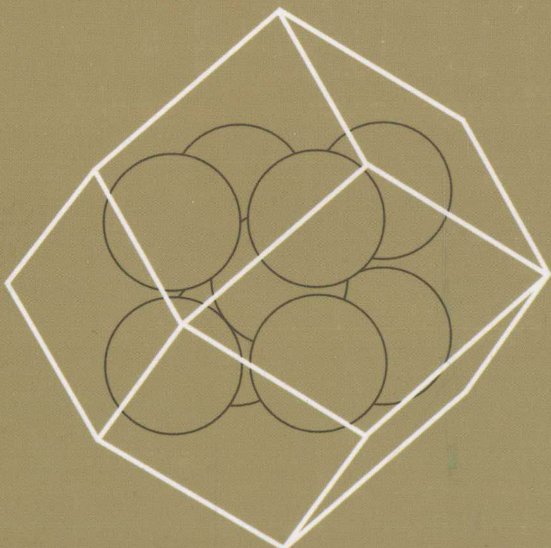
固体物理
概念题和习题指导

王矜奉　范希会　张承琚　编著



山东大学出版社

固体物理概念题和习题指导

王矜奉　范希会　张承琚　编著

山东大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

固体物理概念题和习题指导/王矜奉,范希会,张承琚编著.
—2版.—济南:山东大学出版社,2005.9
ISBN 7-5607-2337-3

Ⅰ.固... Ⅱ.①王... ②范... ③张... Ⅲ.固体物理学
—高等学校—解题 Ⅳ.048-44

中国版本图书馆CIP数据核字(2001)第059818号

山东大学出版社出版发行
(山东省济南市山大南路27号 邮政编码:250100)
山 东 省 新 华 书 店 经 销
山东农业大学印刷厂印刷
850×1168毫米 1/32 8.75印张 225千字
2005年9月第2版 2005年9月第4次印刷
印数:6901—9900册
定价:15.00元

第二版前言

《固体物理概念题和习题指导》是配合作者编著的《固体物理教程》的学习指导书，自出版发行以来，受到全国兄弟院校师生的欢迎. 特别使作者感动的是，他们中除综合大学、师范院校和工科院校本科生主流外，还有为数众多的研究生、中学教师、自学者、电大学生和自考生.

兄弟院校对《固体物理概念题和习题指导》提出了不少宝贵的意见，山东大学物理与微电子学院历届"国家理科基地"班的同学们也对该教学指导书提出过有益的建议. 作者归纳了同行和同学们的意见，对在一版中的不妥之处进行了修订. 为适应新版(第五版)《固体物理教程》的教学内容，第二版的《固体物理概念题和习题指导》在原版的基础上做了部分增补和调整. 王矜奉教授的博士生臧国忠和郑立梅等，对本版的增补内容进行了演算和校正。在此，对在本书的再版给予帮助和支持的人们表示衷心的感谢.

为方便多媒体教学，授课教师可从网页 http://www.phym.sdu.edu.cn/lessons/ 下载《固体物理概念题和习题指导》的所有插图和其它有关资料.

本书的再版先后得到教育部"国家理科基地创建名牌课程项目"和山东大学"名牌课程建设项目"和"山东省精品课程"项目的资助.

作者

2005 年 7 月

前　言

20世纪80年代国内曾出版过《固体物理习题解答》一类的教学参考书,这些教学参考书对我国高等学校固体物理的教学起到了推动和促进作用. 自从恢复高考制度以来, 我国的固体物理教学有了很大的进步, 特别是研究生入学考试, 更大大推动了固体物理概念题和习题的积累和发展. 为了进一步加强授课老师和学生对固体物理基本概念的理解和掌握,为了适应新的21世纪的发展, 很有必要出版一本增添概念题、丰富加强习题的新的固体物理教学指导参考书.

