers 25
 利文斯顿 J.D. Livingston 173
 利普森 H. Lipson 188
 阿朗森 H.I. Aaronson 113
 阿德尔 A.J. Adell 171,172
 阿什比 M.F. Ashby 179
 阿弗拉密 M. Avrami 180
 阿什金 J. Ashkin 333
 阿布拉汉 F.F. Abraham 142
 纳巴罗 F.R.N.Nabarro 122
 里旦 R.H. Lyddane 368
 沃特 C.Wert 152
 李 J.K. Lee 122
 杜林 W. Döring 111

八 画

拉什布鲁克 G.S. Rushbrooke 344
 拉马克里什南 T. V. Ramakrishnan 107

拉奥 C.N.R.Rho, K.J.Rho 4
 范德默夫 J.H. Van der Merwe 120
 范德瓦耳斯 J.D. Van der Waals 306

范因 C. Van 337
 昂萨格 L. Onsager 302,306
 坦布尔 D. Turnbull 111,135
 杨 H.A. Jahn 304,452
 金森顺次郎 J. Kanamori 456
 明斯脱 A. Münster 305
 杰克逊 K.A. Jackson 285
 杰姆金 E. TemkNH 261,262
 波茨 R.B. Potts 307
 法尔克 H. Falk 95,79
 法因 M.E. Fine 4
 刻卜勒 J. Kepler 221
 居里 P. Curie 3
 勃顿 J.A. Burton 228
 泽克斯 B. Zeks 4,305
 佩尔斯 R.E. Peirls 304,472
 奈尔 L. Néel 44
 金兹堡 Б.Л. Гинзбург 62
 罗素 K. C. Russell 119
 罗埃 R. Roy 40
 庞德 G.M. Pound 138,142

九 画

威尔逊 K.G. Wilson 4,306
 威廉斯 E.J. Williams 302
 威登 T.A. Witten 223,291
 拜罗 G. Büro 158
 玻恩 M. Born 303
 郝柏林 5,305
 莱戈斯 F.K. LeGoues 125,139
 哈尔勃林 B.I. Halperin 425
 哈拉特利科夫 И.М. Халатников 313,372
 哈姆 F.S. Ham 152,155
 哈斯廷斯 J.B. Hastings 427

哈恰图良 A.Г. Хачатурян 4, 29.

