凝聚态物理探究式学生讲义

配套详细理论讲义的十份任务单 2026 年 11 月修订

物理学院 研究生课程教学材料 2026 年 11 月

怎样使用本探究式讲义

本册与详细中英文理论讲义配套。B、T、M、SC 分别表示能带、输运、磁性和超导的例题编号；编号跨语言保持一致。每份任务单要求留下预测、推导、计算、证据和反思五类记录。理论讲义提供必要公式和部分核验数值，本册要求学生通过改变假设、参数与边界形成自己的论证。

32 学时无法逐项在课堂完成十个完整计算。基础任务一、二、五、六、九用于共同训练；其余任务可作为小组专题或课程报告选题。每组 2 至 3 人，分配模型推导、数值核验、证据审查角色，并在下一任务轮换。个人提交必须注明本人完成的部分，不能用小组名单代替贡献记录。

开始计算前写明参数、单位、边界、粒子数或化学势控制方式以及保护对称性。每个图必须有坐标、单位、图例、模型假设和数据来源。每个数值结论至少有一个解析极限、网格/尺寸变化或独立方法的检验；相同程序换一种颜色不构成独立证据。

任务单一 电阻率能告诉我们多少信息

定位与用时：T1、T2、T9；建议课前 60 分钟与讨论课 30 分钟

问题与预测：同样一条室温电阻率曲线，能否唯一确定载流子密度、散射时间和平均自由程？先写出你认为可独立确定的量，再预测一个各向同性单带金属是否必然出现纵向磁阻。预测须在运行程序前提交，错误预测不扣结果分，缺少预测记录扣过程分。

推导与计算：取铜教学参数 $n=8.5\times10^{28}\ \mathrm{m^{-3}}$、$\rho=1.7\times10^{-8}\ \Omega\,\mathrm{m}$、T=300 K，使用裸电子质量。由 $\sigma=ne^2\tau/m$ 求 τ，再由 kF=(3π²n)^(1/3)求 EF、vF 和 ℓ。分别记录每步单位，并给出为什么必须借助 n 才能从 ρ 求 τ。随后构造含 B 的 2×2 电导张量并求逆，不能只取 1/σxx。

证据与对照：先令 p=0，在 0 至 5 T 检查 ρxx(B)/ρxx(0)是否恒为 1；再设 p=n、ue=1、uh=0.5 $\mathrm{m^2/(V\,s)}$，检查 2 T 与 5 T 的比值。把单带、完全补偿与 p/n=0.8 的模型画在同图；每条曲线标明迁移率，避免把不同参数混成同一组对照。

反思与交付：提交一页单位核查表、三条磁阻曲线、产生图的数据和可运行程序，以及 300 字结论。回答“大磁阻是否足以证明拓扑”“补偿是否意味着零 Hall”“改变 n 与 τ 能否保持同一零场电阻率”。所有曲线标注教学模型数据，不能改写成测得数据。

任务单二 从跃迁矩阵到费米面

定位与用时：B2、B3、B4；建议独立计算 90 分钟

问题与预测：近自由电子的带隙与紧束缚带宽由什么参数控制？画出你对 U_G 减半、t 加倍和重叠 s 增大的定性预测。说明“能带曲线很平滑”为什么不是计算收敛的证据。

推导与计算：先对 B2 的 2×2 矩阵求解析本征值，代入 a=0.4 nm、U_G=0.2 eV，计算带隙和上下带边曲率。再从方格子四条最近邻有向键推导 $\varepsilon k=-2t(\cos kxa+\cos kya)$，写出 Γ、X、M 点的能量和半填充费米线；明确一个原胞、一个自旋的态数。

数值证据：按 Nk=100、200、400 和展宽 η/t=0.10、0.05 计算 DOS。分别回答网格和展宽改变了什么，检验 DOS 全能量积分。加入 t′=0.2t 时，预测并验证鞍点能量移至 4t′；说明此时 μ=0 未必仍是半填充。

反思与交付：提交两种模型各一张能带图、方格子 DOS 与费米面图、一个至少三行的收敛表及 500 字讨论。必须说明负曲率质量的含义，并解释为什么半填充嵌套支持有限波矢不稳定性的研究，却不能单凭 DOS 峰断言铁磁。

任务单三 石墨烯体态与边态

定位与用时：B5、B6、B7；建议两人合作 120 分钟

问题与预测：石墨烯的低能粒子“无质量”，为什么量子振荡仍能测得回旋质量？zigzag 和 armchair 是否仅是同一能带的不同画法？先分别画体态密度与边缘态密度的预期形状。

推导与计算：使用 t=2.7 eV、a0=0.142 nm，从蜂窝矩阵展开出 vF，令 $n=10^{12}\ \mathrm{cm^{-2}}$计算 kF、EF 和 mc。由赝自旋重叠因子说明正入射平滑势垒为何无反射，并列出至少两种使该结论失效的微观条件。

边界证据：对 zigzag 零能递推 $A(j+1)=-2\cos(k\|a\|/2)A(j)$，选择 $k\|a\|=\pi$、0.8π 和 $2\pi/3$ 附近，画归一化概率。比较定位长度与谷投影的关系。若构造有限纳米带，须把能级按最外两层权重着色，记录宽度变化。