从20世纪80年代初以来,王矜奉教授针对固体物理授课中和学生学习中的难点和疑点,进行了长期深入的研究, 发表了十余篇研究论文,编著了《固体物理教程》. 该教程在晶格的旋转对称性证明、晶体的X光衍射、几何结构因子与衍射强度关系、固体弹性理论、马德隆常数的计算、晶格的简正振动、长波近似、费米面与布里渊区边界正交、布洛赫定理的证明、能带的紧束缚方法、磁化率与能态密度、金属接触电势差、纯金属电阻率等固体物理基本问题上,采取了新的处理方法或做了较大改进. 在《固体物理教程》每章后面, 都分别给出了相当数量的思考题和习题. 大部分思考题是作者长期积累的教学心得,有不少习题是作者自行设计或积累的全国各高校研究生入学富有创意的考题.

《固体物理教程》被不少兄弟院校选为教材或教学参考书. 使用者普遍反映,该教材对固体物理的难点和疑点作出了剖析和论

证，问题的来龙去脉清晰，是很有特色的教材．由于《固体物理教程》的思考题和习题很有新意，很多兄弟院校的师生多次恳请作者能将该书的思考题和习题单独出一本解答．在“国家理科基地创建名牌课程项目”的支持下，在访问学者范希会教授的通力合作下，我们对《固体物理教程》的思考题和习题进行了全面解答，编撰出《固体物理概念题和习题指导》这一教学参考书．可以预见，该教学参考书，对增强教师对固体物理的驾驭能力，提高学生们对固体物理基础理论的理解能力，启迪学生的智力，提高学生的自学能力，培养他们的创新意识，都是大有裨益的．

在《固体物理概念题和习题指导》的编写中，王矜奉教授参加了第一、第二、第三、第四和第五章习题的解答，解答了第六章的全部习题和所有各章的思考题，绘制了全部插图．范希会教授在第一、第二、第三、第四和第五章习题的解答中做了大量工作．张承琚教授参加了第一和第二章习题的解答．在《固体物理概念题和习题指导》的编写中，作者参考了20世纪80年代国内出版的固体物理教学参考书，参考书目列在书后．

刘宜华教授提供了个人对固体物理习题的积累和解答，在此对刘宜华教授的帮助表示衷心的感谢．

由于作者学识有限，书中难免有疏漏、不当甚至谬误之处．切望学界专家和读者给予批评指教，以便日后修改、订正．

本书得到教育部“国家理科基地创建名牌课程项目”的资助．

作　者

2001年6月于山东大学物理系

目　录

本书主要符号

a	晶格常数
$\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3$	原胞基矢
$\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}$	晶胞基矢
$\boldsymbol{a}^*,\boldsymbol{b}^*,\boldsymbol{c}^*$	倒格晶胞基矢
$\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\boldsymbol{b}_3$	倒格原胞基矢
$\boldsymbol{B}$	磁感应强度
C	浓度
C_V	定容热容量
C_{IJ}	弹性劲度常数
$\boldsymbol{D}$	电位移
$D(\omega)$	格波模式密度
d	晶面间距
$d_{h_1h_2h_3}$	晶面间距
d_{hkl}	晶面间距
$\boldsymbol{E}$	电场强度
E	能量
E_F	费密能量
E_g	能隙

e	电子电荷
f	原子散射因子,费密分布函数,力
$\boldsymbol{F}$	力
F	自由能
h	普朗克常数
$\hbar$	$h/2\pi$
H	哈密顿量
$\boldsymbol{J},\boldsymbol{j}$	电流密度,粒子流密度
$\boldsymbol{k}$, k	波矢
k	热导系数(热导率)
K	体积弹性模量
$\boldsymbol{K}_h$, $\boldsymbol{K}_m$, $\boldsymbol{K}_n$	倒格矢
M, m	质量
m^*	有效质量
$\bar{l}$	平均自由程
N	原胞数目,原子数目
n	衍射级数,原子数目,缺陷数目
$\boldsymbol{n}$	单位法矢量
p	公因数,压强
Q	简正坐标
q	波矢,热能流密度
$\boldsymbol{R}$, $\boldsymbol{R}_m$, $\boldsymbol{R}_n$	正格矢
R	普适气体常数
$\boldsymbol{r}$	位置矢量
r	原子间距

