



北京大学物理学丛书

固体物理基础

第二版

阎守胜 编著



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

普通高等教育“九五”国家级重点教材

北京大学物理学丛书

固体物理基础

(第二版)

阎守胜 编著

北京大学出版社
北 京

图书在版编目(CIP)数据

固体物理基础/阎守胜编著. —2版. —北京:北京大学出版社, 2003. 8
(北京大学物理学丛书)

ISBN 7-301-06468-3

I. 固… II. 阎… III. 固体物理学 IV. 048

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 070239 号

书 名: 固体物理基础(第二版)

著作责任者: 阎守胜 编著

责任编辑: 周月梅

标准书号: ISBN 7-301-06468-3/O · 0573

出版发行: 北京大学出版社

地 址: 北京市海淀区中关村北京大学校内 100871

网 址: <http://cbs.pku.edu.cn>

电 话: 出版部 62752015 发行部 62754140 编辑部 62752021

电子信箱: zpup@pup.pku.edu.cn

印刷者: 北京大学印刷厂

经 销 者: 新华书店

787mm×960mm 16开本 22.75印张 508千字

2000年11月第1版 2003年8月第2版

2003年10月第2次印刷(总第5次印刷)

印 数: 14001—18000册

定 价: 29.50元

前 言

物理学是自然科学的基础,是探讨物质结构和运动基本规律的前沿学科。几十年来,在生产技术发展的要求和推动下,人们对物理现象和物理学规律的探索研究不断取得新的突破。物理学的各分支学科有着突飞猛进的发展,丰富了人们对物质世界物理运动基本规律的认识和掌握,促进了许多和物理学紧密相关的交叉学科和技术学科的进步。物理学的发展是许多新兴学科、交叉学科和新技术学科产生、成长和发展的基础和前导。

为适应现代化建设的需要,为推动国内物理学的研究、提高物理教学水平,我们决定推出《北京大学物理学丛书》,请在物理学前沿进行科学研究和教学工作的著名物理学家和教授对现代物理学各分支领域的前沿发展做系统、全面的介绍,为广大物理学工作者和物理系的学生进一步开展物理学各分支领域的探索研究和学习,开展与物理学紧密相关的交叉学科和技术学科的研究和学习提供研究参考书、教学参考书和教材。

本丛书分两个层次。第一个层次是物理系本科生的基础课教材,这一教材系列,将在几十年来几代教师,特别是在北京大学教师的教学实践和教学经验积累的基础上,力求深入浅出、删繁就简,以适于全国大多数院校的物理系使用。它既吸收以往经典的物理教材的精华,尽可能系统地、完整地、准确地讲解有关的物理学基本知识、基本概念、基本规律、基本方法;同时又注入科技发展的新观点和方法,介绍物理学的现代发展,使学生不仅能掌握物理学的基础知识,还能了解本学科的前沿课题和研究动向,提高学生的科学素质。第二个层次是研究生教材、研究生教学参考书和专题学术著作。这一系列将集中于一些发展迅速、已有开拓性进展、国际上活跃的学科方向和专题,介绍该学科方向的基本内容,力求充分反映该学科方向国内外前沿最新进展和研究成果。学术专著首先着眼于物理学的各分支学科,然后再扩展到与物理学紧密相关的交叉学科。

愿这套丛书的出版既能使国内著名物理学家和教授有机会将他们的累累硕果奉献给广大读者,又能对物理的教学和科学研究起到促进和推动作用。

《北京大学物理学丛书》编辑委员会

1997年3月

作 者 序

我从 1984 到 1996 年,隔年在北京大学物理系为三年级大学生讲授“固体物理学”课程,其间曾有写一本教材的想法,但是由于科研工作太忙,以及自觉难于写出新意,一直未能实现.这次因教材建设需要,在多方鼓励和支持下,终于提笔,历时两年多,交出了这部书稿.

