

固体物理学

李延福 编

青海人民出版社

固 体 物 理 学

李延福 编

青海人民出版社

固体物理学

李延福 编

*

青海人民出版社出版

(西宁市西关大街96号)

青海省新华书店发行 青海新华印刷厂印刷

※

开本: 850×1168毫米1/32 印张: 10.875 字数: 260,000

1985年1月第1版 1985年1月第1次印刷

印数: 1—3,000

统一书号: 7097·1053 定价: 1.70元

前 言

固体物理是现代科学技术的重要物理基础，因此近年来我国一般高等师范院校也普遍开设了这门课程。但由于师范院校培养目标 and 课程设置的特点，要求学生掌握固体物理知识的深度和侧重点与其他类型的大学不同。适应师范院校的特点是编写本书的主要目的。本书着重物理概念的阐述，而不涉及繁琐的数学推导，特别注意将固体物理和中学物理教学直接联系起来，因此本书除供师范院校师生作教学参考外，对中学物理教师的提高也有所帮助。

全书共分十章。第一章到第五章是基础内容；第六章到第九章选了与中学物理有联系的四个专题：半导体、金属电子论、固体磁性和超导体；第十章是固体物理对中学物理一些问题的解释，目的是启发学生将所学固体物理知识应用于中学物理教学。

上海复旦大学陆栋副教授详细审阅了原稿，并给予宝贵的指导；在编写过程还得到兰州大学李思渊副教授的热情帮助；周广连同志参与超导电性一章的编写，还有其他同志为本书绘图、提出建议，作者在此一并表示深切的感谢。

由于作者水平有限，书中一定存在不少缺点和错误，诚恳希望读者批评指正。

作 者

一九八三年国庆节于西宁

目 录

第一章 晶体结构	(1)
§ 1 晶体	(1)
§ 2 晶格	(4)
§ 3 晶面与晶面指数	(11)
§ 4 晶体的密堆积结构	(14)
§ 5 晶格的对称性和晶格类型	(18)
§ 6 倒格子	(27)
§ 7 晶体的 X 射线衍射	(32)
第二章 晶体的结合	(45)
§ 1 晶体的结合类型	(45)
§ 2 结合能	(52)
§ 3 原子晶体的结合特点	(62)
第三章 晶格振动	(68)
§ 1 一维原子链的振动	(68)
§ 2 声子	(78)
§ 3 固体热容	(84)
§ 4 非简谐效应	(91)
第四章 晶体中的缺陷	(104)
§ 1 晶体缺陷的类型	(104)
§ 2 热缺陷及其运动	(108)

§ 3	扩散及其微观机构	(114)
§ 4	热缺陷在外力作用下的运动	(119)
§ 5	位错的物理特性	(121)
第五章	能带论基础	(132)
§ 1	一维周期势场中电子状态的特点	(134)
§ 2	三维周期势场中的电子运动	(147)
§ 3	紧束缚近似	(156)
§ 4	准经典运动	(163)
§ 5	导体、绝缘体和半导体	(169)
第六章	金属电子论	(186)
§ 1	费米统计和电子热容量	(186)
§ 2	费米能级和费米面	(198)
§ 3	分布函数和玻耳兹曼方程	(205)
§ 4	弛豫时间近似和电导率公式	(209)
§ 5	金属的电阻率	(212)
第七章	半导体	(222)
§ 1	半导体的一般性能	(222)
§ 2	半导体的费米统计	(229)
§ 3	电导 霍耳效应	(236)
§ 4	P—N结和晶体管	(240)
§ 5	半导体中的温差电现象	(248)
第八章	固体的磁性	(258)
§ 1	原子的磁性	(258)
§ 2	抗磁性	(262)
§ 3	顺磁性	(264)
§ 4	铁磁性	(272)
§ 5	反铁磁性和亚铁磁性	(279)

第九章 超导体	(288)
§ 1 超导体的特性	(288)
§ 2 超导体的唯象模型	(291)
§ 3 超导体的微观模型	(296)
§ 4 超导隧道效应	(301)
第十章 中学物理中有关问题的解释	(309)
§ 1 热学、分子物理学部分	(309)
§ 2 电磁学部分	(318)
§ 3 固体器件部分	(325)

