

高等学校教学参考书

固体物理学

学习参考书

陈金富 主编

高等教育出版社

高等学校教学参考书

固体物理学

学习参考书

陈金富 主编

高等教育出版社

内 容 提 要

本书是一本学习固体物理的参考书。

在本书中作者对固体物理教学中所涉及到的基本内容做了一定的充实和扩展,同时,还汇集了不少图表和资料,对教学有一定的参考价值。全书分两篇,共十三章。第一篇为晶体和能带理论参考教材,包括晶体结构,晶体的结合,晶格振动,晶格缺陷,金属自由电子论,能带理论,教学专题描述七章,第二篇为相应于上述前六章的习题及解答。

本书可供我国高等学校、成人高等教育的物理专业师生参考。

高等学校教学参考书

固体物理学

学习参考书

陈金富 主编

*

高等教育出版社出版

新华书店北京发行所发行

朝阳区展望印刷厂印装

*

开本 850×1168 1/32 印张 15.375 插页 1 字数 368,000

1986年8月第1版 1986年8月第1次印刷

印数 00,001—4,900

书号 13010·01091 定价 3.20元

出版者前言

为适应高等学校固体物理学及各分支学科课程教学的需要，高等学校理科物理学教材编审委员会固体物理编审小组和高等教育出版社组织编写了一套固体物理学科的教学参考书，其中包括固体物理学及其各分支学科的基础课程和实验课程用的教学参考书和一部《固体物理学大辞典》。这些书将由高等教育出版社陆续出版。

《固体物理学——学习参考书》是本套教学参考书中的一种。

本书由厦门大学物理系陈金富副教授主编，上海交通大学方俊鑫教授和北京大学韩汝琦副教授审阅。

前 言

高等院校物理学专业学生一般在学完基础课和大部分理论课程之后学习固体物理学。本门课程着重讲授固体的结构、组成粒子间的相互作用以及微观粒子的运动规律，在此基础上阐明固体的基本物理性质及其应用的原理。课程的主要内容包含三部分：晶格理论基础、固体电子论以及固体专题描述，以前两部分为主。

学习固体物理学应该注意掌握如下两个主要环节：

深入理解固体宏观上的特性和微观粒子行为间的必然关联，并透彻理解阐明固体中粒子运动的定性概念和物理模型；

掌握描述微观粒子运动的理论处理方法，为今后学习固体理论打下基础。

作者根据多年的教学实践编写了这本《固体物理学学习参考书》，编写的指导思想可概括为如下三个方面：

第一，针对上述两个主要教学环节的需要，把描述固体中微观粒子运动的定性概念和物理模型作为编写教材的重点；

第二，概括、综合、吸取国外可供参考的固体物理教材或参考书的精华，开展固体物理教材和教学法研究，编写有特色的固体物理参考书；

第三，作者希望所编写的参考书针对性较强，既能针对读者学习上的难点，又能为课程的任课教师提供教学参考。全书分两篇，共计十三章

第一篇，晶格和能带理论参考教材，它是为提高固体理论教学与定性概念和物理模型的教学质量而编写的，是本书的重点。在编写过程中，作者把阐述固体物理概念和模型的重点内容分章节

拟定条目,然后参照撰写百科全书的要求,按教材编写的体系写成第一篇第一—七章。编写时,作者查阅了现有中外固体物理教材和参考书中的有关内容,结合自己的教学实践,从概念和物理模型上对每个条目作了概括。还扼要选入国外固体物理教材、参考书以及大英百科全书和美国科学技术百科全书中为阐明固体物理概念和模型所汇集的图表资料。书中所选取的近80个条目,有的是基本概念,有的是外文参考书中独具一格值得向读者推荐的内容,有的是教学中的难点,作者尝试予以阐明的资料,与现有中文固体物理教材不是简单的或者变相的重复,而是一定程度的充实和补充。

第一篇第一—六各章的末尾还附上一节《本章思考题和习题选配》,这是为加深理解各章的重点条目和重点内容而编写的教学法资料,因而编入第一篇,而不编入第二篇。其中,有73条思考题是作者结合教学实践,针对读者的学习难点从积累的资料中汇编而成的。第七章教学专题描述宜与前六章有关章节内容穿插使用,可作为读者深入学习的参考教材。