固体物理是凝聚态物理的主干,近二三十年研究工作有很大的发展.首先,我希望这些新的进展、认识和概念能在这本书中有所反映.这主要概括在本书第二部分的无序、尺寸、维度和关联四章中.同时,对于传统固体物理教科书中的章节,除去不可避免地要添加一些新的内容外,我觉得新的发展往往在某种程度上也改变了讲述的角度.以能带论为例,在理论上本书添加了作为近代能带计算基础的密度泛函理论和局域密度近似方法,实验方面添加了用以确定能量色散关系的角分辨光电子谱技术等新的内容.由于理论的进步,特别是高性能计算机的应用,目前,固体的能带计算已发展成卓有成效、十分专业化的领域.因此,除侧重于基本概念和原理外,本书更多地讲述能带计算结果的表述方法.对从事固体物理研究和应用的人,也许能看懂别人计算的结果更重要一些.

其次,固体是包含 10^{23} 个粒子的复杂的多体系统,种类繁多,内容丰富.学生在学习固体物理课程时,和刚刚学过的理论线索明晰的四大力学相比,常常摸不着头绪,并有乱的感觉.因此,我希望能有一个好的理论框架和体系,使学生易于吸纳新的内容,不致迷失.我在 1980~1981 年访问美国 Cornell 大学期间,曾旁听 Ashcroft 教授为研究生开设的固体物理课程,深为他从最简单的金属自由电子气体模型开始,逐渐加以丰富和完善的体系所吸引.回来后我也尝试着在教学中采用,感到学生确实易于从中了解各个模型的限度,以及在最简单的模型基础之上添加的每一因素所带来的物理后果.本书第一部分对大块理想晶体的讲述中沿用这一体系,主要想法和脉络陈述于 1.8 节对金属自由电子气体模型局限性及其改进的讨论中.其后,每章前言对这一章要讨论的问题及在这一体系中所处的地位均有概括的说明.本书第二部分章节的组织是这一体系的自然延伸,以大块理想晶体为参照,讨论有序程度、尺寸、维度的改变,以及电子之间相互作用带来的变化.

第三,我希望在讲述中有尽可能清晰的物理图象,不要让学生迷失在冗长的计算之中.学生学过理论物理基础课程后,容易欣赏从几个基本定理出发进行数学演绎的做法.实际上这并不是物理的主要部分.实际的物理更多的是和现象有关的,理论上则要面对具体的体系和问题,抓住物理过程的主要方面,构造简化模型来处理.在这一点上,清晰的物理图象以及直觉和想像力是至关重要的.

本书取名为《固体物理基础》是希望主要讲述一些基本的、共性的问题.第一部分的内容中,相当部分在其他教科书中也有论述,本书采用的公式和符号尽可能和这些书中的一致,

内容相近的段落也会写得比较简单. 本书第二部分的写作是一个尝试. 很多问题的深入讨论, 超出了学生已有的数理基础, 同时也会使篇幅过长. 反过来, 如不做数学推演, 内容又容易等同于一般的科普读物. 这里采取了一种在大体给定的篇幅下, 尽可能把基本概念和物理图象讲清楚, 同时也给出主要参考文献和书籍的办法, 希望这些物理图象式的、半定量的说明, 能加深学生对物理学的理解, 也希望这些章节能对学生进一步了解固体物理的前沿发展有所帮助. 教师在讲课中, 也可根据当前的发展补充一些内容. 有关半导体、磁性、超导电性、表面、电介质、非晶态、液晶和准晶等领域, 本书仅涉及某些共性的问题, 没有专门的章节讲述, 这些内容可在其他书籍中找到.

我在北京大学物理系就读时, 固体物理课程有幸由黄昆教授执教, 得到启蒙. 此后, 在科研和教学中逐渐加深了理解. 特别感谢物理学界的许多年长的、同辈的和年轻的同事和朋友们, 以及我的一些学生们, 从他们的文章、学术报告、以及和他们的交往讨论中我学到很多东西. 在酝酿本书的写作时, 很多同事和朋友提出过很好的建议, 张殿琳、韩汝珊、吴思诚和邹英华等教授还阅读了本书的部分章节, 提出了重要的修改意见, 这里都一并致谢.