第一章 晶体结构

引言 肉眼看到的固体是连续刚体，实际上固体是由分立的原子所组成。依照原子排列的规则程度固体又分为晶体和非晶体，排列高度规则的叫晶体，排列没有明确的规则性的叫非晶体。晶体的基本特点是原子排列的规则性，它成为研究晶体的宏观性质和微观过程的重要基础。本章介绍晶体中原子规则排列的一些基本规律和描述的方法，并介绍倒格子概念和X射线衍射。

§ 1 晶 体

1. 固体的两类状态

依照原子排列的规则程度，固体可分为物理性质根本不同的两类：晶体和非晶体。

在晶体中，原子按着一定的规则排列，如图1—1(a)所示，

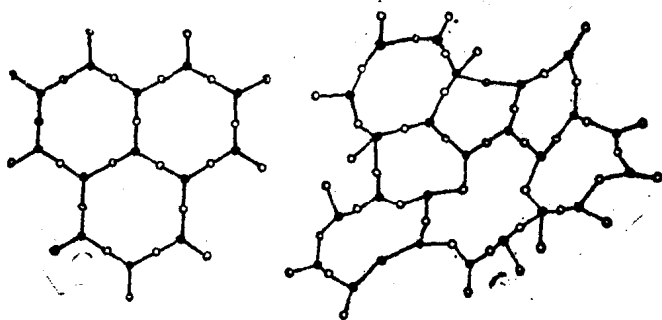


图1—1(a)晶体的规则重复 (b)玻璃的无规网格

图中给出晶体规则重复的二维示意图。

若果某一块固体，当其整体具有这种结构的周期性时，便称之为单晶体。若果某一块固体，由称作晶粒的许多小部分组成，各个晶粒具有这种结构的周期性，而整体不具有这种结构的周期性，便称之为多晶体。晶粒的大小可以是宏观的尺度到几个埃

在非晶体中，原子排列没有上述的规则性，如图 1-1(b) 所示，图中给出玻璃的无规网格。从图看出，非晶体的原子排列规则性限定在一个原子间距的范围内，再大的范围完全无规则。

综上所述，晶体的原子排列的特点是大范围内有序排列，称作长程有序；非晶体的原子排列的特点是极小范围内有序排列，称作短程有序。

2. 晶体的基本特征

我们从前面的讨论已经知道晶体中原子的排列是规则的。这种认识人们首先是通过晶体的宏观特征推断出来的，后来得到了 X 射线衍射的实验证实。

晶体的宏观特征概括起来有下列四点：

(1) 规则的几何外形

晶体具有规则的几何外形，这是人们熟知的。例如窗户玻璃表面上的水冻结成冰时，冰形成许多规则的几何图案；最早作为典型晶体的石英形成，中间是六面棱柱、两端是六面棱锥的晶体；还有岩盐也是晶体，它结晶成立方体，等等。规则的几何外形表明晶体的内部结构是规则的。当然晶体的外形由于受到外界条件的影响，同一晶体物质的各种不同样品的外形可能不完全一样，因而晶体的外形不是晶体品种的特征因素。

(2) 晶面角守恒

在适当条件下，晶体能自发地发展成为一个凸多面体形的单

晶体，围成这样一个多面体的面称为晶面。实验测量表明，同一晶体物质的各种不同样品中，各晶面之间的夹角保持恒定，例如图1—2所示，石英晶体的不同样品中，a、c晶面间夹角总是

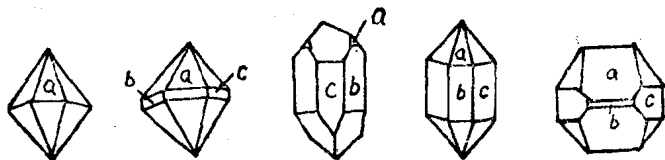


图1—2

$113^{\circ}08'$ ，b、c晶面间夹角总是 $120^{\circ}00'$ ，所以晶面角才是晶体外形的特征因素。晶面角守恒表明同一种晶体，其内部结构的规则性是相同的。

(3) 有固定熔点

晶体和非晶体的宏观性质根本不同，最明显的一个区别是，在固体熔化过程中，晶体有固定的熔点，而非晶体则没有，非晶体的熔化过程是随着温度的增加而逐渐完成，如图1—3所示。

