

固体物理基础

序

本书系作者在四川大学物理系为固体物理专业学生讲授固体电子物理所写讲义修改扩展而成的。

教材内容系按固体中原子和电子两个主要运动发展形式来编写的。比如，第一单元在原子运动方面：首先从固体的几何结构、物理结合形式以及验证上述结果的衍射技术开始，而后进入固体中各类缺陷(点，线，面等包括色心在内)的形成和结构的阐述。第二单元从固体中原子的弹性运动开始，引入声子概念，讨论固体的各种热性质；从点缺陷的无序运动出发，考虑金属中原子的扩散运动及固体滞弹性等问题；然后涉及与固体范性相关的位错运动和缺陷间互作用等方面。在电子运动方面：首先用三种极化机制及三种极化过程来概述电介质由于电位移而导致的介电、压电、热释电和铁电等现象的性质；通过电子运动模型的引进，进入固体的另一个中心问题，即输运现象，将金属和半导体的导电行为，电热效应和电流磁效应等利用玻耳兹曼输运方程统为一体，然后对金属超导现象进行理解和讨论。随即在界面电子行为的专题中，概述固体表面电性质，功函数，金属表面热发射，光电子发射以及金属-半导体接触等等与固体器件有关的基本问题。最后以电子自旋运动形式介绍固体的顺磁，抗磁，铁磁，反铁磁及亚铁磁等现象以及磁弛豫，磁共振等磁过程的物理根源。教材体系这样的选择，旨在避免传统的分科阐述，节约学时又能容纳较多内容，更重要的也许是使学生对固体物理能够获得整体的概念。作者水平有限，能否达到此目的，尚望采用此教材的老师们共同努力来完善它。

全书共分七章容纳上述全部内容, 足供 72 学时讲授之用, 如果可用学时较少, 或学生的需求有所不同, 可在保证 1, 2, 4, 5 四章外选用 3 或 6 和 7 章。

符 号 表

- a 晶格常数
- \mathbf{a}_i 固体物理学惯用单胞基矢, \mathbf{a}_i^* 相应倒格基矢
- $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ 结晶学惯用晶胞基矢
- B (\mathbf{B} 磁感应强度, B_s 饱和磁感应强度 B_r 剩余磁化强度)
- \mathbf{b} 伯格矢量
- C 任意常数、居里常数、热容 (C_p 定压热容, C_V 定容热容, C 超导电子热容, C_n 正常电子热容)
- D 电位移矢量
- D 扩散系数 (D_e 电子扩散系数, D_h 空穴扩散系数)
- d 晶面间距
- E 电场强度 (E_L 洛仑兹场强, E_a 退极化场强)
- ε 能量 (ε_e 电子能量, ε_h 空穴能量)
- ε_F 费密能(级), ε_{F_0} 绝对零度费密能
- \mathbf{e}_i 计算体系单位矢量
- F 力、自由能、几何结构因子
- f 分布函数, f_0 基态分布函数
- f_e, f_a, f_c, f_l 电子、原子、晶胞、晶格散射因子
- G 切变模量, 吉布斯自由能
- g 朗德因子
- H 哈密顿,
磁场强度 (H_c 矫顽强度、临界磁场, H_m 分子场)
- H_P 帕耳帖热
- (h, k, l) 结晶学用密勒指数

- (h_1, h_2, h_3) 固体物理学用晶面指数
 I 电流强度
 J 粒子流强度, 交换积分, 总角动量量子数
 K k -空间格矢
 K 体弹性模量
 k k -空间位矢, 电子波矢
 k_B 玻耳兹曼常数
 L 长度 (L_D 德拜长度, L_e 电子扩散长度, L_h 空穴扩散长度)
 L 罗仑兹数, $L_0, L_1, L_2 \dots$ 输运系数
 L 电子轨道总角动量
 l 长度, 电子轨道角动量量子数
 M 磁化强度, 马德隆常数
 M^{-1} 倒数有效质量张量
 m^* 有效质量 (m_e^* 电子有效质量, m_h^* 空穴有效质量)
 N 粒子总数, 晶胞总数 (N_d 施主浓度, N_a 受主浓度)
 n 电子浓度
 p 动量, 极化强度矢量
 p 极化强度矢量 (p_e 电子极化强度, p_a 原子极化强度, p_d 取向极化强度)
 p 空穴浓度
 Q 热量
 q 声子波矢
 R 晶体空间格矢
 r 晶体空间位矢
 R_H 霍耳系数
 S 电子总自旋角动量, S 绝对热电动势
 S 熵, 电子自旋量子数

