高等固体物理 - 1

引言

Notes from P. Phillips (2012)

1 自发破缺的对称性

寻找有助于简化多体系统物理学的组织原理，是现代固体物理学或更广义的凝聚态物理学的核心。对称性就是这样一种工具。考虑量子力学的简单的置换对称性。这种对称性是 W. Heisenberg 在研究全同粒子的不可分辨性时引入量子力学的。置换群的元素数是有限的，因此与离散对称性相关联。通过置换对称可以将基本粒子分为两类。boson 在两个粒子互换时是偶对称，fermion 是奇对称。在分数量子 Hall 效应中，当两个粒子互换时，这种对称性可以推广到包含非整数相。

凝聚态系统中大多数相关的对称性是连续的，例如旋转对称性。连续对称性的自发破缺会产生根本性的结果。例如，声子在固体中的存在或自旋波在磁体中的存在都源于连续对称性的自发破缺。所谓自发，是指在不施加外场的情况下。晶体中离子的周期性排列会打破连续的平移和旋转对称性。由于晶格的存在，这种连续对称性的自发破缺必然伴随着无质量无自旋 boson 激发。这种无质量无自旋 boson 被称为 Nambu-Goldstone boson，它必然伴随着连续对称性的破缺。考虑一个系统，其 Lagrangian 为

$$\mathcal{L} = T - V(\phi) \tag{1}$$

由动能 T 和势能 $V(\phi)$ 组成，其中我们允许 ϕ 是复变函数。这样的系统在对称操作下是不变的，即

$$V(\phi) = V(\phi + \epsilon\delta\phi) \tag{2}$$

其中 $\epsilon\delta\phi$ 是对称操作的生成元。这里 ϵ 是一个无穷小量。我们暂时假定 $\delta\phi$ 与空间无关。为说明这一恒等式的含义，考虑一个形为 $V(\phi) = \epsilon_0 |\phi|^2$ 的势。这个势在 $\phi \to \phi e^{i\theta}$ 形式的变换下是不变的。令 θ 为一个完全独立于空间的小量。那么我们可以展开指数，只保留一阶项。因此，$\phi \to \phi(1 + i\theta)$，我们令 $\epsilon\delta\phi$ 恒等于 $i\theta\phi$；即 $\epsilon = \theta$ 和 $\delta\phi = i\phi$。这种对称性被称为 U(1)，存在于保持电荷守恒的模型中。将 $V(\phi)$ 展开到 ϵ 的线性阶意味着

$$\delta\phi \frac{\delta V}{\delta\phi} = 0 \tag{3}$$

假设对称性完好无损。现在明确假设对称性被打破，使得 $V \to V(\phi_0 + \chi)$，其中 ϕ_0 使势能最小，而 χ 不能写成如式 (2) 中的对称操作的生成元。由于势能有一个最小值，因此可以展开

$$V(\phi_0 + \chi) = V(\phi_0) + \frac{1}{2}\chi^2 \left.\frac{\partial^2 V}{\partial\phi^2}\right|_{\phi=\phi_0} = V(\phi_0) + \frac{1}{2}\chi^2 m^2 \tag{4}$$

在二阶时截断回复项。第二项可用于定义标准简谐展开中的质量 (m)，由于我们已围绕最小值展开，因此它本身是正半定的。有了这个方程，我们就可以将式 (3) 对 ϕ 求导

$$\frac{\partial\delta\phi}{\partial\phi}\frac{\delta V}{\delta\phi} + \delta\phi\frac{\partial^2 V}{\partial\phi^2} = 0 \tag{5}$$

第一个项在最小值处求值时为零，这意味着

$$\delta\phi \frac{\partial^2 V}{\partial\phi^2}\bigg|_{\phi=\phi_0} = 0 \tag{6}$$