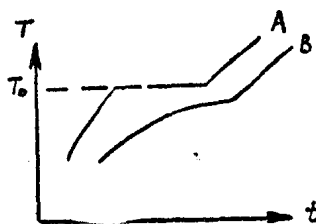


图1—3 熔解时温度随时间变化 (A—晶体，B—非晶体)

为什么晶体当温度达到熔点时，继续加热温度不升高而等到全部熔化后才升高呢？这是因为熔化的过程就是晶体长程序解体的过程，破坏长程序所需的能量就是平常叫的熔解热，所以晶体具有一定的熔点表明晶体内部结构的规则性是长程序的。

(4) 物理性质的各向异性

晶体和非晶体的宏观性质对比的另一个明显的区别是，晶体是各向异性的，非晶体是各向同性的。所谓各向异性，是指均匀

物质在不同方向上具有不同的性质。晶体的各向异性表明晶体内部结构的规则性在不同方向上是不一样的。

晶体的这些宏观特征表明晶体中原子、分子（通称作微粒）是按一定方式重复排列的。这种性质称为晶体结构的周期性，这是晶体最基本的特征。

§ 2 晶 格

在结晶学中，感兴趣的是晶体的几何性质。若以处在原子平衡位置上的几何点代替具体的原子，则几何点的图样描述了同样的晶体几何性质，这样的几何图样就是晶格。几何点称为格点。

1. 空间点阵

为了概括晶体结构的周期性，人们提出了空间点阵的学说。

空间点阵说认为，一个理想晶体是由全同的称作基元的结构单元在空间无限重复而构成；基元是原子群，晶体中的所有基元是等同的，即它的组成、位形和取向都是全同的；因此晶体的内部结构可概括为由一些相同的几何点在空间作周期性的无限分布，几何点代表基元的某个相同位置，点的总体就称作空间点阵，简称点阵，如图1—4所示。

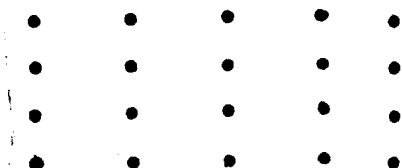


图1—1

显然，晶体结构就等于点阵加基元。图1—5中（a）表示含有两个原子的基元，（b）中黑点组成点阵，每个黑点（称作阵

点)上安置基元, 就得到了晶体结构。

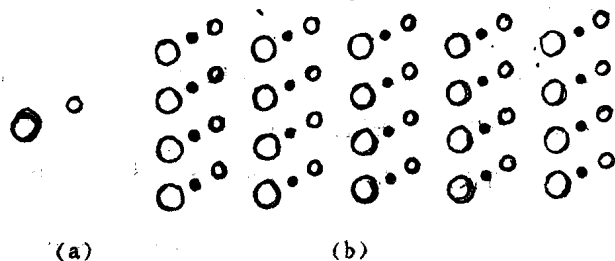


图1-5

点阵是一种数学抽象, 用来概括晶体结构的周期性。整个晶体结构可看作由代表基元的点沿空间三个不同的方向, 按一定的距离周期性地平移而构成。因此空间点阵是由平移矢量

$$\mathbf{T} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (1-1)$$

所联系的诸点的列阵, 如图1-6所示。式中 $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$ 是代表三

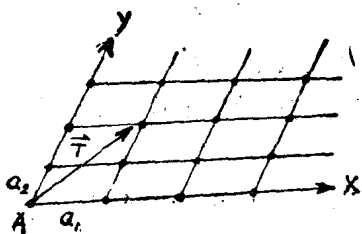


图1-6 晶体原子的周期性排列

个方向上的平移周期的基本平移矢量, n_1 、 n_2 、 n_3 是整数。

从前面的讨论我们知道, 点阵概括了理想晶体的结构周期性, 而这样的理想晶体实际上并不存在。只有在绝对零度下, 忽略表面原子和体内原子的差别, 忽略体内原子排列的少量不规则性时, 理想晶体才是实际晶体的较好的近似。

2. 原胞

晶格的周期性除了用点的周期性排列描述外，还可采用原胞来描述。

晶格可以看做是由一个平行六面体的单元沿三个边的方向重复排列而成，如图1—7所示。这个周期性的重复单元叫做原胞，代表三个棱边的长度和方向的矢量 $\mathbf{a}_1$ ， $\mathbf{a}_2$ ， $\mathbf{a}_3$ 叫做基矢。

