

高等学校教学参考书

固体物理学 习题指导

刘友之 聂向富 蒋生蕊 编

高等教育出版社

内 容 提 要

本书内容包括固体物理基础部分的内容、晶体结构、倒易点阵和晶体衍射、晶体结合、点阵振动、热学性质、自由电子费密气体、能带和点缺陷与位错。共有习题 575 道。

本书通过各部分的内容提要,扼要地叙述了基本概念、重要的定律和公式。有例题、习题和思考题,并附有答案。此外,还附有一批数据表格,供做题时参考。

本书可供高等学校物理及材料科学等专业的大学生、研究生、教师 和 科技人员参考。

(京)112号

高等学校教学参考书

固体物理学习题指导

刘友之 聂向富 蒋生蕊 编

高等教育出版社出版

新华书店北京发行所发行

河北省香河县印刷厂印装

开本 850×1168 1/32 印张 18.25 字数 454 000

1988年8月第1版 1991年9月第2次印刷

印数 2 351—3 561

ISBN7-04-000538-7/O·174

定价 6.70 元

出版者前言

为适应高等学校固体物理学及其各分支学科课程教学的需要，高等学校理科物理学教材编审委员会固体物理编审小组和高等教育出版社组织编写了一套固体物理学学科的教学参考书，其中包括固体物理学及其各分支学科的基础课程和实验课程用的教学参考书和一部《固体物理学大辞典》。这些书将由高等教育出版社陆续出版。

本书是这套书中的一本，由兰州大学刘友之、河北师范大学聂向富主编。由兰州大学童志深、南京大学李正中和吉林大学吴代鸣审订。

前 言

本书是根据固体物理课程的教学需要而编写的。其目的在于帮助大学生和研究生深入理解教材内容，培养他们运用基本物理概念和物理模型解决问题的能力及处理问题的技巧。

本书是在编者长期教学实践中所积累资料的基础上编写而成。全书由以下几部份组成：

一、内容提要。扼要阐明各章的重要物理概念，提出其要点。对重要定理和公式给出简明扼要的总结。

二、典型例题。例题的选取主要根据以下原则：(1) 和基本物理概念紧密相关，通过例题可以加深对基本概念的理解；(2) 题目内容综合性较强，可以锻炼学生分析和解决问题的能力；(3) 体现了一定的计算和处理技巧；(4) 属于教材内容的延伸或扩展。在读者使用这些例题时，希着重于基本物理概念的应用和简单模型的选取，并注意近似处理的技巧。这样才不致陷于繁杂的数学运算中而不能得到简明扼要的结论。

三、习题。本书汇集了相当数量的多种类型的习题，供读者选择使用，并附有答案。

四、思考题。为了帮助学生进一步加深理解，本书在每章末还给出了少量思考问题，供读者探讨。

在理论体系上，本书以周期结构、周期结构中的波动过程、倒易点阵和布里渊区的几何图象为线索，许多重要的物理概念都可以用这条线索联系起来。

在单位制方面，本书应一律采用国际单位制。但由于历史原因，一些原始数据表格和实验结果都是按C G S制给出的，本书在某些地方仍用了C G S制。

兰州大学为本书的主编单位，本书由兰州大学刘友之和河北师范大学聂向富编写，此外，兰州大学蒋生蕊同志也参加了部分工作。全书由兰州大学童志深、南京大学李正中和吉林大学吴代鸣先生审订。复旦大学陆栋、中国科技大学俞文海、东北工学院肖序刚、河北大学张素德、兰州大学张宏图先生对本书初稿提出了许多宝贵意见。在编写过程中曾得到唐贵德、孙惠玲等许多同志的热情支持，编者对他们表示深切的感谢。限于编者水平，加之本书内容涉及面广，书中难免存在错误和不妥之处，希望读者批评指正。

编 者

1985 年 12 月于北京

常用符号表

a	点阵常数
a_1, a_2, a_3	点阵基矢
A_6, A_{12}	点阵和
$A_e(\epsilon_F)$	费密面上与磁场垂直的平面内的极值面积
b	伯格斯矢量
B	体弹性模量
b_1, b_2, b_3	倒易点阵基矢
c	真空中的光速; 每单位体积的热容
C	力常数
C_p	定压热容
C_v	定容热容
C_v^0	定容热容经典值
c_{eff}	有效弹性模量
$c(\mathbf{R})$	平移算符本征值
$c_{\lambda\mu}$	弹性模量矩阵元
d	面间距
D	扩散系数
$\mathbf{D}$	电位移矢量
$\mathbf{D}(\mathbf{k})$	动力学矩阵
e	电子电荷
E	电场强度
E	能量, 位错弹性能
E_A	扩散激活能
E_B	F 心形成能