在本书写作中, 我常常想到我的父亲. 抗战期间, 作为热血青年, 他毅然回国, 投身于祖国的教育事业. 记得他在广西乡下, 晚上就着昏暗的油灯, 一面应付我们这些在他身上爬来爬去的小孩, 一面用毛笔写他的讲义; 也常常想到他对教育事业和教师职业的献身和热爱, 以及他的许多颇富哲理的见解. 父亲在潜移默化中对我人生的指引是不可估量的. 在本书完稿时, 我想我是尽力了, 但也深感学识的浅薄和时间的仓促. 本书定有许多不妥或错误之处, 诚恳希望读者提出宝贵的意见, 以便再版时修正.

最后, 作者感谢教育部高等教育司对本书出版的支持, 感谢北京大学出版社周月梅女士和其他有关人员为本书出版所做的努力, 感谢我的家人和朋友们始终的关心、支持和帮助.

阎守胜

2000年2月于北京大学承泽园

第二版前言

2000年春本书第一版交稿后,作者连续三年在秋季为北京大学物理学院本科四年级学生开设“现代固体物理”课程,主要讲授本书第二部分.为了和三年级的“固体物理学”课程衔接,讲授从单电子近似的物理基础(12.1,12.2节)开始,然后是无序、尺寸和维度,最后以强关联初步作为结束.讲课中,还补充了一些计算,增加了一些内容,着重在当前的研究进展,也包括一些我们自己的研究工作.同时,对某些问题,尝试了不同的讲法.当然,这期间也有了稍微充裕一些的时间用于读书和思考.本书第二版即是在这个基础上完成的.

第二版除对第一部分做了少量必要的更改外,主要对本书第二部分做了修订,希望讲述能更加准确,清晰,简洁和有特色.为此,重写了相当多的地方,改变了讲述的方法和次序.在内容添加方面,主要是扩充了对高温超导电性的讲述,同时增加了一节(12.5节),对人们十分关注的分数量子霍尔效应体系做了入门的介绍.为保持全书篇幅大体不变,其他部分只做了少量最必要的添加.添加的部分与删除部分大体相当.此外,还对参考文献做了必要的补充,也增加了一些习题.

在第一版前言中,作者曾写道:“本书第二部分的写作是一个尝试”,这次的修订,应该可以看作是进一步的探索.

本书第一版受到了读者和同行的关注和鼓励,第二版写作中得到李正中、林志忠、韩汝珊和吴崇试等教授的帮助,也继续得到北京大学出版社周月梅女士的支持,这里一并致谢.

阎守胜

2003年7月
北京大学承泽园

目 录

第一部分 理想晶体

第一章 金属自由电子气体模型	(3)
1.1 模型及基态性质	(3)
1.1.1 单电子本征态和本征能量	(5)
1.1.2 基态和基态的能量	(6)
1.2 自由电子气体的热性质	(8)
1.2.1 化学势随温度的变化	(9)
1.2.2 电子比热	(10)
1.3 泡利顺磁性	(12)
1.4 电场中的自由电子	(13)
1.4.1 准经典模型	(13)
1.4.2 电子的动力学方程	(14)
1.4.3 金属的电导率	(14)
1.5 光学性质	(16)
1.6 霍尔效应和磁阻	(18)
1.7 金属的热导率	(20)
1.8 自由电子气体模型的局限性	(20)
第二章 晶体的结构	(22)
2.1 晶格	(23)
2.1.1 布拉维格子	(23)
2.1.2 原胞	(23)
2.1.3 配位数	(24)
2.1.4 几个常见的布拉维格子	(24)
2.1.5 晶向、晶面和基元的坐标	(26)
2.2 对称性和布拉维格子的分类	(27)
2.2.1 点群	(27)
2.2.2 7个晶系	(30)
2.2.3 空间群和14个布拉维格子	(30)
2.2.4 单胞或惯用单胞	(34)
2.2.5 二维情形	(35)

