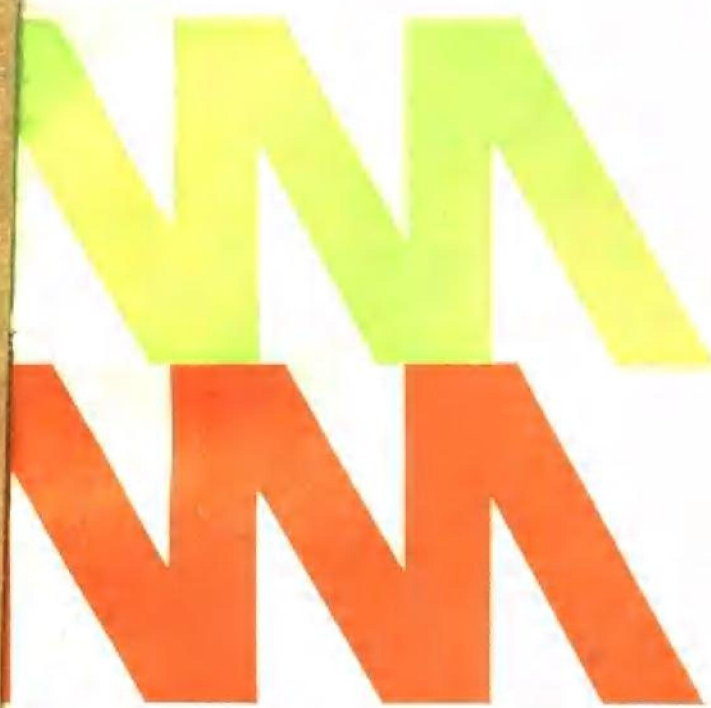


吕世骥 范印哲 编

北京大学出版社



固体物理教程

高等学校教材

固体物理教程

吕世骥 范印哲 编

北京大学出版社

内 容 简 介

《固体物理教程》一书是经高等工科院校半导体物理与器件教材编审小组评选，择优推荐为高等工科院校电子类有关专业教材。本书也可作为综合大学和师范院校有关专业的教学参考书；还可供有关专业的科技人员参考。

本书内容包括固体物理的基本内容和固体物理新进展的一些基本概念：晶体结构、晶体结合、晶格振动、金属自由电子论、能带理论、半导体、电介质、磁性、超导电性、晶体缺陷等。各章附有一定量的思考题和习题。

本书内容简明，重点突出，概念清楚，图表精细，较注重理论联系实际。本书主要内容可供60—70授课学时使用。

高等学校教材

固体物理教程

吕世骥 范印哲 编

责任编辑：李采华

*

北京大学出版社出版

(北京大学校内)

国防科工委印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

850×1168毫米 32开本12.75印张330千字

1990年12月第一版 1990年12月第一次印刷

印数：00001—2100册

ISBN 7-301-01274-8/O·217

定价：3.50元

前 言

固体物理是物理学的一个重要分支，在现代科学技术的发展中，它起着极其重要的基础作用。固体物理是材料科学和器件物理的重要基础，它为研究、开发新型功能材料和器件提供了科学依据和理论指导。而固体物理所发展起来的一整套科学概念、理论和实验技术，则对于其它新兴科学技术领域同样产生重要的影响。

鉴于以上原因，固体物理不仅是综合性大学物理系的一门重要基础理论课，也是师范院校物理系和工科院校材料科学、电子物理、电子器件等专业的重要理论基础课。然而，作者在多年固体物理课程的教学实践中深感缺乏一本适用于工科院校和师范院校这一层次的教材。我们研究后，分工编写了讲义，该讲义于1988年经半导体物理与器件教材编审委员会推荐为教材后，又作了进一步的修改和补充而编写成本书。

近几十年来固体物理的发展十分迅速，并已形成以晶体结构、晶体原子动力学、晶体的电、磁、光学性质，半导体及超导电性等核心论题为中心的若干分支学科。考虑到上述原因，并针对我国各有关专业对固体物理内容要求的差异，本书采用按固体性质分类的体系，这样也许更有利于各专业根据其专业要求和学时安排进行合理的选择。

