

科研反哺教学的固体物理学课程教学改革与实践

陈明星¹ 欧阳方平²

(¹ 湖南师范大学物理与电子科学学院, 湖南 长沙 410081;

² 中南大学物理与电子科学学院, 湖南 长沙 410083)

摘要 固体物理学被认为是本科物理专业最难的课程之一,也是与凝聚态物理科研前沿联系最为密切的课程之一。近年来,凝聚态物理学发展迅猛,诞生了二维材料、拓扑绝缘体等一系列新的研究方向。本文总结了笔者结合自身经历将科学研究进展融入固体物理课程教学的若干尝试,包括引入晶体结构可视化软件,转角石墨烯结构的构建,石墨烯能带结构和能态密度,自旋-轨道耦合与 Rashba 效应以及热电效应和热电输运系数等,有效促进了学生对固体物理基本概念和计算方法的理解。

关键词 凝聚态物理; 固体物理; 科研反哺教学

REFORM AND EXPLORATION OF INTEGRATING RESEARCH INTO THE TEACHING OF SOLID STATE PHYSICS

CHEN Mingxing¹ OUYANG Fangping²

(¹ School of Physics and Electronics, Hunan Normal University, Changsha, Hunan 410081;

² School of Physics and Electronics, Central South University, Changsha, Hunan 410083)

Abstract Solid state physics is one of hardest undergraduate courses in physics, which is also closely connected with research frontier of condensed matter physics. There have been many advances in this field over the past years, e. g., two-dimensional materials and topological insulators. Here, we summarize attempts of integrating some advances in condensed matter physics into course teaching of solid state physics, including visualization tools of crystal structures, structural construction of twisted graphene bilayers, band structure and density of states of graphene, Rashba effect and thermoelectric effects. These attempts turn out to be effective in helping students understand basic concepts and computational methods in solid state physics.

Key words condensed matter physics; solid state physics; integrating research and teaching

2018年10月,教育部发布《关于加快建设高水平本科教育,全面提高人才培养能力的意见》文件,要求本科教育坚持学生中心,全面发展的原

则,既注重“教得好”,更注重“学得好”,激发学生学习兴趣和潜能,激励学生爱国、励志、求真、力行,增强学生的社会责任感、创新精神和实践能

收稿日期: 2022-03-28

基金项目: 教育部物理类专业教学指导委员会固体物理研究课题(JZW-21-GT-10),湖南省普通高等教育教学改革研究项目(HNJG-2022-0539, HNJG-2021-0015),湖南省研究生教学平台项目(HNJPSF202207)。

通讯作者: 陈明星,男,教授,主要从事固体物理教学和计算凝聚态物理研究工作, mxchen@hunnu.edu.cn; 欧阳方平,男,教授,主要从事电磁学、固体物理教学和纳米物理与二维材料领域的研究工作, oyfp@csu.edu.cn。

引文格式: 陈明星, 欧阳方平. 科研反哺教学的固体物理课程教学改革与实践[J]. 物理与工程, 2023, 33(3): 10-13, 20.

Cite this article: CHEN M X, OUYANG F P. Reform and exploration of integrating research into the teaching of solid state physics[J]. Physics and Engineering, 2023, 33(3): 10-13, 20. (in Chinese)

力。因此,教师应围绕激发学生学习兴趣和潜能进行教学改革,以“两性一度”(高阶性、创新性、挑战度)为标准进行课程建设,培养拔尖创新人才,服务国家的“双一流”建设。

凝聚态物理是随固体物理学不断发展而形成的物理学分支,也是当前物理学领域最为庞大的分支。因此,固体物理学是从事凝聚态物理科学研究的基础,是物理学专业本科核心课程。由于固体物理概念抽象,学科综合度较高,学生在学习该课程的过程中普感困难,容易出现畏学心理。

