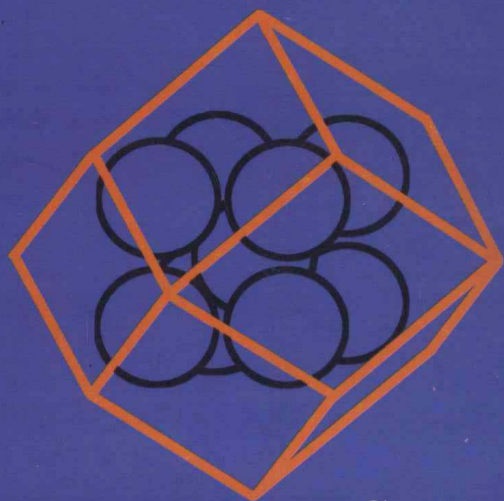



固体物理

教程

王矜奉 编著



Gutiwuli
jiaocheng

 山东大学出版社

固体物理教程

王矜奉 编著

山东大学出版社

内 容 摘 要

本书论述固体物理的基础理论, 具体内容为: 晶体结构及 X 光衍射, 晶体的结合, 晶格振动, 能带理论及金属电子论. 本书总结了作者长期的教学研究和实践, 对不少问题采取了新的处理方法. 每章后都分别给出了相当数量的思考题和习题.

本书可作为理工科院校物理、应用物理、材料科学等专业本科生的基础课教材, 也可作为研究生及其他工程技术人员的参考书.

第四版前言

《固体物理教程》出版发行以来,先后被一些兄弟院校选作教材或教学参考书。四川师大赵敏光、方可、河北师大聂向富、唐贵德、中国科大林鸿生、南开大学郭振亚、王玉芳、天津大学宋承英、兰州大学冯博学、郑州大学李新建、山西大学丁秀香、新疆大学郑毓峰、云南大学周庆、贵州大学张晋敏、扬州大学邓桂昌、苏州大学蒋青、西南师大郑瑞伦、重庆师大向永寿、曲阜师大范希会、青岛大学王淑华、山东师范大学仝殿民、李健、济南大学梁伟、山东大学材料科学与工程学院李胜利、山东大学信息科学与工程学院刘骥、山东大学物理与微电子学院胡季帆、张承璐、赵明文等同志对本书提出过宝贵的意见和鼓励。山东大学物理与微电子学院历届“国家理科基地”班的同学们也对本书提出过有益的建议。作者归纳了同行和同学们的意见,对在第三版中的不妥之处进行了修订。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。

本书的再版得到教育部“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”的资助。

作者

2004年1月

前 言

现行固体物理教科书,既包括固体物理的基础部分,又包括半导体、磁学、电介质、超导等专门化内容.作为一个学期的基础课,一般只能讲授完基础部分.对于专门化内容,不仅来不及讲解,而且没有必要作基础课讲授.因为学生分专业后,还要分别系统地学习这些内容,而且这些内容已有专门的教材:半导体物理、磁性理论或铁磁学、电介质物理、超导物理等.作者编写本书的出发点正是基于这一考虑.也就是说,本书只论述固体物理的基础理论,不包括专门化内容.

本教程共分六章:第一章介绍有关晶体结构的基本知识,包括确定晶格结构的X光衍射理论和方法.第二章讲述晶体的结合类型及晶体中原子间的相互作用.将原子视为固定不动是前两章的前提条件.第三章讲解晶格的振动理论、声子概念及由晶格振动所决定的晶体热学性质.第四章介绍晶体中缺陷的基本知识及缺陷的运动规律.第五章讲述求解晶体中电子能带的基本方法及电子的运动规律.第六章阐述金属中导电电子的运动规律及其输运特性.第五和第六章的共同特点是,几乎所有的问题都是在波矢空间进行分析讨论的.每章后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,有若干习题是作者自行设计的.

本教程是在总结作者长期以来的教学研究和实践的基础上编写而成的.书中对不少问题采取了新的处理方法,特别是关于晶格的简正振动、费密面与布里渊区边界正交、能带的反演对称性、紧

束缚方法、金属接触电势差、纯金属电阻率等问题的论述,都作了新的尝试.

在本书的编写过程中,莫党教授审阅了部分重点章节,韩汝琦教授在纯金属电阻率问题上给予了指教,梅良模、秦自楷、钟维烈、王家俭、张德恒、安希书等老师对书稿的框架和内容提出了宝贵的意见和建议,谢去病、刘克哲、蒋民华、姚熹教授等对本书的出版给予了关心和帮助,俞淑华在插图绘制中做了大量工作.在此,对他们的支持和鼓励表示深切的感谢.