第二篇为固体物理学习题及解答,为配合理解晶格物理和固体电子论各章节的重点内容,作者编写了114道题解和解题提示。所选题目包括概念题,反映基本方法和思路的计算题,一题多解的开拓思路题,也有较灵活的综合题。凡是典型题例都在题目右上角打*号并作了详细的示范性解答。

本书由陈金富主编并负责全书的定稿工作,同时编写第一篇和第二篇的部分题解。

在本书的编写过程中,还有三位同志参加了部分工作,高为翔负责收集第一篇第五章部分条目的资料,增写了大部分的题解;陈慧参加收集第一、第四和第六章部分条目的资料并做了大量的具体工作;苏钟人早期参加收集部分条目和小部分题解的资料。所

有初稿都由陈金富修改定稿。

方俊鑫教授和韩汝琦副教授详细审阅了本书，提出了很多宝贵意见。陆栋副教授对本书的结构体系提出了许多建议。固体物理编审小组有关编委和高等教育出版社物理编辑室的同志在组织审稿等方面做了大量工作，并对提高书稿质量提出了许多有益的建议，作者一并表示深切谢意。

由于水平有限，时间匆忙，书中难免有缺点和错误，欢迎批评指正。

陈金富

1984年4月于厦门大学物理系

本书所用主要符号表

符号	定义	单位
A	电子亲合能	eV
a	格常数	m
a_0	玻尔半径	m
a_1, a_2, a_3	正格子基矢, 基矢	m
B	体弹性模量	Nm ⁻²
B	磁场强度	G
b_1, b_2, b_3	倒格子基矢	m ⁻¹
b	柏格斯矢量	m
C_V	定容比热	Jmol ⁻¹ K ⁻¹
D	扩散系数	m ² s ⁻¹
$D(E)$	能级的状态密度	eV ⁻¹
d_{hkl}	面指数为(hkl)的晶面的面间距	m
E	能级	eV
e	基本电荷(等于质子电荷)	C
$\mathcal{E}$	电场强度	Vm ⁻¹
E_F	费密能量	eV
E_g	禁带宽度	eV
$f(E)$	费密分布函数	/
F	力	N
F, F_V	自由能	eV
G	倒格矢	m ⁻¹
G	切变模量	Nm ⁻²

$g(E)$	单位晶体体积的能级状态密度	$\text{m}^{-3}\text{eV}^{-1}$
$g(\omega)$	振动模的谱密度	sm^{-3}
h	普朗克常数	J s
$\hbar$	$\hbar/2\pi$	J s
H	哈密顿量	eV
I	元素的电离能	eV
I	电流强度	A
J	电流密度	Am^{-2}
k, k	晶体电子的波矢	m^{-1}
k_F	费密波矢、费密半径	m^{-1}
k_B	玻耳兹曼常数	JK^{-1}
K_h, K_m, K_n	倒格矢	m^{-1}
M, m	原子或离子质量	kg
m	电子的静止质量	kg
M_a	原子量	kgmol^{-1}
m^*	有效质量	kg
n	电子浓度	m^{-3}
n_a	原子浓度	m^{-3}
N	晶体中原子(离子)总数	/
	晶体中的原胞数	/
N_A	阿伏伽德罗常数	mol^{-1}
n_C, n_{crit}	临界浓度	m^{-3}
	(当金属电子气浓度超过 n_C 时, 电子气是简并的)	
P	压强	Nm^{-2}
q	载流子电荷($\pm e$)	C
q	声子波矢	m^{-1}
Q_P	正则坐标	m

$\mathbf{r}, r$	位置矢量, 半径	m
R	普适气体常数	$\text{JK}^{-1}\text{mol}^{-1}$
$\mathbf{R}, \mathbf{R}_n$	晶格的平移矢量、正格矢	m
S	熵	JK^{-1}
S_{cf}	位形熵	JK^{-1}
S_{th}	热熵	JK^{-1}
T	动能	eV
T	绝对温度	K
T_F	费密温度	K
T_M	熔化温度	K
t	时间	s
$\mathbf{u}$	原子(离子)位移矢量	m
$u(x), u(r)$	两个原子(离子)互作用势能	eV
u	结合能	eV
V	晶体体积	m^{-3}
$V(\mathbf{r}), V(r)$	晶体势能	eV
v_s	声波速度	ms^{-1}
v_d	漂移速度	ms^{-1}
v_F	费密速度	ms^{-1}
W	势垒能量	eV
Z	状态总和或配分函数	/
Z_V	原子价	/
Z_a	原子序数	/
Z^*	有效核电荷	C
α	马德隆常数	/
β	恢复力系数	Nm^{-1}
γ	重迭积分	eV