近年来,凝聚态物理学发展迅速,诞生了二维材料、铁基超导体、拓扑绝缘体以及双层转角体系等一系列新研究方向^[1-7]。及时将凝聚态物理前沿科研进展融入固体物理课程教学,不仅使学生了解学科前沿研究动态,增长知识见识,培养学生的兴趣,又能增强学生运用所学知识解决问题的能力,即实践能力,有利于培养学生的创新精神和创新能力。目前,已经有一些关于如何将凝聚态物理前沿研究进展转化为教学资源的研究。其中,二维材料石墨烯已经被同行广泛用于固体物理课程教学^[8-12]。近几年,笔者也结合自身研究经历积极将前沿研究进展融入到固体物理学课程教学,学生普遍表现出浓厚的兴趣,教学效果和反响较好。现将若干尝试总结如下。

1 晶体结构

1.1 科研软件作为教学工具

晶体结构是固体物理教学的重要内容。了解晶体结构是进一步研究晶体电子结构和物理性质的前提。因此固体物理教学大纲要求学生掌握描述晶体结构的数学方法。由于晶体结构较为抽象,不少学生在理解格点、晶面以及晶体点群等概念时存在困难。引入晶体结构可视化软件作为教学工具,有利于学生理解和掌握与晶体结构相关的概念。VESTA 是一款免费的晶体结构可视化软件,其操作简单,安装方便,已被凝聚态物理领域的科研人员广泛用于其科研之中。笔者在晶体结构相关的课程教学中借助 VESTA 演示晶体结构,并教授学生使用该软件研究晶体的结构性质,取得了良好的效果。图 1 给出了用 VESTA 显示的 BaTiO₃ 钙钛矿结构图。

除了晶体结构可视化之外,VESTA 还可以用

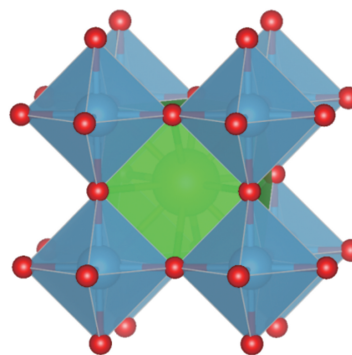
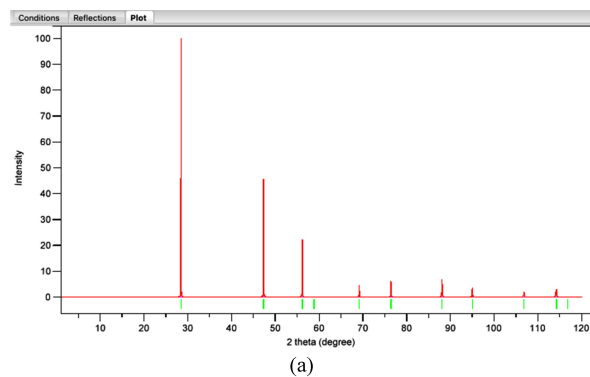


图 1 VESTA 显示 BaTiO₃ 钙钛矿结构

Ti 原子(浅色)位于氧原子(深色)形成的八面体中间,Ba 原子位于八面体围绕的空隙之中

来模拟 X 射线衍射实验(XRD),帮助学生理解消光现象^[13]。图 2 给出了 VESTA 模拟的硅(金刚石结构)XRD 的结果。从中可以看出消光规律:即,只有当 h, k, l 全为偶数且 $h+k+l=4n$ 或 h, k, l 全为奇数时, (hkl) 晶面的衍射强度不为零,与理论结果一致,也与 <https://physicsopenlab.org/> 提供的实验结果一致(<http://physicsopenlab.org/2018/01/28/silicon-germanium-crystal-structure/>)。此外,可以引进科学软件 Xcrysden 辅助布里渊区的教学,演示晶体的第一布里渊区及高对称点。



(a)