由于作者学识有限,书中难免有错误和不当之处,敬请专家和读者批评指正.

作 者

1995年12月于山东大学物理系

本书主要符号

a	晶格常数
A	矢势
a_1, a_2, a_3	原胞基矢
a, b, c	晶胞基矢
a^*, b^*, c^*	倒格晶胞基矢
B	磁感应强度
b_1, b_2, b_3	倒格原胞基矢
c	光速
C_V	定容热容
c_{ij}	弹性劲度常数
D	扩散系数
D	电位移
$D(\omega)$	格波模式密度
d	晶面间距
E	电场强度
E	能量
E_F	费密能量
E_g	能隙
e	电子电荷
f	费密分布函数, 原了散射因子
F	力
F	自由能, 几何结构因子
h	普朗克常数
\hbar	$h/2\pi$

H	哈密顿量
J	电流密度
j	粒子流密度
k, k	波矢, 热导系数
K	体积弹性模量
k_F	费密波矢
k_B	玻耳兹曼常数
$\mathbf{K}_h, \mathbf{K}_m, \mathbf{K}_n$	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, 电子浓度
\mathbf{n}	单位法矢量
\mathbf{P}	电极化矢量
P	压强, 热缺陷跃迁几率
Q	筒正坐标
q	波矢, 热能流密度
$\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_m, \mathbf{R}_n$	正格矢
R	普适气体常数
\mathbf{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
T_F	费密温度
T_{ij}, T_I	应力
t	时间
\mathbf{u}	原子位移
U	原子结合能, 内能

V, V_c	体积
v	速度
v_d	漂移速度
v_F	费密速度
W	微观状态数
Z	配分函数
α	线膨胀系数
β	恢复力常数
γ	格林爱森常数
δ_{ij}	克朗内克尔符号
ϵ	介电常数
ϵ_0	真空介电常数
φ	波函数
ψ	波函数
Ψ	波函数
λ	波长
μ	迁移率
ν	频率
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, 屏蔽常数
τ	弛豫时间
ω	角频率
ω_D	德拜频率
ω_{LO}	长光学纵波频率
ω_{TO}	长光学横波频率
Ω	原胞体积
Ω^*	倒格原胞体积

目 录

本书主要符号	1
第一章 晶体的结构	1
§ 1.1 晶体的共性	1
§ 1.2 密堆积	3
§ 1.3 布喇菲空间点阵 原胞 晶胞	5
§ 1.4 晶列 晶面指数	11
§ 1.5 倒格空间	15
§ 1.6 晶体的对称性	18
§ 1.7 晶格结构的分类	25
§ 1.8 晶体的 X 光衍射	28
§ 1.9 原子散射因子 几何结构因子	35
思考题	40
习题	42
第二章 晶体的结合	47
§ 2.1 原子的电负性	47
§ 2.2 晶体的结合类型	51
§ 2.3 结合力及结合能	55
§ 2.4 分子力结合	59
§ 2.5 共价结合	64
§ 2.6 离子结合	68
§ 2.7 原子和离子半径	72
§ 2.8 应力 应变 胡克定律	75

§ 2.9 弹性动力学方程 弹性波	81
思考题	86
习题	88
第三章 晶格振动与晶体热学性质	91
§ 3.1 一维晶格的振动	91
§ 3.2 三维晶格的振动	101
§ 3.3 简正振动 声子	105
§ 3.4 晶格振动谱的实验测定方法	113
§ 3.5 长波近似	116
§ 3.6 晶格振动热容理论	125
§ 3.7 晶格振动的非简谐效应	134
§ 3.8 晶体的热力学函数	140
思考题	144
习题	145
第四章 晶体的缺陷	149
§ 4.1 晶体缺陷的基本类型	149
§ 4.2 位错缺陷的性质	155
§ 4.3 热缺陷的统计理论	159
§ 4.4 缺陷的扩散	165
§ 4.5 离子晶体的热缺陷在外场中的迁移	170
思考题	175
习题	176
第五章 晶体中电子能带理论	179
§ 5.1 布洛赫波函数	179
§ 5.2 一维晶格中的近自由电子	184
§ 5.3 一维晶格中电子的布拉格反射	187
§ 5.4 平面波方法	192
§ 5.5 布里渊区	196