在破缺对称状态下，对 ϕ 的任何变化上式都必须恒为零。由于 $\delta\phi$ 不为零，只有当二阶导数项为零或 $m^2 = 0$ 时，式 (6) 才成立。这就是 Goldstone 定理。连续破缺对称性的每个生成元都存在一个零模。由于该定理的存在，对称性在物理学的所有领域，尤其是粒子物理和凝聚态物理中占据了核心地位。通常，凝聚态物质系统中出现的无质量 boson 代表了整个多体系统的集体激发。在流体中，声子是纯粹的纵向声子，产生于 Galilean 不变性的自发破缺。在固体中，声子既是横向的，也是纵向的，但与 Galilean 对称性、平移对称性和旋转对称性的自发破缺并不简单对应。在磁体中，自旋波或磁子是自发破缺旋转对称性后产生的集体无能隙激发。

当然，我们可以放宽 θ 与空间无关的限制。这样就能了解在局部而非全局变换下会发生什么。尽管对势能的分析保持不变，但动能

$$T \to \frac{1}{2}\left(\partial_\mu\phi^*\right)\left(\partial^\mu\phi\right) + \frac{1}{2}\left|\phi\right|^2\left(\partial_\mu\theta\left(x\right)\right)^2 \tag{7}$$

确实获得了一个描述相位空间变化的新项。如果 U(1) 对称性没有被这一变换打破，那么第二个项就必须为零。要求

$$\partial_\mu\theta = 0 \tag{8}$$

需要 θ 在空间上是均匀的，这样才能保持对称性。因此，打破连续 U(1) 对称性的结果就是 θ 必须在空间上不均匀。这就是超导体中的情况。超导体内部的电流完全来自相位的空间变化，这从电流的量子力学方程可以看出

$$j_\mu = \frac{e\hbar}{m}\mathrm{Im}\psi^\dagger\partial_\mu\psi = \frac{e^*\hbar}{m}\left|\Delta\right|^2\partial_\mu\theta \tag{9}$$

这里我们把 ψ 解释为超导态的波函数，即 $\psi = \Delta \mathrm{e}^{i\theta}$。我们把 ψ 解释为超导态的序参量。虽然关于超导的 Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) 理论不是作为连续对称性被破缺的例子而提出的，但这却是该理论的基本原理。事实上，超导性的关键要素——电荷 $2e$ 的载流子和超流都源于 U(1) 对称性的破缺。

破缺对称性产生的无质量 boson 通常会产生意想不到的新物理学。例如，声子介导了电子之间的配对，从而推动了汞等金属以及 MgB_2 等更复杂系统中超导性的产生。然而，严格的规则决定了这种 Nambu-Goldstone boson 如何影响任何系统。Adler 指出，无质量 boson 因连续对称性破缺而引起的相互作用必须与转移的动量成正比。更正式地说，由 Nambu-Goldstone boson 交换介导的相互作用只能通过导数耦合获得。因此，当交换动量为零时，相互作用为零。因此，完全从晶格的存在出发，声子及其介导的相互作用类型可以很容易地推导出来。

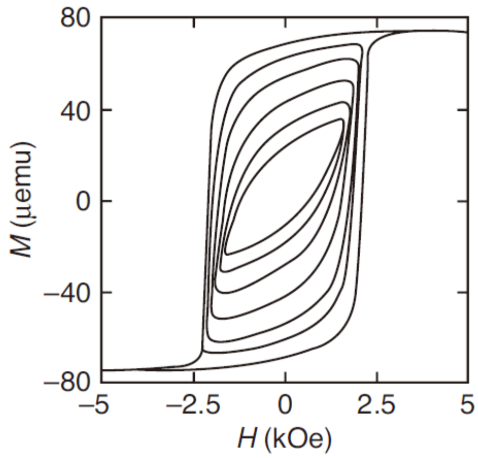

图 1: CoPtCrB 薄膜磁化随外磁场变化的磁滞回线。多层 Co/Pt 可用于内存存储。

2 追踪破缺的对称性：序参量

序参量的概念是凝聚态物理学中另一个强大的概念。序参量追踪破缺的对称性。在对称性被破缺的阶段，它们是非零的，反之则为零。考虑铁磁体。从局部来看，每个自旋可以沿任何方向指向。这是在对称性没有被破缺的高温下的情况。在由热涨落控制的相变中，通常是高温相具有更高的对称性。为了量化自旋集合的有序性，我们对每个自旋算符的 z 分量求和，