Conditions	Reflections		Plot						
No.	h	k	l	d (Å)	F(real)	F(Imag)	F	2θ	I
1	1	1	1	3.13335	-60.113	-1.84245	60.1412	28.4627	100.0000
2	2	2	0	1.91878	-68.9728	-2.5435	69.0197	47.3379	64.5356
3	3	1	1	1.63634	-45.1361	-1.77268	45.1709	56.1652	37.4704
4	2	2	2	1.56667	0	0	0	58.9016	0.0000
5	4	0	0	1.35678	-57.459	-2.44719	57.511	69.1854	9.8192
6	3	3	1	1.24507	38.3725	1.70555	38.4104	76.4394	14.1856
7	4	2	2	1.10781	49.5435	2.35452	49.5994	88.1078	19.4250
8	3	3	3	1.04445	33.2217	1.64097	33.2622	95.0402	2.7728
9	5	1	1	1.04445	33.2217	1.64097	33.2622	95.0402	8.3185
10	4	4	0	0.95939	43.0897	2.26536	43.1492	106.817	7.1951
11	5	3	1	0.91735	28.9592	1.57883	29.0022	114.216	14.0670
12	4	4	2	0.90452	0	0	0	116.774	0.0000
13	6	2	0	0.85810	37.693	2.17958	37.756	127.708	15.1185

(b)

图 2 VESTA 模拟硅的 XRD

(a) 模拟的 XRD 衍射图案的截图;(b) VESTA 给出的具体晶面相关信息的截图,从中可以得到出现消光现象的晶面

1.2 石墨烯及其双层转角结构

石墨烯的发现掀起了二维材料的研究热潮。由于其结构简单,能带结构和电子性质特殊,且能够很好地与固体物理相关知识点融合,已经被同行广泛用于固体物理课程教学^[8-12]。石墨烯具有六角蜂窝状结构,为复式格子。学习石墨的结构性质有助于学生理解格点与原子的区别、倒格矢的计算以及第一布里渊区的作图等。图3给出了单层石墨烯的结构图。

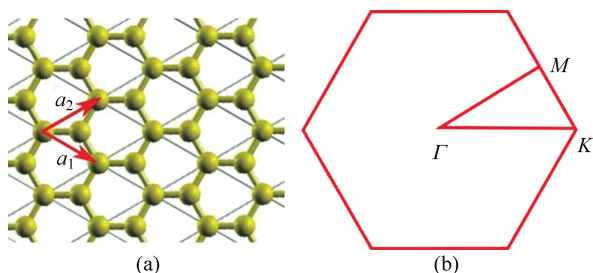


图3 石墨烯的结构及其布里渊区
(a) 原胞的基矢; (b) 第一布里渊区及其高对称点

此外,目前受到人们广泛关注的双层转角石墨烯也可以作为教学资源,向学生展示如何构造双层转角石墨烯的结构,有利于学生掌握描述晶体结构的数学方法^[14]。为了从石墨烯原胞构造转角石墨烯,需引入原胞到超胞的变换矩阵 M

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 \\ \mathbf{A}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix} \quad (1)$$