§ 5.6	紧束缚方法	202
§ 5.7	正交化平面波 赝势	207
§ 5.8	电子的平均速度 平均加速度和有效质量	210
§ 5.9	等能面 能态密度	215
§ 5.10	磁场作用下的电子能态	222
§ 5.11	导体 半导体和绝缘体	229
	思考题	233
	习题	234
第六章	自由电子论和电子的输运性质	239
§ 6.1	电子气的费密能和热容量	239
§ 6.2	接触电势差 热电子发射	246
§ 6.3	玻耳兹曼方程	252
§ 6.4	弛豫时间的统计理论	257
§ 6.5	电子与声子的相互作用	259
§ 6.6	金属的电导率	263
§ 6.7	纯金属电阻率的统计模型	266
§ 6.8	弱磁场下玻耳兹曼方程的解	269
§ 6.9	金属的热传导	273
	思考题	277
	习题	278
	参考书目	282
	词汇汉英对照	284
	常用物理常数	296

第一章 晶体的结构

固体分为晶体和非晶体。本章中晶体的共性和密堆积是了解晶体的性质和结构的基础。原胞、晶面、倒格子、对称性及晶格结构分类等节对晶体结构作了多方面的阐述。最后，对研究晶体结构的重要手段—X光衍射的基础理论作了介绍和分析。

§ 1.1 晶体的共性

不同原子构成的晶体，其性质有很大差别。Al 是良好的导体，而 Al_2O_3 是优良的绝缘体。即使是同种原子构成的晶体，若结构不同，其性质也会有很大差异，例如金刚石和石墨都是由碳原子构成的，但其性质相去甚远。前者硬度很高，不能导电；后者质地疏松，有良好的导电性。晶体除具有各自的特性外，不同的晶体还具有一些共同的性质。

一、长程有序

长程有序是晶体最突出的特点。晶体中的原子都是按一定规则排列的，这种至少在微米数量级范围的有序排列，称为长程有序。晶体分为单晶体和多晶体，多晶体是由许许多多小单晶（晶粒）构成。对于单晶体，在整体范围内原子都是规则排列的。对于多晶体，在各晶粒范围内，原子是有序排列的。

二、自限性

晶体具有自发地形成封闭几何多面体的特性,称之为晶体的自限性.这一特性是晶体内部原子的规则排列在晶体宏观形态上的反映.

由于生长条件的不同,同一种晶体的外形会有差异.在某条件下生长的晶体的晶面数目和相对大小,与另一条件下生长的同一种晶体的晶面情况会有很大的差别.如图 1.1 是石英晶体的理想外形,图 1.2 是人造 Z (与 m 面平行的轴为 c 轴,通常取作直角坐标的 Z 轴)块石英晶体.

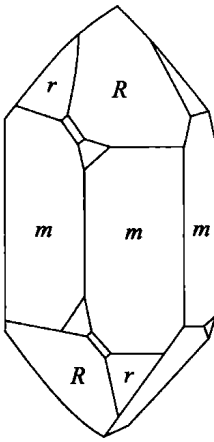


图 1.1 理想石英晶体

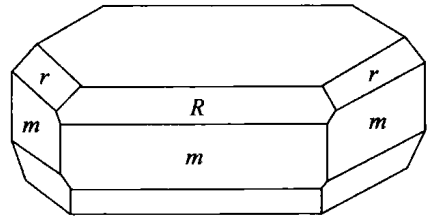


图 1.2 一种人造石英

尽管同一种晶体其外形可能不同,但相应的两晶面之间的夹角总是不变的,称这一规律为晶面夹角守恒定律.比如,石英晶体的 mm 两面夹角为 $60^{\circ}0'$, mR 两面夹角为 $38^{\circ}13'$, mr 两面夹角为 $38^{\circ}13'$.

三、各向异性

晶体的物理性质是各向异性的。例如，平行石英的 c 轴入射单色光，不产生双折射；而沿其他方向入射单色光，会产生双折射。晶体常具有沿某些确定方位的晶面发生劈裂的现象，方解石和云母就是最好的例子，晶体的这一解理性也是各向异性的表现。晶体的各向异性从外形上也能反映出来，某一方位的晶面的形状和大小会与另一方位的不同。但有一些晶面的交线（又称晶棱）互相平行，这些晶面称为一个晶带，晶棱的方向称为带轴。如石英晶体的 m 面构成一个晶带，这个晶带的带轴是石英的一个晶轴，即 c 轴。

正因为晶体的物理性质是各向异性的，因此有些物理常数一般不能用一个数值来表示。例如，弹性常数，压电常数，介电常数，电导率等一般需要用张量来描述。需要指出的是，晶体的各向异性是晶体区别于非晶体的重要特性。

