

WULIXUE

# 固体物理学

主 编 陈 霞

河南大学出版社

WULIXUE

# 固体物理学

王德山 著

河南大学出版社

# 固体物理学

主 编 陈 霞  
副主编 路庆风 戴宪起  
朱 虹 路 莹

河南大学出版社

## 固体物理学

主 编 陈 霞

责任编辑 陈国剑

---

河南大学出版社出版

(开封市明伦街 85 号)

河南省新华书店发行

河南大学出版社电脑照排

河南大学印刷厂印刷

---

开本:850×1168 1/32 印张:12.75 字数:320千字

1998年7月第1版 1998年7月第1次印刷

印数:1—2000 定价:13.80元

---

ISBN 7-81041-601-4/O · 114

## 内 容 简 介

本书主要介绍固体物理学的基础知识和基本理论。

全书共分七章：晶体结构、晶体的结合、晶格振动与晶体的热学性质、固体电子论基础、能带理论、半导体、固体的磁性。根据教学对象的实际情况，本书在内容的选择、编排上特别注重基础理论的系统性和完整性，注重从物理概念入手，阐明它的物理性质实质，并附有一定数量的思考题及解题示例。

本书可作为普通高等师范院校物理专业的教材，也可作为其他专业的参考书。

# 前 言

固体物理学,是一门研究固体的各种物理性质(力学、热学、电学、光学的性质等),并从固体的原子、电子结构来阐明这些性质的微观本质的学科.

本书是针对师范院校学生编写的教材.在内容的选择、编排上,特别注重基础理论的系统性和完整性,使学完此教材后能够获得尽可能全面的固体结构和性能的基础知识和方法体系.在分析问题时,注意从物理概念入手,阐明它的物理性质实质,并附有一定数量的思考题及解题示例,以帮助学生在学习中对各章内容的理解.

本书是在多年讲授固体物理学的讲义的基础上改编而成的.具体分工是,陈霞负责大纲编写,撰写绪论、第一章、第二章,并负责对全部书稿的统审;第三章由路庆风撰写;第四章由戴宪起撰写;第五章、第六章、第七章由朱虹、路莹撰写.

由于编者水平有限,书中难免会有错误及不当之处,欢迎使用本教材的师生提出批评、指正.

编 者

1997年9月

# 目 录

绪 论	(1)
第一章 晶体结构	(6)
§ 1.1 晶体的特征	(6)
§ 1.2 晶格及其周期性	(8)
§ 1.3 晶向、晶面和它们的标志	(20)
§ 1.4 晶系和布喇菲原胞	(27)
§ 1.5 倒格子	(33)
§ 1.6 晶体的特殊对称性 对称操作	(37)
§ 1.7 晶体衍射的一般介绍	(47)
思考题	(48)
解习题示例	(50)
习题	(64)
第二章 晶体的结合	(66)
§ 2.1 晶体结合的类型	(67)
§ 2.2 晶体的结合力和结合能	(73)
§ 2.3 离子晶体	(77)
§ 2.4 分子晶体	(86)
§ 2.5 共价晶体	(90)
§ 2.6 原子半径	(93)
思考题	(99)
解习题示例	(100)
习题	(109)

<b>第三章 晶格振动与晶体的热学性质</b> .....	(111)
§ 3.1 一维原子链的振动 .....	(111)
§ 3.2 三维晶格的振动 .....	(123)
§ 3.3 晶格振动的量子化 声子 .....	(133)
§ 3.4 晶格热容的量子理论 .....	(145)
§ 3.5 热膨胀与热传导 .....	(155)
思考题.....	(164)
解习题示例.....	(165)
习题.....	(180)
<b>第四章 固体电子论基础</b> .....	(183)
§ 4.1 电子气的能量状态 .....	(184)
§ 4.2 电子气的费密能量 .....	(189)
§ 4.3 金属电子气的热容量 .....	(194)
§ 4.4 功函数和接触势差 .....	(197)
§ 4.5 布洛赫波 .....	(202)
§ 4.6 克龙尼克-潘纳模型 .....	(206)
§ 4.7 微扰法——自由电子近似 .....	(212)
§ 4.8 简并微扰法——散射波较强的情况 .....	(215)
§ 4.9 晶体中电子运动的速度和加速度 .....	(221)
§ 4.10 金属、半导体和绝缘体 空穴概念 .....	(224)
思考题 .....	(231)
解习题示例.....	(232)
习题.....	(250)
<b>第五章 能带理论</b> .....	(251)
§ 5.1 三维情况的布洛赫定理 .....	(253)
§ 5.2 布里渊区 .....	(257)
§ 5.3 平面波方法 .....	(262)
§ 5.4 紧束缚方法 .....	(266)