δ_{ij}	克朗内克尔符号	/
∇	矢量微分算符, 劈形算符	
ε	电容率、介电常数	Fm^{-1}
ε	切应变	/
ε_0	真空电容率	Fm^{-1}
Θ_D	德拜温度	K
κ	压缩系数	N^{-1}m^2
λ	波长	m
μ	迁移率	$\text{m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$
μ	化学势	eV
ν	频率	s^{-1}
ν_D	德拜截止频率	s^{-1}
ρ_m	质量密度	kgm^{-3}
$\rho(T), \rho$	电阻率	$\Omega\text{m}, \text{VA}^{-1}$
σ, σ_{ij}	电导率, 电导率张量	$\Omega^{-1}\text{m}^{-1}, \text{V}^{-1}\text{A}$
τ	切应力	Nm^{-2}
τ	弛豫时间	s
ϕ	势能函数, 功函数	eV
χ	电负性	/
ψ	电子波函数	/
ω	角频率	s^{-1}
ω_D	德拜截止角频率	s^{-1}
Ω_d	正格子原胞体积	m^3
Ω_r	倒格子原胞体积	m^{-3}

目 录

前言.....	1
本书所用主要符号表.....	1

第一篇 晶格和能带理论参考教材

第一章 晶体结构.....	1
1.1 布喇菲点阵.....	1
1.2 带基元的布喇菲格子.....	4
1.3 周期性单元.....	6
1.4 晶列、晶面及其标志.....	9
1.5 倒格子.....	12
1.6 晶格的 X 射线衍射.....	19
1.7 七大晶系、十四种布喇菲格子.....	28
1.8 32 种晶体点群.....	36
1.9 元素的晶体结构.....	42
1.10 元素的密度和原子浓度.....	44
1.11 立方格子的特征.....	46
1.12 本章思考题、习题选配.....	46
第二章 晶体的结合.....	51
2.1 基态时中性原子外层电子分布.....	51
2.2 元素的电离能.....	54
2.3 电子亲和能.....	55
2.4 元素的电负性.....	60
2.5 晶体结合的基本类型.....	64
2.6 离子结合.....	67
2.7 共价结合.....	70
2.8 范德瓦尔斯相互作用, 几种惰性气体晶体的性质.....	73
2.9 金属结合.....	75

2.10	原子和离子半径	78
2.11	晶体的结合能	81
2.12	具有 NaCl 结构的卤化碱晶体的性质	84
2.13	本章思考题、习题选配	86
第三章	晶格振动	88
3.1	声学支和光学支	88
3.2	晶格振动谱色散关系的对称性	96
3.3	爱因斯坦和德拜比热理论	99
3.4	德拜温度	104
3.5	声子	108
3.6	晶格的状态方程和热膨胀	109
3.7	N 过程和 U 过程	114
3.8	本章思考题、习题选配	117
第四章	晶格缺陷	120
4.1	晶体缺陷的类型	120
4.2	缺陷的统计理论	125
4.3	与缺陷有关的若干现象	128
4.4	缺陷的运动和自扩散的机制	133
4.5	色心	138
4.6	滑移	141
4.7	位错的若干性质以及有关位错的重要现象	144
4.8	本章思考题、习题选配	150
第五章	金属自由电子理论	152
5.1	特鲁特模型	152
5.2	费密-狄喇克函数的一些性质	155
5.3	金属电子气的简并性	157
5.4	电子比热模型	162
5.5	电导模型	165
5.6	跨越势垒问题	168
5.7	本章思考题、习题选配	173
第六章	能带理论	177
6.1	布洛赫波	177