$$M = \frac{1}{N}\sum_i \langle S_i^z \rangle \tag{10}$$

与自旋数 N 成比例。这里 S_i^z 是原子在第 i 位点上的自旋 z 分量，角括号表示系统各状态的热平均值。M 是磁化。在任何对称性被破坏之前的高温下，磁化完全为零。在足够低的温度下，自旋有序，磁化获得非零值。考虑 Curie 温度或有序温度为 1340K 的铁。之所以会出现这种情况，是因为磁化一般是空间的函数。因此，铁的一块不会均匀地破坏对称性。事实上，块状磁体的实际磁化并不是自发获得的，而是通过某种外部手段使所有独立的磁畴对齐。在磁畴的边界，磁化会改变符号，形成磁畴壁。铁的典型磁畴大小约为 300 个离子。将一大块铁置于磁场中，所有磁畴都会朝同一方向定向，这种状态在磁场关闭后会持续很长时间。这一点非常重要，因为重新定向的畴状态并不构成系统的最小能量状态。磁畴通过缺陷钉扎而锁定。因此，当磁化场发生变化时，磁化率不会连续变化，而是会随着畴壁从缺陷处退钉扎而发生不连续的跃变。这就是 Barkhaussen 效应的实质，即磁化在外磁场作用下产生的微小不连续跃变，也是铁磁体磁化曲线呈现磁滞现象的最终原因。场的抬升与降低与路径有关，取决于哪个磁畴先后退钉扎。

磁性系统的关键在于，每个自旋在局部都有两个自由度。在高温条件下，两种状态都可以进入。在足够低的温度下，其中一种自旋状态被选择。这种状态选择性可以用双阱势来模拟，其形式为

$$V(M) = -\frac{1}{2}\alpha M^2 + \frac{1}{4}\gamma M^4 \tag{11}$$

其中 M 为磁化，α 和 γ 为正值。该势能的最小值出现在

$$M_{\pm} = \pm\sqrt{\frac{\alpha}{\gamma}} \tag{12}$$

这两个最小值在高温下都可以达到，而且不可能磁化。我们选择 $\alpha > 0$，以确保 M 偏离 $M_{\pm}$ 会耗费能量。因此，V 的最小能量不是零，而是 $V_0 = -\alpha^2/4\gamma$ 的非零值。因此，我们的理论对于 $M \to -M$ 的变化是完全对称的。当然，如果我们通过将标量场 M 移动一个常数，使 $M \to M_+ + \phi(x)$，来重新构建理论，物理学原理也不会改变。新的势

$$V' = V_0 + \left(-\frac{1}{2}\alpha + \frac{3}{2}\gamma M_+^2\right)\phi^2 + \gamma M_+ \phi^3 + \frac{1}{4}\gamma\phi^4 \tag{13}$$

不再对称。这是因为我们围绕 V 的一个极小值展开，就是为了隐藏对称性。从本质上讲，我们通过将磁化设置为 M_+ 打破了对称性。在对称性被打破的阶段，上下自旋不再等同。磁场 M 的作用是测量磁序。M 是序参量。与 M 的非零值使旧势能最小化不同，V' 的最小值发生在 $\phi(x) = 0$ 处。在铁磁体的经典模型中，在非零温度 T_c 下，磁化是连续开启的

$$M \propto |T - T_{\mathrm{c}}|^{\alpha} \tag{14}$$

它在 $T = 0$ 时获得最大值。指数 α 是序参量开启的临界指数。

当修改势能时，会出现一个稍微复杂一点的对称性被破缺的例子，

$$V(\varphi) = -\alpha\varphi^*\varphi + \gamma(\varphi^*\varphi)^2 \tag{15}$$

以允许复标量场 $\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 + \mathrm{i}\varphi_2)$ 的存在。相应的 Lagrangian 形式为