为了能适应工科院校及师范院校的特点，本书力求突出简明性和实践性。由本书的目录可见，本书所包括的内容和目前理科专业所用教材基本相同，但篇幅仅为它们的三分之二左右。这是由于本书在强调概念准确的基础上省略了许多繁琐的推导和严格的证明。除此之外，本书还对固体物理在材料、器件等方面的应用作了一些简要的介绍，这对于读者掌握固体物理的基本内容也

许是有益的。

固体物理教材和高等院校其它教材一样，担负着传授知识和培养能力的双重任务。如何发挥教材在培养学生能力，尤其是创造性思维能力方面的作用是教材建设中必须考虑的。本书在这方面作了一些努力，这主要反映在本书除给出了大量习题外，每章还给出了一定数量的思考题。同时，尽管本书篇幅有限，但对于固体物理的最新发展，如非晶态物质、超导电性和元激发等内容仍作必要的介绍，这样不仅能开扩读者的视野，还能使他们在此基础上作更深入的探讨。

在本书的编写过程中，韩汝琦教授对本书的编写要求、特点和内容选择作了十分具体的指导。在书稿完成后他又在百忙中仔细审阅了全部初稿，并提出了许多宝贵的意见，在此仅向韩汝琦教授表示深切的谢意。

本书第一、二、三、五、六、七、八、九、十章由吕世骥执笔，范印哲编写了第四、十一章及非晶态物质、元激发和固体磁性材料的内容，全书由吕世骥统稿。

由于我们水平有限，书中难免有不妥与错误之处，恳请读者批评指正。

编 者

一九八九年十二月

目 录

第一章 晶体结构	1
1.1 晶体的宏观特征	1
1.2 晶体的微观结构	5
1.3 晶向与晶面	11
1.4 晶体的宏观对称性	15
1.5 倒易点阵	21
1.6 晶体衍射简介	25
1.7 非晶态固体的结构	31
思考题	34
习 题	35
第二章 晶体的结合	37
2.1 离子键与离子晶体	37
2.2 共价键与原子晶体	38
2.3 金属键与金属晶体	41
2.4 分子晶体	42
2.5 氢键晶体与混合型晶体	43
2.6 晶体结合的普遍特征	45
思考题	52
习 题	52
第三章 晶格振动	55
3.1 一维布喇菲晶格	55
3.2 一维双原子链	59
3.3 能量量子化与声子	63
3.4 晶体的热学性质	69
3.5 非谐效应	74
思考题	82
习 题	82
第四章 晶体缺陷	85
4.1 晶体缺陷的分类	85
4.2 点缺陷	85
4.3 晶体中的扩散	93
4.4 离子晶体的点缺陷及导电性	98
4.5 位错	100

4.6	面缺陷及其它缺陷	109
4.7	缺陷对半导体器件的影响	108
	思考题	113
	习题	113
第五章	金属自由电子论	116
5.1	自由电子气的状态	116
5.2	电子的热容	122
5.3	金属的电导率	125
5.4	金属的热导率	128
5.5	霍耳效应	130
5.6	功函数与接触电势	131
5.7	元激发与等离子体振荡	134
	思考题	138
	习题	139
第六章	能带理论	141
6.1	布洛赫定理	142
6.2	准自由电子近似	145
6.3	布里渊区	155
6.4	紧束缚近似	160
6.5	无序系统中的电子状态	166
6.6	电子的准经典运动	169
6.7	导体、绝缘体和半导体的能带模型	176
	思考题	180
	习题	181
第七章	半导体	184
7.1	典型的晶体结构	184
7.2	基本能带结构	186
7.3	杂质能级	188
7.4	载流子的统计分布	193
7.5	电导与霍耳效应	199
7.6	半导体的光吸收	201
7.7	非平衡载流子	206
7.8	PN结	209
7.9	半导体表面层和 MIS 结构	216
7.10	异质结	224
7.11	半导体超晶格	228
7.12	非晶态半导体	234
	思考题	240
	习题	241