哈森 P. Haasen 113

查斯 C. Chase 215

查尔默斯 B. Chalmers 3, 222

查卡拉科斯 T. Tsakalacos 201

施密特 H. Schmidt 426

施瓦博 H. Schwabl 426

施里弗尔 J. R. Schrieffer 413

施纳德尔 T. Schneider 419

科克伦 W. Cochran 4, 305

科坦斯 E. Courtens 427

科恩 W. Kohn 447, 479

柯亨 M. Cohen 135, 136

柯柏 C. G. Kuper 491

柯耳莫戈罗夫 A. Н. Колмогоров 2

费休 J. C. Fisher 111

费休 J. D. Fisher 274

柏克 P. Bak 103

十 画

哥根哈姆 E. A. Guggenheim 349

朗道 Л. Д. Ландау 3, 42, 372

朗格 J. S. Langer 201, 237

特勒 E. Teller 304, 452

特里维迪 R. Trivedi 157, 274

铃木 T. Suzuki 433

桑德 L. M. Sander 223, 291

莫拉尔 J. E. Morral 179

莫特 N. F. Mott 305, 481

莫林斯 M. M. Mullins 3, 222

栗夫雪兹 E. M. Лифшиц 59, 503

栗夫雪兹 L. M. Lifshitz 111,

170

格林伍德 G. W. Greenwood 168

格林 H. Grimm 378

格利克曼 M. E. Glicksman 222, 225

格罗尔德 V. Gerold 123

格赖特 H. Gleiter 158

爱伦 S. M. Allen 80

十 一 画

寇勒 T. R. Koehler 403

维格纳 E. P. Wigner 304, 509

维赛克 T. Vicsek 297

维莱特 L. Verlet 107

勒斯特 T. Riste 409

曼德尔布罗特 B. B. Mandelbrot
291

傅里叶 J. B. Fourier 221

培刻 M. Baker 225, 234

萨克斯 Sachs 25

萨拜斯瓦迈 K. R. Subbaswamy
400

萨穆尔森 E. J. Samuelson 407

曾纳 C. Zener 2, 39, 166

琼斯 G. J. Jones 159

十二 画

黄昆 303

斯坦莱 H. E. Stanley 5

斯科特 J. F. Scott 375

斯里沃佐夫 V. V. Slyozov 111,
170

斯坦曼斯维克 S. Stamanhovic 404

斯托尔 E. Stoll 419

斯忒藩 J. Stefan 222, 223

普赖斯顿 G. D. Preston 123

蒲凡 W. G. Pfann 230

蒂勒 W. A. Tiller 232

塔曼 G. Tammann 2

十三 画

塞格 A. Seeger 267

塞尔多维奇 J. B. Zeldovich 118.

塞克卡 R. F. Sekerka 3, 261

奥特纳斯 K. Otmes 409

奥布里 S. Aubry 403, 418
 奥恩斯坦 L. S. Ornstein 67
 奥尔森 G. B. Olson 136
 豪洛蒙 J. H. Holomon 135
 楞次 W. Lenz 302
 瑞利 L. Rayleigh 175
 谬勒-克鲁姆哈尔 H. Muller-Krūm-
 bhaar 222, 237

十四画以上

赫克 K. H. Höck 425
 赫伯德 J. Hubbard 504
 福塞克 J. Fousek 88
 德丰泰纳 D. de Fontaine 199, 204
 德让 P. G. de Gennes 54
 德冯谢亚 A. F. Devonshire 50, 52
 德尔夫斯 R. T. Delves 253
 喇曼 C. V. Raman 3, 369

内 容 索 引

一 画

- 一级相变 3, 8, 11
- 一维导体 472, 477, 488
- 一维周期晶格 473, 484
- 一维伊辛模型 307—313
 - ~的本征值问题 310
 - ~的磁化强度 311
 - ~的比热 312
 - ~的最近邻相互作用 313
 - ~的长程相互作用 335

二 画

- 二级相变 3, 8, 469
- 二维成核 39, 149
- 二维伊辛模型 313—327
 - ~的梅逸图 317
 - ~的本征值问题 313
 - ~的高温展开 316
 - ~的低温展开 318
 - ~的严格解 319—327
 - ~的内能 325
 - ~的比热 326
 - ~的序参量 327

三 画

- 三维伊辛模型 325—336
 - ~的高温展开 328
 - ~的低温展开 328
 - ~的布喇格-威廉姆斯近似 329
- 广义齐次函数 350

马氏体 20

马氏体型相变

- ~的晶体学 19—25
- ~的成核 134—136
- ~的局域软模理论 430
- ~的晶格动力学理论 427—436
- ~的预相变软模理论 432
- ~的朗道理论 93—98

四 画

- 元激发 437, 492
- 无公度相 89, 341
- 无序系统 509
- 无分凝凝固 234—236
- 无限维模型 335
- 瓦尼尔表象 446
- 乌耳夫法则 120, 265
- 不动点 360
- 不连续相变 11
- 反相态 339
- 反应前沿 161
- 反常共晶 283, 284
- 匀相转变 31, 188—216
- 幻想核 181
- 化学势 237, 238
- 分形结构 223
- 分形生长 291—299
- 分形生长判据 296
- 气相 150
- 公度-无公度相变 89, 493
- 贝茵对应关系 20
- 贝茵应变 20, 37, 431
- 贝特点阵 332