E_I	夫仑克耳缺陷形成能
E_v	空位形成能
E_p	离子晶体空位对形成能
ϵ	电子能量
ϵ_F	费密能量
f	亥姆霍兹自由能密度; 费密分布函数; 原子形状因子
F	亥姆霍兹自由能
$\mathbf{F}$	力
G	切变模量; 吉布斯自由能
$\mathbf{G}$	倒易点阵矢量
$g(\omega)$	模式密度
$g(\epsilon)$	状态密度
H	哈密顿量
H	磁场强度
I	散射波强度
J	热能流密度; 粒子流密度; 扩散流密度; 热电子发射电流
$\mathbf{j}$	电流密度
$\mathbf{k}$	电磁波波矢; 中子波矢; 电子波矢; 简约波矢
k_F	费密波矢
$\mathbf{K}$	声子波矢; $\mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$
$\tilde{\mathbf{K}}$	从区边界算起的波矢值
K_D	德拜截止波矢
L	晶体边长
l	平均自由程
M	质量; 磁化强度
m	电子质量
$(m)^{-1}$	有效质量倒数张量

m^*	迴旋共振有效质量;各向同性有效质量
N	阵点数;初基晶胞数;原子数;电子数;粒子数
n	衍射级;排斥力负指数;粒子数密度;电子浓度
$\hat{n}$	法向单位矢量
n_+^v	正离子空位浓度
n_-^v	负离子空位浓度
O	可以忽略的小量
P	压强;极化强度;功率损耗
p	粒子跃迁频率
p	动量
p_{ij}	以最近邻距离度量的参考离子 i 到任何一个 j 离子间的距离
r	原子的最近邻距离
r	位置矢量
r_0	平衡最近邻距离
R	点阵矢量
R_H	霍尔系数
R	离子半径
S	熵;面积
s	熵密度
$\&_c$	基元结构因子
T_F	费密温度
U	点阵能;热能;内能
$U(r)$	周期势
U_0	平衡点阵能;内聚能;基态下自由电子能量
U^{harm}	简谐势
u	振幅;每个原子的总能量;能量密度;原子间相互作用能;位移

$u(\mathbf{R})$	位于阵点 $\mathbf{R}$ 的原子相对平衡位置的位移
v	声速
v_g	群速
$\mathbf{v}$	电子速度; 漂移速度
v_F	费密速度
v_l	纵向弹性波波速
v_t	横向弹性波波速
V_c	初基晶胞体积
V	体积
W	微观状态数
$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$	笛卡儿坐标单位矢量
Z	配分函数
z	配位数, 价电子数
α	马德隆常数; 热膨胀系数
γ	格林爱森常数
Γ_{ij}	克利斯托夫模量
ϵ	原子排斥力经验参数
ϵ	简正模式偏振态; 介电常数张量
$\epsilon(0)$	静介电常数
$\epsilon(\infty)$	光频介电常数
$\epsilon(\omega)$	介电函数长波极限
$\epsilon_L(\omega)$	离子晶体横光学波对介电函数的贡献
θ_D	德拜温度
θ_E	爱因斯坦温度
κ	压缩系数; 热导率
λ	波长
μ	折合质量; 化学势; 迁移率
ν	频率

ξ	巨配分函数
ρ	质量密度;电阻率;电荷密度
σ	排斥力经验参数;单位表面自由能;电导率;面电荷密度
σ	电导率张量
τ_c	临界切应力
τ	弛豫时间
ϕ	功函数
$\phi(\mathbf{R})$	相距点阵矢量 $\mathbf{R}$ 的两原子间的相互作用势
χ	磁化率
ω_D	德拜截止频率
ω_L	纵光学声子频率
ω_T	横光学声子频率
ω_p	等离子体振荡频率
ω_c	回旋共振频率
$\omega_s(\mathbf{k})$	波矢为 $\mathbf{k}$ 的第 s 支声子的频率
Ω	倒易点阵初基晶胞体积;巨热力学势
$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$	电子波函数