S	熵,面积
S_{ij}, S_I	应变
S_{IJ}	弹性顺度常数
T	温度,应力,周期
T_F	费密温度
T_{ij}, T_I	应力
t	时间
$\boldsymbol{u}$, u	原子位移,质点位移,能量
U	结合能,原子相互作用能
V, V_c	体积
$\boldsymbol{v}$	速度
v	速度,圆频率
v_d	漂移速度
v_F	费密速度
W	微观状态数
α, α_V	线膨胀系数,体膨胀系数
β	恢复力系数
γ	格林爱森常数
δ_{ij}	克朗内克尔符号
δ	微小相对变化量,δ 函数
$\boldsymbol{\varepsilon}$	电场强度
ε	介电常数
ε_0	真空介电常数
φ,Ψ	波函数
λ	波长

μ	系数
θ	角度
Θ_D	德拜温度
Θ_E	爱因斯坦温度
ρ	质量密度,电阻率
σ	电导率
τ	弛豫时间,体积
ω	角频率
ω_D	德拜频率
ω_A	声学波频率
ω_O	光学波频率
Ω	原胞体积
Ω^*	倒格原胞体积

第一章　晶体的结构

思　考　题

1. 以堆积模型计算由同种原子构成的同体积的体心和面心立方晶体中的原子数之比.

[**解　答**]

设原子的半径为R,体心立方晶胞的空间对角线为$4R$,晶胞的边长为$4R/\sqrt{3}$,晶胞的体积为$(4R/\sqrt{3})^3$,一个晶胞包含两个原子,一个原子占的体积为$(4R/\sqrt{3})^3/2$,单位体积晶体中的原子数为$2/(4R/\sqrt{3})^3$;面心立方晶胞的边长为$4R/\sqrt{2}$,晶胞的体积为$(4R/\sqrt{2})^3$,一个晶胞包含四个原子,一个原子占的体积为$(4R/\sqrt{2})^3/4$,单位体积晶体中的原子数为$4/(4R/\sqrt{2})^3$. 因此,同体积的体心和面心立方晶体中的原子数之比为$\left(\sqrt{\frac{3}{2}}\right)^3/2=0.919$.

2. 解理面是面指数低的晶面还是指数高的晶面？为什么？

[**解　答**]

晶体容易沿解理面劈裂,说明平行于解理面的原子层之间的结合力弱,即平行解理面的原子层的间距大. 因为面间距大的晶

面族的指数低，所以解理面是面指数低的晶面.

3. 基矢为$\boldsymbol{a}_1=a\boldsymbol{i}$，$\boldsymbol{a}_2=a\boldsymbol{j}$，$\boldsymbol{a}_3=\frac{a}{2}(\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j}+\boldsymbol{k})$的晶体为何种结构？若$\boldsymbol{a}_3=\frac{a}{2}(\boldsymbol{j}+\boldsymbol{k})+\frac{3a}{2}\boldsymbol{i}$，又为何种结构？为什么？

［**解　答**］

由已知条件，可计算出晶体的原胞的体积

$$\Omega=\boldsymbol{a}_1\cdot|\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3|=\frac{a^3}{2}.$$

由原胞的体积推断，晶体结构为体心立方. 按照本章习题14，我们可以构造新的矢量

$$\boldsymbol{u}=\boldsymbol{a}_3-\boldsymbol{a}_1=\frac{a}{2}(-\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j}+\boldsymbol{k}),$$

$$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{a}_3-\boldsymbol{a}_2=\frac{a}{2}(\boldsymbol{i}-\boldsymbol{j}+\boldsymbol{k}),$$

$$\boldsymbol{w}=\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{a}_3=\frac{a}{2}(\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j}-\boldsymbol{k}).$$

$\boldsymbol{u}$，$\boldsymbol{v}$，$\boldsymbol{w}$ 对应体心立方结构. 根据14题可以验证，$\boldsymbol{u}$，$\boldsymbol{v}$，$\boldsymbol{w}$ 满足选作基矢的充分条件. 可见基矢为$\boldsymbol{a}_1=a\boldsymbol{i}$，$\boldsymbol{a}_2=a\boldsymbol{j}$，$\boldsymbol{a}_3=\frac{a}{2}(\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j}-\boldsymbol{k})$的晶体为体心立方结构.