其中, $\mathbf{A}_i$ 和 $\mathbf{a}_i$ 分别为超胞和原胞的基矢。然后利用晶体的周期性,将超胞中的原子坐标用超胞的基矢表示出来

$$(X_a, Y_a) = (n_1 + x_a, n_2 + y_a) M^{-1} \quad (2)$$

其中, $(n_1 + x_a, n_2 + y_a)$ 为超胞中的原子用原胞基矢表示时的坐标

$$\mathbf{P}_n = (n_1 + x_a) \mathbf{a}_1 + (n_2 + y_a) \mathbf{a}_2 \quad (3)$$

(X_a, Y_a) 为同一原子用超胞的基矢表示时的坐标

$$\mathbf{P}_n = X_a \mathbf{A}_1 + Y_a \mathbf{A}_2 \quad (4)$$

图4是学生通过上述方式构造并用VESTA可视化的3.89°双层转角石墨烯的结构图。

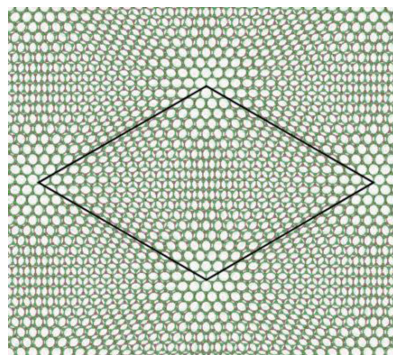


图4 3.89°双层转角石墨烯的结构
图中黑色框代表一个单胞

教学的经典例子,已经有相关文献进行了探讨。其能带结构如图5所示。

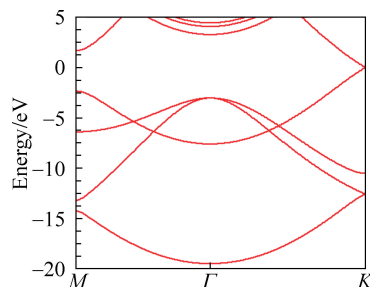


图5 石墨烯的能带结构

在只考虑 p_z 轨道的情况下,学生可以很容易解析求解得到能带的色散关系

$$E(\mathbf{k}) = \pm t |f(\mathbf{k})| \quad (5)$$

其中

$$F(\mathbf{k}) = e^{ia_0 k_y} \left[1 + 2e^{\frac{3ia_0 k_x}{2}} \cos \frac{\sqrt{3}a_0 k_y}{2} \right] \quad (6)$$

a_0 为晶格常数, t 为最近邻 p_z 轨道之间的跃迁参数。进一步将 $F(\mathbf{k})$ 在 $\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3a_0} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$ 和 $\mathbf{K}' =$

$\frac{2\pi}{3a_0} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$ 附近做级数展开,可得到在 $\mathbf{K}(\mathbf{K}')$ 附近能带的线性特征

$$E(\mathbf{K} + \mathbf{q}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}|, \quad v_F = \frac{3a_0 t}{2\hbar} \quad (7)$$

除此之外,石墨烯还可以在能态密度的教学中作为例子。基于上述色散关系和能态密度公式,可求得在 $\mathbf{K}(\mathbf{K}')$ 附近电子能态密度正比于 E ,即

$$N(E) = \frac{2|E|}{\pi \hbar^2 v_F^2} \quad (8)$$

2 能带理论

2.1 石墨烯与紧束缚近似

紧束缚近似下石墨烯能带的计算是固体物理

2.2 自旋轨道耦合与 Rashba 效应

固体中自旋-轨道耦合诱导的新奇量子效应和新物态是近二十年凝聚态物理的前沿研究课题。比如,拓扑绝缘体作为一种新物态,体内是有带隙的绝缘体,但在其带隙中存在具有拓扑保护的无带隙的表面态。将其引入固体物理课程教学,可以加深学生对能带理论的理解。此外,在表面结构导致中心反演对称性破缺的情况下,自旋-轨道耦合诱导电子能带发生自旋劈裂的 Rashba 效应,为人们实现电场调控电子自旋提供可能,是自旋场效应晶体管的基础^[15]。其有效哈密顿量具有如下形式

$$H_R = \alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) \quad (9)$$

考虑二维近自由电子气的 Rashba 劈裂,则总哈密顿量为

$$H = H_0 + H_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) \quad (10)$$

引导学生将哈密顿量对角化,容易得到其能量本征值

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \alpha |k| \quad (11)$$

其能带示意图如图 6 所示。

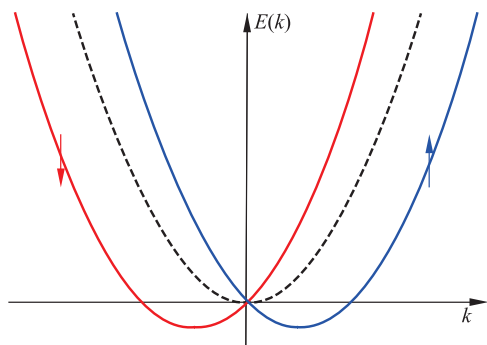


图 6 Rashba 效应导致的能带自旋劈裂示意图
虚线代表没有劈裂时的能带

3 Boltzmann 输运方程与热电效应

热电效应主要包括 Seebeck 效应和 Peltier 效应,分别由 Thomas Seebeck 和 Jean-Charles Peltier 在 1821 年和 1834 年发现。因此,关于热电效应的研究已经 200 多年。严格来说,算不上凝聚态物理前沿。然而,近年来人们将半经典 Boltzmann 输运方程与第一性原理电子结构计算相结