T 温度, T_F 费密温度

U, u 内能, 结合能

$[u, v, w]$ 晶向指数

V 晶体体积 v_0 晶胞体积

V 电压, 电势(差) (V_d 势垒高度, V_s 表面势)

v 速度 (v_p 相速度, v_q 群速度, v_s 声速, v_D 漂移速度)

W 热流密度

Z 电子态密度函数

α 电介质极化率 (α_e 电子极化率, α_a 原子极化率, α_d 取向极化率)

β 原子力常数

γ 回磁比 (γ_s 电子自旋回磁比, γ_l 电子轨道回磁比)

δ 趋肤深度, δ 函数

ϵ 应变

介电常数 (ϵ_s 静态介电常数, ϵ^* 复数介电常数(动态))

μ 化学势 (μ_0 绝对零度化学势)

θ 特征温度 (θ_D 德拜温度, θ_E 爱因斯坦温度)

θ_{12} 温差电动势

κ 导热率

λ 波长, 平均自由程, 穿透深度

μ 迁移率, 磁导率

μ_B 玻尔磁子, μ_l 电子轨道磁矩, μ_s 电子自旋磁矩)

π_{12} 帕耳帖系数

ρ 密度, 电阻率

σ 应力, 导电率, 汤姆逊系数, 电子占据态函数

τ 切应力, 弛豫时间

ν 频率

ϕ 功函数, 原子间作用势能

χ 磁化率, 电子亲和势

Ψ, ψ 波函数

ω 圆频率 (ω_L 拉摩耳频率, ω_c 回旋频率)

目 录

序	1
符号表	1
第一章 固体结构	1
§ 1.1 晶体模型	1
§ 1.1.1 布拉菲格子	1
§ 1.1.2 晶格对称性	13
§ 1.1.3 晶胞和晶体结构	24
§ 1.1.4 倒格子和布里渊区	33
§ 1.2 晶体结合	46
§ 1.2.1 原子间力和晶体类型	46
§ 1.2.2 固体结合能	57
§ 1.3 晶体衍射	66
§ 1.3.1 布拉菲晶格对 X 射线的衍射	67
§ 1.3.2 非布拉菲晶格对 X 射线的衍射	71
§ 1.3.3 X 射线衍射的实测方法*	78
§ 1.3.4 电子衍射和中子衍射	85
§ 1.4 固体中缺陷	89
§ 1.4.1 点缺陷	90
§ 1.4.2 线缺陷——位错	101
§ 1.4.3 面缺陷	111
第二章 固体中原子运动	114
§ 2.1 晶格振动和固体热性质	114
§ 2.1.1 一维晶链振动	114
§ 2.1.2 声子	125
§ 2.1.3 晶格热容	134

§ 2.1.4	晶格导热	146
§ 2.2	原子跳跃运动	150
§ 2.2.1	原子在固体中的运动	150
§ 2.2.2	固体滞弹性	157
§ 2.3	位错运动	168
§ 2.3.1	位错运动的两种基本形式	168
§ 2.3.2	位错交割几何	172
§ 2.3.3	位错间的互相作用	175
§ 2.3.4	位错的来源和增殖	182
第三章	电极化	187
§ 3.1	电致极化	188
§ 3.1.1	介电常数 ϵ	188
§ 3.1.2	作用于原子(离子)上的局域场	191
§ 3.1.3	三种微观极化原因	194
§ 3.1.4	固体静态介电常数 ϵ_s	199
§ 3.2	极化弛豫及介质损耗	202
§ 3.2.1	极化弛豫	202
§ 3.2.2	动态介电常数 ϵ^*	206
§ 3.2.3	介质损耗	209
§ 3.2.4	介电常数的色散关系	211
§ 3.3	应变极化	215
§ 3.3.1	电致伸缩和压电效应	215
§ 3.3.2	压电系数	218
§ 3.3.3	压电方程	223
§ 3.4	自发极化	226
§ 3.4.1	热释电效应	226
§ 3.4.2	电畴	227
§ 3.4.3	铁电性	230
§ 3.4.4	典型的铁电晶体	233
第四章	固体中电子运动模型	240

