

材料科学与技术丛书

R. W. 卡恩 P. 哈森 E. J. 克雷默 主编

(第3A卷)

金属与陶瓷的 电子及磁学性质

I

(英) K. H. J. 巴肖 主编

科学出版社



材料科学与技术丛书(第 3A 卷)

R. W. 卡恩 P. 哈森 E. J. 克雷默 主编

金属与陶瓷的电子及 磁学性质(I)

[英] K. H. J. 巴肖 主编

郑庆祺 储谦谨 等译

113A F07/02

科学出版社

2002

图字：01-97-1614 号

图书在版编目(CIP)数据

金属与陶瓷的电子及磁学性质. I. 第3A卷. [英] K. H. J. 巴肖主编; 郑庆祺、储谦谨等译. -北京: 科学出版社, 2001

(材料科学与技术丛书; 第3A卷)

书名原文: Electronic and Magnetic Properties of Metals and Ceramics Part I

ISBN 7-03-008516-7

I. 金… II. ①郑… ②储… III. ①金属-物理性能 ②陶瓷-物理性能 IV. ①TG111.1 ②TQ174.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2000) 第 08577 号

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

源海印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2002年1月第一版 开本: 787×1092 1/16

2002年1月第一次印刷 印张: 39½

印数: 1-2 000 字数: 941 000

定价: 98.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换〈新欣〉)

《材料科学与技术》丛书

中文版编委会

主编

师昌绪 国家自然科学基金委员会
柯俊 北京科技大学
R. W. 卡恩 英国剑桥大学

成员 (以姓氏笔画为序)

丁道云 中南工业大学
干福熹 中国科学院上海光机研究所
叶恒强 中国科学院金属研究所
刘嘉禾 北京钢铁研究总院
朱逢吾 北京科技大学
朱鹤孙 北京理工大学
吴人洁 上海交通大学
闵乃本 南京大学
周邦新 中国核动力研究设计院
柯伟 中国科学院金属腐蚀与防护研究所
施良和 中国科学院化学研究所
郭景坤 中国科学院上海硅酸盐研究所
徐僖 四川大学
徐元森 中国科学院上海冶金研究所
黄勇 清华大学
屠海令 北京有色金属研究总院
雷廷权 哈尔滨工业大学
詹文山 中国科学院物理研究所
颜鸣皋 北京航空材料研究院

总 译 序

20 世纪 80 年代末,英国剑桥大学的 R. W. 卡恩教授、德国哥丁根大学的 P. 哈森教授和美国康奈尔大学的 E. J. 克雷默教授共同主编了《材料科学与技术》(Materials Science and Technology) 丛书。该丛书是自美国麻省理工学院于 80 年代中期编写的《材料科学与工程百科全书》(Encyclopedia of Materials Science and Engineering) 问世以来的又一部有关材料科学和技术方面的巨著。该丛书全面系统地论述了材料的形成机理、生产工艺及国际公认的科研成果,既深刻阐述了有关的基础理论,具有很高的学术水平,又密切结合生产实际,实用价值较强。

该丛书共 19 卷(23 分册),分三大部分:第 1~6 卷主要阐述材料科学的基础理论;第 7~14 卷重点介绍材料的基本性能及实际应用;第 15~19 卷则着重论述材料的最新加工方法和工艺。

该丛书覆盖了现代材料科学的各个领域,系统而深入地对材料科学和技术的各个方面进行了精辟的论述,并附以大量图表加以说明,使其内容更加全面、翔实,论述也比较严谨、简洁。

有 400 余名国际知名学者、相关领域的学术带头人主持或参加了该丛书的撰写工作,从而使该丛书具有很高的权威性和知名度。

该丛书各卷都附有大量参考文献,从而为科技工作者进一步深入探讨提供了便利。

随着我国科学技术的飞速发展,我国从事与材料有关研究的科技人员约占全部科技人员的 1/3,国内现有的有关材料科学方面的著作远远满足不了广大科技人员的需求。因此,把该丛书译成中文出版,不但适应我国国情,可以满足广大科技人员的需要,而且必将促进我国材料科学技术的发展。

