

高等学校教材

固体物理

徐毓龙 阎西林

西安电子科技大学出版社

高等学校教材

固 体 物 理

徐毓龙 阎西林

西安电子科技大学出版社

1990

内 容 简 介

本书主要论述固体物理的基本内容，如晶体结合、晶体结构和晶体缺陷；倒格子和晶体衍射；晶格振动和晶体的热学性质；固体能带和固体中电子输运性质。为了反映固体物理领域的新进展，对固体的磁性、超导电性和介电性；元激发；非晶态固体等的基本概念和内容也作了介绍。

本书是工科电子类电子材料与元器件专业、半导体物理与器件专业、磁性材料与器件专业的固体物理课教材，也可供从事有关专业工作的科技人员阅读。

高等学校教材

固 体 物 理

徐毓龙 阎西林

责任编辑 谭玉瓦

西安电子科技大学出版社出版

西安电子科技大学印刷厂印刷

陕西省新华书店发行 各地新华书店经售

开本 850×1168 1/32 印张 12 字数 290 千字

1990年6月第1版 1990年6月第1次印刷 印数 1-1400

ISBN 7-5606-0118-9 / TN · 0042 定价：2.85 元

出版说明

根据国务院关于高等学校教材工作分工的规定，我部承担了全国高等学校、中等专业学校工科电子类专业教材的编审、出版的组织工作。由于各有关院校及参与编审工作的广大教师共同努力，有关出版社的紧密配合，从1978年至1985年，已编审、出版了两轮教材，正在陆续供给高等学校和中等专业学校教学使用。

为了使工科电子类专业教材能更好地适应“三个面向”的需要，贯彻“努力提高教材质量，逐步实现教材多样化，增加不同品种、不同层次、不同学术观点、不同风格、不同改革试验的教材”的精神，我部所属的七个高等学校教材编审委员会和两个中等专业学校教材编审委员会，在总结前两轮教材工作的基础上，结合教育形势的发展和教学改革的需要，制订了1986~1990年的“七五”(第三)教材编审出版规划，列入规划的教材、实验教材、教学参考书等近400种选题。这批教材的评选推荐和编写工作由各编委会直接组织进行。

这批教材的书稿，是从通过教学实践、师生反映较好的讲义中经院校推荐，由编审委员会(小组)评选择优产生出来的。广大编审者、各编审委员会和有关出版社为保证教材的出版和提高教材的质量，作出了不懈的努力。

限于水平和经验，这批教材的编审、出版工作还会有缺点和不足之处，希望使用教材的单位，广大教师和同学积极提出批评建议，共同为不断提高工科电子类专业教材的质量而努力。

电子工业部教材办公室

前 言

本教材系按电子工业部制定的工科电子类专业教材1986—1990编审出版规划,由《电子材料与固体器件》教材编审委员会《半导体物理与器件》编审小组征稿、评定并择优推荐出版。责任编委是东南大学的简耀光教授。

本教材由西安电子科技大学担任主编,西安交通大学朱秉升教授担任主审。

本书的主要内容分两大部分。前五章为第一部分,涉及固体物理的基本内容和基本概念,诸如晶体结合、晶体结构和晶体缺陷;倒格子和晶体衍射;晶格振动和晶体的热学性质;固体能带和电子输运性质等。这一部分的参考教学时数是64学时,教学时强调基本概念和理论阐述的准确性,问题讲解的具体化和明确性。因而每章都写了内容提要和小结,选配了思考题和习题,要求演练。后四章涉及近年来发展较快的固体物理领域,诸如高温超导、磁记录材料、非晶态固体、元激发等。这部分参考教学时数为36学时,可作为固体物理(II)由本科生或有关专业的研究生选学。

