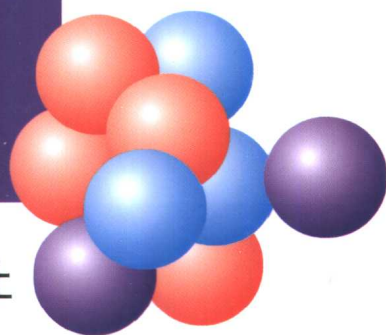
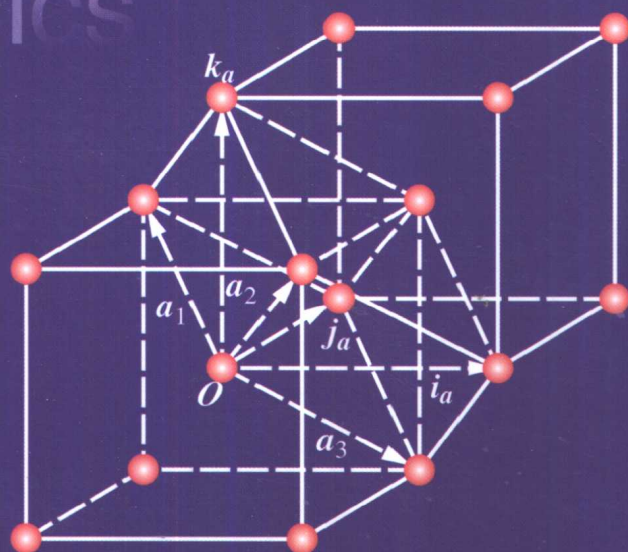


材料物理基础

The Foundations of Material Physics

宗祥福 翁渝民 编著

The Foundations of
Material
Physics



复旦大学出版社

材料物理基础

宗祥福 翁渝民 编著

复旦大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

材料物理基础/宗祥福,翁渝民编著. —上海:复旦大学出版社,
2001.12

ISBN 7-309-03050-8

I. 材… II. ①宗…②翁… III. 材料-物理性能-高等学校-
教材 IV. TB303

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 093523 号

出版发行 复旦大学出版社
上海市国权路 579 号 200433
86-21-65118853(发行部) 86-21-65642892(编辑部)
fupnet@fudanpress.com http://www.fudanpress.com

经销 新华书店上海发行所

印刷 上海崇明晨光印刷厂

开本 787×1092 1/16

印张 50.5

字数 1290 千

版次 2001 年 12 月第一版 2001 年 12 月第一次印刷

印数 1—1 500

定价 75.00 元

如有印装质量问题,请向复旦大学出版社发行部调换。

版权所有 侵权必究

内 容 提 要

本书是为适应强化基础训练、拓宽知识面的需要而撰写的教学用书或教学参考书。全书共分 14 章,主要阐述材料结构及其组成粒子间的相互作用规律、高分子凝聚态、固体材料的各种性质、固体能带理论与超导、纳米材料,侧重探讨固体电子材料。

本书可作为理工科院校材料物理和材料化学等专业的基础教材或教学参考书。

MAU 5/06

前 言

在过去的一百多年里,材料研究方面取得了令人激动的进步。在上个世纪之交,人类还不知道物质的原子结构。但在今天,我们不仅知道了结构,更能够轻易地将原子位置进行特定的排列以形成人工结构,通过原子的组合来获得自然界物质所不可能具有的特性,而这些新的功能却是当今的技术所需要的,尤其是我们可以调节它的性质来使它适应各种环境,即所谓的智能材料。从过去几年开始,我们已经能够控制单个原子来创造用于进行科学探索的物质结构,但这毫无疑问将导致意义深远的一系列技术的、社会的后果;举例来说,如果我们操控了一个DNA分子中的核苷酸,由于它们是和基因的功能相联系的,所以那也就意味着我们对疾病的某种控制。