合用于计算固体的电导率、电子热导率、Seebeck 系数等热电输运性质,大大推动了热电材料的研究。因此,目前热电材料的研究正热火朝天,有必要在固体物理课程教学中适时予以讲授。当前的固体物理学教材均对电导率的计算予以介绍,然而鲜有涉及其他的输运系数。Seebeck 系数和电子热导率也同样可以由 Boltzmann 输运方程得到,比如 Seebeck 系数的形式为

$$S = \frac{K_1}{eTK_0} \quad (12)$$

其中

$$K_n = \frac{1}{4\pi^3 \hbar} \sum \mathbf{v}(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) (E - \mu)^n \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \quad (13)$$

$\mathbf{v}(\mathbf{k})$ 为能带电子速度, f_0 为费米-狄拉克函数。上式的求和遍及第一布里渊区内所有 $\mathbf{k}$ 点和能带。式(13)在形式上与电导率公式形式相近。因此,热电效应及热电输运性质的计算很容易融入 Boltzmann 输运方程的教学,具体内容可参考 J. M. Ziman 或者阎守胜先生的教材^[16,17]。

4 结语

本文总结了笔者结合自身经历将若干科学研究进展转化为教学资源,融入固体物理学课程教学的尝试。比如,在晶体结构的教学中引入可视化软件和当前的研究热点转角石墨烯。在能带理论的教学中将紧束缚近似方法应用于石墨烯的能带计算,探讨 K 点附近特殊线性能带的能态密度特征。此外,还挖掘了易于本科生掌握的 Rashba 效应和热电效应,有效促进了学生对晶体中的自旋-轨道耦合效应和半经典 Boltzmann 输运方程的理解。

参 考 文 献

- [1] NOVOSELOV K S, GEIM A K, MOROZOV S V, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films[J]. Science, 2004, 306(5696): 666-669.
- [2] KAMIHARA Y, WATANABE T, HIRANO M, et al. Iron-based layered superconductor $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$ ($x = 0.05 \sim 0.12$) with $T_c = 26\text{K}$ [J]. J. Am. Chem. Soc., 2008, 130(11): 3296-3297.
- [3] KANE C L, MELE E J. Z2 Topological order and the quantum spin Hall effect[J]. Phys. Rev. Lett., 2005, 95(14): 146802.

(下转第 20 页)

