# 基本固態物理學

基泰爾著
張桐生譯

臺灣中華書局印行

# 基本固態物理學

Introduction to

# ELEMENTARY SOLID STATE PHYSICS

FIRST EDITION

by

Charles Kittel

張 桐 生 譯

臺灣中華書局印行

中華民國五十四年五月初版

# 基本固態物理學（全一冊）

基本定[illegible]元正

（郵運匯費另加）





原著者　Charles Kittel

譯者　張桐生

發行人　臺灣中華書局股份有限公司代表　姚戟楣
臺北市重慶南路一段九十四號

印刷者　臺灣中華書局印刷廠
臺北市成都路一〇六號

發行處　臺灣中華書局
臺北市重慶南路一段九十四號

（臺總）甲書

臺參（廠・王）

# 著 者 序

本書爲著者原書 Introduction to Solid State Physics 之節選本，適合於大學部修習工程、化學、及物理之學生一學期課程講授之需用。本書之著述嘗設讀者有一學期原子物理學課程之基礎。著者在本書中之用心，係力求以簡單之方式討論固體中之基本物理過程，特爲半導體中與金屬中者。本書並非一固態器物之書，而係討論固態器物見諸應用之原理者。

有特爲工程學生一述者：在固態物理學中，有些部份可以獲達相當精確之數字結果或工程近似值；另外一些部份雖精確度較差祗能有數量級之估計，但作爲研究發展方向之引導，則甚有價值。著者在本書中經常設法鼓舞讀者向此方向思考。

MKS 與高斯 cgs 單位制，在本書中有些部份平行應用，處理電磁場與固體之交互作用時，即有此事例。

爲本書提供器物、像片、與表解諸君，已在原書序言中一一列名致謝。另須在此致謝者，爲 Bernard Cooper 博士核閱本書原稿；Eleanor Thornhill 夫人與 Kaye Wells 小姐經常不懈之襄助。

貝克萊，加州

1962年 6 月

基 泰 爾

# 譯 者 序

此書爲基泰爾（Charles Kittel）博士 1962 年新著"Elementary Solid State Physics"之譯本。

固態物理學之研究能獲得普遍興趣與迅速發展者，爲第二次世界大戰末期及戰後之事。作戰與重建，在在要求有優良品質之新材料；亦要求從舊材料中發現新品質。科學工作者，是乃就金屬、陶瓷、玻璃、半導體、與聚合體（polymers）諸固態物質展開研究。由於量子力學、分子動力說、疵弊結構學說之應用，益之以近代原子能與電子學之助力，使此類物質之結構行爲大明。固態物理學所論述者，即爲此類物質之結構行爲。

固態物理學之發展，可以舉其眉目如次：

自 16 世紀始，晶體各向異性，光性，力學性質，凡可觀測者，均注意研究。

18–19 世紀間，A. Bravais 倡晶體格子構造說。1912 年起，Max von Laue 利用 X–射線繞射研究晶體格子構造，至於今日，復有用電子繞射法與中子繞射法者。

晶體電子性質之探究，爲近代固態物理理論工作之中心。P. K. L. Drude 與 H.A. Lorentz 首創自由電子說，繼之 E. Madelung 與 Max Born 創游子晶體之電子說，對於晶體本性均有透視。於此，古典學說已竭盡力量。

嗣後之迅速發展，得之於 1925 年後之量子統計學與量子力學。固體能帶（band）學說闡明各型晶體之特徵。於此方面，E. P. Wigner, F. Seitz, J. C. Slater, N. F. Mott, C. Herring, 與 J. H. Van Vleck 貢獻良多。至 1940 年，四種理想晶體中之電子行爲，已得相當仔細之半定量圖案。

固態物理於理論方面逐漸形成後，其在應用方面出色之成就亦廣

續出現。1940年以後,研究晶體中各項疵弊對於晶體性質之影響,如半導體之電子導電性,鹽類之電解導電性,展性物質之可塑性等。另一方面則爲研究固體之表面性質,此稱爲表面物理 (surface physics)。討論電子自金屬表面發射可以遠溯至 1920 年,惟表面物理之積極研究爲 1947年 J. Bardeen 論及金屬與半導體接觸性質係依據於表面能階中之電子行爲一事開其端。此於今,已成爲一重要之研究部門。