§ 4.1	金属中自由电子经典模型	240
§ 4.1.1	特鲁德-洛仑兹电子	240
§ 4.1.2	维德曼-夫兰兹定律	241
§ 4.1.3	特鲁德-洛仑兹电子的失败	245
§ 4.2	金属中自由电子的量子力学模型	247
§ 4.2.1	索末菲电子	247
§ 4.2.2	索末菲电子的能量和动量	250
§ 4.2.3	电子态分布——态密度函数 $Z(\epsilon)$	252
§ 4.2.4	电子分布密度——费密分布	256
§ 4.2.5	电子气热容	262
§ 4.3	周期场中电子运动模型	266
§ 4.3.1	布洛赫电子	266
§ 4.3.2	一维克朗尼格-朋奈模型	268
§ 4.3.3	能带和能隙	273
§ 4.3.4	三维布洛赫函数	281
§ 4.3.5	能量不连续面	284
§ 4.3.6	紧束缚近似	290
§ 4.3.7	等能面	294
§ 4.3.8	能态密度曲线	296
§ 4.3.9	金属、半金属、非导体、半导体	301
§ 4.3.10	金属费密面	304
第五章	电子迁移现象	310
§ 5.1	布洛赫电子的运动	310
§ 5.1.1	布洛赫电子的动力性质	310
§ 5.1.2	布洛赫电子运动的加速度, 有效质量	313
§ 5.1.3	玻耳兹曼输运方程	316
§ 5.2	金属导电及导热	319
§ 5.2.1	金属导电	319
§ 5.2.2	杂质电阻	325
§ 5.2.3	金属导热	333
§ 5.2.4	热电现象	338

§ 5.3 半导体电输运	350
§ 5.3.1 半导体能带图样	350
§ 5.3.2 半导体中载流子统计分布	354
§ 5.3.3 半导体导电率	365
§ 5.3.4 非平衡载流子的寿命和扩散	369
§ 5.4 布洛赫电子在磁场中的运动	374
§ 5.4.1 布洛赫电子回旋频率	374
§ 5.4.2 电流磁效应	377
§ 5.4.3 回旋共振	386
§ 5.5 金属超导特性	193
§ 5.5.1 金属超导现象	393
§ 5.5.2 迈斯纳效应	396
§ 5.5.3 超导体热力学性质	406
§ 5.5.4 同位素效应和电子隧道效应	410
§ 5.5.5 超导器件——冷致管	417
第六章 界面电子行为	420
§ 6.1 固体表面性质	420
§ 6.1.1 功函数	420
§ 6.1.2 金属-金属接触电势差及其测定	424
§ 6.1.3 半导体表面势垒	429
§ 6.1.4 表面电子态	433
§ 6.2 表面电子发射	435
§ 6.2.1 电子热发射——里查逊公式	435
§ 6.2.2 肖脱基场效应	439
§ 6.2.3 场发射	441
§ 6.2.4 光电子发射	444
§ 6.3 界面接触	446
§ 6.3.1 金属-半导体接触	446
§ 6.3.2 肖脱基势垒的整流作用	450
§ 6.3.3 P-N 结	460

§ 6.4 趋肤效应	473
§ 6.4.1 趋肤深度	473
§ 6.4.2 表面电阻	474
§ 6.4.3 皮帕德实验	475
§ 6.4.4 反常趋肤效应	477
第七章 电子自旋运动	480
§ 7.1 顺磁性和抗磁性	480
§ 7.1.1 物质磁性	480
§ 7.1.2 原子磁性	482
§ 7.1.3 轨道电子的磁响应——磁化率	487
§ 7.1.4 导体中自由电子的磁贡献	494
§ 7.2 自发磁化	507
§ 7.2.1 分子场	507
§ 7.2.2 分子场的量子力学解释	510
§ 7.2.3 有效磁子数	512
§ 7.2.4 磁畴	514
§ 7.2.5 反铁磁性	520
§ 7.2.6 铁氧体-亚铁磁性	524
§ 7.3 磁弛豫和磁共振	525
§ 7.3.1 顺磁弛豫	525
§ 7.3.2 顺磁共振	528
§ 7.3.3 量子放大器	533
习题	535
索引	543
基本物理常数	558