2.2.6	点群对称性和晶体的物理性质	(35)
2.3	几种常见的晶体结构	(36)
2.3.1	CsCl 结构和立方钙钛矿结构	(36)
2.3.2	NaCl 和 CaF ₂ 结构	(37)
2.3.3	金刚石和闪锌矿结构	(37)
2.3.4	六角密堆积结构	(38)
2.3.5	实例, 正交相 YBa ₂ Cu ₃ O _{7-δ}	(39)
2.3.6	简单晶格和复式晶格	(40)
2.4	倒格子	(40)
2.4.1	概念的引入	(40)
2.4.2	倒格子是倒易空间中的布拉维格子	(42)
2.4.3	倒格矢与晶面	(43)
2.4.4	倒格子的点群对称性	(43)
2.5	晶体结构的实验确定	(44)
2.5.1	X 射线衍射	(44)
2.5.2	电子衍射和中子衍射	(48)
2.5.3	扫描隧穿显微镜	(50)
第三章	能带论 I	(52)
3.1	布洛赫定理及能带	(53)
3.1.1	布洛赫定理及证明	(54)
3.1.2	波矢 k 的取值与物理意义	(55)
3.1.3	能带及其图示	(56)
3.2	弱周期势近似	(57)
3.2.1	一维情形	(57)
3.2.2	能隙和布拉格反射	(59)
3.2.3	复式晶格	(61)
3.3	紧束缚近似	(62)
3.3.1	模型及计算	(62)
3.3.2	万尼尔函数	(64)
3.4	能带结构的计算	(65)
3.4.1	近似方法	(66)
3.4.2	$\epsilon_n(k)$ 的对称性	(68)
3.4.3	$\epsilon_n(k)$ 和 $n(r)$ 的图示	(69)
3.5	费米面和态密度	(72)
3.5.1	高布里渊区	(72)
3.5.2	费米面的构造	(72)

3.5.3 态密度	(74)
第四章 能带论 II	(76)
4.1 电子运动的半经典模型	(76)
4.1.1 模型的表述	(77)
4.1.2 模型合理性的说明	(77)
4.1.3 有效质量	(79)
4.1.4 半经典模型的适用范围	(80)
4.2 恒定电场、磁场作用下电子的运动	(81)
4.2.1 恒定电场作用下的电子	(81)
4.2.2 满带不导电	(82)
4.2.3 近满带中的空穴	(82)
4.2.4 导体、半导体和绝缘体的能带论解释	(83)
4.2.5 恒定磁场作用下电子的准经典运动	(84)
4.3 费米面的测量	(86)
4.3.1 均匀磁场中的自由电子	(86)
4.3.2 布洛赫电子的轨道量子化	(87)
4.3.3 德哈斯-范阿尔芬效应	(88)
4.3.4 回旋共振方法	(89)
4.4 用光电子谱研究能带结构	(90)
4.4.1 态密度分布曲线	(90)
4.4.2 角分辨光电子谱测定 $\epsilon_n(k)$	(92)
4.5 一些金属元素的能带结构	(94)
4.5.1 简单金属	(95)
4.5.2 一价贵金属	(95)
4.5.3 四价金属和半金属	(96)
4.5.4 过渡族金属和稀土金属	(97)
第五章 晶格振动	(100)
5.1 简谐晶体的经典运动	(101)
5.1.1 简谐近似	(101)
5.1.2 一维单原子链, 声学支	(102)
5.1.3 一维双原子链, 光学支	(104)
5.1.4 三维情形	(105)
5.2 简谐晶体的量子理论	(107)
5.2.1 简正坐标	(107)
5.2.2 声子	(108)

5.2.3	晶格比热	(109)
5.2.4	声子态密度	(113)
5.3	晶格振动谱的实验测定	(113)
5.3.1	中子的非弹性散射	(115)
5.3.2	可见光的非弹性散射	(115)
5.4	非简谐效应	(116)
5.4.1	热膨胀	(116)
5.4.2	晶格热导率	(118)
第六章	输运现象	(121)
6.1	玻尔兹曼方程	(122)
6.2	电导率	(124)
6.2.1	金属的直流电导率	(124)
6.2.2	电子和声子的相互作用	(126)
6.2.3	电阻率随温度的变化	(127)
6.2.4	剩余电阻率	(129)
6.2.5	近藤效应	(130)
6.2.6	半导体的电导率	(131)
6.3	热导率和热电势	(132)
6.3.1	热导率	(133)
6.3.2	热电势	(134)
6.4	霍尔系数和磁阻	(137)
第七章	固体中的原子键合	(140)
7.1	概述	(140)
7.1.1	化学键	(140)
7.1.2	晶体的分类	(143)
7.1.3	晶体的结合能	(143)
7.2	共价晶体	(144)
7.3	离子晶体	(146)
7.3.1	结合能	(146)
7.3.2	离子半径	(148)
7.3.3	部分离子部分共价的晶体	(150)
7.4	分子晶体、金属及氢键晶体	(152)
7.4.1	分子晶体	(152)
7.4.2	量子晶体	(154)
7.4.3	金属	(155)

