

高等学校教学参考书

固体物理习题详解

吴代鸣等 解答

苏文辉 校订

吉林人民出版社

前 言

美国C. Kittel著的《Introduction to Solid State Physics》(Fifth Edition)(1976)一书,是目前国际上有名的固体物理学教材之一,已有十一种文字的译本,颇受欢迎。全书共分十八章,其中包括晶体结构、晶格振动与声子、自由电子论、能带论、各种元激发、晶体的光学性质、超导电性、磁性以及力学性质等内容,精选了一百三十道习题。所选习题有助于巩固已学知识,并深入掌握全书的基本内容;很多习题颇有启发性,它能诱导人们进一步学会运用基本概念和重要模型去解决复杂的固体物理问题;还有不少习题涉及固体物理学中的一些较新的问题,解答这些问题将扩大知识面,习题解答起着全书补篇的作用。目前国内尚没有一本固体物理习题解答。有这样一份材料,对固体物理学课程的教学工作也许是有益的。本书可供固体物理学有关专业的大学生、研究生以及科学工作者参考。

本书是在吉林大学的固体物理学课程的教学实践中完成的。全部习题由吴代鸣、董维义、金曾孙、何岚鹰、郝兆印、苏文辉解答,由苏文辉校订。由于固体物理学的分支学科很多、内容丰富、范围广泛,而我们的水平有限,加上时间匆促,可能会有错误,希望读者批评指正。

1980年6月于长春

21世纪某一天 到此一游!

目 录

前 言

第一章 晶体结构

- 1. 四面体键角 (1)
- 2. 晶面指数 (2)
- 3. 六角密堆(hcp)结构..... (3)

第二章 晶体衍射与倒易格子

- 1. 傅里叶级数的逆变换 (5)
- 2. 晶面间距 (7)
- 3. 由线排列与矩形排列产生的衍射 (8)
- 4. 六角空间晶格 (12)
- 5. 布里渊区的体积 (15)
- 6. 衍射峰的宽度 (15)
- 7. 中子截止滤波器 (17)
- 8. 金刚石的结构因子 (17)
- 9. 氢原子的散射因子 (19)
- 10. 双原子线 (20)

第三章 晶体的结合

- 1. 量子固体 (22)
- 2. bcc和fcc Ne的结合能..... (23)
- 3. 固体分子氢 (25)
- 4. 形成离子晶体 R^+R^- 的可能性 (26)

5. 线型离子晶体	(27)
6. 立方ZnS结构	(29)
7. LiF的体模量	(30)
8. 双价离子晶体	(32)
9. 高压实验	(33)

第四章 声子 (I), 晶格振动

1. 正方形晶格的振动	(35)
2. 单原子线性晶格	(38)
3. 连续波方程	(41)
4. 含有两个不同原子的基团	(43)
5. 科恩(Kohn)反常	(44)
6. 双原子链	(45)
7. 金属中的原子振动	(47)
8. 软声子模	(49)

第五章 声子 (I), 热性质

1. 模密度的奇异点	(54)
2. 晶体原胞的 R_{MS} 热膨胀	(55)
3. 零点晶格位移与应变	(56)
4. 一维晶格与层状晶格的热容	(58)
5. Grüneisen常数	(60)
6. 正方形晶格的模密度	(64)

第六章 自由电子费米气体

1. 电子气体的动能	(67)
2. 电子气体的压强和体模量	(68)
3. 二维电子气体的化学势	(69)
4. 天体物理中的费米气体	(70)

5. 液体 He^3	(72)
6. 电导率与频率关系	(73)
7. 自由电子的动力学磁致电导率张量	(74)
8. 自由电子费米气体的结合能	(77)
9. 静态磁致电导率张量	(80)

第七章 能 带

1. 正方形晶格, 自由电子能量	(83)
2. 简约区中的自由电子能量	(86)
3. Kronig—Penney模型	(90)
4. 金刚石结构中的势能	(92)
5. 能隙中的复数波矢	(98)
6. 正方晶格	(100)

第八章 半导体晶体

1. 杂质轨道	(104)
2. 施主的电离	(105)
3. 含有两类载流子的霍尔效应	(105)
4. 球体等能面的回旋共振	(107)
5. 施主电离	(110)
6. 含有两类载流子的磁阻	(111)