反思与交付：提交密度到能量的计算链、三个边态概率图和一张“适用条件与失效因素”表。解释赝自旋与真实自旋的区别，说明边缘平带为何只是磁性研究的出发点，不能被当成已实现磁序的证据。

任务单四 SSH 的体边对应

定位与用时：B8；建议 90 分钟，供视频 V2 使用

问题与预测：两个具有同样带宽和带隙的二聚化链能否有不同边界态？固定左端 A、右端 B 的截断方式，比较(t1,t2)=(0.6,1)和(1,0.6)，先预测周期与开边界谱的差别。

推导与计算：由 q(k)=t1+t2exp(ik)计算绕数，推导左边态递推和归一化。对 20、40、80 原胞开链对角化，记录最接近零的两能级。对这两个态构成的整个子空间求边界权重，不应从一个任意线性组合判断只在单侧或双侧。

反事实证据：保持相同终止，分别加入随机弱键扰动和 Δσz 在位项，区分手征对称性保留与破坏。再改为周期边界，检验体隙仍存在而孤立端态消失。报告随机数种子和扰动范围。

反思与交付：提交复平面绕行图、开闭边界谱、三种链长的低能表及保护条件说明。回答改变原胞定义为何会改变绕数写法，而不能任意改变同一物理截断下是否有端态。不得将 SSH 普通端态称为 Majorana 零模。

任务单五 用三个证据判断 Chern 相

定位与用时：B11、B12、B13；建议课前 120 分钟和第二次讨论课

问题与预测：有能隙是否一定拓扑非平庸？先用 Haldane 两谷质量判断 M=0.2 和 0.8 的相，参数 t2=0.1、φ=π/2。写清谷、曲率和 Hall 张量的符号约定。

推导与计算：对 QWZ 的四个可能闭隙点计算质量和手性，得到 m=−1、1、3 的下带 Chern 数。实现反向重叠的格点通量公式，在 21、41、81 网格上求 C；再给每个本征矢乘独立随机相位，确认 C 不变。

交叉证据：构造 x 开边界、y 周期的 24 层条带，画谱并按边界权重着色；把体 Chern、体隙、条带谱放在同页。添加 d0(k)I 项后分别检查几何不变量和间接隙，解释为何本征矢未变但绝缘条件仍可能改变。

反思与交付：提交解析相图、离散 Chern 收敛表、随机规范检验、条带谱与 800 字论证。说明为什么“算出一个整数”“看到带隙内态”“发生一次带反转”都不能单独完成材料 QAH 认定。

任务单六 Hubbard 平均场的稳定性

定位与用时：B4、M4、M7；建议两人合作 150 分钟

问题与预测：从 m=0 出发一直得到 m=0，能否说明没有磁性？以半填充方格子为例，先比较均匀铁磁和 Q=(π,π)反铁磁的可能性，再说明嵌套如何影响判断。

推导与计算：明确 m=(n↑−n↓)/2 与 Δ=Um 的定义，从 Hartree–Fock 分解写出折叠区 2×2 矩阵；把自洽方程改写成完整布里渊区求和并核对因子 2。取 t=1、T=0、U=1、2、4、8，使用 0.5 混合和未混合残差阈值 10^{-12}。

证据与对照：U=4 时至少使用 100、200、400 网格，记录 m、谱隙、原始哈密顿量能量与顺磁参照。分别从 0、0.05、0.2 及相反符号初值开始；比较收敛残差与能量，而不把迭代步数当成物理观察。

反思与交付：提交一次完整迭代轨迹、网格表、双计数修正推导和 600 字解释。区分自洽驻点、变分能量较低、精确多体基态与有限温真实长程序；解释二维连续自旋对称模型的平均场转变温度为何不能直接当作实验 Tc。

任务单七　磁性半导体与量子阱的平均场理论

对应算例 M8、M9、M10。研读 Dietl 等关于磁性半导体的研究及 Wang 等关于磁掺杂 InAs/GaSb 量子阱的研究和补充材料，建议用时 180 分钟。

问题与预测　为什么绝缘体费米能处的态密度为零，电子系统仍可能产生磁响应？对照两种材料，分别列出磁性自由度、电子模型、控制变量和计算目标，说明六带价带模型和八带异质结模型各自描述的物理过程。

缩减计算一：按 M8 的单抛物线教学参数计算 N0、kF、EF、DOS 和 Tc。将 p 增大八倍与 x_eff 增大两倍分别比较。明确 N0βpd 给的是能量，βpd 本身是能量乘体积；这一步用于检验单位和标度，不是论文图像复现。

缩减计算二：对 H=dxτx+dzτz 与 O=τz，推导带间矩阵元和响应，代入 dx=3、dz=4 meV；然后按 M10 扫描四带谱，分别计算局部质量、直接隙、间接隙。将试探 q=0.3 与自洽得到 q 严格区分。