本教材由徐毓龙、阎西林编著。徐毓龙编写第一、四、五、六章,阎西林编写第二、三、七、八、九章,曹全喜编写全部思考题与习题及部分插图。徐毓龙统编全稿。参加审阅工作的还有华南理工大学的周佐平同志,他为本书提出许多宝贵意见,这里表示诚挚的感谢。由于编者水平有限,书中难免还存在一些缺点和错误,殷切希望广大读者批评指正。

编著者

1989年6月21日

目 录

前言

第一章 晶体结合、晶体结构和晶体缺陷

1-1 引言	1
1-2 晶体的结合类型	3
1-2-1 离子结合	3
1-2-2 共价结合	6
1-2-3 金属结合	10
1-2-4 氢键结合	11
1-2-5 范德瓦尔斯(Van der Waals)结合	11
1-2-6 键和晶体结构	12
1-3 晶体结构的周期性——平移对称性	13
1-3-1 晶体结构及其布拉菲(Bravais)格子	13
1-3-2 元胞和基矢	16
1-3-3 典型晶体结构举例	18
1-3-4 晶向指数和面指数	27
1-4 晶体结构的对称性——7个晶系和14种布拉菲格子	30
1-4-1 基本对称操作	30
1-4-2 32种点群	31
1-4-3 7个晶系和14种布拉菲元胞	34
1-5 晶体缺陷	38
1-5-1 晶体中的结构缺陷	38
1-5-2 晶体中的化学缺陷	44
1-6 晶体中的扩散	45
1-6-1 晶体中扩散现象的实验规律	45

1-6-2 晶体中扩散的微观机制	47
1-6-3 离子导电	49
本章小结	51
思考题与习题	52
主要参考文献	54

第二章 倒格子和晶体衍射

2-1 倒格子	56
2-1-1 倒格子的定义	56
2-1-2 倒格子的重要性	58
2-2 晶体 X 射线衍射的一般原理	60
2-3 衍射极大条件	65
2-3-1 劳厄方程	65
2-3-2 衍射条件的布拉格(Bragg)解释	66
2-4 布里渊区(Brillouin Zone)	68
2-5 消光条件和结构因子	71
2-6 X 射线衍射实验方法	75
2-6-1 劳厄(Laue)法	75
2-6-2 转动单晶法	77
2-6-3 粉末法	78
2-7 几种衍射技术的比较	80
2-7-1 波长和能量	80
2-7-2 主要应用领域	81
本章小结	82
思考题与习题	83
主要参考文献	85

第三章 晶格振动和晶体的热学性质

3-1 一维单原子晶格振动	88
3-2 一维双原子晶格的振动	97

3-3 三维晶格的振动	103
3-3-1 元胞位置、原子位置、位移和简谐势的表示	103
3-3-2 运动方程及其解	104
3-3-3 模式密度	107
3-4 晶格振动的量子化, 声子(Phonon)	109
3-4-1 简正坐标	109
3-4-2 量子谐振子, 声子	111
3-4-3 平均声子数 $\bar{n}(\omega, T)$	112
3-5 固体比热	113
3-5-1 爱因斯坦(Einstein)模型	114
3-5-2 德拜(Debye)模型	114
3-5-3 比热理论值和实验值的比较	116
3-6 晶格的非简谐效应	119
3-6-1 热膨胀和固体状态方程	120
3-6-2 晶格热传导	124
本章小结	129
思考题与习题	130
主要参考文献	132

第四章 固体能带

4-1 原子能级和固体能带	135
4-1-1 原子能级	135
4-1-2 固体电子的共有化和能带	137
4-2 固体电子态的一般特点	142
4-2-1 布洛赫(Bloch)定理	142
4-2-2 布洛赫定理的一些重要推论	145
4-2-3 能态密度	147
4-3 紧束缚模型	149
4-4 近自由电子模型	154