基于此,几年前我们就倡议购买该丛书的版权。科学出版社与德国 VCH 出版社经过谈判,于 1996 年 10 月达成协议,该丛书的中文版由科学出版社独家出版。

为使该丛书中文版尽快与广大读者见面,我们成立了以师昌绪、柯俊、R. W. 卡恩为主编,各分卷主编为编委的中文版编委会。为保证翻译质量,各卷均由国内在本领域学术造诣较深的教授或研究员主持有关内容的翻译与审核工作。

本丛书的出版与中国科学院郭传杰研究员的帮助和支持是分不开的,他作为长期从事材料科学研究的学者,十分理解出版本丛书的重大意义,购买本

丛书版权的经费问题就是在他的大力协助下解决的，特此对他表示感谢。另外，本丛书中文版的翻译稿酬由各卷主编自筹，或出自有关课题组和单位，我们对他们给予的支持和帮助表示衷心的感谢。

我们还要感谢中国科学院外籍院士、英国皇家学会会员 R. W. 卡恩教授，他以对中国人民的诚挚友谊和对我国材料科学发展的深切关怀，为达成版权协议做出了很大努力。

材料是国民经济发展、国力增强的重要基础，它关系着民族复兴的大业。最近几年，我国传统材料的技术改造，以及新型材料的研究正在蓬勃展开。为适应这一形势，国内科技界尽管编著出版了不少材料科学技术方面的丛书、工具书等，有的已具有较高水平，但由于这一领域的广泛性和迅速发展，这些努力还是不能满足科技工作者进一步提高的迫切要求，以及我国生产和研究工作的需要。他山之石，可以攻玉。在我国造诣较深的学者的共同努力下，众煦漂山，集腋成裘，将这套代表当代科技发展水平的大型丛书译成中文。我们相信，本丛书的出版，必将得到我国广大材料科技工作者的热烈欢迎。

为了使本丛书尽快问世，原著插图中的英文说明一律未译，各卷索引仍引用原著的页码，这些页码大致标注在与译文相应的位置上，以备核查。

由于本丛书内容丰富，涉及多门学科，加之受时间所限，故译文中难免存在疏漏及不足之处，请读者指正。

师昌绪

柯俊

1998年3月于北京

丛 书 序

材料是多种多样的,如金属、陶瓷、电子材料、塑料和复合材料,它们在制备和使用过程中的许多概念、现象和转变都惊人地相似。诸如相变机理、缺陷行为、平衡热力学、扩散、流动和断裂机理、界面的精细结构与行为、晶体和玻璃的结构以及它们之间的关系、不同类型材料中的电子的迁移与禁锢、原子聚集体的统计力学或磁自旋等的概念,不仅用来说明最早研究过的单个材料的行为,而且也用来说明初看起来毫不相干的其他材料的行为。

正是由于各材料之间相互有机联系而诞生的材料科学,现在已成为一门独立的学科以及各组成学科的聚集体。这本新的丛书就是企图阐明这一新学科的现状,定义它的性质和范围,以及对它的主要组成论题提供一个综合的概述。

材料技术(有时称材料工程)更注重实际。材料技术与材料科学相互补充,主要论及材料的工艺。目前,它已变成一门极复杂的技艺,特别是对新的学科诸如半导体、聚合物和先进陶瓷(事实上对古老的材料)也是如此。于是读者会发现,现代钢铁的冶炼与工艺已远超越古老的经验操作了。

当然,其他的书籍中也会论及这些题目,它们往往来自百科全书、年报、专题文章和期刊的个别评论之中。这些内容主要是供专家(或想成为专家的人)阅读。我们的目的并非是贬低同行们在材料科学与技术方面的这些资料,而是想创立自己的丛书,以便放在手边经常参考或系统阅读;同时我们尽力加快出版,以保证先出的几卷与后出的几卷在时效方面有所衔接。个别的章节是较之百科全书和综述文章讨论得更为详细,而较之专题文章为简略。

本丛书直接面向的广大读者,不仅包括材料科学工作者和工程师,而且也针对活跃在其他学科诸如固体物理、固体化学、冶金学、建筑工程、电气工程和电子学、能源技术、聚合物科学与工程的人们。