第九章 费米面与金属

1. 矩形晶格的布里渊区	(116)
2. 布里渊区, 矩形晶格	(117)
3. 六角密堆结构	(119)
4. 二维二价金属的布里渊区	(122)
5. 开轨道	(124)
6. 对方势阱求结合能	(125)

7. 钾的De Haas-Van Alphen周期	(128)
8. 基于 $k \cdot p$ 微扰理论的带边结构	(129)
9. Wannier 函数	(132)
10. 开轨道与磁致电阻	(133)

第十章 等离子体振荡量子、电磁声子和极化子

1. 表面等离子体振荡量子	(135)
2. 介面等离子体振荡量子	(136)
3. Alfvén 波	(138)
4. 螺旋波(Helicon waves)	(141)
5. 球体的等离子体振荡量子模	(142)
6. 磁等离子体振荡频率	(143)
7. 小波矢处的光学支	(144)
8. 等离子体频率与电导率	(146)
9. 费米气体的体模量	(147)
10. 电子气体的响应	(148)
11. 间隙等离子体振荡量子与范德瓦耳斯相互作用	(150)

第十一章 光学过程与激子

1. 因果关系与响应函数	(155)
2. 耗散求和规则	(156)
3. 垂直入射时的反射	(157)
4. 电导率求和规则与超导电性	(159)
5. 介电常数与半导体能隙	(162)
6. 金属红外反射的Hagen—Rubens关系	(163)
7. 激子谱线的达维多夫劈裂	(165)

第十二章 超导电性

1. 平板超导体中的磁场穿透	(167)
----------------------	-------

2. 超导薄膜的临界场	(168)
3. 超导体的二流体模型	(170)
4. 磁通线的涡旋结构	(172)
5. London 穿透深度	(175)
6. Josephson 结的衍射效应	(176)
7. 超导球的Meissner 效应	(177)

第十三章 电介质与铁电体

1. 氢原子的极化率	(179)
2. 导体球的极化率	(180)
3. 空气间隙的影响	(181)
4. 介面极化	(183)
5. 球形介质的极化强度	(184)
6. 原子的铁电性判据	(185)
7. 居里点处的饱和极化强度	(186)
8. 低于转变温度的介电常数	(187)
9. 软模与晶格转变	(188)
10. 铁电性的线型晶格	(189)

第十四章 抗磁性与顺磁性

1. 氢原子的抗磁磁化率	(191)
2. Hund规则	(191)
3. 三重激发态	(193)
4. 来自内部自由度的热容量	(195)
5. 泡利自旋磁化率	(197)
6. 传导电子的铁磁性	(199)
7. 二能级体系	(202)
8. $S=1$ 体系的顺磁性	(204)

第十五章 铁磁性与反铁磁性

1. 磁振子的色散关系	(205)
2. 磁振子的热容量	(207)
3. 奈耳 (Neel) 温度	(208)
4. 磁弹耦合	(210)
5. 微粒的矫顽力	(213)
6. T_c 附近的饱和磁化强度	(215)

第十六章 磁共振与微波激射器

1. 等效电路	(216)
2. 转动坐标系	(216)
3. 超精细结构对金属中电子自旋共振的影响	(219)
4. 各向异性场中的铁磁共振 (FMR)	(221)
5. 交换共振频率	(222)
6. 射频 (Rf) 饱和	(224)

第十七章 点缺陷与合金

1. 夫伦克耳缺陷	(227)
2. 肖脱基空位	(228)
3. F 心	(228)
4. Cu_3Au 的超格子谱线	(229)
5. 位形热容量	(231)

第十八章 位 错

1. 原子最密集堆积线	(232)
2. 位错对	(232)
3. 作用于位错上的力	(233)