一百年前没有什么电子设备,但今天几乎所有的电子应用领域都少不了它们。实际上,所有的电子器件都可以看作为材料的再加工。可以预计:在不久的将来,不仅仅是计算和信息存储设备,几乎所有的电子设备都会内嵌一个微处理器。这些在一个世纪前所无法想象的器件,如果不是关于材料的研究在绝缘体、半导体、金属、陶瓷和聚合物等方面的成就的话,也是不可能实现的。在上个世纪末,我们已经开始讨论在光速和原子量子本性的限制下,我们目前的器件和设备还能有多大的发展。这是一个前一个世纪的科学家和工艺学家们所根本无法理解的问题。在这个论题里,我们正在探讨硅后时代的材料物理学和材料化学问题。

在一百年前,人们对瞬时现象的观测局限于几分之一秒的分辨率。但是现在,我们已经可以在飞秒量级上观测性质的变化了。我们既能够研究在飞秒时间尺度内一个半导体中的电子的弛豫态,还可以观察在皮氏培养皿中细菌的可视运动。我们已能在原子、分子尺度上观测、分析、修饰及组装材料。

材料研究的范围从基础科学,到工程学,直到最后的生产工艺。这种状况在过去的数百年甚至在整个人类文明史中都未曾改变。材料研究是由于人类的实际需求所产生的。文明纪元的划分也是根据材料来命名的,因此在人类征服自然的历程中材料始终是最重要的。材料研究的领域可追溯到冶金术、自然哲学,甚至还包括艺术,并且这些研究已经进行了很多世纪了。但是,我们现在所指的由材料物理所表征的现代材料研究,却只有大约60年的历史。实际上,科学家对不

完整晶体结构的研究才开创了真正的材料物理学。

现在,在几乎所有的设有材料科学与工程系类的院校中,几乎都开设了材料物理之类的课程。复旦大学在1983年建成了材料科学系,并从1992年起开设材料物理学课程。先后由宗祥福和翁渝民担任主讲,并一直延伸至今。主要是面向培养为我国微电子工业服务的理工科类大学本科生。

本教材初稿由宗祥福编写而成。翁渝民对全稿作了增删、修订,并写了绪论、结语、第九及第十七章等。现整理成书出版。本书是根据国家教育部1998年调整的新专业目录,为适应加强基础、拓宽知识面的需要而编写的。我们的学生王建颖、王锋及吴福扬在书稿誉印、打字等方面付出了辛勤的劳动。整个出版工作得到了复旦大学教务处的大力支持,在此谨表感谢。

绪 论

科学研究的目的在于认识自然与改造自然,而改造自然的根本所在是让人类有更良好、更优越的生存环境。随着信息时代的到来,人类又获得了过去单凭本身智力无法想象的能力。人类文明的发展,历史的断代,往往可以用人类所掌握的技术工具之材料来表征。如远古的石器时代,尔后的青铜时代、铁器时代。可以这么说:材料是现代工业社会的支柱之一,是现代材料构筑当今信息的感知、传输、处理、存储和显示技术,是现代材料支撑了信息技术。能源问题的物质基础是材料。所有的环境问题也都可归结为物质材料问题。现代先进材料科学是产业和研究开发活动的基础,是生命科学、信息通信和环境科学技术等重点科技领域的基础,是一切科学技术发展的生命线。

电话传输的基础物理学研究到 1920 年已经发展得相当完善了。因此,与通信相关的研究开始转移到基础材料领域。1939 年杜邦公司研制出高纯度硅材料。第二次世界大战时期,硅和锗已被用来作为最好的微波检波器。特别是自 1947 年 Bell 公司的两位物理学家 Bardeen 和 Brattain 展示首块晶体管以来,微电子工业飞速发展。1956 年,提出了晶体中杂质扩散技术,1960 年,解决了外延晶体生长技术及硅平面技术,半导体器件进入集成电路(IC)时代。60 年代以来,芯片的集成度呈指数上升趋势。到 1999 年底,集成了 1 亿个晶体管的存储器芯片和工作频率达 1 GHz 的微处理器已经诞生。每年半导体芯片的销售额超过了 130 亿美元。再过 5 年左右,硅基集成电路将可制造出每秒能运算 130 万亿次的超级计算机。实际上,几乎没有一个生活领域没有接触到硅芯片了。可以说,硅芯片的发展是材料科学在 20 世纪中最大的创新。