若

$$\boldsymbol{a}_3=\frac{a}{2}(\boldsymbol{j}+\boldsymbol{k})+\frac{3a}{2}\boldsymbol{i},$$

则晶体的原胞的体积

$$\Omega=\boldsymbol{a}_1\cdot|\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3|=\frac{a^3}{2},$$

该晶体仍为体心立方结构.

4. 若$\boldsymbol{R}_{l_1l_2l_3}$与$\boldsymbol{R}_{hkl}$平行，$\boldsymbol{R}_{hkl}$是否是$\boldsymbol{R}_{l_1l_2l_3}$的整数倍？以体心立方

和面心立方结构证明之.

[解　答]

若 $\boldsymbol{R}_{l_1l_2l_3}$与 $\boldsymbol{R}_{hkl}$平行,$\boldsymbol{R}_{hkl}$一定是 $\boldsymbol{R}_{l_1l_2l_3}$的整数倍. 对体心立方结构,由《固体物理教程》(1.2)式可知

$$\boldsymbol{a}=\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3,\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}_3+\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{c}=\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2,$$

$\boldsymbol{R}_{hkl}=h\boldsymbol{a}+k\boldsymbol{b}+l\boldsymbol{c}=(k+l)\boldsymbol{a}_1+(l+h)\boldsymbol{a}_2+(h+k)\boldsymbol{a}_3=p\boldsymbol{R}_{l_1l_2l_3}=p(l_1\boldsymbol{a}_1+l_2\boldsymbol{a}_2+l_3\boldsymbol{a}_3)$,其中 p 是$(k+l)$、$(l+h)$和$(h+k)$的公约(整)数.

对于面心立方结构,由《固体物理教程》(1.3)式可知,

$$\boldsymbol{a}=-\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3,\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3,\boldsymbol{c}=\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{a}_3,$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}_{hkl}&=h\boldsymbol{a}+k\boldsymbol{b}+l\boldsymbol{c}\\&=(-h+k+l)\boldsymbol{a}_1+(h-k+l)\boldsymbol{a}_2+(h+k-l)\boldsymbol{a}_3\\&=p'\boldsymbol{R}_{l_1l_2l_3}\\&=P'(l_1\boldsymbol{a}_1+l_2\boldsymbol{a}_2+l_3\boldsymbol{a}_3),\end{aligned}$$

其中P'是$(-h+k+l)$,$(h-k+l)$和$(h+k-l)$的公约(整)数.

5. 晶面指数为(123)的晶面 ABC 是离原点 O 最近的晶面,OA,OB 和 OC 分别与基矢 $\boldsymbol{a}_1$,$\boldsymbol{a}_2$ 和 $\boldsymbol{a}_3$ 重合,除 O 点外,OA,OB 和 OC 上是否有格点?若 ABC 面的指数为(234),情况又如何?

[解　答]

晶面族(123)截 $\boldsymbol{a}_1$,$\boldsymbol{a}_2$ 和 $\boldsymbol{a}_3$ 分别为1,2,3 等份,ABC 面是离原点 O 最近的晶面,OA 的长度等于的 $\boldsymbol{a}_1$ 长度,OB 的长度等于 $\boldsymbol{a}_2$ 的长度的1/2,OC 的长度等于 $\boldsymbol{a}_3$ 的长度的1/3,所以只有 A 点是格点. 若 ABC 面的指数为(234)的晶面族,则 A、B 和 C 都不是格点.