第一章 晶体结构

1. 四面体键角。 如图 1—1 所示，金刚石四面体键之间的交角与立方体的体对角线之间的交角相同。试用初等矢量分析求此角度的值。

〈解〉

如图 1—1 所示， $|\mathbf{a}'| = |\mathbf{b}'| = |\mathbf{c}'| = \sqrt{3}a/2$ 。金刚石的

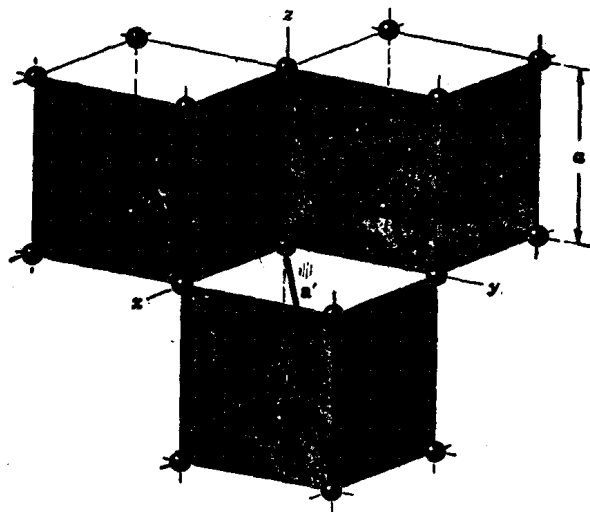


图1—1 体心立方晶格的平移基矢。这些矢量联结位于原点的格点和位于体心的格点。初基原胞为菱面体。立方体边长以 a 表示，则平移基矢为：

$$\mathbf{a}' = \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}),$$

$$\mathbf{b}' = \frac{a}{2} (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}),$$

$$\mathbf{c}' = \frac{a}{2} (\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}).$$

四面体键之间的夹角 θ_{ab} , θ_{ac} , θ_{bc} 为:

$$\begin{aligned}\cos \theta_{ab} &= \frac{\mathbf{a}' \cdot \mathbf{b}'}{|\mathbf{a}'| |\mathbf{b}'|} = \frac{1}{3} (\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \cdot (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \\ &= -\frac{1}{3},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\cos \theta_{ac} &= \frac{\mathbf{a}' \cdot \mathbf{c}'}{|\mathbf{a}'| |\mathbf{c}'|} \\ &= \frac{1}{3} (\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \cdot (\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) = -\frac{1}{3},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\cos \theta_{bc} &= \frac{\mathbf{b}' \cdot \mathbf{c}'}{|\mathbf{b}'| |\mathbf{c}'|} \\ &= \frac{1}{3} (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \cdot (\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) = -\frac{1}{3},\end{aligned}$$

所以, $\theta_{ab} = \theta_{ac} = \theta_{bc} = 109^\circ 28'$.

2. 晶面指数. 考虑指数为 (100) 和 (001) 的晶面; 晶格为面心立方 (fcc), 晶面指数是参照惯用立方晶胞选取的. 若参照图 1—2 的初基轴时, 这些晶面的指数是什么?

〈解〉

如图 1—2, (100) 面在 $\mathbf{a}'$, $\mathbf{b}'$, $\mathbf{c}'$ 坐标系中与 $\mathbf{b}'$ 轴平行, 在 $\mathbf{a}'$, $\mathbf{c}'$ 轴上的截距为 $2\mathbf{a}'$ 和 $2\mathbf{c}'$, 截距的倒数 $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{\infty}$, $\frac{1}{2}$, 故面指数为 (101). 同样, (001) 面在 $\mathbf{a}'$, $\mathbf{b}'$, $\mathbf{c}'$ 三轴上的截距为 $\infty\mathbf{a}'$, $2\mathbf{b}'$, $2\mathbf{c}'$, 截距的倒数为 0, $1/2$, $1/2$, 面指数为 (011).