本丛书的分类主要基于材料的类型和工艺模式,有些卷着眼于应用(核材料、生物材料),有些卷则偏重于性能(相变、表征、塑性变形和断裂)。有些题材的不同方面有时会被安排在两卷或多卷中,而有些题材则集中于一专卷内(如有关腐蚀的论述就是编在第7卷的一章中,有关粘结的论述则是编在第12卷的一章中)。编者特别注意卷内与卷间的相互引证。作为一个整体,本丛书完成时将刊出一卷累积的索引,以便查阅。

我们非常感谢VCH出版社的编辑和生产人员,他们为收集资料并最后出

书,对这样繁重的任务作出了大量而又高效的贡献。对编辑方的 Peter Gregory 博士和 Deborah Hollis 博士、生产方的 Hans-Jochen Schmitt 经济学工程师表示我们的特别谢意。我们亦感谢 VCH 出版社的经理们对我们的信任和坚定的支持。

R. W. 卡恩 (Cambridge)

P. 哈森 (Göttingen)

E. J. 克雷默 (Ithaca)

1991 年 4 月

前 言

本卷试图对金属和陶瓷的电子及磁学性质这一极其庞大的领域作一个均衡的通论。本卷将从材料科学及其交叉学科领域的角度进行介绍,涉及固体物理、固体化学和现代技术等。

本卷不能被看成是关于金属和陶瓷的电子及磁学性质的标准教科书,它也不是为了成为一本大全,来囊括目前已知的多种材料的电子和磁学性质。相反地,它集中在可以说明主要成就的课题上,讨论基本现象的理解和描述,以及有同样重要意义的技术应用。这样,仍然不可能仅用一卷来容纳需要处理的所有课题,因此,本卷由两部分组成(A, B卷),我现在可以向读者介绍这两部分的第一部分内容。

第1章论述电子结构计算。高速计算机的应用使得人们有可能把电子结构计算扩展到相当复杂的体系,从而,相应的计算模型已经越来越多地渗透进了材料科学领域,它们不仅被用来获得结合能、磁性和输运性质的基本知识,也用于处理形成热和相之间的关系。

第2章描述材料的磁光性质,几十年来它在材料科学中已经占据了显著的位置。这一章主要涉及基本方面,所描述的几种材料将在3B卷中的高密度磁光记录材料一章中再次讨论。

接下来的两章讨论输运性质。第3章首先论述正常金属电子输运性质的许多变化。由于超导电性自身成为一个领域,材料的超导性质放在目前理论和唯象模型的适当框架中,在单独的一章(第4章)中讨论。

磁性材料在材料科学和基础物理中都有悠久的历史。本卷有两章讨论磁性,第5章评述金属体系中碰到的不同类型的磁性,陶瓷材料的磁性将在3B卷中单独的一章介绍。这两章重点都在基础方面上,磁性材料的性质导致了专业化应用,例如用于磁记录、永磁材料、软磁材料和因瓦合金,所有这些都将在3B卷中介绍。

材料科学中相对年轻的分支是超薄膜和超晶格。第6章描述这些体系的基本性质,主要是输运性质、磁性和超导性质。最后,在第7章向读者介绍在许多金属体系中发现的费米面的奇异世界,这一章像第1章一样介绍了金属体系的基本性质。

上述所有章节都由人们感兴趣的许多领域中的主导权威写成,对许多作者来说,把写作相应章节的任务提到日常工作之上是不容易的,我感谢所有作者为尽可能减少本卷的拖延所做的许多努力。我也对VCH的Christina Dyl-

lick 博士的帮助表示深深的谢意，她规划与协调了这一有价值的科学项目。最后，我感谢 P. 哈森关于本卷内容的卓有成效的讨论以及他持续的兴趣和指导。

K. H. J. 巴肖

Eindhoven

1991 年 7 月

内容简介

本卷主要介绍金属与陶瓷的电子及磁学性质。本卷共7章。第1章至第3章主要介绍电子结构计算,金属、合金和化合物的磁光性质,正常金属的电子输运性质;第4章至第7章叙述超导电性、金属性系统的磁性,超薄膜和超晶格,强关联电子系统的费米面。