目 录

前言

常用符号表	1
-------	---

第一章 晶体结构	1
----------	---

内容提要	1
------	---

1 布喇菲点阵和初基矢量	1
--------------	---

2 初基晶胞(原胞)	1
------------	---

3 惯用晶胞(单胞)	1
------------	---

4 维格纳-赛兹晶胞(W-S 晶胞)	2
--------------------	---

5 晶体结构	2
--------	---

6 简单晶体结构	3
----------	---

7 晶面指数和晶向指数	6
-------------	---

8 对称操作	7
--------	---

9 七种晶系和十四种布喇菲点阵	9
-----------------	---

例题(1.1—1.16)	9
--------------	---

习题(1.1—1.48)	40
--------------	----

思考题(1.1—1.6)	47
--------------	----

第二章 倒易点阵和晶体衍射	49
---------------	----

内容提要	49
------	----

1 倒易点阵和倒易点阵初基矢量	49
-----------------	----

2 倒易点阵矢量与晶面指数间的关系	50
-------------------	----

3 X-射线衍射的布喇格定律和劳厄条件	50
---------------------	----

4 布里渊区	53
--------	----

5 实验衍射方法	53
----------	----

6 基元的几何结构因子	53
-------------	----

例题(2.1—2.23)	
--------------	--

习题(2.1—2.52)	107
思考题(2.1—2.9)	117
第三章 晶体结合	119
内容提要	119
1 内聚能	119
2 范德瓦耳斯相互作用	119
3 离子晶体的静电能(马德龙能)	120
4 平衡最近邻距离	120
5 晶体结合的基本形式	120
例题(3.1—3.17)	121
习题(3.1—3.45)	160
思考题(3.1—3.11)	169
第四章 点阵振动(声子 I)	172
内容提要	172
1 格波与声子	172
2 点阵振动的色散关系	172
3 第一布里渊区	174
4 声学支和光学支	174
5 离子晶体的长光学波	174
6 三维布喇菲点阵的动力学矩阵	175
7 中子的非弹性散射	177
8 晶体弹性	177
例题(4.1—4.15)	179
习题(4.1—4.25)	236
思考题(4.1—4.12)	242
第五章 热学性质(声子 II)	244
内容提要	244
1 简正模式密度(声子能级密度)	244
2 爱因斯坦模型和德拜模型	245

3 点阵热容	246
4 非简谐效应	247
5 热膨胀	247
6 点阵热导率	247
7 倒逆过程	248
8 点阵的自由能和格林爱森常数	248
例题(5.1—5.12)	249
习题(5.1—5.57)	284
思考题(5.1—5.7)	290
第六章 自由电子费密气体	292
内容提要	292
1 金属自由电子论的物理模型	292
2 费密-狄喇克统计	292
3 三维自由电子气体的能级和状态密度	293
4 自由电子在基态下的性质	294
5 自由电子气体的热学性质	296
6 电导和欧姆定律	297
7 电子在外加磁场中的运动	298
8 金属热导率	298
9 热电子发射	299
例题(6.1—6.19)	299
习题(6.1—6.63)	357
思考题(6.1—6.15)	367
第七章 能带	370
内容提要	370
1 布洛赫(Bloch) 定理	370
2 周期场中电子的波动方程	370
3 弱周期势场中的电子	372
4 能隙	374

5 能带的简约区、扩展区和周期(重复) 区图	374
6 状态密度	375
7 金属和绝缘体	376
8 费密面	377
9 紧束缚近似	378
10 能带中电子的半经典运动	380
11 有效质量	380
12 均匀磁场下电子的半经典运动	381
13 迴旋共振	382
14 德·哈斯-范·阿耳芬(De Haas-Van Alphen) 效应	382
例题(7.1—7.23)	384
习题(7.1—7.50)	443
思考题(7.1—7.11)	454
第八章 点缺陷与位错	457
内容提要	457
1 肖脱基(Schottky) 和夫伦克耳(Frenkel) 缺陷	457
2 扩散	458
3 F 心	459
4 位错模型与柏格斯(Burgers) 矢量	460
5 位错的弹性性质	462
6 位错的运动与产生	464
例题(8.1—8.22)	464
习题(8.1—8.30)	500
思考题(8.1—8.7)	505
习题答案(1—8 章)	507
附表	533
常见的物理常数	561
索引	562