§ 5.5 赝势方法 .....	(272)
§ 5.6 费密面的构造法 .....	(275)
§ 5.7 计算能带的其他方法 .....	(278)
思考题 .....	(286)
解习题示例 .....	(288)
习题 .....	(305)
<b>第六章 半导体</b> .....	<b>(307)</b>
§ 6.1 半导体概述 .....	(308)
§ 6.2 半导体中的杂质 .....	(315)
§ 6.3 平衡载流子浓度 .....	(322)
§ 6.4 非平衡载流子 .....	(328)
§ 6.5 PN 结 .....	(332)
思考题 .....	(342)
解习题示例 .....	(343)
<b>第七章 固体的磁性</b> .....	<b>(352)</b>
§ 7.1 原子和离子的固有磁矩 .....	(353)
§ 7.2 抗磁性 .....	(357)
§ 7.3 顺磁性 .....	(359)
§ 7.4 原子磁性的量子力学理论 .....	(363)
§ 7.5 顺磁共振 .....	(366)
§ 7.6 金属中传导电子的磁性 .....	(372)
§ 7.7 铁磁性的唯象理论 .....	(377)
§ 7.8 交换作用 .....	(382)
思考题 .....	(387)
解习题示例 .....	(388)
<b>常用物理常数</b> .....	<b>(396)</b>

# 绪 论

## 一、固体物理的研究对象

固体物理是研究固体的结构及其组成粒子(原子、离子、电子等)之间相互作用与运动规律,以阐明其性能与用途的学科.就固体结构来说,有规则的与不规则的结构之分.规则结构的固体,叫做晶体(晶态),其中原子(分子)是按一定的周期排列的.如果固体中的原子(分子)的排列没有明确的周期性,则叫做非晶体(非晶态).晶体的微观结构是长程有序的,非晶体(过冷液体)只是短程有序的.固体物理的研究过程中,为了抓住问题的典型性,便于研究固体中原子、电子运动的规律,起初的主要研究对象是晶态固体(晶体).在充分研究了晶体中粒子(原子、电子)运动规律的基础上,才开始研究非晶态固体.

内在结构完全规则的固体是理想晶体,又叫做完整晶体.实际晶体中或多或少地存在有不规则性.在规则排列的背景中尚存在微量不规则性的晶体叫做近乎完整的晶体.近乎完整的晶体内部的微量不规则性叫做缺陷,外来杂质就是一种缺陷.缺陷的存在影响着晶体的性质,影响的原因是多种多样的,机理较为复杂.固体物理在研究了完整晶体的基础上主要是从研究近乎完整晶体中微量缺陷的作用而展开的.性能优异的合金钢,光电灵敏的半导体和集成电路,高亮度的固体激光器等都是从这些研究中陆续地衍生出来的.固体物理学已成为固体材料和固体器件的基础学科,是固体材料和新器件的生长点.今天,固体物理学的研究领域愈益广

泛,成果愈益丰富.

固体物理在近代尖端科学技术中占有很重要的地位.目前尖端科学技术的发展,正把人类对自然的控制推向前所未有的高度.各种优异的半导体材料、超导材料、磁性材料、合金材料、人造晶体、激光器、超大规模集成电路等,这些技术的发展所需要的大量的、多种多样的新材料、新器件,无不是利用了固体各方面的性质,包括了固体的力学、热学、电磁学、光学等性质,以及在极低温、超高压等特殊条件下固体中的各种性能.显然,没有固体物理的崭新的发展,就没有对各种固体中复杂的物理规律的深刻认识,这些新材料和新器件就不可能产生,尖端技术就不能顺利发展.