20 世纪中材料科学的进展是与技术发展的需要紧密相关的,尤其是 20 世纪后 60 年代,这一领域开始成形并得到承认。50 年代,固体物理学登场,美国学术界首次出现材料科学这个词汇。1960 年,日语中也出现了材料科学这个词汇。有趣的是,凝聚态物理学在 1960 年左右同时也正式宣布登场。这两门关系密切的科学在今天依然是科学研究中最大的领域。估计全世界至少有三分之一以上的物理学家在从事凝聚态物理学及与其相关的材料科学的研究工作。材料科学几乎是 20 世纪后半叶中所有领域内技术创新的基础。特别是硅材料,已成为我们这个时代最具特征性的材料。今天的电子学与信息技术几乎是唯一地建立在由硅制成的器件基础之上。硅器件已导致了无数的发明。20 世纪经济奇迹有很大部分来自于硅和与它相关的技术。回顾历史,以硅为核心的电子材料的发展真令人感慨万分。在直接或间接的领域内,它们创造了数以十亿计的商机,提供了数以百万计的就业机会,并极大地扩展了人类在信息采集、传输和处理上的能力,带来了今日信息技术(IT)的辉煌。科学,特别是材料科学是我们取得这些伟大成就的关键。同时,这些进步又使科学家们得以进一步探索自然的奥秘。实际上,在人类征服自然的过程中,材料及材料研究始终是重要的。

历史已经证明,正是由于 IT 产业,特别是通信产业,如 Bell 及 Intel 等公司雇用了最优秀

的科学家进行基础和应用研究才取得了这样辉煌的成就。对于这一点,以往的 IT 领域的领导者都看得很清楚。他们已经意识到把最新可增强 IT 的物理学成果投入到实用中去的巨大潜力。现在和将来的卓有远见的领导者也必将继承这一思想和做法。

材料家族按其组成可分为金属材料、陶瓷材料、高分子材料和复合材料四大类。金属材料主要包括金属化合物、轻金属合金、难熔金属合金、稀土合金、形状记忆合金、非晶态金属及准晶合金材料;陶瓷材料主要包括高温结构陶瓷、功能陶瓷及超硬陶瓷材料;高分子材料主要有高分子工程材料及功能材料;复合材料有高分子基复合材料、陶瓷基复合材料及金属基复合材料。

而从另一视角分,又可分为传统材料和先进材料两大类。先进材料是指那些新近开发或正在开发的、具有优异性能的材料。诸如信息功能材料(主要是微电子材料、光电子材料及光子材料)、纳米材料、智能材料、生物材料及仿生材料、环境友好材料、新能源材料、复合材料、高性能陶瓷及新型金属材料等。先进材料对于高科技具有极为关键的作用。

材料科学是一门应用性很强的工程科学。这正是由它的研究对象材料与社会需求的密切关系而决定的。通常正是由于社会的需求而促使材料科学家们与工程师设法去寻找新材料或改变老材料来满足新的需求。而且科学家们发现了某些具有新性能、新功能的新材料后,又会促进人们研制开发出新元件和新器件,从而进一步推动工业社会的发展。我们现在比过去任何时候都更加明确是市场决定产品。没有市场,再好的材料也没有用武之地。

材料科学是一个典型的多学科交叉、融合的科学,它有着不定的且不断扩大的边界。

在材料开发上,有以下四个特点:

(1) 整个开发过程耗时较长。

(2) 这是一个化学-物理,甚至生物、数学等多学科交叉、融合和互相渗透的过程。

(3) 不能仅仅由研制材料的人员来决定所研制的材料是否符合目标和要求,主要是按系统和器件的要求来进行研制。

(4) 仅仅通过材料的开发不可能获得直接的投资效果,要在器件及系统中产生附加价值后,才能对所研制、开发的材料进行评价。

现代材料科学的目的是为了预测与理解材料的技能、制作及发明有用的材料。材料物理的目的主要是着眼于材料的结构-功能-性质的相互关系的物理学本质。它是一门研究材料的结构及其组成粒子(原子、离子、电子等)之间相互作用及运动规律,并进一步阐明其性能与用途的科学。