基泰爾博士現年 48 歲,爲美國加州大學教授,爲 1957 年 Oliver Buckley 固態物理獎金得主。著作豐碩。1953 年,印行其著名之固態物理學概論 (Introduction to Solid State Physics) 一書,風行一時。1956 年增修,發行第二版,益臻完善。范緒筠教授評論 "該書之特點在取及最新之材料, 文字叙述明白而深刻……爲近代固態物理概論之最善本。適用於大學講授,亦適用於許多科學家之參考。"本原書卽爲該固態物理學概論第二版之節選本, 目的在用作工程、化學、及物理系大學本部學生一學期講授之課本(見著者序)。

譯者以固態物理學爲近代物理學之一新支, 關係於科學與技術之發展應用,直接而重要,前途旣廣且遠。乃不惴譾陋, 迻譯介紹,甚望此新興物理,能引起國內青年學子之普遍興趣焉。

張 桐 生 謹識

中華民國五十三年九月於成功大學物理系

# 目　次

# 第一章　晶體構造

晶體由原子所構成，有簡單方式者有複雜方式者。有少數晶體，甚可想其爲自然原子所構成，祇稍因晶體之束合作用而略有變形——稀有氣體之原子晶體卽若此。許多晶體可以想其爲帶正負電荷之游子所構成：岩鹽卽爲 $Na^+$ 與 $Cl^-$ 游子所組成。鹼金屬之晶體，係小粒正游子心浸沒於帶負電荷之傳導電子海中。有些晶體則爲中性原子所構成，此項原子有略微疊搭之電子雲，形成相鄰原子間之電子橋或共價帶，吾人可以料想金剛石與矽係如此型式者。其它晶體則爲中性分子所組成，係以弱交互作用結合於固體中：許多有機分子晶體卽爲此型式者。

此諸晶體束合力間之差異(圖1·1)，乃與晶體之力學性、電性、磁性密切相關。惟所有一切晶體中，引起束合之實際交互作用，幾全爲尋常電荷間之庫侖靜電交互作用——卽電子負電荷與核正電荷間之吸引力。故晶體束合型式之差別，非爲交互作用本性之差別，而爲電子電荷分布形態之差別。電荷分布，在原理上係決定於量子力學學說。雖則晶體問題之謹嚴解答不能獲得，惟常可藉實驗引導之學說以獲得有助之洞察。吾人必須常常自問，並且吾人必須儘量尋求實驗啓迪者，爲“固體中之核與電子何在？”此問題稱爲固體結構之決定。

首兩章之主要目的，乃在解釋決定結構之一最重要之直接方法——X射線繞射。在某些問題中，則重視電子繞射與中子繞射實驗。在質點繞射中，附隨於質點之布羅格利(de Broglie)波，其經晶體原子之繞射乃一如X-射線被繞射然。中子繞射實驗對磁性晶體特有價値。一中子經一磁原子之散射截面乃決定於原子磁矩之方位，故中子繞射實驗可以提供吾人以晶體之磁構造。

晶體原子構造之特性大小尺寸，遠較吾人可以目識或光學顯微鏡所能鑑別之任何物體爲小。一形象若以一光照明之，吾人常不能指望吾人可以鑑別之形象尺寸能小於該光波長者，如爲波長之 $\frac{1}{4}$；故就一光學顯微鏡言，除有特殊裝置外，$10^{-5}$ 厘米卽爲吾人可以鑑別之最小形象尺