§ 1.2 密堆积

在两个世纪以前，人们认为晶体是由实心的基石堆砌而成的。这一设想虽然粗浅，但它形象地直观地描述了晶体内部的规则排列这一特点。直到现在人们仍沿用这种堆积方式来形象地描述晶体的简单晶格结构。

把原子视为刚性小球，在一个平面内最简单的规则堆积便是正方排列，如图 1.3 所示，任一个球与同一平面内的四个最近邻相切。如果把这样的排列层层重合堆积起来，就构成了简单立方结构。用黑点代表球心，图 1.4 便是简单立方的结构单元。

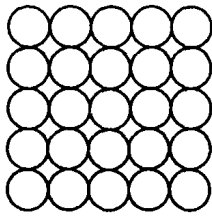


图 1.3 原子球的正方堆积

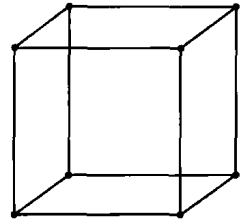


图 1.4 简立方结构单元

设想上述简立方堆积的原子球均匀地散开一些,而恰好在原子球空隙内能放入一个全同的原子球,使空隙内的原子球与最近邻的八个原子球相切,这便构成了如图 1.5 所示的体心立方堆积方式.图 1.6 便是由几何点来表示的体心立方结构单元.

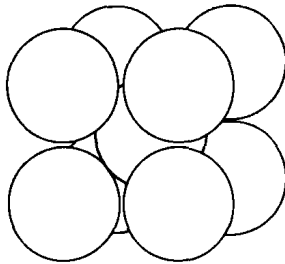


图 1.5 体心立方堆积

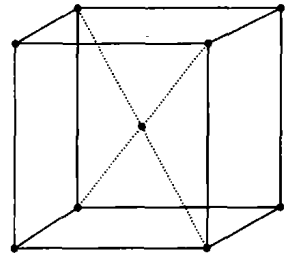


图 1.6 体心立方结构单元

以上两种堆积并不是最紧密的堆积方式.原子球若要构成最紧密的堆积方式,原子球必须与同一平面内相邻的 6 个原子球相切,如图 1.7 所示.如此排列的一层原子面称为密排面.要达到最紧密堆积,相邻原子层也必须是密排面,而且原子球心必须与相邻原子层的空隙相重合.若第三层的原子球心落在第二层的空隙上,且与第一层平行对应,便构成了如图 1.8 所示的六角密排方式.若第三层的球心落在第二层的空隙上,且该空隙也与第一层原子空隙重合,而第四层又恢复成第一层的排列,这便构成了立方密排方式.图 1.9 示出了立方密积结构单元,阴影平面对应密排面.

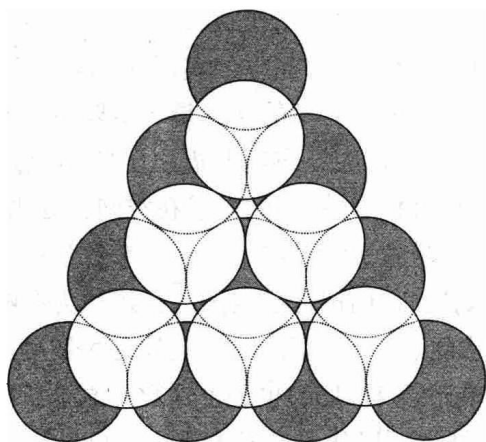


图 1.7 密堆积

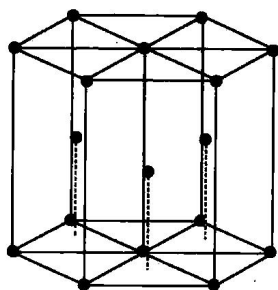


图 1.8 六角密排

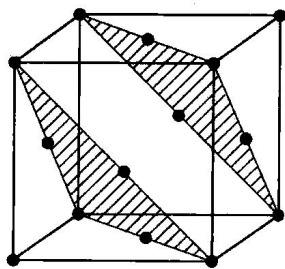


图 1.9 立方密排结构单元

一个原子周围最近邻的原子数,称为该晶体的配位数,可用来表征原子排列的紧密程度.最紧密的堆积称密堆积,密堆积对应最大的配位数.不论是六角密排还是立方密排,晶体的配位数都是12,即任一个原子球与最近邻的12个原子球相切.

§ 1.3 布喇菲空间点阵 原胞 晶胞

上一节我们介绍了由同种原子构成的晶体的一些结构.但实