6.2	布里渊区	179
6.3	$E(k) \sim k$ 关系的三种表示	185
6.4	三种模型的 $E_n(k) \sim k$ 图线	188
6.5	$E_n(k)$ 的对称性	199
6.6	$v(k) \sim k$, $m^*(k) \sim k$ 关系	201
6.7	态密度	207
6.8	费密面	211
6.9	本章思考题、习题选配	214
6.10	《金属电导理论》章思考题、习题选配	217
第七章	教学专题描述	220
7.1	晶体结构报告符号	220
7.2	倒格子	226
7.3	面指数、密勒指数及面间距的计算	233
7.4	共价键与氢原子的海特勒-伦敦模型	237
7.5	正则振动、正则坐标	241
7.6	正则振动的量子化、声子概念	245
7.7	三维晶格的振动	251
7.8	晶格不完整性对晶格振动频谱的影响	256
7.9	费密电子气的简并性	261
7.10	周期函数的傅里叶级数展开	268
7.11	周期性势场中运动的单电子的一般属性	274
7.12	佛罗开定理	283
7.13	布洛赫函数和平面波	287
7.14	旺尼耳函数与紧束缚近似波函数	289
7.15	缺陷能级和有效质量方程	292
7.16	与波矢有关的一些关系式及其互换	299

第二篇 固体物理学习题及解答

第八章	晶体结构及X射线衍射	302
第九章	晶体结合	334
第十章	晶格振动	344

第十一章	晶格缺陷	396
第十二章	金属自由电子理论	407
第十三章	能带理论	424
参考书目		460
几个常见的物理常数及单位变换		463
索引		464

第一篇 晶格和能带理论参考教材

第一章 晶体结构

本章着重介绍阐述晶体结构的一些重要概念和术语，并简要介绍揭示晶体结构的X射线衍射的基本原理。

1.1 布喇菲点阵

布喇菲点阵学说是概括晶体内部周期性结构特征的一种数学抽象。它有两个等价的定义：

(1) 布喇菲点阵是由在空间排列和取向完全等同的一系列分立的格点在空间作无限的规则排列所构成的点阵。

(2) 一个三维的布喇菲点阵是由具有位矢

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

的一系列的点所构成， $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$ 是三个不共面的矢量，它代表格点在这三个方向规则性排列的重复单元(长度)，称为基矢， n_1 、 n_2 、 n_3 可取任意整数。选定 $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$ 后，布喇菲点阵也可以看作是由原胞(即体积为 $\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ 的六面体，顶角上各有一个格点)沿 $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$ 方向各以 $|\mathbf{a}_1|$ 、 $|\mathbf{a}_2|$ 、 $|\mathbf{a}_3|$ 为周期重复排列而成。

从布喇菲点阵学说可以引伸出晶列和晶面的概念。格点可以看做排列在一系列平行等距的直线族和平面族上。这样，点阵成

为网格，称为晶格或格子。因此布喇菲点阵也称为布喇菲格子，阵点也称为格点。为行文方便，本书在必要时将平行使用这两个术语。

布喇菲点阵的上述两个定义是等价的，从第二个定义出发可推出第一个定义的结论，但对符合第一个定义的点阵，如何确定其基矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 则比较困难，其选择也不是唯一的。

图 1.1 是符合布喇菲点阵的第一个定义的一个二维布喇菲点阵。这个点阵可由具有位矢为 $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2$ 的点所构成，用 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ 的线性组合来表示。例如格点 P 和 Q 可写成

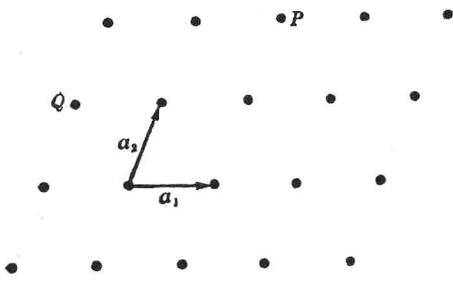


图 1.1 二维布喇菲点阵

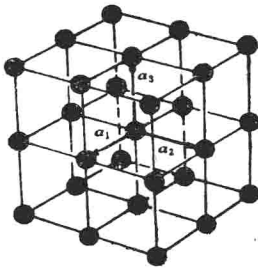


图 1.2 三维简单立方布喇菲晶格

$$P = \mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2, \quad Q = -\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$$

显然 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ 的选择不是唯一的。

图 1.2 是三维简单立方布喇菲晶格(简写 sc)，可选取三个互相垂直的矢量 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 作为基矢，点阵的平移矢量是 $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ 。

对体心立方布喇菲晶格(简写 bcc)，基矢的选择不是唯一的。例如：图 1.3 代表体心立方晶格基矢的一种选取，以 $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ 表示三个正交的单位矢量，则

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}, \mathbf{a}_2 = aj, \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})$$