第八章 固体的介电性质	244
8.1 介质极化现象与机理	244
8.2 电介质的有效场理论	251
8.3 交变电场中的介质极化	254
8.4 电介质的损耗	259
8.5 铁电体	261
8.6 压电体	267
思考题	274
习题	275
第九章 固体的磁性	277
9.1 原子的磁矩	277
9.2 抗磁性与顺磁性	281
9.3 金属传导电子的磁化率	287
9.4 磁有序现象	291
9.5 铁磁性的分子场理论	296
9.6 磁畴与技术磁化	300
9.7 铁磁性量子理论概述	303
9.8 磁性材料的分类及其应用	312
思考题	320
习题	321
第十章 超导电性	323
10.1 超导体的基本电磁性质	323
10.2 超导体的热力学性质	328
10.3 伦敦电磁学方程	333
10.4 第二类超导体	336
10.5 BCS理论梗概	340
10.6 隧道效应	346
10.7 约瑟夫森效应	350
思考题	354
习题	355
第十一章 相平衡和相图	356
11.1 几个基本概念	356
11.2 相平衡	360
11.3 相平衡曲线和相图	362
11.4 单元系相图及实例	364
11.5 二元系相图及其应用	365
11.6 二元系相图实例	367
11.7 共晶和包晶体系	372
11.8 共晶体系相变实例	377
11.9 中间相	378

11.10 合金的有序-无序转变	380
*11.11 相图的热力学基础	381
*11.12 三元系合金相图简介	385
思考题	390
参考文献	391
索 引	393
基本物理常数	400

第一章 晶体结构

在自然界的固态物质中，具有规则几何外形的晶体很早就引起了人们的关注。尽管目前对非晶态物质的研究日趋活跃，但迄今为止，人们对于固体的了解大部分还是来自对于晶体的研究。本章将主要讨论晶体中原子排列的几何特征，并对非晶固体的结构作简要介绍。

1.1 晶体的宏观特征

1.1.1 晶体与非晶体

如果将大量的原子聚集到一起构成固体，那么显然原子会有无限多种不同的排列方式。而在相应于平衡状态下的最低能量状态，则要求原子在固体中有规则地排列。若把原子看作刚性小球，按物理学定律，原子小球应整齐地排列成行，由各行一起构成平面，又由各平面重叠成规则的三维形状的固体。

人们很早就注意到一些具有规则几何外形的固体，如岩盐、石英等，并将其称为晶体。显然，这是不严格的，它不能反映出晶体内部结构本质。事实上，晶体在形成过程中，由于受到外界条件的限制和干扰，往往并不是所有晶体都能表现出规则外形，一些非晶体，在某些情况下也能呈现出规则的多面体外形。因此，晶体和非晶体的本质区别主要并不在于外形，而在于内部结构的规律性。

图1-1为石英晶体与石英玻璃的内部结构示意图。由图可见，组成石英晶体中的离子是有规则地按周期性排列的，而石英玻璃中的离子排列是无规则的。迄今为止，已经对五千多种晶体进行

了详细的 X 射线研究。实验表明，组成晶体的粒子(原子、离子或分子) 在空间的排列都是周期性的有规则的，我们称之为长程有序；而非晶态固体内部则是长程无序的。

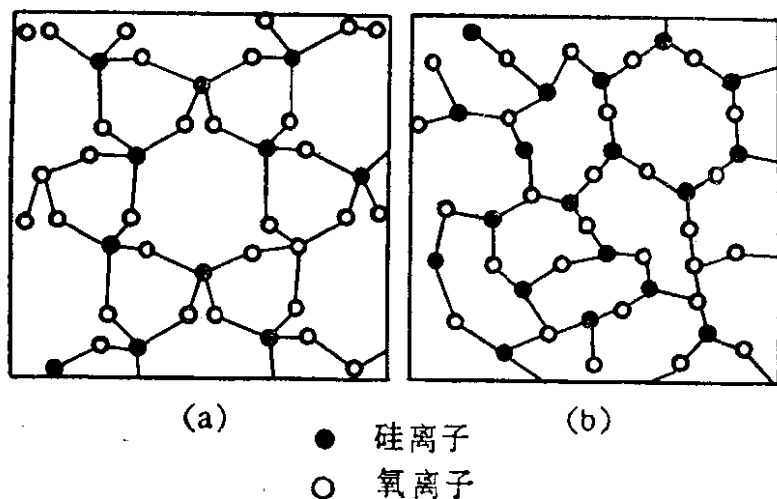


图1-1 晶体与非晶体的结构示意图
(a) 石英晶体 (b) 石英玻璃

1.1.2 晶体的宏观特征

各种晶体由于其组分和结构不同，因而不仅在外形上各不相同，而且在性质上也有很大的差异，然而一切晶体又都具有一些仅决定于其内部结构规律性的宏观特征。这些宏观特征可以归纳为以下几点：