材料物理学的基本理论框架就是凝聚态物理学。

物理学家思考问题的方法扩展了我们对物质材料世界的认识。特别是在 20 世纪,相对论揭示了时间和空间彼此间深刻的联系,以及物质和能量间的惊人的统一。量子力学则表明:运动有时空周期性。运用到物质材料世界中,便产生了人们难以想象的美观、精确和实用。材料物理学的一个基本思路是:大部分固体的特性都取决于其微结构,取决于原子的排列及固体在一维、二维和三维空间上的尺寸大小。换句话说,如果改变其中的一个或几个参数,固体的特性就会改变。最著名的一个例子就是由于大量碳原子排列发生变化,金刚石就成了石墨。如果固体的原子结构偏离平衡态或固体的尺寸在空间各维减小几个原子间距,我们就可以发现不小的变化。比如:当晶体的尺度减小到几个纳米到几十个纳米时,它的力学、电学、热学及光学等性质就会发生戏剧性的变化;许多不溶于水的物质在纳米颗粒下会溶于水;普通单晶硅是

几乎不发光的,但纳米晶的硅就会发光;普通钢是一种多晶物质,但纳米晶的钢材,其硬度就会大幅度提高;普通陶瓷又硬又脆,而纳米陶瓷却有很好的韧性,在高温下柔软异常;纳米铜竟有超过自身晶格 10^{19} 倍的自扩散系数;由石墨原子层弯曲成的碳纳米管(直径为几到几十纳米,壁厚仅几个纳米),其韧性极高,强度竟可达到钢的 100 倍,而比重仅为钢的 $\frac{1}{6}$,它还有极好的储氢性能,有望成为极好的绿色能源材料。伴随着纳米材料,纳米电子、纳米医学与纳米机械学也应运而生,灰尘大小的军用纳米微电子机械及医用生物纳米微电子机械技术的突破已迫在眉睫,科学家对原子、分子的操纵精度正越来越接近于生物精度(一般蛋白质、DNA 的分子大小在几个纳米到几十个纳米量级)。一个真正革命性的技术——纳米技术正在进入 21 世纪。

尽管材料家族的成员众多复杂,但对材料物理学来说,其高于一切的愿望主要并不在于追求理解为什么一种物质和其他物质行为的不同,而是期望寻找出超出特定物质的规律。实际上,对材料微结构的控制的知识,一直是材料科学家的梦想与追求,材料科学带来了材料的结构、特性与加工过程定量化理解和控制的发展方向。20 世纪材料科学的成就都可归结为我们对材料结构-特性-工艺间关系理解的成熟。正是从发现材料到材料的系统开发的这种范式的转变,创造了材料科学与工程这门学科。在这里我们看到,科学家与工程师有以强有力的理论支持来挑战传统的自由,而无须恐惧或担心会遭到惩罚。

我们所写的《材料物理基础》,则是材料物理的初级教材或参考书。我们的重点主要放在固体电子材料,侧重于基本概念及思路。

现在许多实验室都在进行极限尺寸下材料制备的研究,他们在器件领域的探索将导致新技术的产生。这种突破需要人类对基本问题的理解的进步以及新的数学、科学定理的建立。只有那些将科学进程应用于生产技术的公司才能在量子化的信息时代生存下去。我们的计算技术由于我们对物理定律的束缚而难于逾越。这种情况也将为数学家、物理学家、化学家等各种学科的科学家带来令人鼓舞的研究机遇。

回顾 20 世纪,我们看到一些主要的改变就是使用了愈来愈多的复杂的、人工设计和制备的材料,以及在空间和时间上愈来愈灵敏的检测技术。特别是提出新的理论观念甚至是研究的新范式。

对未来的预测是困难的,但有一点则是明确的,那就是光明的未来正在远方向我们召唤!