第一章 固体结构

§ 1.1 晶体模型

§ 1.1.1 布喇菲格子

(一) 晶格和晶胞

(如果将无限大晶体的每个组成粒子或粒子集团抽象为一个代表点(它可以是粒子集团的质心或某特定粒子的质心或任意其他等效的点), 那么晶体便可以抽象为这些代表点的无穷集合, 称之为点阵, 而代表点称为阵点。) 这样的点阵模型可用来描述晶体结构的几何对称性。

在点阵中任取一点为原点。从这原点引向三个不共面的最近阵点作三矢量(如图1-1中的 \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 和 \mathbf{a}_3)。这三个矢量确定三个轴向, 称为基矢, 又称平移矢量, 因为利用它们平行移动可构成整个点阵。阵点可沿这三个方向用平行直线族联结起来构成一个网格, 称为格子。网格的结点(阵点)称为格点。通常我们想像格点(小)上有象征粒子或粒子集团的小球体, 并将这样的格子称为晶格。在后面将把它作为描述晶体的模型。

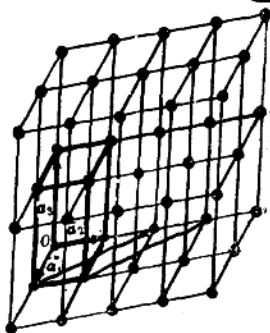


图 1-1 格子和原胞

整个格子系由无限多相同的平行六面体所构成。由基矢 \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 及 \mathbf{a}_3 平移构成的平行六面体连带六个在顶点上的结点构成一个原胞(见图 1-1 中的粗线格)。原胞是格子的重复单位, 将这原

胞沿三个轴向按平移矢量 \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 及 \mathbf{a}_3 逐步平移可以构成整个格子。这正显示了格子自身的平移对称性, 同时也表明晶格结构的周期性。根据这一平移性质, 任意格点的位置矢量 \mathbf{R} , 简称格矢, 可用下式来表示:

$$\mathbf{R} = R_1\mathbf{a}_1 + R_2\mathbf{a}_2 + R_3\mathbf{a}_3 \dots \quad (1-1)$$

其中 R_1 , R_2 和 R_3 可取任意正负整数(包括零在内)。同时, 格矢的坐标用 (R_1, R_2, R_3) 表示。

这样定义的 \mathbf{R} 矢量(或格点)的无穷集合称为布喇菲点阵, 由它构成的格子称为布喇菲格子。

对于一定格子, 原胞的选择是任意的, 比如在图 1-2 中表示

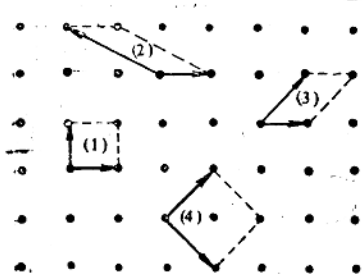


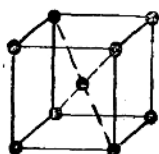
图 1-2 示意原胞可以有多种的选择如(1), (2), (3), (4)等

的二维正方点阵, 原胞可以有(1), (2), (3), (4)等的不同选择。但通常尽量选择反映晶格的对称性比较明显而体积又是最小的。所谓最小是指每个原胞平均只包含单个格点。比如图 1-2 中的(1), 每个原胞的角顶格点为相邻四个原胞所共有, 四个

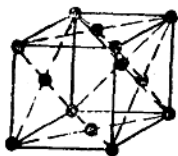
角顶格点只能作一个格点计算, 这样的原胞属于初基原胞。为了更好地反映格子的对称性或是由于某种方便也可选用较大的原胞, 如图 1-2 中的(4)。对于三维情况, 可以有如图 1-3 所示的体心立方原胞(bcc)和面心立方原胞(fcc)。前者每个原胞平均包含两个格点, 后者平均包含四个格点(每个面心格点为相邻两原胞所共有, 只算半个)。包含两个以上格点的原胞属于复式原胞。