7.4.4 氢键晶体	(156)
第八章 缺陷	(157)
8.1 点缺陷	(157)
8.1.1 点缺陷的种类	(157)
8.1.2 扩散的规律和机制	(159)
8.1.3 离子晶体的电导率	(161)
8.2 定域态	(162)
8.2.1 杂质能级	(162)
8.2.2 非本征半导体	(164)
8.2.3 局域晶格振动	(166)
8.3 拓扑缺陷	(167)
8.3.1 二维面自旋体系	(168)
8.3.2 涡旋线和磁通线	(170)
8.3.3 晶体中的位错	(172)
8.4 面缺陷, 壁	(174)
8.4.1 扭折、孤子	(174)
8.4.2 铁磁材料中的畴壁	(175)
8.4.3 晶界	(176)
8.4.4 粗糙转变	(177)

第二部分 无序、尺寸、维度和关联

第九章 无序	(181)
9.1 无序导致的定域	(182)
9.1.1 安德森定域	(183)
9.1.2 莫特迁移率边	(185)
9.1.3 态密度	(186)
9.1.4 一维情形	(186)
9.1.5 最小金属电导率	(187)
9.2 定域的标度理论	(188)
9.2.1 早期的工作	(188)
9.2.2 标度理论	(189)
9.3 弱定域化	(193)
9.3.1 相干背散射	(193)
9.3.2 弱定域化磁阻	(196)
9.3.3 电子-电子相互作用	(198)
9.4 跳跃电导	(199)

9.5 非晶态固体的比热和热导率	(201)
9.5.1 低温比热和热导率	(202)
9.5.2 两能级隧穿模型	(203)
9.5.3 更宽温度范围的行为共性	(205)
第十章 尺 寸	(206)
10.1 介观体系的物理	(206)
10.1.1 介观尺度	(207)
10.1.2 Landauer 类型的电导公式	(207)
10.1.3 正常金属中的 Aharonov-Bohm(AB)效应	(209)
10.1.4 普适电导涨落	(211)
10.1.5 非定域效应	(215)
10.1.6 正常金属环中的持续电流	(216)
10.2 纳米微粒	(219)
10.2.1 电子能级的分立	(219)
10.2.2 比热和磁化率	(220)
10.2.3 实验测量	(223)
10.2.4 表面效应	(224)
10.3 团簇	(225)
10.3.1 团簇的产生和探测	(225)
10.3.2 惰性气体元素团簇	(226)
10.3.3 简单金属团簇	(228)
10.3.4 C_{60} 、固体 C_{60} 和碳纳米管	(230)
10.4 库仑阻塞	(236)
10.4.1 电流偏置的单结	(237)
10.4.2 单电子岛	(238)
10.4.3 量子点中的库仑阻塞	(240)
第十一章 维 度	(243)
11.1 半导体低维电子系统	(243)
11.1.1 Si 反型层及 GaAs-AlGaAs 异质结	(244)
11.1.2 弹道输运	(246)
11.1.3 量子霍尔效应	(248)
11.1.4 边缘通道	(251)
11.2 二维体系中的相变	(254)
11.2.1 二维体系实例	(254)
11.2.2 维度和长程序	(255)
11.2.3 K-T 相变	(259)