4-4-1 索末菲(Sommerfeld)自由电子模型	154
4-4-2 近自由电子模型	156
4-4-3 自由电子和近自由电子的能态密度	165
4-5 各种能带图	167
本章小结	169
思考题与习题	170
主要参考文献	172
第五章 固体电子输运性质	
5-1 电子的速度	174
5-2 电子的有效质量	175
5-3 晶体中的电流和空穴	180
5-3-1 布洛赫电子费米气	180
5-3-2 能带中的电流	181
5-3-3 空穴	182
5-3-4 导体、绝缘体和半导体	184
5-4 电阻的起因	186
5-4-1 理想晶体无电阻	186
5-4-2 电阻来源于杂质、声子等对载流子的散射	187
5-5 金属电导论	188
5-5-1 金属电导的经典理论	188
5-5-2 金属电导论	189
5-6 热电效应	196
5-6-1 电场和温度梯度并存时玻尔兹曼方程的解	196
5-6-2 输运系数 L_{12} 和广义电场 $\mathcal{E}'$	198
5-6-3 热能流密度 j_Q	199
5-6-4 塞贝克效应和珀尔帖效应	200
本章小结	201
思考题与习题	202

主要参考文献	204
第六章 固体的磁性、介电性和超导电性	
6-1 固体磁性概述	205
6-2 原子(离子)的磁性	207
6-2-1 电子磁矩	207
6-2-2 原子磁矩	208
6-2-3 洪德(Hund)法则	210
6-2-4 理论与实验的比较	211
6-3 固体的顺磁性	212
6-3-1 顺磁性的实验结果	212
6-3-2 顺磁性理论	213
6-3-3 金属的顺磁性	214
6-4 固体的铁磁性	216
6-4-1 铁磁物质的特性	216
6-4-2 磁序	218
6-4-3 铁磁性的唯象理论——分子场理论	219
6-4-4 分子场的物理起源——局域电子交换作用模型	220
6-4-5 巡游电子交换作用模型	221
6-5 磁畴和铁磁物质的技术磁化	223
6-5-1 磁畴	223
6-5-2 技术磁化的不可逆性和矫顽力	224
6-5-3 铁磁晶体中的各种能量	224
6-5-4 磁泡	227
6-6 磁共振	227
6-6-1 无阻尼共振	228
6-6-2 阻尼共振	229
6-7 与磁性对比来看固体的介电性	231
6-7-1 一些基本概念	231

6-7-2 铁电体	233
6-8 电介质的极化机理	237
6-8-1 电子位移极化	238
6-8-2 离子位移极化	240
6-8-3 偶极矩的转向极化	242
6-9 在交变电场中的电介质	244
6-9-1 弹性偶极子的强迫振动	244
6-9-2 复介电系数和介质损耗	246
6-10 介质极化弛豫	248
6-11 固体超导电性概述	251
6-12 超导体的基本特性	254
6-12-1 理想导电性	254
6-12-2 完全抗磁性	254
6-12-3 超导体的临界参数	255
6-12-4 伦敦方程	256
6-12-5 第Ⅱ类超导体	259
6-13 超导微观机制——声子机制	262
6-13-1 声子机制的实验根据	262
6-13-2 超导态的本质——声子机制	264
6-13-3 超导临界温度	266
6-14 超导环路中的磁通量子化	267
6-15 约瑟夫逊(Josephson)效应	269
6-15-1 直流约瑟夫逊效应	269
6-15-2 交流约瑟夫逊效应	271
6-15-3 电磁辐射对约瑟夫逊结的作用	272
6-15-4 磁场对超导电流的调制现象	272
6-15-5 超导量子干涉效应	274
6-16 磁性材料、超导材料、介电材料及其应用	276