(二) 14 种布喇菲格子和 7 个晶系

可将 20000 种以上的晶体按宏观对称划分为 32 种晶族, 各具



体心立方



面心立方

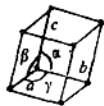
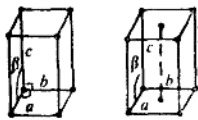
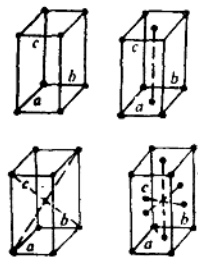

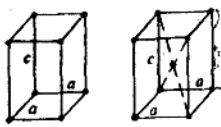

图 1-3 复式原胞 bcc 和 fcc

有它们自己的对称类型。这同用来描述晶体内部微观结构周期性的原胞的对称性应是相吻合的。能够符合上述 32 种对称类型 要求的原胞，已由布喇菲于 1948 年从数学上全部推出，共有 14 种 (7 种初基原胞及 7 种复原胞) 统称为布喇菲原胞，有时又被称为惯用原胞。参看表 1-1。

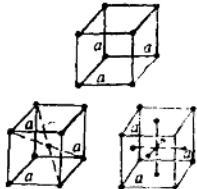
这 14 种布喇菲原胞，在结晶学上，按构成它的三个基矢 a 、 b 和 c 的相对长短及相互间的夹角 $\alpha = \angle b, c$ 、 $\beta = \angle c, a$ 、 $\gamma = \angle a, b$ 关系，归属于 7 个晶系，三斜、单斜、正交、三方、四方、六方、及立方晶系，参看表 1-1。

这 14 种布喇菲原胞按所属晶系已分别在表 1-1 中示出。其中属于三斜晶系只有简单三斜原胞一种，用 (P) 表示；属于单斜晶系的布喇菲原胞有两种，除简单单斜原胞 (P) 外，还有底心单斜原胞，即在单斜原胞的顶面及底面中心各加一个格点，它是属于带心原胞，用 (C) 表示。正交系除简单正交原胞 (P) 和底心正交原胞 (C) 外，还有体心正交原胞 (I) 和面心正交原胞 (F) 两种，后两种同前面说过的体心立方和面心立方有相同的结构，即在简单正交原胞上分别在原胞中心和在原胞的四个面中心各增加一个格点而成。其余的不难见表自明。可能有人要问为什么不在 7 个晶系的所有简单原胞中都加上底心，体心或面心来构成更多可能的复原胞呢？回答是：这些增添的复原胞除表中所有的外，其余的，是不符合平移对称性的要求便是可以归结为 14 种布喇菲原胞中的

表 1-1

系 别	基矢相对关系	原胞名称	布喇菲原胞
三 斜	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	简单三斜 P	
单 斜	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta > 90^\circ$	简单单斜 P 底心单斜 C	
正 交	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单正交 P 底心正交 C 体心正交 I 面心正交 F	
三 方	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	简单三方 P	
四 方	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单四方 P 体心四方 I	
六 方	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	简单六方 P	

(续表)

系 别	基矢相对关系	原胞名称	布喇菲原胞
立 方	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单立方 P 体心立方 I 面心立方 F	

某一种。比如在简四方的上下底面各加一个底心构成一个底心四方，但实际上由图 1-4 可以明显地看出，经过重新划取原胞，由虚线构成的原胞仍然是个简单四方。

最后，补充一点，布喇菲格子如果按 § 1.1 所说的，在格点上安放一个象征原子的小球体我们便称它为布喇菲晶格。在这种情况下，晶格中的每一个格点都是完全等同的，任一格点同它的周围所有格点的几何关系(包括格点间的取向关系，实质上就是原子间化学键的取向关系)都是完全相同的。这是布喇菲格子的另一种定义。如果格点上安放的是一个有特殊对称性的原子某团(分子)，这原子集团称之为基底。这样的晶格称为带基底的布喇菲晶格，或称为非布喇菲晶格，用布喇菲晶格抽象描述的晶体叫布喇菲晶体或称简单晶体；用非布喇菲晶格描述的晶体叫非布喇菲晶体。

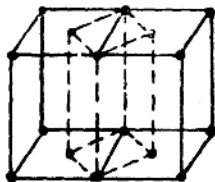


图 1-4 底心四方仍然是一个简单四方示意图

(三) 晶面, 密勒指数

上面讨论空间阵点亦即格点在空间中的分布时，是用三维原胞在空间中的重复来实现的，格点在格子空间中的分布同样还可