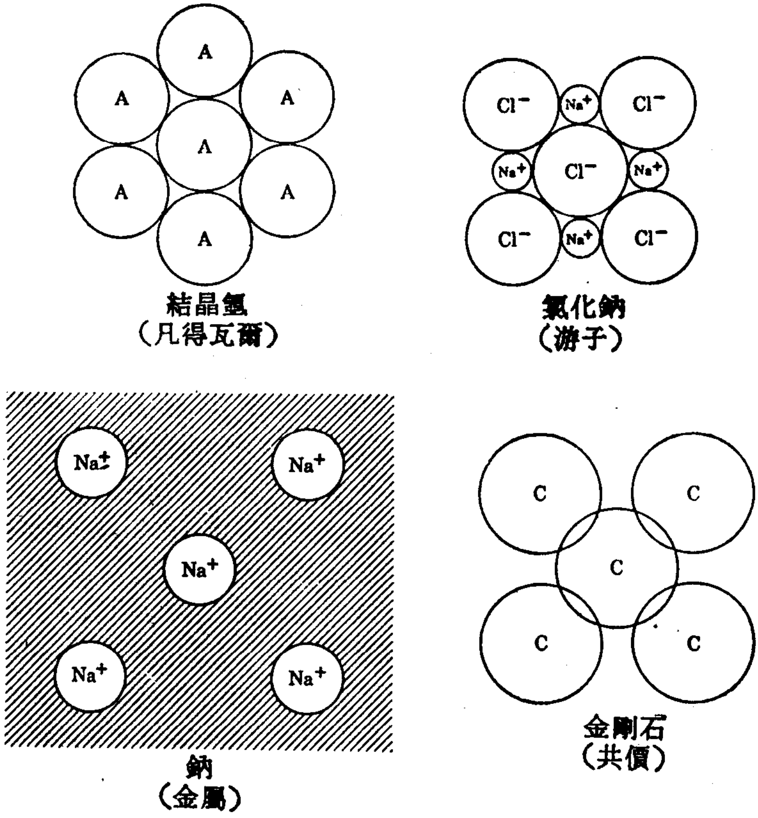


圖 1·1 數種主要型式之結晶束合力之圖型。

寸。此種鑑別率之規範，物理光學書中例有討論。

吾人甚易估計晶體中此特性尺寸大小之數量級。試考金屬鐵：密度爲每立方厘米 7.86 克，原子質量約爲每模爾 55.85 克。故 1 厘米$^3$之鐵含 $7.86/55.85=0.14$ 模爾。亞佛加德羅常數爲一元素一模爾中之原子數，即每模爾 $6.03\times10^{23}$ 個原子。故一厘米$^3$之鐵中含

$$0.14\times6.03\times10^{23}=0.85\times10^{23} \text{ 個原子}$$

如果吾人視每一原子爲一每邊爲 $a$ 之立方體，體積爲 $a^3$，則

$$0.85\times10^{23}a^3=1 \text{ 厘米}$$

故

$$a^3 = \frac{1}{0.85\times10^{23}} \cong 12\times10^{-24}\ 厘米^3$$

即

$$a \cong 2.3\times10^{-8}\ 厘米$$

吾人可見 $10^{-8}$ 厘米乃爲晶體中原子間距之一合適之長度單位。今日 $10^{-8}$ 厘米或 $10^{-10}$ 米係稱爲埃斯特稜 (angstrom) 單位，以A表之，故吾人之結果可以寫作 $a\cong 2.3$A。在 MKS 制中，鐵之密度爲 $7.8\times10^{-3}$ 仟克/米$^3$，與 $a\cong 2.3\times10^{-10}$ 米。

吾人所面臨之問題，爲用光學顯微鏡搜尋 ~1A 之原子間距，而該顯微鏡可以鑑別之最小數量級爲 1000A。此當不可辦。吾人需要較此短甚之波。欲得一電磁輻射源其波長爲 1A 者不難。當電子經電壓$V$加速擊中一靶而產生之 X-射線，其短波長限値可以就光子能量

$$(1\cdot1)\quad h\nu = \frac{hc}{\lambda} \cong 6.6\times10^{-27}\ 爾格\text{-}秒\ \frac{3\times10^{10}\ 厘米/秒}{\lambda} \cong \frac{2.0\times10^{-17}}{\lambda}\ 爾格$$

令其等於動能 (=電位能)

$$(1\cdot2)\qquad eV \cong (4.8\times10^{-10})\,\frac{V}{300} \cong 1.6\times10^{-12}\,V\ 爾格$$

計算得之。前式中之 $h$ 爲蒲郎克常數；$\lambda$ 爲波長之厘米數；$V$ 爲加速電壓之伏特數。故

$$(1\cdot3)\qquad \lambda = \left(\frac{2\times10^{-17}}{1.6\times10^{-12}}\right)V^{-1} = \frac{1.24\times10^{-5}}{V}\ 厘米;\ \frac{\text{kev}\cdot\text{A}}{伏}$$