6-16-1 磁性材料及其应用	276
6-16-2 超导材料及其应用	278
6-16-3 介电材料及其应用	279
本章小结	281
主要参考文献	282
第七章 元激发	
7-1 声子(Phonon)、极化激元(Polariton)	286
7-1-1 声子	286
7-1-2 极化激元	286
7-2 极化子(Polaron)	294
7-3 激子(Exciton)	297
7-4 等离激元(Plasmon)和准电子(Quasi-Electron)	304
7-5 磁振子(Magnon)	309
本章小结	312
主要参考文献	314
第八章 合金与相图	
8-1 二元匀晶相图	317
8-2 共晶相图	319
8-2-1 固态中二组元完全不互溶体系的相图	319
8-2-2 固态中的二组元部分互溶体系的相图	321
8-3 包晶相图	325
8-4 形成稳定化合物的二元相图	327
8-5 合金的热力学	329
8-5-1 合金的自由能	329
8-5-2 用自由能解释相图	334
本章小结	336
主要参考文献	337
第九章 非晶态固体	

9-1 非晶态固体的结构及实验测定	340
9-1-1 主要结构特征	340
9-1-2 径向分布函数	341
9-1-3 EXAFS	346
9-1-4 非晶态的结构模型	349
9-2 非晶态固体中的电子态	353
9-2-1 电子态的局域化	354
9-2-2 非晶半导体的能带模型	357
9-3 非晶态的直流电导与光吸收	359
9-3-1 直流电导	359
9-3-2 光吸收	363
本章小结	368
主要参考文献	369

第一章 晶体结合、晶体结构 和晶体缺陷

本章提要

本章分6节来介绍晶体结合、晶体结构和晶体缺陷三方面的基本知识。一、二节讨论结合力的一般特点和晶体的5种结合类型。三、四节介绍晶体结构的周期性和对称性两大特点；介绍晶格、布拉菲格子、元胞、晶体学指数等重要概念并举例说明典型的晶体结构。最后两节介绍基本的晶体缺陷及借助缺陷运动而产生的扩散和离子导电现象。

1-1 引言

从传统观念来说，物质一般可分成气体、液体和固体。固体物质有一定的形状和体积。根据组成固体的原子、离子或分子在空间是否具有周期性，固体可分成晶体和非晶体两大类。固体物理主要的研究对象是晶体，以后提到固体一般指晶体。

物质能以固体存在的原因，是固体的原子、离子或分子之间存在着相当大的相互作用力。对于一个稳定结构的固体，存在两种作用力：吸引力和排斥力。吸引力把原子、离子或分子结合在一起，防止他们彼此散开；排斥力阻止它们无限接近，以保持一定的体积。固体的体积是这两种力的平衡所决定的。

下一节我们将详细研究吸引力的性质，这里简要说说排斥力。排斥力有两个来源，一是同性电荷间的库仑排斥力(主要是

核之间的排斥力)。二是和泡利(Pauli)原理有关的力。例如, 当 2p 满壳层的钠离子(Na^+)和 3p 满壳层的氯离子(Cl^-)相互接近到一定程度时, 3p 电子壳层和 2p 电子壳层相互交叠, 在每一个壳层中的电子数都超过泡利原理所允许的数目, 因而某些电子就要趋向更高的能级, 结果导致系统能量增加, 表现出一种排斥力。

由上例可见固体的原子、离子或分子之间的作用力涉及原子的电子组态, 特别是价电子组态。在讨论固体的结合之前, 先简单回顾原子物理和量子力学中有关原子电子组态的概念。习惯上, 根据径向对称势场中薛定谔方程的解, 将原子的电子态或电子轨道进行分类。由于主量子数和轨道量子数的不同, 它们可分成 1s; 2s, 2p; 3s, 3p, 3d; 4s, 4p, 4d, 4f; ……电子态或电子轨道。电子按能级由低到高填充构成了原子的电子壳层(或电子组态)。由泡利原理, s、p、d、f 等状态可容纳的最大电子数分别为 2、6、10 和 14。