11.2.4	二维晶格的熔化	(262)
11.2.5	公度相	(263)
11.2.6	维度的跨接	(264)
11.3	准一维导体	(265)
11.3.1	Peierls 相变	(265)
11.3.2	电荷密度波和自旋密度波	(268)
11.3.3	电荷密度波材料和现象	(271)
11.3.4	准一维有机导体	(274)
第十二章	关 联	(280)
12.1	单电子近似的理论基础	(281)
12.1.1	哈特里-福克近似	(281)
12.1.2	屏蔽库仑势	(285)
12.1.3	密度泛函理论和局域密度近似	(287)
12.2	费米液体理论	(290)
12.3	Hubbard 模型,强关联体系	(295)
12.3.1	Hubbard 模型	(296)
12.3.2	金属-绝缘体转变	(297)
12.3.3	维格纳格子	(298)
12.4	作为强关联体系的高温超导体	(299)
12.4.1	结构和相图	(300)
12.4.2	电子结构	(302)
12.4.3	正常态存在费米面	(304)
12.4.4	正常态的输运性质的反常行为	(306)
12.4.5	超导相	(308)
12.4.6	正常态能隙	(312)
12.4.7	条纹相	(314)
12.5	分数量子霍尔效应体系	(315)
12.5.1	Laughlin 波函数	(316)
12.5.2	分数电荷	(318)
12.5.3	复合费米子	(319)
主要参考书目		(321)
习题选编		(322)
主要符号一览表		(332)
索引		(335)

第一部分

理想晶体

第一章 金属自由电子气体模型

固体是由很多原子组成的复杂体系. 作为第一步近似,也是相当好的近似,可把固体中的原子分成离子实(ion core)和价电子(valence electron)两部分. 离子实由原子核和内层结合能高的芯电子(core electron)组成. 形成固体时,离子实的变化可以忽略. 价电子是原子外层结合能低的电子,在固体中,其状况可能和在孤立原子中十分不同. 即使做这样的简化,人们面对的依然是一个强相互作用的、粒子(离子实,价电子)数为 $10^{22} \sim 10^{23}/\text{cm}^3$ 的多体问题,难以处理. 通常是对特定的方面,抓住有关问题物理过程的本质,提出简化的模型加以讨论. 本书即从一最简单的,也是相当成功的模型——金属的自由电子气体模型开始讲述.

从对金属的讨论开始,还因为在固态的纯元素中,三分之二以上是金属. 金属优良的性质,如极好的电导、热导性能,优良的机械性能,特有的金属光泽等,使之成为重要的实用材料. 这些性质需要加以说明,得到了了解. 正是这一点,推动了现代固体理论的发展. 同时,对金属的了解,也是认识非金属的基础.

有关金属的第一个理论模型,是1900年Drude提出的. 在1897年汤姆逊(Thomson)发现电子后,他大胆地将当时已很成功的气体分子运动论用于金属,提出了经典的金属自由电子气体模型,用以解释金属的电导和热导行为. 1928年索末菲(Sommerfeld)首先将费米-狄拉克统计用于电子气体,发展了量子的金属自由电子气体模型,克服了经典模型明显的不足. 本章的讲述即从量子的金属自由电子气体模型及其基态性质开始(1.1节),随后是温度 $T \neq 0$ 时的平衡态性质,电子比热(1.2节)和泡利顺磁性(1.3节). 在1.4节中,将引进弛豫时间近似,并讲述准经典模型,即将在外场作用下的电子看作经典粒子,但其速度取为费米速度的物理原因. 在此基础上将讨论自由电子气体的输运性质(1.4, 1.6, 1.7节). 在输运性质以及1.5节对光学性质的讨论中,凡不涉及电子速度大小的部分,均可视为完全经典的,经典的处理仍是好的近似.

本章最后一节(1.8节),在讲述金属自由电子气体模型局限性的基础上,给出对金属和整个固体进一步了解的主要方案,即沿用单电子近似,但考虑离子实系统对电子的作用. 由此出发,概括地陈述了本书第一部分内容安排和发展的脉络.

1.1 模型及基态性质

自由电子气体模型把金属简单地看成是价电子组成的电子气体. 有两个基本的假定,或“自由”有两层含意:

1. 忽略电子和离子实之间的相互作用,电子自由运动的范围仅因存在表面势垒而限制在样品内部. 这相当于将离子实系统看成是保持体系电中性的均匀正电荷背景,类似于凝