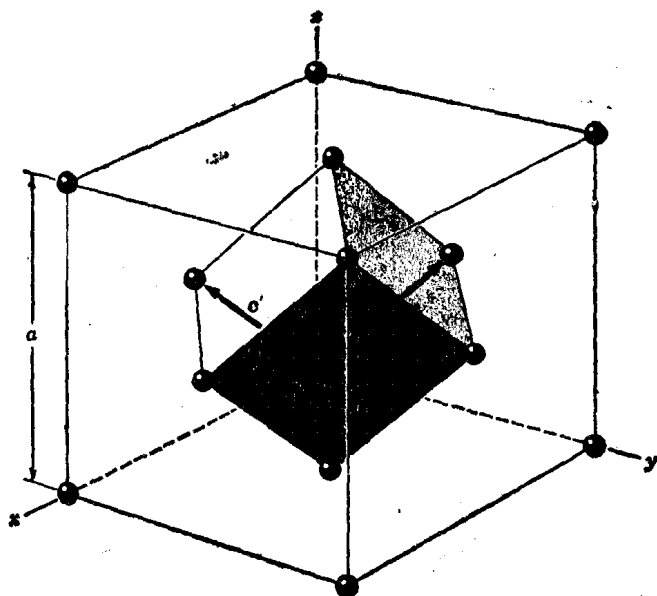


图 1—2 面心立方晶体的菱形初基原胞。平移基矢 $\mathbf{a}'$, $\mathbf{b}'$, $\mathbf{c}'$ 联结原点和位于面心的格点, 如图所示, 平移基矢为:

$$\mathbf{a}' = \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y}), \quad \mathbf{b}' = \frac{a}{2} (\hat{y} + \hat{z}), \quad \mathbf{c}' = \frac{a}{2} (\hat{z} + \hat{x}),$$

轴间交角为 60° 。

3. 六角密堆 (hcp) 结构。 证明理想六角密堆结构的轴比 c/a 等于 $(8/3)^{1/2} = 1.633$ 。如果 c/a 明显大于此值, 则晶体结构可以认为是由原子密排面所组成, 但这些平面之间是疏松堆积的。

〈解〉

如图 1—3 所示, 六角层内最近邻原子间距为 a , 而相邻两

层间的最近邻原子间距为

$$d = (a^2/3 + c^2/4)^{1/2},$$

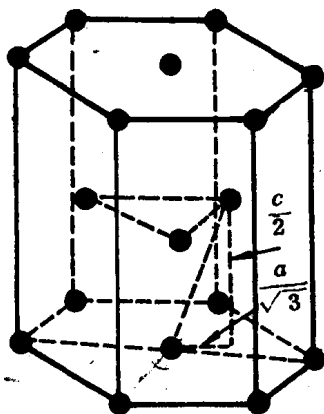


图 1—3 六角密堆结构。

当 $d = a$ 时构成理想的密堆六角结构，此时有

$$a = (a^2/3 + c^2/4)^{1/2},$$

由此解出， $c/a = (8/3)^{1/2} = 1.633$ 。

若 $c/a > 1.633$ 时，则表示原子平面的层间距较理想结构的层间距大，因此层间堆集不够紧密。

第二章 晶体衍射与倒易格子

1. 傅里叶级数的逆变换

(a) 证明方程式

$$n(x) = \sum_p n_p \exp(i2\pi p x/a)$$

中的傅里叶系数 n_p 为.

$$n_p = a^{-1} \int_0^a dx n(x) \exp(-i2\pi p x/a).$$

(b) 证明

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} n_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$$

的逆变换为

$$n_{\mathbf{G}} = V_0^{-1} \int_{\text{Cell}} d\mathbf{v} n(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}),$$

式中 V_0 为晶体原胞的体积.

<解>

(a) 若 $n(x)$ 展为傅氏级数

$$n(x) = \sum_p n_p \exp(i2\pi p x/a),$$

式中 p 为整数, 上式两边乘以 $a^{-1} \exp(-i2\pi p' x/a)$, 并对 x 积分, 得

$$\begin{aligned} & \frac{1}{a} \int_0^a dx n(x) \exp(-i2\pi p' x/a) \\ &= \sum_{p'} n_{p'} \frac{1}{a} \int_0^a dx \exp[i2\pi(p' - p)x/a], \end{aligned}$$

而 $\frac{1}{a} \int_0^a dx \exp[i2\pi(p' - p)x/a]$

$$= \delta(p' - p) = \begin{cases} 1, & \text{当 } p' = p \text{ 时;} \\ 0, & \text{当 } p' \neq p \text{ 时.} \end{cases}$$

所以有:

$$\begin{aligned} \sum_{p'} n_{p'} \delta(p' - p) &= n_p \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a dx n(x) \exp(-i2\pi px/a). \end{aligned}$$

(b) 若有三维傅氏级数

$$n(\mathbf{r}) = \sum n_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}),$$