反思与交付　提交两种材料的模型对照及两项简化计算。用一个反例说明质量项反号与出现全局能隙的关系，并列出定量计算材料居里温度或能隙所需的微观参数。

任务单八 交错磁性的对称性与电流

定位与用时：M11、M12、M13、T8；建议 90 分钟

问题与预测：净磁矩为零是否强迫每个 k 点自旋简并？对 $\delta(k)=Ja(\cos kx-\cos ky)$，先画符号区域和节点，再指出 C4 空间旋转必须配合哪一个自旋操作。

推导与计算：取 t=1 eV、Ja=0.10 eV，求 Γ、X、Y、M 的劈裂；在对称网格和相同化学势下求 N↑−N↓。用变量代换证明积分补偿，不能只凭某个有限网格给零作证。

输运证据：对低能椭圆模型 $\alpha(kx^2+ky^2)+\sigma\beta a(kx^2-ky^2)$，取 $\beta a/\alpha=0.2$、等密度等弛豫时间，求 Px 和 Py。然后指出这个实对角模型的本征矢为何不能产生内禀 Berry 曲率；最后列出打开 SOC 后必须重查的操作。

反思与交付：提交劈裂热图、补偿证明、两个方向的电流极化以及一页“对称性允许和实验确认”的区别说明。不得把 d 波劈裂形状与 d 波超导配对等同，也不得从零磁矩或自旋劈裂直接推出反常 Hall。

任务单九 超导能隙应从方程求出

定位与用时：SC1、SC3、SC5；建议 120 分钟

问题与预测：为什么配对波函数可以指数小，而一个好看的 tanh 插值曲线不能证明已经解了能隙方程？预测 λ 增大后 Δ0 与 Tc 如何变化，指出 Cooper 两体结合能与 BCS 多体能隙的差别。

推导与计算：采用 ωD=1、kB=1、λ=0.30，先二分求 Tc，再对每个 T<Tc 二分求正 Δ。计算 T/Tc=0、0.2、0.5、0.8、0.9、0.99；对 E=0 处使用极限而不是除零。比较 6001 与 12001 点积分、零温解析解和弱耦合比值。

固定密度对照：在方格吸引 Hubbard 中取 t=1、U=3、n=0.8、T=0.05，联合求 Δ 与有效化学势 $\tilde{\mu}$。把 $\mu=\tilde{\mu}-Un/2$ 列在结果旁；如果固定旧 μ 再改 Δ，检查密度偏离多少。

反思与交付：提交能隙曲线、积分收敛表、数方程残差和固定密度解。说明平均场配对温度与严格二维相位相干转变不是同一概念；不能用均匀配对分支的存在断言已排除所有竞争态。

任务单十 非常规配对与拓扑超导

定位与用时：SC11、SC12、SC13、SC14；建议 180 分钟，供第三次讨论课选择

问题与预测：排斥作用是否绝不可能产生配对？非零超导能隙是否自动意味着拓扑？先分别预测双口袋配对核的最大本征向量，以及 Kitaev 链 μ=0.5 和 3.0 时的边界行为。

推导与计算：对只有带间排斥的 2×2 配对核求本征值和本征向量，再令 v2=4v1 求能隙幅度比。对方格 d 波例 SC12 同时求 ξk=0 和 Δk=0，计算节点位置及法向、切向斜率，不能只画 Δk=0 的直线就称为节点。

拓扑证据：取 Kitaev 链 t=1、Δ=0.6，比较 N=20、40、80，记录正负谱配对和最低绝对能量。计算低能子空间的端部权重，并改成周期边界作对照。对纳米线阈值只作为理想模型预测，还需检查全动量最小隙与母体超导限制。

反思与交付：提交配对核解、节点计算、有限尺寸表、边界概率图与一页证据审查。明确变号不等于必有节点，零偏压峰不等于已经证明 Majorana，SSH 端态与 BdG Majorana 态在粒子空穴结构上有何不同。

统一提交格式与复算要求

提交包按问题陈述、假设、推导、计算方法、结果、反例检验、局限、参考文献的顺序组织。正文建议 4 至 6 页，另附程序和原始模型输出；文献专题可按教师要求调整。程序中把可改参数集中列出，注明依赖、运行入口、随机种子、网格和残差阈值。所有人工改动数据必须记录原因，禁止删除不符合预期的参数点而不说明。

图注需要区分解析曲线、数值模型结果、文献原图和实验数据。引用课件时写课件名称与页码；引用论文时写作者、题名、期刊与 DOI。重画文献图也要标明来源。使用自动化工具辅助代码或文字时，仍须由本人验证公式、单位、结果和引文；提交中说明辅助范围。

个人反思记录模板

先写最初预测及其理由，再记录使预测改变的具体方程、数据点或反例。若预测未变，指出哪一个对照使结论比直觉更可信。最后提出一个仍不能由现有模型回答的问题，以及下一步需要什么模型或证据。

同伴互评　同伴互评时独立复算一项结果，指出推导所依赖的条件，核对数据能否支持结论。书面反馈应指明有待澄清的步骤，并提出一项可行的检验。作者在修订稿中回应意见，说明采纳或保留原判断的理由。