目 录

绪 论	1
第一章 晶体结构(一)	1
§ 1.1 晶体中原子、分子的结合方式	1
§ 1.2 离子键与离子晶体	3
§ 1.2.1 几种典型的离子晶体结构	3
§ 1.2.2 点 阵 能	4
§ 1.2.3 晶体中的离子半径	7
§ 1.2.4 密堆积原理	9
§ 1.2.5 离子的极化	11
§ 1.3 共价键与共价化合物	13
§ 1.3.1 共 价 键	13
§ 1.3.2 共 价 晶 体	13
§ 1.3.3 共 价 半 径	17
§ 1.4 键 的 极 性	18
§ 1.5 金属、合金与金属键	20
§ 1.5.1 金 属 键	20
§ 1.5.2 密堆积和金属的晶体结构	21
§ 1.5.3 合 金 结 构	22
§ 1.5.4 金属的原子半径	23
§ 1.6 氢键与氢键晶体	24
§ 1.7 范德华键与分子晶体	25
第二章 晶体结构(二)	28
§ 2.1 晶体的特征	28
§ 2.2 空间点阵	29
§ 2.3 晶 胞	30
§ 2.3.1 布喇菲晶胞	30
§ 2.3.2 约 化 胞	32
§ 2.4 晶面与晶向	34
§ 2.4.1 晶向的密勒指数	34
§ 2.4.2 晶面的密勒指数	34
§ 2.5 倒 易 点 阵	35
§ 2.5.1 倒易点阵的基矢	35
§ 2.5.2 倒易关系与线面对应	38

§ 2.6 晶体的宏观对称性——32 种点群	38
§ 2.6.1 对称操作和对称元素	39
§ 2.6.2 32 种点群	40
§ 2.7 晶体的微观对称性——空间群	42
§ 2.7.1 晶体的微观对称元素	42
§ 2.7.2 230 种空间群	44
第三章 晶体缺陷	53
§ 3.1 点缺陷	53
§ 3.1.1 各类点缺陷	54
§ 3.1.2 点缺陷的热平衡浓度	56
§ 3.1.3 点缺陷的原因	57
§ 3.1.4 扩散现象	59
§ 3.1.5 扩散的微观机理	61
§ 3.2 线缺陷——位错	63
§ 3.2.1 伯格矢量	64
§ 3.2.2 位错的应力与能量	67
§ 3.2.3 位错的运动	69
§ 3.2.4 位错与其他缺陷的相互作用	73
§ 3.3 面缺陷	77
§ 3.3.1 匹配界面	78
§ 3.3.2 半匹配界面	83
第四章 非晶态结构	88
§ 4.1 描述方法	89
§ 4.1.1 配位数	89
§ 4.1.2 径向分布函数	89
§ 4.1.3 泡沫-原子原胞集合的蜂房	91
§ 4.2 无规则密堆积	92
§ 4.2.1 经验的无规则密堆积结构	92
§ 4.2.2 理论处理方法	93
§ 4.2.3 无规则密堆积结构的特征	94
§ 4.3 连续无规则网络	95
§ 4.3.1 共价玻璃的连续无规则网络模型	96
§ 4.3.2 典型的元素连续无规则网络结构——非晶态硅	98
§ 4.3.3 典型的二元化合物的连续无规则网络结构——熔融氧化硅	99
§ 4.4 硫系玻璃	100
§ 4.4.1 分子固体与网络维数	100
§ 4.4.2 一维与二维固体网络	102
§ 4.4.3 硫系玻璃及氧化物中成分的自由度	104
§ 4.4.4 理想玻璃及拓扑缺陷	106
§ 4.5 高分子键	108
§ 4.5.1 无规则线团模型	108
§ 4.5.2 无规行走、醉鸟和柔性链的位形	110