固体物理学的研究范围极广,实际上已形成了一个内容极为丰富的固体学科体系.就广度而言,固体物理学领域包含了金属物理、半导体物理、磁学及电介质物理、晶体生长、固体发光等研究某类固体或固体的某类问题的分支学科(子学科).就深度而言,固体物理学在不断地深入探讨固体内部粒子之间相互作用与运动状态以及缺陷的形成与运动规律等,引入了许多元激发(准粒子)的概念;还在许多实验技术的配合下研究超高压、强磁场、极低温、强辐射等特殊条件的固体性质以及固体表面、界面、非晶态固体的特殊性质.新的实验现象、新的理论、具有各种特殊性质的新材料、新器件都会在固体物理学研究基础上产生出来.

## 二、固体物理的学科领域

当前,固体物理学发展到了一个新的阶段,主要研究固体中粒子间结合力的一些综合而特殊的性质和各种激发态,从而更加深刻地以微观观点阐明固体的性质和用途,是发展材料科学的基础.概括起来,固体物理的学科领域大致可分为下列几个大方向:

(1)研究固体中的元激发及其能谱.固体的结构和性质与其组成粒子间结合力和运动的规律有密切关系.一定的运动状态就有一定的能量,各种激发态的运动就有一系列的能量状态,组成所谓

的能谱。电子运动的能谱称为电子能谱；与晶格振动有关的能谱称为声子谱；还有各种准粒子的元激发谱。能谱的研究说明了各种物理现象发生的原因，同时也是各种实际应用的指南。只有对能谱作深入研究，才能深入了解固体内部微观运动的规律，揭示固体内部的微观奥秘。这方面的研究也将使人们认识光与物质相互作用的规律，掌握光子与固体中元激发耦合所形成的各种混态及其性质，从而掌握光在固体中传输时可发生的微观过程。这对于发展固态的光电子器件乃至固态光子学有着重要意义。

(2)固体的微观结构与相变机理的研究，是固体物理学中基础性的工作。固体的特性和结构常常随外界条件的变化而逐步变化，并可发展到突变，即所谓相变。相变是固体内粒子间结合力和运动的规律发生突变而引起的。研究固体内部原子间结合力的综合性质与复杂结构的关系，掌握缺陷形成和运动以及结构变化(相变)的规律，从而发展多功能的复合材料以适应新的需要。

(3)研究在极低温、超高压、强磁场、强辐射条件下固体的性质。这主要是为发展新的能源和能量转换方式提供技术准备，也为满足种种特殊条件所需要的材料和器件创造条件。

(4)表面物理的研究范围是固体表面的几个原子层。这一薄层的原子既受体内的束缚，又受到环境的影响，其结构、成分和性质与体内不同。半导体实际界面的研究在改善和稳定半导体器件性能上已显示出锐利的锋芒。表(界)面的研究对固体(金属)材料防腐蚀、防断裂有重要作用。表面物理的研究将揭示出化学催化的微观机制。在半导体物理、金属物理的基础上发展起来的表面物理将在物理与化学、生物学等一些学科之间构成重要的边缘学科。表面物理的研究成果对冶金、石油化工、电子技术、计算机技术等工业部门以及新材料、新器件的研制都具有很大的影响。

(5)非晶态物理——在研究晶态的基础上开始进入非晶态的研究，即研究非晶体中原子、电子的微观过程。预料从这里将发展

出价廉物美的新器件.这方面的研究将引导到液态物理的发展.