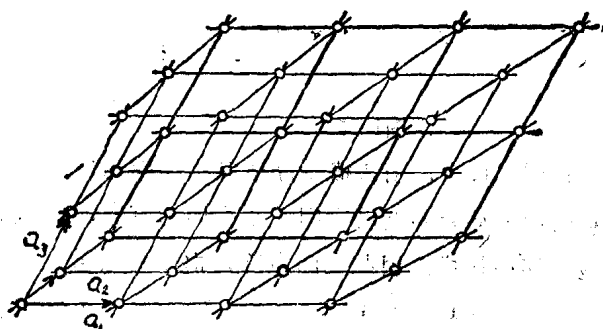


图1—7 晶体的网格

原胞具有两个特性：一是它们平行地堆积在一起，可以充满整个晶体；二是在任何两个原胞相对应的点上，晶体的物理性质相同。设 $\mathbf{r}$ 为原胞中任意一处的位置矢量， Q 代表晶体的任一物理量，则有

$$Q(\mathbf{r}) = Q(\mathbf{r} + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3) \quad (1-2)$$

这是晶格周期性的必然结果，它描述了晶体物理量的一般特征。

原胞的选取方法很多，通常采用三种方法：固体物理学原胞，结晶学原胞和维格纳-赛兹原胞。

固体物理学原胞是体积最小的原胞，其特点是格点只在顶角上，每个原胞平均只含一个格点，其基矢用 $\mathbf{a}_1$ ， $\mathbf{a}_2$ ， $\mathbf{a}_3$ 表示。

结晶学原胞是为了反映晶体对称的特征而选取的体积较大的原胞，其特点是格点不只在顶角上，而且可以在体心或面心上，

每个原胞平均不只含一个格点。其基矢用 $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ 表示。

维格纳-赛兹原胞是以一格点为中心，画中心到最近邻格点的连线的许多垂直平分面围成的多面体，其特点是格点只在中心，体积也是最小。

下面我们举出几个例子，说明三种原胞选取方法的不同：

(1) 简立方

如图1—8(a)所示，是简立方的结晶学原胞，也是固体物理学原胞；图1—8(b)所示，是简立方的维格纳-赛兹原胞。

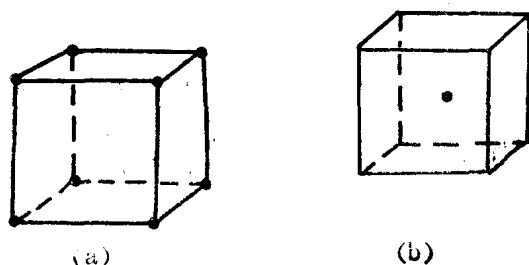


图1—8

(2) 体心立方

如图1—9(a)所示，结晶学原胞是体心立方，固体物理学

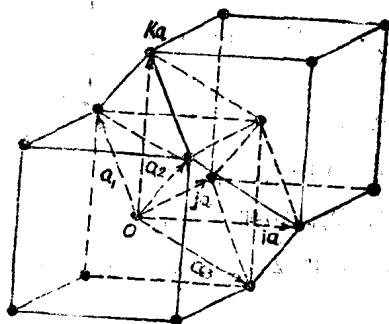


图1—9(a)

原胞是由(1-3)式表述的基矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 决定的平行六面体。

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2} (-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}) \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2} (\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}) \\ \mathbf{a}_3 &= \frac{a}{2} (\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}) \end{aligned} \right\} \quad (1-3)$$

可以证明固体物理学原胞体积为结晶学原胞体积的一半。证明如下：

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 &= \frac{a}{2} (-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}) \\ &\quad \cdot \frac{a^2}{4} [(\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}) \times (\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k})] \\ &= \frac{a^3}{8} (-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}) \cdot (0 + 2\mathbf{j} + 2\mathbf{k}) \\ &= \frac{1}{2} a^3 \end{aligned} \quad (1-4)$$

从图看出，结晶学原胞平均含2个格点，固体物理学原胞平均含1个格点。

体心立方的维格纳-赛兹原胞是截角八面体，如图1-9(b)所示。

(3) 面心立方

如图1-10(a)所示，结晶学原胞是面心立方，固体物理学原胞是由(1-5)式表述的基矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 决定的平行六面体。