- [8] 张清泽,陶宗明,陈宇. 对高斯定理特性与应用的认知[J]. 高等函授学报(自然科学版), 2011,24(1):29-30.
ZHANG Q Z, TAO Z M, CHEN Y. Cognition of the characteristics and application of Gauss theorem[J]. Journal of Higher Correspondence Education (Natural Science Edition), 2011, 24(1): 29-30. (in Chinese)
- [9] 付静,姜广军. 静电场中高斯定理的证明[J]. 长春工业大学学报(自然科学版), 2013,34(2):127-129.
FU J, JIANG G J. Proof of Gauss theorem in electrostatic field[J]. Journal of Changchun University of Technology (Natural Science Edition), 2013, 34(2): 127-129. (in Chinese)
- [10] 张容. 正确理解高斯定理[J]. 成都大学学报(自然科学版), 2003,22(2):61-64.
ZHANG R. Correctly understand Gauss theorem [J]. Journal of Chengdu University (Natural Science Edition), 2003, 22(2): 61-64. (in Chinese)
- [11] 曲小钢. 流体的体胀速度、散度及高斯公式的物理意义[J]. 高等数学研究, 2003,6(1):11-14.
QU X G. The expansion velocity, divergence of fluid and the physical meaning of Gauss formula[J]. Studies in College Mathematics, 2003, 6(1): 11-14. (in Chinese)
- [12] 吴静,严峰军. 从流体通过曲面的流量看高斯公式[J]. 高等数学研究, 2016,19(2):32-34.
WU J, YAN F J. Gauss formula from the flow rate of fluid through the surface[J]. Studies in College Mathematics, 2016, 19(2): 32-34. (in Chinese)
- [13] 张映辉. 贯彻“三位一体”要求的思考和建议[J]. 物理与工程, 2021,31(5):68-72.
ZHANG Y H. Reflections and suggestions in implementation of triad teaching requirements[J]. Physics and Engineering, 2021, 31(5): 68-72. (in Chinese)
- [14] 张丽静,赵鲁涛,李娜. 基于唯物辩证法的概率论与数理统计课程思政建设与实践[J]. 大学数学, 2022,38(2):51-65.
ZHANG L J, ZHAO L T, LI N. Ideological and political construction and practice of probability theory and mathematical statistics based on materialistic dialectics[J]. College Mathematics, 2022, 38(2): 51-65. (in Chinese)
- [15] 张映辉. 结合物理教学传授唯物辩证思想和科学方法初探[J]. 物理与工程, 2021,31(2):54-57.
ZHANG Y H. Study on imparting dialectical materialism and scientific method via combining teaching content[J]. Physics and Engineering, 2021, 31(2): 54-57. (in Chinese)
- (上接第13页)
- [4] KANE C L, MELE E J. Quantum spin hall effect in graphene[J]. Phys. Rev. Lett., 2005, 95(22): 226801.
- [5] BERNEVIG B A, HUGHES T L, ZHANG S C. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells[J]. Science, 2006, 314(5806): 1757-1761.
- [6] BISTRITZER R, MACDONALD A H. Moiré bands in twisted double-layer graphene[J]. PNAS, 2011, 108(30): 12233-12237.
- [7] CAO Y, FATEMI V, DEMIR A, et al. Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices[J]. Nature, 2018, 556(7699): 80-84.
- [8] 杨翠红,程国生. 浅谈用一个学科前沿课题贯穿《固体物理》教学[J]. 课程教育研究, 2012, 7: 181.
YANG C H, CHENG G S. Use of a frontier research topic in teaching of solid state physics course[J]. Course Education Research, 2012, 7: 181. (in Chinese)
- [9] 张加永. 固体物理课程教学改革探讨与实践[J]. 教育教学论坛, 2020,10(43):96-98.
ZHANG J Y. Discussion and practice on teaching reform of solid state physics[J]. Education Teaching Forum, 2020, 10(43): 96-98. (in Chinese)
- [10] 杨翠红,王璐,雷勇,等. Bloch定理在单层石墨烯多势阱结构体系中的应用[J]. 大学物理, 2015, 34(1): 6-6.
YANG C H, WANG L, LEI Y, et al. Bloch theorem used in monolayer graphene with multi-barriers structure[J]. College Physics, 2015, 34(1): 6-6. (in Chinese)
- [11] 王晴晴,程荣龙,宫昊. 以石墨烯为例分析二维六角晶格结构及振动模式[J]. 大学物理, 2019, 38(6): 24-28.
WANG Q Q, CHENG R L, GONG H. Analysis of two-dimensional hexagonal lattice structure and vibration mode using graphene as an example[J]. College Physics, 2019, 38(6): 24-28. (in Chinese)
- [12] 黄桂芹. 二维材料的前沿进展在固体物理教学中的渗透[J]. 大学物理, 2021, 40(9):1-4.
HUANG G Q. Permeating frontier progress about two-dimensional materials into the teaching of solid state physics [J]. College Physics, 2021, 40(9): 1-4. (in Chinese)
- [13] MOMMA K, IZUMI F. VESTA: a three-dimensional visualization system for electronic and structural analysis[J]. J. Appl. Cryst., 2008, 41: 653-658.
- [14] 陈明星. 双层转角石墨烯结构的构建方法浅析[J]. 大学物理, 2021, 40(8):8-10.
CHEN M X. A brief analysis of the method for constructing the structures of twisted graphene bilayers[J]. College Physics, 2021, 40(8): 8-10. (in Chinese)
- [15] MANCHON A, KOO H C, NITTA J, FROLOV S M, et al. New perspectives for Rashba spin-orbit coupling[J]. Nat. Mater., 2015, 14: 871-882.
- [16] ZIMAN J M. Electrons and phonons: The theory of transport phenomena in solids[M]. London: Cambridge University Press, 2001.
- [17] 阎守胜. 固体物理基础[M]. 北京:北京大学出版社, 2003.