第五章 高分子材料的链结构	113
§ 5.1 高分子链的近程结构	115
§ 5.1.1 结构单元的化学组成	115
§ 5.1.2 键 接 结 构	117
§ 5.1.3 支化与交联	118
§ 5.1.4 共聚物的序列结构	120
§ 5.1.5 高分子链的空间立构	121
§ 5.2 高分子链的远程结构	123
§ 5.2.1 高分子的大小	123
§ 5.2.2 高分子链的内旋转构象	124
§ 5.2.3 高分子链的柔顺性	126
§ 5.3 高分子链的构象统计	130
§ 5.3.1 均方末端距的几何算法	130
§ 5.3.2 均方末端距的统计算法	133
§ 5.3.3 高分子链柔顺性的表征	139
§ 5.3.4 高分子链的均方旋转半径	140
第六章 高分子凝聚态	141
§ 6.1 引 言	141
§ 6.2 半结晶聚合物	141
§ 6.2.1 晶体结构	142
§ 6.2.2 形 态	143
§ 6.2.3 熔 融	146
§ 6.3 无定形聚合物	146
§ 6.3.1 玻璃化转变现象	147
§ 6.3.2 玻璃化转变温度的化学结构影响	149
§ 6.3.3 半结晶聚合物的玻璃转变	150
§ 6.4 聚合物材料的不同状态	150
§ 6.4.1 非晶态材料	150
§ 6.4.2 交联非晶态材料	151
§ 6.4.3 半结晶材料	151
§ 6.4.4 定向结晶聚合物	152
§ 6.5 软物质系统	153
第七章 晶格振动和晶体的热学性质	155
§ 7.1 一维原子链的振动	155
§ 7.1.1 一维布喇菲格子的情形	155
§ 7.1.2 一维复式格子的情形	157
§ 7.1.3 声学波和光学波	159
§ 7.1.4 周期性边界条件[玻恩-卡门(Born-Karman)边界条件]	161
§ 7.2 晶格振动的量子化——声子	162
§ 7.2.1 一维布喇菲格子	163
§ 7.2.2 三维复式格子	166

§ 7.3 长波近似	168
§ 7.3.1 长声学波	168
§ 7.3.2 长光学波	170
§ 7.4 固体比热	173
§ 7.4.1 爱因斯坦模型	175
§ 7.4.2 德拜模型	176
§ 7.5 非简谐效应	179
§ 7.5.1 热传导	180
§ 7.5.2 热膨胀	182
§ 7.6 确定振动谱的实验方法	183
§ 7.7 晶格的自由能	186
第八章 固体材料中电子能量状态	190
§ 8.1 固体电子论基础	190
§ 8.1.1 一维周期性势场中电子的能量状态	190
§ 8.1.2 克龙尼克-潘纳模型	194
§ 8.1.3 微扰法——自由电子近似	199
§ 8.1.4 简并微扰法——散射波较强的情况	201
§ 8.1.5 晶体中电子运动的速度和加速度	205
§ 8.1.6 金属、半导体和绝缘体 空穴概念	207
§ 8.2 能带理论	211
§ 8.2.1 三维情况的布洛赫定理	212
§ 8.2.2 布里渊区	216
§ 8.2.3 平面波方法	219
§ 8.2.4 紧束缚方法	223
§ 8.2.5 正交化平面波方法	227
§ 8.2.6 $k \cdot p$ 微扰法	231
§ 8.2.7 赝势方法	236
§ 8.2.8 费密面的构造法	239
§ 8.2.9 迪·哈斯-范·阿耳芬效应	242
§ 8.2.10 合金的性质和能带结构——休谟-饶塞里定律	246
§ 8.3 非晶材料的能带结构	250
§ 8.3.1 定域化	250
§ 8.3.2 局域有序和化学成键	263
§ 8.3.3 非晶半导体的能带模型	267
§ 8.3.4 非晶半导体的缺陷与能隙态	269
第九章 固体的电导	280
§ 9.1 金属的电导	280
§ 9.1.1 玻尔兹曼方程	281
§ 9.1.2 金属的电导率	283
§ 9.1.3 弛豫时间的统计理论	286
§ 9.1.4 电子-晶格相互作用	288
§ 9.1.5 纯金属的电阻率	291