贝特近似 330
厄任费斯脱关系式 8

五 画

电子-晶格相互作用 400,437
电子-声子相互作用 441
电荷密度波 487,496
布洛赫表象 446,501
布洛赫转变 498
平均场理论 447,494
平均场近似 462
四方锆石结构 467
立方 CsCl 结构 30,468
石英 13,14
孕育时间 119
生长 144—166
生长螺旋 149
台阶机制 159
矢量波茨模型 (Zn 模型) 337
失稳分解 2,31,112
失稳有序化 34,35
失配度 193
卡恩-希利阿德方程 195,200
边缘稳定性判据 222,262
区域熔化 230
正常共晶 283
艾登模型 295,296
皮帕德关系式 14
对称破缺 42
对偶点阵 319
对应态原理 96

六 画

成核 114—144
成核功 117
成分无序 509
吉布斯-汤姆逊参量 250
吉布斯-汤姆逊关系 239

吉布斯-汤姆逊定理 150
约翰孙-迈尔-阿弗拉密 (JMA) 方程
180—184

长程序 509
长程扩散控制型生长 152—157
共格畸变 193,197
共格畸变能 193,197
共析分解 161
共格亚稳-失稳界限 196
共晶凝固 283—291
扩展体积 181,280
扩散限制的聚集 (DLA) 模型
223,291—299

亚稳-失稳界限 188,196
亚稳相 35,36
弛豫时间 214
有序畴 211
有序无序相变 25—27
有序无序相变的朗道判据 74
有序无序型结构相变 26—27
~的模型哈密顿 389
~的静态性质 393
~的动态性质 396
~的软模频率-温度曲线 399
~的点阵动力学计算 400
~的相稳定性 398

多型性 341
多相点 342
多粒子系统薛定谔方程 437
多粒子聚集 295
合作杨-特勒效应 454
伊辛哈密顿 462
关联长度 69,359
尖晶石结构 467
自对偶点阵 319
自旋密度波 489
安德森转变 509,519,524
迁移率边缘 516
传热模型 238
传质模型 238

西山关系 25
西尔宾斯基箭头 294
光滑界面生长 148, 149
纪尼埃-普赖斯顿区 123

七 画

应变模 464
位移型相变 15—19, 27—30
位移型结构相变 15—19, 368—389
 ~的模型哈密顿 380
 ~的平衡性质 381
 ~的动态性质 384
 ~的相稳定性 386
 ~的软模频率-温度曲线 388
局域态 514
沉淀反应 161
沉淀相的生长 152
亨利定律 115
均匀成核 116—119
邻位面 39
时间-温度-转变 (TTT) 图
 183—187
序参量 42, 72, 104
序参量的弛豫 273—216
连续相变 11
连续性条件 238
连续相变的朗道判据 59
伯格效应 267
库尔久莫夫-萨克斯型 25
库兹-费休的简化的边缘稳定性理论
 274
形态稳定性动力学理论 237—253
克拉珀龙-克劳修斯关系式 11
低熵相 283

八 画

规则固溶体 139
凯莱树 330

非均匀成核 128—134
非均匀连续介质模型 137
非晶态金属 509
非自对偶点阵 319
佩尔斯相变 472—496
佩尔斯失稳 472
奇异面 148
拓扑缺陷 178, 179
拓扑无序 509
组分调制 188
组分过冷 2, 230—233
组分过冷判据 222, 232
软模的一般理论 368—376
软模的热力学理论 371
软模的科克伦理论 372
软模的非谐的点阵动力学理论 375
软模本征矢 376—379
枝晶生长 254—270
波茨模型 336
定向凝固 226
阿什金-特勒模型 337
金属-非金属转变 306, 497—526
固相线 226
范德瓦耳斯方程 2, 96
林德曼方程 106
居里原理 84
金兹堡-朗道方程 62
空间群 56, 84
杨-特勒效应 452—471
杨-特勒离子 454
杨-特勒定理 452