1. 自范性

晶体物质在适当的结晶条件下都能自发地成长为单晶体，发育良好的单晶体均以平面作为它与周围物质的界面，而呈现凸多面体，如图1-2所示。这一特征称之为晶体的自范性。

2. 晶面角守恒定律

由于外界条件和偶然情况的不同，同一类型的晶体，其外形不尽相同。图1-3给出几种不同外形的石英晶体，这表明由于外界条件的差异，晶体中某

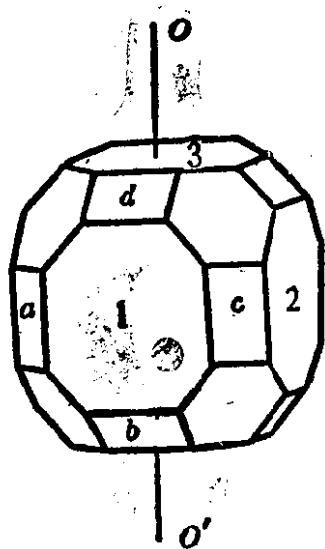


图1-2 晶体外形图

组晶面可以相对地变小、甚至消失。所以，晶体中晶面的大小和形状并不是表征晶体类型的固有特征。

那么，由内在结构所决定的晶体外形的固有特征是什么呢？实验表明，对于一定类型的晶体来说，不论其外形如何，总存在一组特定的夹角，如图1-3所示的几种石英晶体， a 、 b 面之间的夹角总是 $141^{\circ}47'$ ， b 、 c 面之间的夹角总是 $120^{\circ}00'$ ， a 、 c 面之间的夹角则总是 $113^{\circ}08'$ 。对于其它品种的晶体，晶面间则有另一组特征夹角，这一普遍规律称之为晶面角守恒定律，即同一种晶体在相同的温度和压力下，其对应晶面之间的夹角恒定不变。

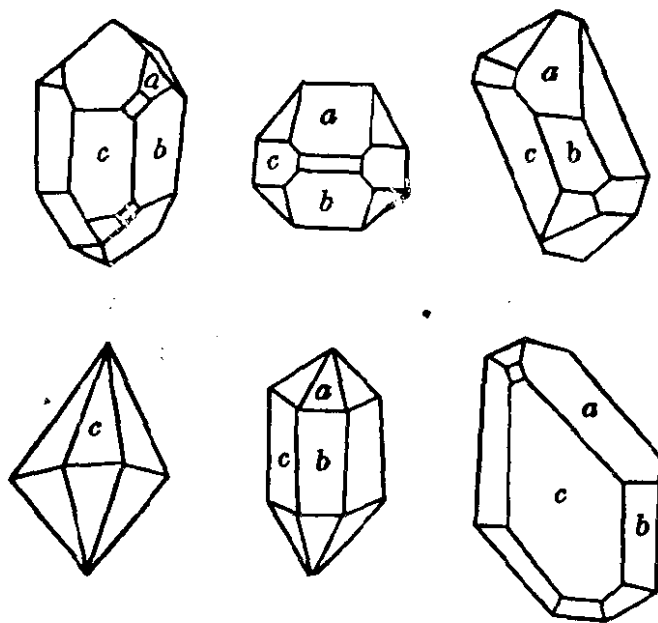


图1-3 几种不同外形的石英晶体

3. 解理性

当晶体受到敲打、剪切、撞击等外界作用时，可有沿某一个或几个具有确定方位的晶面劈裂开来的性质。如固体云母（一种硅酸盐矿物）很容易沿自然层状结构平行的方向劈为薄片，晶体的这一性质称为解理性，这些劈裂的晶面则称为解理面。自然界的晶体显露于外表的往往就是一些解理面。

4. 各向异性

如果我们测量石墨的电导率，将得到一个令人惊奇的结果：当石墨放在某一个方向时，电导率是某一数值，而将石墨转动一下后，电导率的数值便改变了。晶体的物理性质随观测方向而变的现象称为各向异性。晶体的很多性质，如压电性质、光学性质、磁学性质、热学性质等都表现出各向异性。