就 $V=10$ kev $=10^4$ 伏特言

$$(1\cdot4)\qquad \lambda = 0.12\,\text{A}$$

此波長已够短，足敷吾人之需用。

**晶體之辭彙** 已有一套辭彙以描述晶體構造。凡對此符號辭彙熟悉者，可以就別人之晶體叙述，用玆符號辭彙以自行重作一晶體構造，全部或一部份。吾人在此對結晶學之辭彙，屬簡單晶體構造之幾何形態者，略述少數基本觀念。

一理想晶體係由完全相同之構造單元或型塊 (building block)在空間作無限量之有規律重覆排列所構成。就最簡單之單原子晶體言，型塊卽爲該單原子，但大多數之晶體，型塊係含有一些原子或分子，所謂一些是指在 2 與 100,000 (或尤過之)間之數。

吾人所謂一理想晶體係指排成格子(lattice)之原子所構成之物體，該格子間有三個基本平移向量 $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$，使從任一點 $\mathbf{r}$ 觀看時與從另一點 $\mathbf{r}'$ 觀看時，該原子之排列在各方面均相同，

$$(1\cdot5)\qquad \mathbf{r}'=\mathbf{r}+n_1\mathbf{a}+n_2\mathbf{b}+n_3\mathbf{c},$$

式中 $n_1,n_2,n_3$ 爲任意整數。如果從任意兩點 $\mathbf{r},\mathbf{r}'$ 看原子排列相同者，恒能於適當選用整數 $n_1,n_2,n_3$ 而滿足式 (1·5)，則此基本平移向量爲原(本)者 (primitive)。吾人將常以原平移向量訂定晶軸 $\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c}$，惟吾人亦常用其他(非原本)者訂定晶軸。

將一晶體用

$$(1\cdot6)\qquad \mathbf{T}=n_1\mathbf{a}+n_2\mathbf{b}+n_3\mathbf{c}$$

作平行於其自身之移置手續，稱爲一平移手續。此手續之全體，卽包括所有一切之 $n_1,n_2,n_3$ 之整數値者，稱爲晶體之平移羣 (translation group)。晶體構造之最重要描述特性爲將晶體移至相同形態之對稱手續。平移手續 $\mathbf{T}$ 並非晶體具有之惟一對稱手續；吾人若對型塊中各點應用旋轉及反射手續亦可以將晶體移至相同之形態。此諸手續稱爲點手續 (point operations)；此外，仍可以有其它之對稱手續。

吾人且談晶體格子。此爲一數學抽象體。一格子爲諸點之平行網狀排列，其所具之特性爲格子上任何點之周遭形態與任何其它點者全同。在最簡單之晶體構造中，每一格子點附隨一個原子，吾人對此種晶體作構造分類，祗須舉出晶軸$\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c}$即可。超乎此，吾人卽必須對每一格子點附隨一單位原子集團，卽晶基 (basis)；每一晶基之組成、排列、與方位均相同。在每一格子點上加一晶基而形成晶體構造，示如圖 1·2

以原軸 $\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c}$ 所訂定之平行六面體稱爲原框 (primitive cell)。一原框爲單位框 (unit cell) 之一式。凡一框可用晶體平移手續而能佈滿全空間者稱爲一單位框。一原框爲一最小體積之單位框，原框可以選用僅於其角隅有格子點者。從初步之向量分析得一框之體積 $V_c$ 爲