### 三、固体物理的研究方法

固体物理主要是一门实验性学科.但是为了阐明所揭示出来的现象之间内在的本质联系,就必须建立和发展关于固体的微观理论.从20年代起,固体物理学一直在上升发展,而且发展的步伐一直是飞快的.为什么能够如此呢?首先是由于生产、军事国防和其他学科发展的需要;其次是由于新技术为固体物理领域的研究提供了优越的手段;更重要的原因还在固体物理学的本身,实验工作与理论工作之间能够相互密切配合,以实验促进理论,以理论来指导实验,相辅相成,相得益彰.

固体(晶体)是一个很复杂的客体,每一立方米中包含有数量级为 $10^{29}$ 的原子、电子,而且它们之间的相互作用相当强.固体的宏观性质就是如此大量的粒子之间的相互作用和集体运动的总表现.这显然是非常复杂的多体问题.因此,在研究固体的客观规律时,必须针对某一特殊过程,抓住主要矛盾,突出主要因素来进行分析研究.譬如,抓住晶体中原子(分子)规则排列的主要特点,抽象出理想的周期性(尽管理想的完整晶体是没有的),建立晶格动力学理论.又例如,从对金属的研究,抽象出电子公有化的概念,再用单电子近似的方法,建立能带理论.这些理论虽是近似的,但有针对性,实践表明,在一定条件下,它们是很有效的.由晶格动力学,引入声子的概念,能够很好地阐明固体的低温比热和中子衍射谱.由能带理论的指导,发展出一系列的合金材料,特别是发现了半导体,制备出优异的半导体材料和半导体器件乃至建立了半导体物理学.在研究物质的铁磁性时,重点研究了电子与声子的相互作用,阐明低温磁化强度随温度变化的规律.在超导的理论中也着重研究了电子和声子的相互作用.1957年巴丁(J. Bardeen)、库柏(L. N. Cooper)和施里弗(J. R. Schrieffer)提出了重要概念,建立了超导电性的微观理论,由于电子和晶格振动的相互作用在电子之

间产生间接的吸引力,从而形成库柏电子对.库柏对的凝聚表现为超导电相变,它促进了超导电性的理论和实验的研究.在此基础上又发现了超导体中库柏对以及单粒子的隧道效应和约瑟夫逊(Josephson)效应,为超导体的技术应用开辟了广阔的前景.

在自然科学的理论探索中,科学的抽象、科学的假说是不可缺少的手段.现在,固体物理学又发展到了一个新的阶段,进入了关于固体中元激发、表面状态和非晶态固体的研究,问题更加复杂了.晶格动力学和固体电子论在新的条件下必须要发展.因此,我们更需要采用恰当的科学假设和科学抽象,来发展新的理论.实践、理论、再实践、再改进理论……这正是科学研究的总规则.所以,在学习固体物理学时,一定要特别注意研究固体的不同性质时采用不同理论模型的依据、应用范围、局域性和改进方法.

# 第一章 晶体结构

本章首先从晶体的特征和晶体结构的周期性出发,来阐述完整晶体中离子、原子或分子的排列规律.然后,简略地阐述晶体的对称性与晶系的特征和利用 X 射线揭示晶体结构的一些基本方法.

## § 1.1 晶体的特征

固体可分为两大类:晶态和非晶态.晶态固体,例如金属、岩盐等具有一定的熔点;非晶态固体,例如白蜡、玻璃、橡胶等则没有固定的熔点(在熔化时有逐渐软化的过程).非晶态固体又叫做过冷液体,它们在凝结过程中不经过结晶(即有序化)的阶段,非晶体中分子与分子的结合是无规则的.雪花往往呈六角状,这是因为水在凝结的时候,分子是按一定的规则排列的.用显微镜观察金属,可知金属由许多小晶粒组成;用 X 射线衍射方法对小晶粒进行的研究表明,小晶粒(线度为微米量级)内部是有序排列的.总之,晶态固体的内部,至少在微米量级的范围内是有序排列的,这叫做长程序.在熔化过程中,晶态固体的长程序解体时对应着一定的熔点,非晶态固体因为没有长程序,故也就没有固定的熔点.