§ 9.1.6	电离杂质的散射	295
§ 9.1.7	不含过渡族元素的金属固溶体的电导	297
§ 9.1.8	过渡金属及其合金的电阻	301
§ 9.1.9	弱磁场下玻尔兹曼方程的解	304
§ 9.1.10	金属的热导率	307
§ 9.2	半导体的电导	309
§ 9.2.1	晶态半导体的电导	310
§ 9.2.2	非晶态半导体的电导	345
§ 9.2.3	掺杂非晶态半导体的电导	374
§ 9.3	快离子电导	395
§ 9.3.1	快离子电导概述	395
§ 9.3.2	晶体结构和快离子传导	401
§ 9.3.3	迁移机制和点阵缺陷	408
§ 9.4	高分子电导	418
§ 9.4.1	载流子的种类	418
§ 9.4.2	载流子的产生	420
§ 9.4.3	载流子的迁移	426
§ 9.5	超 导 电 性	436
§ 9.5.1	超导态的电磁特性	438
§ 9.5.2	超导电相变	441
§ 9.5.3	两类超导体	444
§ 9.5.4	金斯堡-朗道理论	448
§ 9.5.5	同位素效应和电子-声子相互作用	453
§ 9.5.6	库 柏 对	456
§ 9.5.7	超导态的微观图像和特性	459
§ 9.5.8	超导能隙和隧道效应	462
§ 9.5.9	宏观的量子现象	466
§ 9.5.10	约瑟夫逊效应	470
§ 9.5.11	超导量子干涉效应	473
第十章	固体材料的介电特性	477
§ 10.1	电介质材料的介电特性	477
§ 10.1.1	电介质材料的静态介电常数	477
§ 10.1.2	分子极化	478
§ 10.1.3	洛伦兹的有效场	483
§ 10.1.4	变动电场中电介质的行为——介质损耗	486
§ 10.1.5	极化弛豫	489
§ 10.1.6	动态介电常数	491
§ 10.2	高分子材料的介电性质	493
§ 10.2.1	高分子材料介电常数与结构的关系	493
§ 10.2.2	高聚物的介电损耗	495
§ 10.3	晶体的介电性质	507
§ 10.3.1	晶体的极化率和介电常数	509

§ 10.3.2	晶体的极化能 $[\chi_{ij}]$ 和 $[\epsilon_{ij}]$ 张量的对称性	510
§ 10.3.3	晶体对称性的影响	512
§ 10.4	晶体的压电性质	513
§ 10.4.1	正压电效应	513
§ 10.4.2	反压电效应	517
§ 10.4.3	二级压电效应	518
§ 10.4.4	晶体对称性对压电模量的影响	519
§ 10.4.5	压电晶体材料	524
§ 10.4.6	压电晶片的切型和振动方式	526
§ 10.5	晶体的热释电性质	529
§ 10.5.1	热释电效应	529
§ 10.5.2	晶体对称性对热释电效应的影响	529
§ 10.5.3	静压力产生的极化	531
§ 10.5.4	热释电晶体材料及其应用	532
§ 10.6	晶体的铁电性质	534
§ 10.6.1	自发极化和铁电晶体	534
§ 10.6.2	铁电晶体的一般特性和种类	534
§ 10.6.3	铁电材料的分类和应用	540
§ 10.6.4	反铁电体和铁弹体(包括铁电-铁弹体)	544
§ 10.6.5	钛酸钡的铁电性质	549
§ 10.6.6	铁电体的相变热力学	554
§ 10.6.7	光学波软模与铁电性	558
第十一章	材料的光学特性(一)	561
§ 11.1	光在晶体中的传播	561
§ 11.1.1	光波和光线	561
§ 11.1.2	晶体中的光波	564
§ 11.1.3	双 折 射	565
§ 11.2	光率体和折射率面	572
§ 11.2.1	光 率 体	572
§ 11.2.2	晶体对称性对光率体的影响	574
§ 11.2.3	折 射 率 面	582
§ 11.2.4	光率体和折射率面的色散	585
§ 11.3	晶体的电光效应	589
§ 11.3.1	电光效应的基本原理	589
§ 11.3.2	一次电光效应	593
§ 11.3.3	二次电光效应	621
§ 11.4	电光效应的应用	624
§ 11.5	电光晶体材料	637
§ 11.6	弹光效应	648
§ 11.7	晶体的非线性光学效应	662
§ 11.7.1	非线性光学效应和非线性光学系数	662
§ 11.7.2	位 相 匹 配	670