九 画

绝热近似 437, 453
哈特里-福克近似 440, 488
标度律 351
标度假设 353
科恩反常 447
结构相变 437, 398—427

~的混合特征 402
 ~的统一理论 402—408
 欧拉-拉格朗日条件 138
 轴向次近邻伊辛模型(ANNI 模型)
 338—341
 钙钛矿结构 16,370
 胚芽 114
 相位子 492
 相变驱动力 114—116
 流向图 360
 重构型相变 14
 重正化群 358—367
 重正化变换 360
 临界指数 342—351
 ~的定义 342
 ~的理论值 348
 ~的实验结果 350
 临界核心 117,118
 临界乳光 2
 临界变慢 213
 弥散界面 137
 界面稳定性 221
 界面绝对稳定性判据 252
 界面控制型生长 144—150
 界面失稳的线性动力学理论
 237—253
 界面响应函数 225
 界面形态失稳 237
 界面形态失稳判据 242
 胞区分解 161
 胞区沉淀 161
 胞区粗化 172
 逆扩散 190,238
 准周期结构 89,106
 夏耳方程 230
 复相合金的界面形态 282—290

十 画

核心 114

珠光体 162
 铁电体 72
 铁磁体 72
 铁弹体 72
 铁素体 164
 铁畸变 455
 铁弹相变 72,73
 铁电相变 70—73
 铁磁相变 70—73
 离散格点模型 112,139,204
 调制结构 188,340
 倒易关系 320
 莫特转变 501
 莫特-安德森转变 518
 朗道理论 3,42—107
 朗道-栗夫雪兹条件 73,74
 朗道-德让理论 54,55
 朗道-德冯谢亚理论 50—55,95
 格子系统 308
 格兰宁-特罗依诺型 25
 栗夫雪兹点 339
 栗夫雪兹不变式 61
 栗夫雪兹条件 62
 诺埃曼原理 70
 能带理论 440
 能带杨-特勒效应 457,467
 振幅子 492
 振动-电子模式 454
 钨青铜结构 523
 热传导 238
 热力学势 617
 热力学函数 6—8
 球形界面的失稳判据 247
 原位复合材料 283
 高熵相 283
 高级相变 8

十一 画

密度响应 447

密度涨落关联函数 344
 弹性常数 464
 弹道式聚集 295
 蒙特卡罗方法 141
 普适性 351, 357
 粗化 166—179
 惯态面 22, 25
 雪花 221, 298
 康托尔杆 293
 集团波 423
 维莱特判据 107
 液相线 226
 脱溶固溶体的失稳分解 2, 188
 旋节点(线) 36, 52, 430
 曾纳-希拉特方程 157

十二画

超晶格 341
 短程序 510
 晶核 120, 140
 晶界成核 131
 奥氏体 162
 奥斯瓦尔德熟化 167
 梯度能 205
 梯度能系数 205
 斯忒藩问题 221, 226
 最大生长速率假设 222
 最小自由能递减率“原则” 222
 最小熵增长率“原则” 222
 普遍沉淀(连续沉淀) 40
 彭罗斯拼砌 103