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\partial_\mu\varphi^*)(\partial^\mu\varphi) - \left(\alpha\varphi^*\varphi + \gamma(\varphi^*\varphi)^2\right) \tag{16}$$

Lagrangian 具有全局对称性 $\varphi \to \varphi e^{\mathrm{i}\theta}$，其中 θ 是一个常数。由于这种对称性，V 的最小值呈现出一个满足 $\varphi_1^2 + \varphi_2^2 = \alpha/\gamma$ 值的圆。由于连续的全局对称性，存在无限多个鞍点。与磁化的单标量场一样，可以通过定义 $\varphi = \left(\sqrt{\frac{\alpha}{\gamma}} + f(x) + \mathrm{i}g(x)\right)$ 来展开圆周处的极值。也就是说，我们手动打破了对称性。由于在最小值点，φ_1 和 φ_2 并不独立，因此这种变换并不是对 φ_1 和 φ_2 分别进行简单的平移。因此，二次项基本上只有一个自由度。可以把这解释为其中一个标量场的质量为零，这与 Goldstone 定理是一致的，即在连续对称性被打破时，一定会出现一个无质量模式。这种复数场获得非零值的解就是超导相变的核心。Bardeen-Cooper-Schrieffer 解清楚地表明，以在超导态中获得非零值的复序参量为基础的 Landau-Ginzburg 现象学处理方法，在电子-声子相互作用中具有微观基础。这种相互作用介导配对，超导态的序参量是配对形成的振幅与 $e^{\mathrm{i}\theta(r)}$ 的乘积，其中 θ 是配对场的相位。

低温相通常具有较低的对称性，这只是经典的说法。在 $T = 0$ 时，有许多对称性破缺的例子与热涨落无关。这种相变受真空涨落的支配，即不确定性原理。一般来说，这

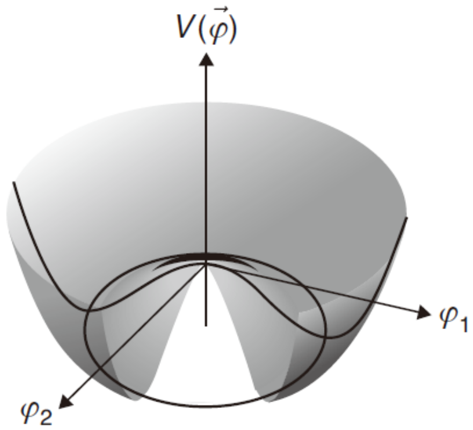

图 2: 与复标量场 φ 相对应的势。最小值对应于满足 $\varphi_1^2+\varphi_2^2=\alpha/\gamma$ 的圆。

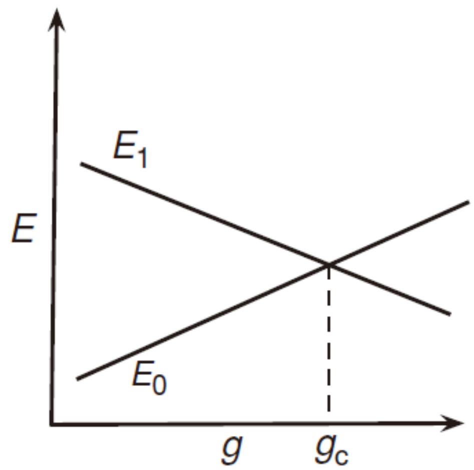

图 3: 基态 E_0 和第一激发态 E_1 的能级图与耦合常数 g 的函数关系。g_c 处的交叉标志着基态和第一激发态之间的相变。

种相变是由多体系统的量子力学状态之间的转变所决定的，只需改变系统的某些参数即可。考虑一个哈密顿 $H(g)$，其中 g 是耦合常数。作为 g 的函数，如果第一激发态和基态发生交叉，那么就会发生向第一激发态的相变。要使相变连续必须使 $\partial E/\partial g=0$。