§ 11.7.3 光混频和参量振荡	684
§ 11.8 非线性光学材料	689
第十二章 固体的光学特性(二)	697
§ 12.1 固体光学常数间的基本关系	697
§ 12.2 固体中的光吸收过程(概述)	701
§ 12.3 基本吸收	702
§ 12.4 自由载流子的光吸收	705
§ 12.5 晶格吸收	706
§ 12.6 杂质和缺陷吸收	709
§ 12.7 光电导和光生伏特	711
§ 12.8 固体中的光发射过程	715
§ 12.9 固体发光的衰减机构和陷阱效应	718
§ 12.10 电致发光与半导体发光二极管	721
§ 12.11 受激发射	723
第十三章 固体的磁性	728
§ 13.1 原子和离子间的固有磁矩	729
§ 13.2 逆磁性	732
§ 13.3 顺磁性	734
§ 13.4 原子磁性的量子力学理论	737
§ 13.5 顺磁共振	740
§ 13.6 金属中传导电子的磁性	745
§ 13.7 铁磁性的唯象理论	749
§ 13.8 交换作用	752
§ 13.9 巡游电子模型	756
§ 13.10 自旋波	760
§ 13.11 磁畴	763
§ 13.12 反铁磁性	767
§ 13.13 亚铁磁性	772
第十四章 纳米材料	775
§ 14.1 基本概念	776
§ 14.2 纳米材料特性上的奇异性	777
§ 14.2.1 晶体尺寸效应	777
§ 14.2.2 热学性质	778
§ 14.2.3 纳米效应	780
§ 14.2.4 纳米结构单元之间的交互作用	781
§ 14.3 纳米材料物性的特殊性	782
§ 14.4 概念与计算上的挑战	782
结 语	786
主要参考书目	788

第一章 晶体结构(一)

晶体是固体材料的主要组成部分,同样也是结构研究得最完善的一种固体材料。通常有两条途径介绍晶体材料的结构:一是根据晶体中原子、分子之间的作用力来描述晶体的结构;一是根据晶体宏观及微观对称性,用晶体几何理论——点阵理论来描述晶体结构。两种方法各有所长,前者较为直观,后者逻辑较为严密,本章对第二种方法作些介绍,在下一章中再介绍点阵理论。

原子与分子间的结合曾是化学家的主要研究内容,而物质的气态、液态、固态的变化又往往认为仅是一个物理问题。实质上导致气态、液态凝聚成固态的“物理力”,与导致原子、分子化学反应的“化学力”是统一的。其本质都是原子或分子的原子核外电子的“电”相互作用,也即物质凝结成固体的凝结对力学中经常提到的键。根据核外电子“电”作用的起因及方式,键可分为离子键、共价键、金属键、氢键、范德华键五种。下面我们先对五种键构成的五种晶体作一粗略介绍,然后再分节对这五类晶体作较深入的讨论。

§ 1.1 晶体中原子、分子的结合方式

早在1942年,Decagnlicw就假定原子间作用力的本质是电性的。1913年Bohr的原子结构理论为原子之间的作用方式提供了物理模式,而射线分析技术的发展使人们进一步认识到使分子中原子相结合的“化学”力与使原子凝结成固体的“物理”力之间并无本质差别。并且发现大多数简单化合物在固态中通常形成的“分子”并不存在,这一发现开辟了用物理方法来解释化学键的性质,而且许多物理性质与化学性质也均都可以用键来解释。

现在,我们了解形成不同类型晶体结构的键有下列五种:

- (1) 离子键或称为电价键,极性键,异极键。
- (2) 共价键或称为同极键。
- (3) 金属键。
- (4) 氢键。
- (5) 范德华键。

在这些键的作用下构成了离子晶体、共价晶体、金属晶体、分子晶体及氢键晶体。

(一) 离子晶体

离子晶体中基本质点是正、负离子,它们之间存在的库仑相互作用使它们以离子键的形式结合成离子晶体。

典型的金属与非金属元素形成的化合物,如NaCl、MgO、CsCl、LiF、FeO等都是离子晶