十三画

瑞利-贝纳对流 2, 222
 瑞利失稳 175
 溶质分凝 224, 236
 溶质分布系数 225
 溶质拘陷 234

银轧退火 224
 豪斯道夫维数 \square 293
 新相的成核 2, 114
 塞尔多维奇因子 118
 叠套 496

十四画

熔化熵 283
 稳定相 35, 36
 稳态成核率 118
 聚乙炔 476, 487
 赫伯德模型 504

十五画

增幅因子 195, 209
 潜热 9
 横伊辛模型 463
 腹自旋 30, 389

十六画

激光退火 224
 激活能 165

十六画以上

魏氏组织 270
 螺型位错 149
 魔梯 340

希腊字母

α - β 相变 16, 18
 β - ω 相变 18, 21
 β CuZn 75, 77
 β Gd₂(MO₄)₃ 88
 λ 相变 11
 λ 点 11

拉丁字母

AgCd 75
 $\text{Ag}_2\text{H}_2\text{IO}_6$ 82
 Al-Cu 合金 122
 Al_3Ti 79
 ANNNI 模型 338—341
 AuCu 78
 AuCu_3 78, 82
 BaMnF_4 89
 $\text{Ba}_2\text{NaNb}_2\text{O}_{11}$ 89
 BaTiO_3 39, 382.
 $\text{Bi}_2\text{Ti}_2\text{O}_{11}$ 82
 Ce 82
 CsCl 29, 198, 468
 $\text{CsH}_2(\text{ScO}_3)_2$ 82
 Cu-Co 合金 125
 CuPt 78
 DyVO_4 463
 FeAl 80
 Fe_2Al 76, 80
 Fe-C 合金 25
 Fe-Cr-C 合金 25
 Fe-Ni 合金 25
 FeO 82
 In-Tl 合金 25
 GP 区 123
 GPI 区 123
 GPII 区 123
 KCN 27, 82
 KCP 476
 KDP 25
 KH_2AsO_4 82
 KH_2PO_4 25
 $\text{KH}_2(\text{ScO}_3)_2$ 83, 427

KMnF_6 409, 410
 KNbO_3 17, 86, 88
 KScO_4 89
 $\text{KTa}_{0.6}\text{Nb}_{0.4}\text{O}_3$ 25
 Mg_2Cd 82
 $(\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x)_2\text{CuO}_4$ 525
 LaCoO_3 82
 Mn_2O_3 82
 LiNbO_3 82
 LiTaO_3 304, 368
 LST 关系 304 368
 NaN_3 85
 NaNO_2 89
 NaNO_3 82
 Na_2WO_4 524
 NH_4Cl 89
 NH_4BeF_4 89
 NiCrO_2 82
 PrAlO_3 83
 RbAg_4I_5 84
 Rb_2CdCl_4 82
 Rb_2ZnCl_4 89
 ReO_3 523
 SbSI 82
 SmS 82
 $\text{Sr}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ 82
 SrTiO_3 17, 18, 410
 TbVO_4 469
 TeO_2 83
 TGS 82
 TmVO_4 459, 462
 TTF-TCNQ 447
 V_2S_5 82
 VO_2 82
 V_2O_5 520
 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ 525
 ZrO_2 25

凝聚态物理学丛书

主 编: 葛庭燧

副主编: 冯 端

执行编委: 李义发

已 出 版

张克从: 近代晶体学基础(上、下册)

戴道生、钱昆明: 铁磁学(上册)

钟文定: 铁磁学(中册)

廖绍彬: 铁磁学(下册)

方俊鑫、殷之文主编:

电介质物理学

谢毓章: 液晶物理学

冯端等: 金属物理学(第一卷, 第二卷)

杨顺华: 晶体位错理论基础(第一卷)

近 期 出 版

李名复: 半导体物理学

杨顺华: 晶体位错理论基础(第二卷)

冯端等: 金属物理学(第三卷)

马如璋、徐恩庭主编:

穆斯堡尔谱学

待出版(暂定)

周志刚、李景德、王永令:

铁电学

谢希德等: 表面物理学

葛庭燧: 固体内耗理论基础

王震西等: 非晶态物理学

冯端: 凝聚态物理学导论

凝聚态物理学丛书

主 编: 葛庭燧

副主编: 冯 端

执行编委: 李义发

已 出 版

张克从: 近代晶体学基础(上、下册)

戴道生、钱昆明: 铁磁学(上册)

钟文定: 铁磁学(中册)

廖绍彬: 铁磁学(下册)

方俊鑫、殷之文主编:

电介质物理学

谢毓章: 液晶物理学

冯端等: 金属物理学(第一卷, 第二卷)

杨顺华: 晶体位错理论基础(第一卷)

近 期 出 版

李名复: 半导体物理学

杨顺华: 晶体位错理论基础(第二卷)

冯端等: 金属物理学(第三卷)

马如璋、徐恩庭主编:

穆斯堡尔谱学

待出版(暂定)

周志刚、李景德、王永令:

铁电学

谢希德等: 表面物理学

葛庭燧: 固体内耗理论基础

王震西等: 非晶态物理学

冯端: 凝聚态物理学导论