5. 均匀性

由于晶体内部不同部位质点，其排列方式和周围情况完全一样，如果不考虑外界条件的影响，从宏观上看，晶体的物理性质不随晶体部位的改变而改变，这就是晶体所具有的均匀性。

此外，在晶体内部，凡是沿相互平行的方向，由于质点的性质和排列方式是一致的，其物理性质必相同。所以，晶体的各向异性和均匀性是相互补充的。

6. 对称性

晶体的宏观性质一般说来是各向异性的，但并不排斥晶体在某几个特定方向可以异向同性。晶体宏观性质在不同方向上有规律重复出现的现象称为晶体的对称性。

晶体的对称性反映在几何外形和物理性质两个方面。实验表明，晶体的许多物理性质都和晶体几何外形的对称性有关。

7. 最低内能与固定熔点

实验表明，从气态、液态或非晶态过渡到晶体时都要放热。反之，从晶态物质转变为非晶态、液态或气态时都要吸热。这表明在相同的热力学条件下，与同种化学成分的气体、液体或非晶体相比，以晶体的内能为最小。我们知道，物体的内能包括质点热

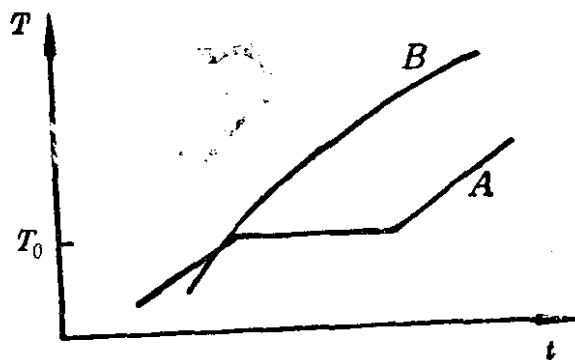


图1-4 晶体与非晶体的加热曲线

运动的动能和质点间相互作用势能两个部分，其中动能部分随所处的温度、压力条件而变化，可供直接比较的是质点间的势能部分。由此可见，在相同的热力学条件下，以具有相同化学成分的晶体与非晶体相比，晶体是稳定的，非晶体则是不稳定的，后者有自发转变为晶体的趋势。

当我们加热某种晶体时，我们会发现当加热到某一特定温度

时，晶体开始熔化，且在熔化过程中保持温度不变，直到晶体全部熔化，温度才又开始上升(如图1-4曲线A)。换句话说，晶体的熔点是一定的，如石英晶体的熔点为1470℃，硅单晶的熔点为1420℃。另一方面，玻璃等非晶体在加热过程中则先出现整个固体变软，然后逐渐熔化成液体(图1-4曲线B)。它们没有确定的熔点，而只是在某一温度范围内发生软化，非晶体软化的温度范围称软化区。晶体具有固定熔点这一特性不难由其具有最低势能给予解释。

晶体为什么会具有非晶体所没有的这样一些宏观特征呢？众所周知，物体的宏观特性乃是其微观结构的反映。为了更深刻地理解和利用晶体的这些宏观特性，还是让我们从晶体的微观结构来研究吧！

1.2 晶体的微观结构

1.2.1 空间点阵与晶格

晶体的微观结构包括两个因素：第一，晶体是由什么粒子组成的；第二，粒子是以怎样的方式在空间排列的。固体物理着重研究第二个问题。理论和实验都已证明，晶态固体内部的粒子(原子、离子或分子)在空间是周期性地规则排列的，或称作长程序。为了描述晶体内部结构的长程序，人们引入了空间点阵概念。

空间点阵学说认为一个理想的晶体是由组成晶体的粒子，排列在由不共面的三个基本矢量 a_1, a_2, a_3 按下列方式所确定的一个点阵上所构成的。当我们从任意一点 r 去观察粒子的排列时，将同我们从另一点

$$r' = r + ma_1 + na_2 + pa_3, \quad (1-1)$$

(m, n, p 为任意整数)

去观察所看到的粒子排列在各方面都是一样的。令 m, n, p 取一切整数，则由式(1-1)所确定的空间无穷多个点的集合就定义一个空

间点阵。所以，点阵仅是一个数学的抽象或者说是一个几何概念。一个实际晶体就是由某种原子、分子或其集团这样的基本结构单元配置在三维点阵上构成的。这种配置有原子、分子或其集团的点阵就称作晶格。

1.2.2 布喇菲格子与复式格子

如果晶格只由一种原子构成，则基本结构单元（简称基元）就是一个原子，原子中心与阵点重合，这种晶格便称之为布喇菲格子，而配置有基元的阵点一般又称作格点。布喇菲格子的特点