6. 验证晶面$(\bar{2}10)$,$(\bar{1}11)$和(012)是否属于同一晶带. 若是同一晶带,其带轴方向的晶列指数是什么?

[解　答]

由习题12 可知，若$(\bar{2}10)$，$(\bar{1}11)$和(012)属于同一晶带，则由它们构成的行列式的值必定为0. 可以验证

$$\begin{vmatrix} \bar{2} & 1 & 0 \\ \bar{1} & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{vmatrix} = 0,$$

说明$(\bar{2}10)$，$(\bar{1}11)$和(012)属于同一晶带.

晶带中任两晶面的交线的方向即是带轴的方向. 由习题13 可知，带轴方向晶列$[l_1l_2l_3]$的取值为

$$l_1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = 1, l_2 = \begin{vmatrix} 0 & \bar{2} \\ 1 & \bar{1} \end{vmatrix} = 2,\ l_3 = \begin{vmatrix} \bar{2} & 1 \\ \bar{1} & 1 \end{vmatrix} = -1.$$

7. 带轴为[001]的晶带各晶面，其面指数有何特点？

[解　答]

带轴为[001]的晶带各晶面平行于[001]方向，即各晶面平行于晶胞坐标系的$\boldsymbol{c}$轴或原胞坐标系的$\boldsymbol{a}_3$轴，各晶面的面指数形为$(hk0)$或(h_1h_20)，即第三个数字一定为0.

8. 与晶列$[l_1l_2l_3]$垂直的倒格面的面指数是什么？

[解　答]

正格子与倒格子互为倒格子. 正格子晶面$(h_1h_2h_3)$与倒格式$\boldsymbol{K}_h = h_1\boldsymbol{b}_1 + h_2\boldsymbol{b}_2 + h_3\boldsymbol{b}_3$ 垂直，则倒格晶面$(l_1l_2l_3)$与正格矢$\boldsymbol{R}_l = l_1\boldsymbol{a}_1 + l_2\boldsymbol{a}_2 + l_3\boldsymbol{a}_3$ 正交. 即晶列$[l_1l_2l_3]$与倒格面$(l_1l_2l_3)$ 垂直.

9. 在结晶学中，晶胞是按晶体的什么特性选取的？

[解　答]

在结晶学中，晶胞选取的原则是既要考虑晶体结构的周期性

又要考虑晶体的宏观对称性.

10. 六角密积属何种晶系？一个晶胞包含几个原子？

[解 答]

六角密积属六角晶系，一个晶胞(平行六面体)包含两个原子.

11. 体心立方元素晶体，[111]方向上的结晶学周期为多大？实际周期为多大？

[解 答]

结晶学的晶胞，其基矢为$\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$，$\boldsymbol{c}$，只考虑由格矢$\boldsymbol{R}=h\boldsymbol{a}+k\boldsymbol{b}+l\boldsymbol{c}$构成的格点. 因此，体心立方元素晶体[111]方向上的结晶学周期为$\sqrt{3}a$，但实际周期为$\sqrt{3}a/2$.

12. 面心立方元素晶体中最小的晶列周期为多大？该晶列在哪些晶面内？

[解 答]

周期最小的晶列一定在原子面密度最大的晶面内. 若以密堆积模型，则原子面密度最大的晶面就是密排面. 由《固体物理教程》图1.9可知密勒指数(111)[可以证明原胞坐标系中的面指数也为(111)]是一个密排面晶面族，最小的晶列周期为$\sqrt{2}a/2$. 根据同族晶面族的性质，周期最小的晶列处于{111}面内.

13. 在晶体衍射中，为什么不能用可见光？

[解 答]

晶体中原子间距的数量级为10^{-10}米，要使原子晶格成为光波的衍射光栅，光波的波长应小于10^{-10}米. 但可见光的波长为7.6～4.0×10^{-7}米，是晶体中原子间距的1000倍. 因此，在晶体衍射中，