为计算 $n_{\mathbf{G}}$, 可在上式两边乘以 $v_c^{-1} \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$, 并对原胞 c 积分, 则得

$$\begin{aligned} V_c^{-1} \int_c d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \\ = \sum_{\mathbf{G}'} n_{\mathbf{G}'} V_c^{-1} \int_c d\mathbf{r} \exp[i(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}], \end{aligned} \quad (1)$$

其中 V_c 为原胞体积, $\mathbf{G}$, $\mathbf{G}'$ 为倒易矢量. 上式右边的积分有如下的结果

$$\begin{aligned} \int_c d\mathbf{r} \exp[i(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}] &= V_c \delta(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ &= \begin{cases} V_c, & \text{当 } \mathbf{G}' = \mathbf{G} \text{ 时;} \\ 0, & \text{当 } \mathbf{G}' \neq \mathbf{G} \text{ 时.} \end{cases} \end{aligned} \quad (2)$$

$\mathbf{G}' = \mathbf{G}$ 的结果是显然的. 现只需证明 $\mathbf{G}' \neq \mathbf{G}$ 的情况. 令 $\mathbf{G}' - \mathbf{G} = \mathbf{G}''$, 只需证明

$$\int_c d\mathbf{r} \exp(i\mathbf{G}'' \cdot \mathbf{r}) = 0 \quad \mathbf{G}'' \neq 0$$

即可. 因为 $\mathbf{G}'$, $\mathbf{G}$ 均为晶体的倒易矢量, $\mathbf{G}''$ 也应为倒易矢量, 所以 $\exp(i\mathbf{G}'' \cdot \mathbf{r})$ 必具有晶格周期性, 故上式对原胞的积分与原胞的选择无关. 若将原胞平移任意矢量 $\mathbf{d}$, 积分区域就平移至原胞 c' , 于是有

$$\begin{aligned}\int dv \exp[i\mathbf{G}'' \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{d})] &= \int_c dv \exp(i\mathbf{G}'' \cdot \mathbf{r}) \\ &= \int_c dv \exp(i\mathbf{G}'' \cdot \mathbf{r}),\end{aligned}$$

所以

$$[\exp(i\mathbf{G}'' \cdot \mathbf{d}) - 1] \int_c dv \exp(i\mathbf{G}'' \cdot \mathbf{r}) = 0.$$

因 $\mathbf{d}$ 是任意一个矢量, $\exp(i\mathbf{G}'' \cdot \mathbf{d}) \neq 1$, 故 $\mathbf{G}'' \neq 0$ 时, 必

$$\int_c dv \exp(i\mathbf{G}'' \cdot \mathbf{r}) = 0,$$

于是, (2) 式成立. 将 (2) 式代入 (1) 式, 得

$$n_G = V_c^{-1} \int_c dv n(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}).$$

2. 晶面间距. 设晶格中的一个平面为 hkl . (a) 证明倒易矢量 $\mathbf{G} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}$ 垂直于这个平面. (b) 证明晶格的两相邻平行平面(这些平面通过格点)之间的距离为 $d(hkl) = 2\pi/|\mathbf{G}|$, $\mathbf{G} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}$. (c) 对于简单立方晶格, 证明 $d^2 = a^2/(h^2 + k^2 + l^2)$.

<解>

(a) 晶面 (hkl) 在基矢 $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{b}$ 、 $\mathbf{c}$ 上的截距为 a/h , b/k , c/l .

作矢量

$$\mathbf{m}_1 = \mathbf{a}/h - \mathbf{b}/k,$$

$$\mathbf{m}_2 = \mathbf{b}/k - \mathbf{c}/l,$$

$$\mathbf{m}_3 = \mathbf{c}/l - \mathbf{a}/h.$$

显然这三个矢量互不平行, 均落在 (hkl) 晶面上, 且

$$\begin{aligned}\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{G} &= (\mathbf{a}/h - \mathbf{b}/k) \cdot (h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}) \\ &= (\mathbf{a}/h - \mathbf{b}/k) \cdot \left[2\pi h \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}} + 2\pi k \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}} \right]\end{aligned}$$

$$+ 2\pi l \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}] = 0,$$

同理有

$$\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{G} = 0,$$

$$\mathbf{m}_3 \cdot \mathbf{G} = 0,$$

故倒易矢量 $\mathbf{G}$ 垂直于晶面 (hkl) 。

(b) 晶面族 (hkl) 的面间距为

$$d_{hkl} = \mathbf{a} / h \cdot \mathbf{G} / |\mathbf{G}| = \mathbf{a} / h \cdot \frac{(h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C})}{|\mathbf{G}|} = 2\pi / |\mathbf{G}|.$$