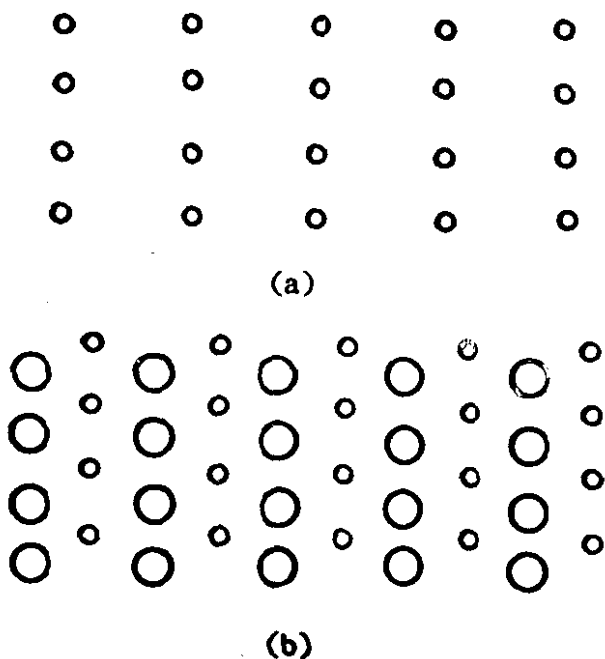


图1-5 布喇菲格子与复式格子

是每个原子周围的情况都完全一样(图1-5(a))。然而更为普遍的情况是晶体的基元包括两种或两种以上的原子，这种晶格称为复式格子(图1-5(b))。在复式格子中基元的原子集团中心与阵点重合。不难看出，各基元中相应的同种原子构成布喇菲格子，且基元中不同原子构成的布喇菲格子是相同的，只是相对地有一定位移。所以

复式格子是由若干相同的布喇菲格子相互位移套构而成。

1.2.3 原胞与晶胞

至此，我们已经用点阵或晶格的概念描述了晶体微观结构的周期性，然而从理论上说无论是点阵或晶格都是一个空间的无限图形，这对于我们的叙述来说多少会带来某些不便。实际上不难看出，如果取任一格点为顶点，以基矢 a_1, a_2, a_3 为边构成平行六

面体，则整个晶体便是由这样的最小单元在空间以 a_1, a_2, a_3 为周期无限重复排列构成的，我们称这样选取的最小重复单元为初基原胞或简称原胞。

晶体除了微观结构的周期性外，每种晶体还有其特殊的宏观对称性。在结晶学中为能既反映晶体的周期性，又能反映其对称性特征，通常并不一定取最小单元作为重复单元。因而，格点不仅在顶点上，亦可在体心、面心或其它位置上，但原胞边长总是一个周期，并各表示某一晶轴的方向，以 a, b, c 示之。换句话说，结晶学中原胞是按对称性特点选取的，通常取最小单元的几倍作为原胞，这种原胞称结晶学原胞或简称晶胞。图1-6为立方晶系的三种布喇菲格子的原胞和晶胞示意图，它们分别称为简立方、体心立方和面心立方。