本卷可供材料科学、电子、磁学、航空、航天、物理、机械等研究、教学及生产的科学技术工作者阅读、参考。

目 录

1	电子结构计算	(1)
2	金属、合金和化合物的磁光性质	(133)
3	正常金属的电子输运性质	(227)
4	超导电性	(293)
5	金属性系统的磁性	(338)
6	超薄膜和超晶格	(424)
7	强关联电子系统的费米面	(505)
	索引	(580)

1 电子结构计算

Jürgen Kübler and Volker Eyert

Institut für Festkörperphysik, Technische Hochschule

Darmstadt, Federal Republic of Germany

(周玉美 顾宗权 耿文通 段纯刚 译 王鼎盛 校)

目 录

1.1	引言	7
1.2	单粒子薛定谔方程的解法	8
1.2.1	Bloch 定理	8
1.2.2	平面波和赝势	13
1.2.2.1	平面波	13
1.2.2.2	赝势	15
1.2.2.3	保模赝势	17
1.2.3	缀加平面波和 Green 函数	20
1.2.3.1	缀加平面波 (APW)	20
1.2.3.2	Green 函数	24
1.2.4	原子轨道线性组合 (LCAO) 和线性方法	29
1.2.4.1	原子轨道线性组合 (LCAO)	29
1.2.4.2	波函数 ϕ 的能量微商 ϕ	31
1.2.4.3	线性缀加平面波方法 (LAPW)	34
1.2.4.4	Muffin-Tin 轨道线性组合方法 (LMTO)	35
1.2.4.5	Korringa-Kohn-Rostoker 原子球近似 (KKR-ASA)	37
1.2.4.6	缀加球面波 (ASW)	42
1.2.5	相对论修正	51
1.3	单粒子薛定谔方程的导出: 密度泛函理论	59
1.3.1	概述	59
1.3.2	自旋极化	63
1.3.3	局域密度近似 (LDA)	65
1.4	专题研究选编	67
1.4.1	非磁性单质材料	68
1.4.1.1	能带结构	68
1.4.1.2	结合和弹性性质	77
1.4.1.3	结构相稳定性与声子	85

1.4.2 磁性单质材料·····	91
1.4.2.1 Stoner 理论 ·····	92
1.4.2.2 铁磁金属的能带结构 ·····	96
1.4.2.3 反铁磁金属和竞争相 ·····	102
1.4.2.4 尚未解决的问题 ·····	110
1.4.3 非磁性化合物和合金 ·····	111
1.4.3.1 生成热 ·····	111
1.4.3.2 关于合金相图 ·····	114
1.4.3.3 挑战性的模型 ·····	116
1.4.4 磁性化合物和金属间化合物 ·····	118
1.4.4.1 Slater-Pauling-Friedel 曲线 ·····	118
1.4.4.2 反铁磁体 ·····	121
1.5 结论 ·····	123
1.6 致谢 ·····	124
1.7 参考文献 ·····	125

符号与缩语表

a	晶格常数
$A, \Gamma, L, K, H, X, P, N, M, W$	BZ 中的高对称点
a, b, c	实空间基矢
A, B, C	倒空间基矢
A	矢势
a_j, c_j 或 $a_i(k)$	波函数展开系数
a_0	玻尔半径, $0.529177 \cdot 10^{-10} \text{m}$
B	体模量
B	磁感应强度
$B_{LL'}(\epsilon, k)$	结构常数
c	光速
$ c\rangle$	芯态
C_{ij}	弹性常数
$C_l = \omega_l$	能带中心
$C_{LL'L''}$	Gaunt (或 Clebsch-Gordan) 系数
$D_l(\epsilon)$	对数导数
$D_L, D_L^{(1)}, D_L^{(2)}, D^{(3)}$	结构常数的组成部分
E	能量
$E[n]$	总能泛函
e	电子电荷