3 破缺的对称性之外

尽管对称性在对集体现象进行分类方面很有用，但物理学中却不乏物质状态之间发生相变的例子，这些相变具有相同的对称性，但却截然不同。一个明显的例子就是液-气相变或分数量子 Hall 态的形成。然而在这里重点讨论的强耦合物理学的典例，是那些以某种束缚态的形成为显著特征的例子。例如橡胶的硫化或交叉链接相变。在未硫化状态下，橡胶是一种粘性液体，其中的长链单体可独立运动。相邻单体之间发生交联，形成高度纠缠的无定形状态，这就是硫化相变。虽然单体在硫化状态下是局部的，但它们是随机分布的。因此，没有 Bragg 峰。不过，我们可以定义一个合适的序参量，它反映

了在 $t=0$ 和 $t=\infty$ 时，液体中单体链的构型会发生变化，而在无定形状态下基本上是静态的。由此产生的橡胶回弹性和新出现的静态模量都源于单体的有效胶合。在高能物理中，介子或夸克的束缚态是原子核低能时的传播自由度。它们的产生不破坏任何连续对称性。非磁性宿主中的磁性杂质在低于特征温度时与所有传导电子形成束缚态，同样不会破坏任何对称性，甚至不会引起相变。这种束缚态的形成是 Kondo 问题的实质，而 Kondo 问题是重正化群原理的重要成果之一。束缚态的出现是因为杂质与主电子之间的耦合常数发散了。因此，在低温条件下，将磁性电子自由度和传导电子自由度分开考虑是不正确的。在低能时会出现一个新的实体，而这个实体在起始的紫外完备 Lagrangian 中是不存在的，这是强耦合系统的一个特征。虽然在强耦合时出现了在弱耦合或高温体系中不存在的新自由度，但这两种状态仍然是绝热连接的，即通过改变系统参数，可以顺利地从一个阶段进入另一个阶段。然而这两个相位是截然不同的。它们拥有不同的自由度，因此无法用单一实体来统一描述此类系统。束缚态形成是强耦合物理学的标准范式，Mott 问题（部分填充带中的绝缘态）也不例外。

另一个重要的例子是 Fermi 液体理论。该理论的主要原理是，金属的激发态与非相互作用电子气的激发态一一对应。金属中的相互作用当然是非零的。不过，它们被强烈屏蔽，基本上可以被视为短程。Landau 断言，所有这些短程斥力相互作用不会破坏非相互作用电子气中电子激发的尖锐性。金属中可以忽略短程相互作用原因在于基本重正化原理。解决任何多体问题的关键在于确定传播自由度。在相互作用的电子气中，确定传播自由度为色散 $p^2/2m$ 的单个电子是非常困难的。事实上，这无法直接从 Hamiltonian 中推导出来。还需要一些进一步的事实。这个进一步的事实就是 Fermi 的存在。Fermi 液体理论的基本原理是 Fermi 面对短程斥力相互作用具有显著的弹性。由这种相互作用引起的所有重正化都是朝向费米面的。因此，这种相互作用可以被有效地整合掉，只留下缀饰的电子或准粒子，从而证明 Landau 的关键信条是正确的，即金属的低能电子激发谱与非相互作用费米气体的低能电子激发谱是相同的。因此，在大于或等于两个维度上打破 Fermi 液体理论是众所周知的困难。在一个空间维度中，相互作用总是相关的，于是出现了一种新的物态，称为 Luttinger 液体，其中自旋和电荷以不同的速度运动。在更高的维度中，这个问题仍未解决，是固体物理学中的关键难题。

Fermi 液体理论之所以能够使超导态的 BCS 理论成为可能，是因为它明确地指出了传播的自由度。而要想知道氧化铜高温超导体中是什么配对形成了超导凝聚态，就必须对正常态中的传播自由度进行类似的鉴定。由于母体材料都是反铁磁 Mott 绝缘体，因此这个问题尤其困难。