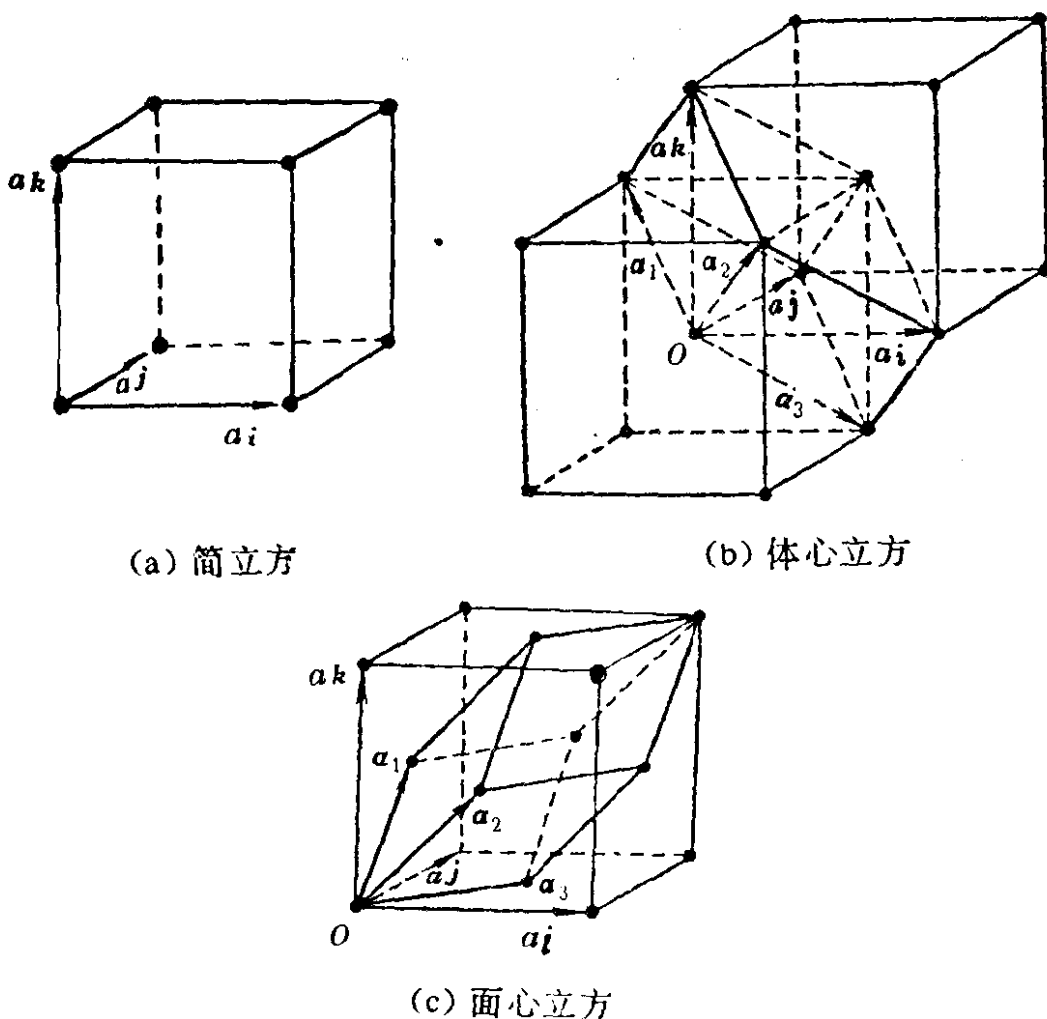


图1-6 立方晶系布喇菲原胞和晶胞

1.2.4 几个简单的晶体结构

现在我们以一些晶格的实例来了解原胞和晶胞的选取及其基本特征。

1. 简立方 (sc)

对简立方的晶胞而言, 仅在立方体的 8 个顶角上配置有原子。从整个晶格来看, 每个原子为 8 个晶胞所共有, 平均说来每个晶胞只包含一个原子。晶胞的体积也就是一个原子所“占”有的体积, 这样的晶胞显然是最小的重复单元。所以, 对简立方晶格而言, 其原胞与晶胞相同, 即 $a_1 = a = ai$, $a_2 = b = aj$, $a_3 = c = ak$ (图1-6(a))。

2. 体心立方 (bcc)

在体心立方晶格的晶胞中, 除顶角上配置有原子外, 在立方体的体心上还有一个原子。对于整个晶格而言, 不难看出, 顶角上的原子和体心上的原子是等同的, 故属布喇菲格子。但体心立方的一个晶胞包含有两个原子, 而原胞要求只包含一个基元。因而通常选取具有下列循环对称性的原胞基矢

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= \frac{a}{2}(-i + j + k) \\ a_2 &= \frac{a}{2}(i - j + k) \\ a_3 &= \frac{a}{2}(i + j - k) \end{aligned} \right\} \quad (1-2)$$

这样选取的原胞体积为 $a^3/2$ 。由于仅在原胞的顶角上置有原子, 所以每个原胞只包含一个原子(图1-6(b))。

3. 面心立方 (fcc)

在面心立方的晶胞中, 6 个面心上的原子和顶角上的原子是等同的。由于从整个晶格来看, 每个面心上的原子为相邻的两个晶胞所共有, 因而只有 1/2 是属于某个晶胞的, 故每个晶胞含有 4 个原子。在固体物理学中, 原胞的基矢是这样选取的