$E_F, \mathbf{k}_F, \mathbf{v}_F$	费米能, 动量, 速度
E_v	特征 LMTO 能
$f(\epsilon)$	费米-Dirac 分布函数
G, G_0	格林函数
g, f	径向函数
$\mathbf{G}_s$	倒格矢 (加 $\mathbf{k}$)
$H, \mathcal{H}$	Hamiltonian (有时 $\hat{H}$)
$\mathbf{H}$	Hamiltonian 矩阵
H_D	Dirac Hamiltonian
$H_0, \mathcal{H}_0$	无相互作用粒子的 Hamiltonian
H_{SO}	自旋轨道 Hamiltonian
$\hbar$	普朗克常量除以 2π
$\tilde{H}, \tilde{h}, \tilde{J}, \tilde{j}, \tilde{\chi}$	缀加函数
I	交换常数
i	$\sqrt{-1}$ (不作为上下标时)
J_L, H_L, N_L	与 j_l, h_l, n_l 联系的波函数
$J_l, n_l, h_l^\pm$	球 Bessel, Neumann 和 Hankel 函数
$\mathbf{k}$	第一 BZ 中倒空间矢量
$ \mathbf{K}\rangle$	平面波态
k_B	玻尔兹曼常量
$\mathbf{K}_s$	倒格矢
$\mathbf{L}, \mathbf{J}$	角动量算符
$l, m, L = (l, m)$	角动量量子数
m	电子质量
m	磁矩
M_μ	离子质量
M	Dirac 理论中的质量参数
m^*	有效质量
N	晶体中的晶胞数
$N(\epsilon)$	态密度
$N_l(\epsilon)$	分波态密度
n	电荷密度
$\hat{n}(\mathbf{r})$	电荷密度算符
$\hat{n}_{\alpha\beta}$	自旋极化情况下的电荷密度算符
$\tilde{n}_{\alpha\beta}$	密度矩阵
$n_\uparrow, n_\downarrow$	自旋向上 (向下) 电荷密度
$\mathbf{O}$	重叠矩阵
P	压力

p	动量算符
P_l	势函数
$P_l(x)$	Legendre 多项式
q	波矢
q_l	分波电荷
q_0	Ewald 参数
R	球径
R	径向波函数
$\hat{r}$	单位矢量
R_i	正格矢
r_i	电子位置
r_s	密度参数
Ryd, Ry	13.6058eV, Rydberg
S	球径
S_D	无序态的熵
$\mathcal{S}_{LL'}$	LMTO 结构常数
T	动能算符(有时用 $\hat{T}$)
$\mathcal{T}$	动能
$\mathbf{T}, \mathbf{t}$	变换矩阵
T	温度
T_i	平移算符
u	径向波函数
U_{e-1}	电子-离子相互作用
u_q	位移振幅
$v_n(\Omega)$	多体作用势
V, V_c	势能(有时用 $\hat{V}$)
V_1	离子作用势
$V_l = \omega_{l+}$	能带底
$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$	笛卡尔基矢
X_n	离子位置
$\mathcal{Y}$	自旋角函数
Y_L	球谐函数
Z	原子序数
Z_V	原子价
α, β	Dirac 理论中的算符
γ	Sommerfeld 常数
γ_l	LMTO 尺度因子
δ_{ij}	Kronecker δ 函数

$\delta(x)$	Dirac δ 函数
δ^*	约束变分
ΔH	形成热
ε	能带能量
ε_c	芯态能量
ε_i	本征能量
$\varepsilon(H), \varepsilon(J)$	Hankel 和 Bessel 能量
ε_{XC}	交换关联能量密度
η_l	散射相移
θ_D	德拜温度
κ^2	能量 ε
κ	Dirac 量子数
Λ	KKR-ASA 矩阵
λ	电子声子增强因子
$\lambda_i^{(q)}$	q 级能量矩
μ_B	玻尔磁子
μ_l	散射相移
ν	Poisson 率
ξ_n	关联函数
$\rho_{\alpha\beta}$	密度算符
σ	矢量算符($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$)
Σ	自能
σ_p	Ising 类自旋变量
$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$	泡利自旋矩阵
τ_v	无胞中原子位置
$\phi, \dot{\phi}$	LMTO 基函数
ϕ_i	单粒子态
χ, χ_0	极化率
χ_+, χ_-	双自旋子
$\psi, \phi, \chi, \Phi, \psi$	波函数
ω_D, Π, Ω	波函数展开系数
ω_q	声子频率
Ω	晶体体积
Ω_{BZ}	BZ 区体积
Ω_{UC}	Wigner-Seitz 元胞体积
Ω_{MT}	muffin-tin 球体积
AF	反铁磁
APW	缀加平面波