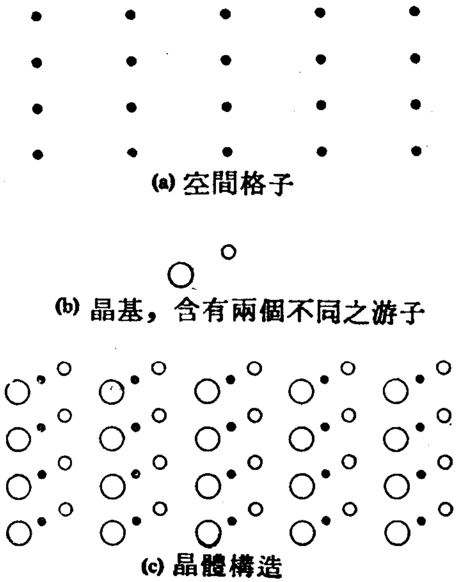


圖 1·2 晶體構造(c)，係就空間格子(a)上每一格子點加以晶基(b)所構成。

$$V_c = \mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} \tag{1·7}$$

晶體格子與晶體構造，不僅可經 **T** 手續將之移至相同形態，亦可經許多其它手續移得。典型者爲對穿經一格子點爲軸之轉動。據知可以有一、二、三、四、及六次轉動軸之格子，即相當於轉過 360°，180°，120°，90°，及 60° 者。轉軸以符號 1，2，3，4，及 6 表之。2，3，4，及 6 號軸常稱爲二分、三分、四分、及六分軸。捨此，吾人不能得適合其它轉動量之格子，如經轉 $2\pi/173$，或甚至 $2\pi/5$。實際上，可以用數學證明，適當之轉動僅止於此。對於一有立方原框之格子之其它對稱手續，示於圖 1·3 中。

欲有點對稱各手續（轉動、反射、轉變、轉變後再轉動）之各種允許組合，則須十四種不同之空間格子，各具不同之軸比與角度。如此每一種情況即訂定一布拉維斯 (Bravais) 格子。此十四種布拉維斯格子示於圖 1·4。仔細情形，學生應參閱專著。

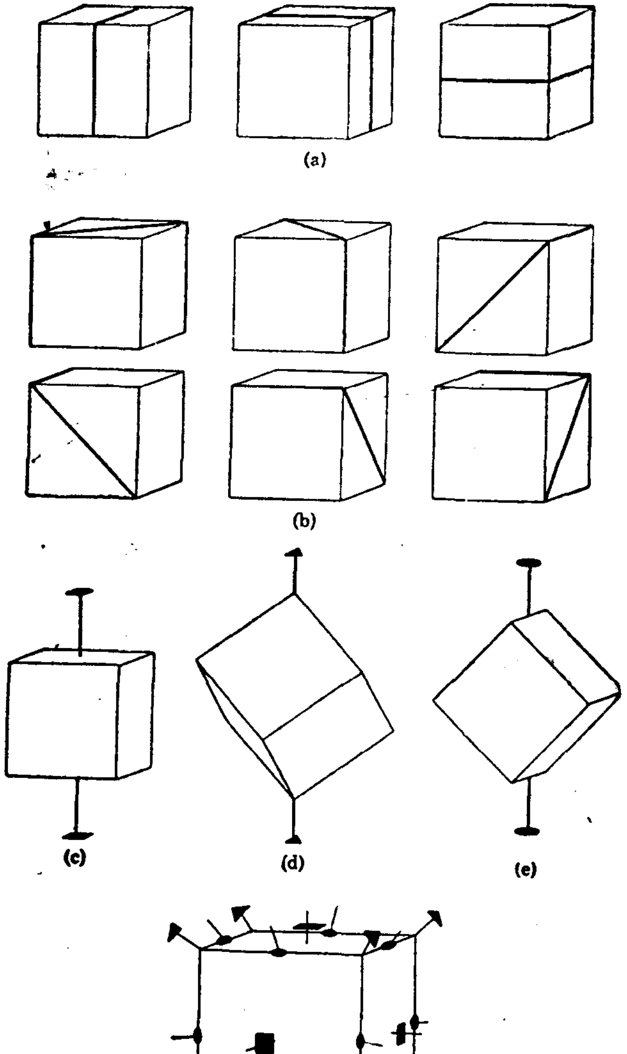

圖 1·3 (a)平行於立方體各面之三個對稱平面。(b)一立方體中,六個對角對稱平面。(c)一立方體之一個四分轉軸。(d)一立方體之一個三分轉軸。(e)一立方體之一個二分轉軸。(f)一立方體有十三個對稱軸。