化学元素周期表概括了所有元素原子的电子组态。表 1-1 给出了一些重要元素的价电子组态。表中字母 s、p 右上角的数字表示该状态的电子数。如 $\text{Si}(3s^2 3p^2)$ 表示硅原子的价电子组态是: 3s 态有两个电子, 3p 态有两个电子。表中元素符号下方的数字表示原子的负电性。原子的负电性是原子得失价电子能力的一种度量, 它的定义是:

$$\text{负电性} = \text{常数}(\text{电离能} + \text{亲和能}) \quad (1-1)$$

为使锂(Li)的负电性为 1, 通常选上式的常数等于 0.18。式中的电离能指原子发生第一次电离所需要的能量。亲和能则指中性原子获得一个电子所放出的能量。负电性小的元素易于给出电子, 负电性大的元素易获得电子。从表 1-1 可知, 在同一周期内, 由左至右负电性逐渐增大, 而在同一主族内由上至下负电性逐渐减小。

1-2 晶体的结合类型

按结合力的性质，晶体可分成 5 类：离子晶体、共价晶体、金属晶体、分子晶体和氢键晶体。

晶体中原子(离子或分子)间的作用力常称为键。固体中有 5 种典型的键，即离子键、共价键、金属键、范德瓦尔斯键和氢键。

1-2-1 离子结合

当负电性小的(金属)原子与负电性大的(非金属)原子接近时，前者放出价电子形成正离子，后者获得前者放出的电子而形成负离子，两者都有闭合的电子壳层。正负离子由于库仑引力而相互靠近，但当他们近到一定程度时，两闭合电子壳层的电子云因重叠而产生排斥力。当吸引力和排斥力平衡时，就形成稳定的离子键。

氯化钠是典型的离子晶体，正负离子在空间的排列如图 1-1 所示。钠离子(Na^+)与氯离子(Cl^-)交替排列，一种离子的最近邻是另一种离子。

下面我们仅就一价的碱卤晶体讨论其离子间的相互作用能。根据库仑定律，一对离子之间的库仑能为

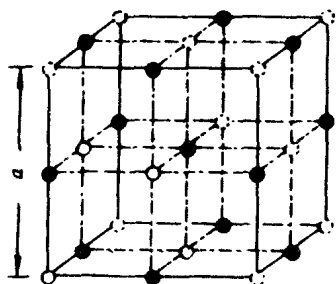


图 1-1 氯化钠结构

$$u_1(r) = \pm \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1-2)$$

式中的 r 为两离子间的距离, e 为电子电荷的绝对值。同种离子之间取+号, 异种离子之间取-号。

离子之间的重叠排斥力难于计算, 玻恩(Born)假设重叠排斥能有如下形式:

$$u_2(r) = \frac{b}{r^n} \quad (1-3)$$

其中 b 和 n 是由实验确定的常数。对于碱卤晶体, n 值大致在 6 ~ 10 之间。

考虑到排斥能和吸引能, 一对离子之间的相互作用势能为

$$u(r) = u_1(r) + u_2(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{b}{r^n} \quad (1-4)$$

$u(r)$ 的典型曲线如图 1-2 所示。

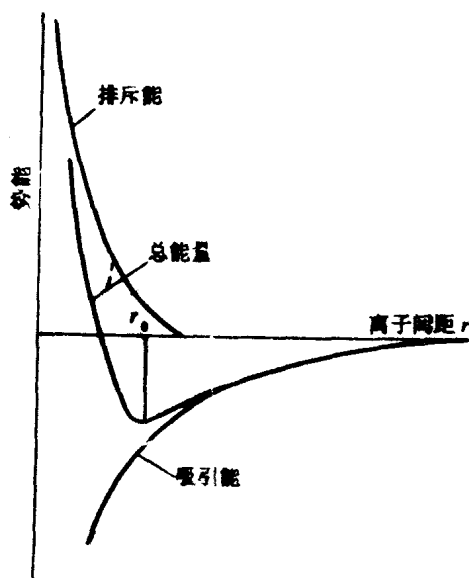


图 1-2 一对离子的相互作用势能