常见的晶体往往是个凸多面体,围成这个凸多面体的面是光

滑的,称为单晶体. 晶态物质在适当的条件下都能自发地发展成单晶体. 发育良好的单晶体,外形上最显著的特征是晶面有规则的配置. 一个理想完整的晶体,相同的晶面具有相同的面积. 晶体外形上的规则性反映着内部分子(原子)间排列的有序.

晶体(本章所讨论的晶体,如未经指出,都指单晶体)常具有沿某些确定方位的晶面劈裂的性质,这种性质称为晶体的解理性,这样的晶面称为解理面. 显露在晶体外表的往往是一些解理面. 单晶体的晶面往往排列成带状,即有些晶面的交线所构成的晶棱是相互平行的,这些晶面的总体称为一个晶带(如图 1-1 中的  $a-1-c-2$  面形成一个带). 这些互相平行的晶棱的共同方向称为该晶带的带轴(如图 1-1 中  $O-O'$  表示带轴). 一个晶体有很多晶带和带轴,其中

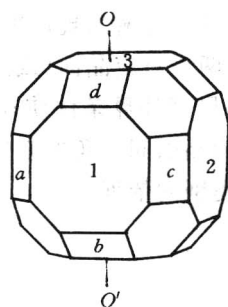


图 1-1 晶体外形图

重要的带轴称为晶轴. 不同晶轴方向的物理性质(如介电常数、电导率等)往往是不同的,即晶体一般具有各向异性.

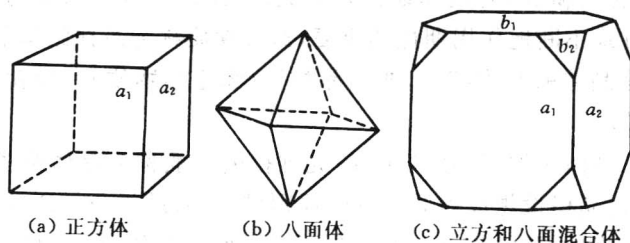


图 1-2 氯化钠晶体的若干外形

由于晶体生长条件不同,同一品种的晶体,其外形是不一样的,例如,氯化钠(岩盐)晶体的外形,如图 1-2 所示,可以是立方体的



或八面体,也可能是立方和八面的混合体,外界条件能使某一组晶面相对地变小,或完全隐没.如图 1-2(b)表示氯化钠立方体的六个晶面消失了,而发展成八面体的八个晶面.因此,晶面本身的大小和形状受晶体生长时外界条件影响,不是晶体品种的特征因素,不能由之鉴定晶体的归属.但是我们注意到,图 1-2 中氯化钠晶体的  $a_1, a_2$  面间夹角( $90^\circ$ )及  $b_1, b_2$  面间夹角( $109^\circ 28' 16''$ )等在各种情况下是不变的,这是晶体的普遍性特征,是由晶体内部的结构所决定的.这个普遍的规律被概括为晶面角守恒定律:属于同一品种的晶体,两个对应晶面(或晶棱)间的夹角恒定不变.因为同一品种的晶体,尽管外界条件使外形不同,但因内部结构相同,其共同性就表现为晶面间夹角的守恒.因而,测定晶面间夹角的大小才是判定晶体类别的依据.

## § 1.2 晶格及其周期性

从 X 射线研究的结果,我们知道晶体是由离子、原子或分子(统称为微粒)有规律地排列而成的.晶体中微粒的排列按照一定的方式不断地作周期性的重复,这种性质称为晶体结构的周期性.这是晶体的基本特征,非结晶物质(无定形物质)一般就没有这种特征.

晶体中原子(或离子)的规则排列一般称为晶体格子,简称晶格.把晶格设想成为原子球的规则堆积,有助于我们比较直观地理解晶格的组成.图 1-3 表示在一个平面内规则排列的原子球一个最简单的形式.如果把这样的原子层叠起来,各层的球完全对应,就形成所谓简单立方晶格.没有实际的晶体采取简单立方晶格,但是一些更复杂的晶格可以在简单立方晶格基础上加以分析.简单