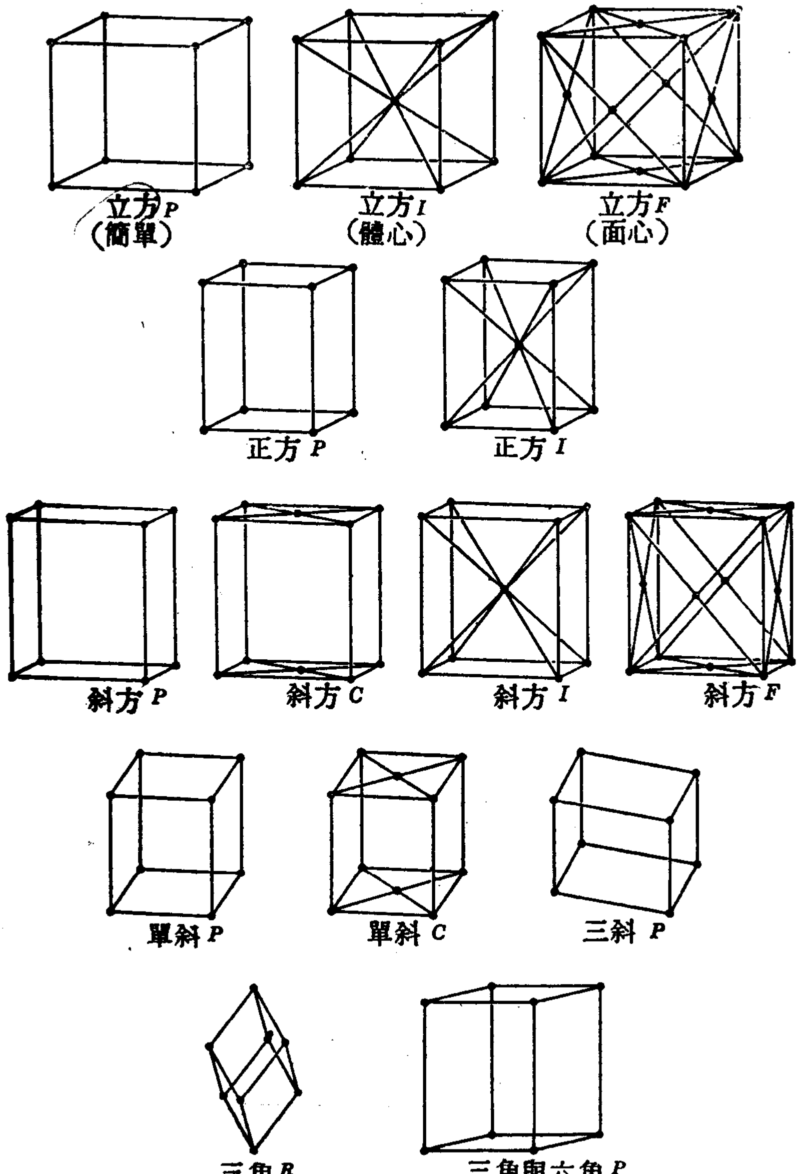


圖 1·4　十四種布拉維斯格子或空間格子

**表 1·1**

立方格子之特性

| | 簡單 | 體心 | 面心 |
|---|---|---|---|
| 單位框體積 | $a^3$ | $a^3$ | $a^3$ |
| 每框之格子點數 | 1 | 2 | 4 |
| 每單位體積之格子點數 | $1/a^3$ | $2/a^3$ | $4/a^3$ |
| 最近鄰距離 | $a$ | $3^{1/2}a/2$ | $a/2^{1/2}$ |
| 最近鄰數 | 6 | 8 | 12 |
| 次近鄰距離 | $2^{1/2}a$ | $a$ | $a$ |
| 次近鄰數 | 12 | 6 | 6 |

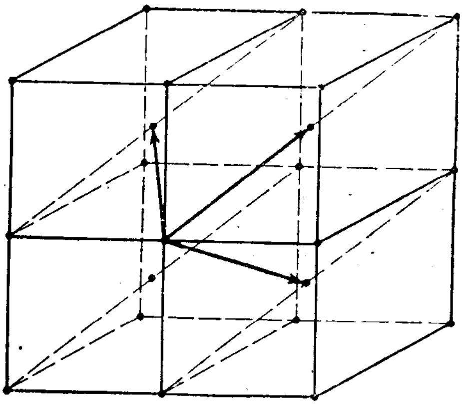

圖 1·5 體心立方格子之原平移向量；完成斜方六面體卽得原框。

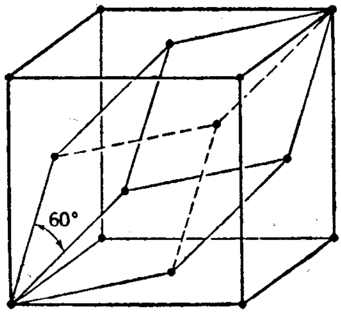


圖 1·6 面心立方 F 格子之斜方六面體原框。