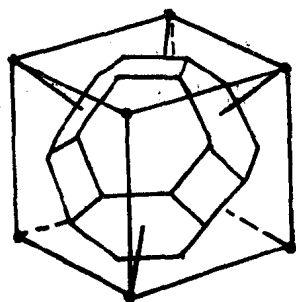


图1-9(b)

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2} (\mathbf{j} + \mathbf{k}) \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2} (\mathbf{k} + \mathbf{i}) \\ \mathbf{a}_3 &= \frac{a}{2} (\mathbf{i} + \mathbf{j}) \end{aligned} \right\}$$

(1-5)

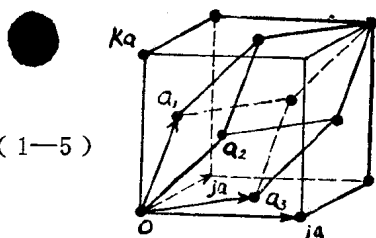


图1-10 (a)

可以证明固体物理学原胞体积为结晶学原胞体积的 $\frac{1}{4}$ 。证明如下：

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 &= \frac{a^3}{8} (\mathbf{j} + \mathbf{k}) \cdot [(\mathbf{k} + \mathbf{i}) \times (\mathbf{i} + \mathbf{j})] \\ &= \frac{a^3}{8} (\mathbf{j} + \mathbf{k}) \cdot (\mathbf{j} - \mathbf{i} + \mathbf{k}) \\ &= \frac{1}{4} a^3 \end{aligned} \quad (1-6)$$

从图看出，结晶学原胞平均含4个格点，固体物理学原胞平均含一个格点。

面心立方的维格纳-赛兹原胞是菱形十二面体，如图1-10 (b) 所示。

3. 布拉菲格子和复式格子

若我们研究的晶体完全由相同的原子构成，则原子和格点重合，而且每个格点周围情况都一样，这样的格子称为布拉菲格子。若晶体由两种或两种以上的原子构成，而且每种原子各构成一种相同的布拉菲

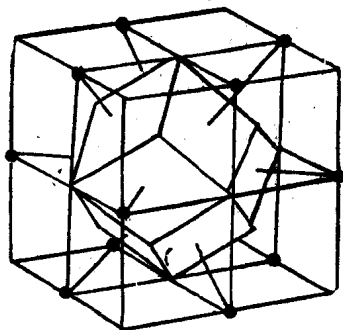


图1-10 (b)

格子，只是这些格子相互错开一定的距离，则此种格子称为复式格子，也就是说复式格子是由若干相同的布拉菲格子套构而成的。下面举出几例说明之。

(1) 氯化钠结构

氯化钠结构如图1—11所示。由于钠离子周围是氯离子，氯离子周围是钠离子，显然不是布拉菲格子。若只看一种离子，它们各构成面心立方格子，所以氯化钠结构是两个面心立方套构成的复式格子。碱金属锂、钠、钾、铷和卤族元素氟、氯、溴、碘的化合物都具有氯化钠结构。

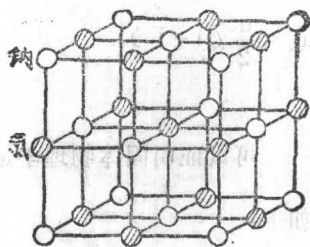


图1—11

(2) 金刚石结构

金刚石结构如图1—12所示，由图看出，A、B、C、D4个原子构成正四面体，四面体中心为O原子，由于四面体顶角原子和中心原子的键取向不同，虽然都是碳原子，仍不是布拉菲格子。金刚石结构是由两个面心立方相互沿其空间对角线位移 $1/4$ 长度套构而成的复式格子。锗、硅半导体就具有这样的结构。

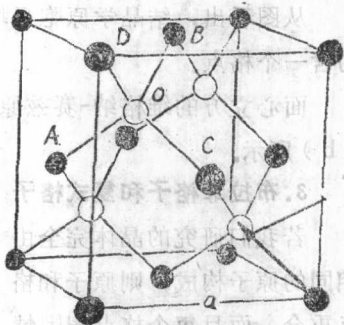


图1—12

(3) 闪锌矿结构

在金刚石结构立方单元的对角线上的原子位置安放一种原子，面心立方位置上安放另一种原子，便得到闪锌矿结构。半导体镉化铜、砷化镓等Ⅲ—V族化合物就具有这样的结构。由于是两