第一章 晶体结构

内 容 提 要

1 布喇菲点阵和初基矢量

晶体结构的特点在于原子排列的周期性质。布喇菲点阵是平移操作 $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ 所联系的诸点的列阵。布喇菲点阵是晶体结构周期性的数学抽象。点阵矢量 $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ ，其中， n_1, n_2 和 n_3 均为整数， $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ 和 $\mathbf{a}_3$ 是不在同一平面内的三个矢量，叫做布喇菲点阵的初基矢量，简称基矢。初基矢量所构成的平行六面体是布喇菲点阵的最小重复单元。

布喇菲点阵是一个无限的分立点的列阵，无论从这个列阵中的哪个点去观察，周围点的分布和排列方位都是完全相同的。

对一个给定的布喇菲点阵，初基矢量可以有多种取法。

2 初基晶胞(原胞)

初基晶胞是布喇菲点阵的最小重复单元。初基晶胞必定正好包含布喇菲点阵的一个阵点。

对于一个给定的布喇菲点阵，初基晶胞的选取方式可以不只一种，但不论初基晶胞的形状如何，初基晶胞的体积是唯一的， $V_c = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ 。

3 惯用晶胞(单胞)

惯用晶胞是为了反映点阵的对称性而选用的晶胞。惯用晶胞

可以是初基的或非初基的。惯用晶胞的体积是初基晶胞体积的整数倍, $V = nV_c$ 。其中, n 是惯用晶胞所包含的阵点数。

确定惯用晶胞几何尺寸的数字叫做点阵常数。

4 维格纳-赛兹晶胞(W-S 晶胞)

维格纳-赛兹晶胞是另一种能够反映晶体宏观对称性的晶胞, 它是某一阵点与相邻阵点连线的中垂面(或中垂线)所围成的最小体积。维格纳-赛兹晶胞是初基晶胞。

5 晶体结构

当我们强调一个实际的晶体与布喇菲点阵的抽象几何图案的区别时, 我们用“晶体结构”这个名词^[1]。

理想的晶体结构是由相同的物理单元放置在布喇菲点阵的阵点上构成的。这些物理单元称为基元, 它可以是原子、分子或分子团(有时也可以指一组抽象的几何点)。将基元平移布喇菲点阵的所有点阵矢量, 就得到晶体结构, 或等价地表示为

$$\text{基元} + \text{点阵} = \text{晶体结构}^{[2]}$$

? 当选用非初基的惯用晶胞时, 一个布喇菲点阵可以用带有基元的点阵去描写。例如, 在强调体心立方和面心立方布喇菲点阵的立方对称性时, 我们常把它们分别用带有两点基元 $\left(0, \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})\right)$ 或四点基元 $\left(0, \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y}), \frac{a}{2} (\hat{y} + \hat{z}), \frac{a}{2} (\hat{z} + \hat{x})\right)$ 的简单立方点阵处理。

[1] 布喇菲点阵是无限的, 实际的晶体则是有限的。因此, 在作为理想晶体处理时, 需要加上周期性边界条件。

[2] 有时晶体结构又称为带有基元的点阵。

6 简单晶体结构

简单立方(sc)、体心立方(bcc)和面心立方(fcc)结构的特征如表 1.1 所示.

表 1.1 sc、bcc、fcc结构的特征

	sc	bcc	fcc
惯用晶胞体积	a^3	a^3	a^3
每个原胞所含的阵点数	1	2	4
初基晶胞体积	a^3	$\frac{1}{2}a^3$	$\frac{1}{4}a^3$
阵点密度	$\frac{1}{a^3}$	$\frac{2}{a^3}$	$\frac{4}{a^3}$
最近邻数	6	8	12
最近邻距离	a	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	$\frac{1}{\sqrt{2}}a$
次近邻数	12	6	6
次近邻距离	$\sqrt{2}a$	a	a
堆积比率	$\frac{1}{6}\pi = 0.524$	$\frac{\sqrt{3}}{8}\pi = 0.680$	$\frac{\sqrt{2}}{6}\pi = 0.740$

除此之外,简单晶体结构还有:

(1) 金刚石结构

金刚石结构如图 1.1 (a) 所示. 布喇菲点阵是面心立方, 基元由两个同种原子组成, 分别位于 0 和 $\frac{a}{4}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$. 这里选取立方晶胞的三个棱为晶轴, $\hat{x}$ 、 $\hat{y}$ 、 $\hat{z}$ 是笛卡尔坐标 x 、 y 、 z 三个方向的单位矢量. 金刚石结构的四面体键堆积方式如图 1.1 (b) 所示.

(2) 六角密堆积结构(hcp)

六角密堆积结构如图 1.2 所示. 布喇菲点阵是简单六角, 基