(c) 对于简立方晶格,

$$|\mathbf{G}| = (2\pi/a)(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2},$$

所以 $d^2_{hkl} = a^2 / (h^2 + k^2 + l^2).$

3. 由线排列与矩形排列产生的衍射。晶格常数为 a 的线性结构的衍射花样由图2—1来说明。有些类似的结构在分子生物学中是重要的：脱氧核糖核酸（DNA）和许多蛋白质是螺旋形的。（a）让图2—1 b的衍射花样使圆柱状底片曝光；圆柱轴与线性结构或丝状样品的轴重合。试描述底片上衍射花样的图形。（b）平板照相底片放在丝状样品的后面并垂直于入射束。粗略画出在底片上的衍射花样图形。（c）一层原子平面形成晶格常数为 a 的矩形晶格。平面垂直于入射 x 射线束。请粗略画出在照相底片上的衍射花样。（d）图2—2表示从Ni晶体的 (110) 表面的Ni原子背反射的电子衍射花样。说明衍射图形的取向与在模型中所显示的表面原子的位置的关系。假定在低能电子反射中只有表面原子起作用。

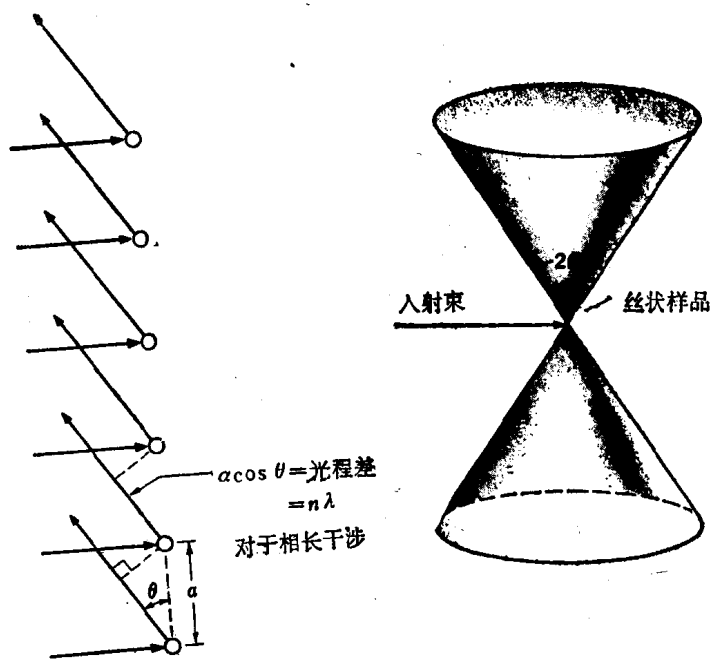


图 2—1 单色x射线束垂直于晶格常数为 a 的线性晶格的衍射图案。(a) 相长干涉的条件为 $a \cos \theta = n\lambda$ n 为整数。(b) 对于给定的 n, λ 相同的衍射线落在—锥面上。

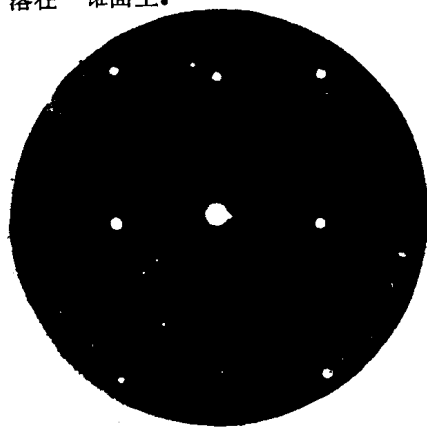


图 2—2 (a)