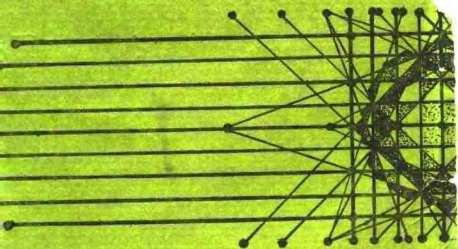


古

体物理基础

陈 洗 编著

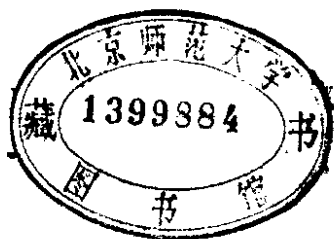
华中工学院出版社



固体物理基础

陈 洗 编 著

7-11/66/67



华中工学院出版社

内 容 提 要

本书是固体物理的基础部分，内容包括：固体的结构，衍射，结合，点阵振动，缺陷，热学性质，能带理论，金属的费密面和导电性。

本书为高等工科院校应用物理及材料科学等专业而编写，要求具备高等数学、普通物理、初步的量子力学与统计物理等基础知识。它的主要特点是：在体系上，以固体的物理性质作为一条主线展开，用声子等量子化粒子模型来分析、研究问题；在内容上，以研究晶态为主，也介绍了非晶态；在教学上，重点突出，思路清晰，习题举一反三。

固 体 物 理 基 础

陈 洗 编 著

责任编辑 赖毅敏

华中工学院出版社出版发行

(武昌喻家山)

新华书店湖北发行所经销
华中工学院出版社印刷厂印刷

开本：850×1168 1/32 印张：13.875 字数：344,000

1980年11月第一版 1980年12月第一次印刷

印数：1—2,000

统一书号：13255—049 定价：2.85元

序 言 (一)

在现代科学技术的发展中，固体物理学作为物理学的一个组成部分，起着非常重要的和基础的作用。它不仅作为材料科学的重要基础，为研究和开发新型功能材料和结构材料提供了科学依据和指导，而且它所发展起来的一整套概念、理论和实验技术，也已渗透到一系列新兴技术领域和边缘学科。固体物理学是一门发展十分迅速、成果十分丰富、科研十分活跃的基础学科。因此今天，更需要一些具有综述性的教材，向学生介绍这个领域的基础知识和现代成就。

我愉快地向读者介绍这本固体物理方面的基础教材。作为多年教学实践的总结，作者在处理理论方法与实验验证、基础知识和技术应用、基本内容和发展方向等方面，有很多独到的地方。全书思路清楚，概念正确，推理细致，层次分明，是一本富于启发性、便于自学的教材。特别是作者在书中适当的地方，简要地穿插了一些理论物理知识。这不仅为理科学学生提供了理论联系实际的一些范例；也为广大工科学学生深入掌握固体物理原理，创造了非常有利的条件。书中统一地安排了例题和习题，还介绍了丰富的参考文献。这些，作为一本教材，也都是很有特色的。

对于固体物理学的整个内容来说，这本书介绍的只是最基础的部分。希望继续努力，在固体物理的各个专题上，写出更有水平、更具特色的教材来！

阮图南

一九八五年一月一日

序 言 (二)

在物理学范围内，还没有那一学科象固体物理那样发展得如此丰满；认识得如此深刻；对人类生活影响得如此深远。实际上，固体物理又可以分成许多子学科，如晶格动力学；半导体物理，离子晶体等等，其中每一个都有十分丰富完备的内容，因此，很少有一本固体物理的书能既深入浅出，又较全面地介绍基本内容。本书试图引导初学者掌握固体物理的基本内容，并在某些方面有更深入的了解。应该说，就此目的来看，本书是取得一定成功的，所选的内容也很合适。因此，作为一本教材是很好的，学生掌握了本书的基本内容再去深入某一领域将不会感到特别困难。

由于现代技术与固体物理有如此紧密的联系，促使其它领域的专家了解固体物理是十分必要的。我相信，本书将在此方面起很好的作用。

霍 裕 平

一九八五年十一月一日

前 言

二十世纪以来，随着量子理论的建立、实验技术的发展和生产实践上的迫切需要，固体物理学作为研究固体微观的原子、电子结构与宏观物理性质相互关系及其变化规律的一门学科，有了飞速的发展，并取得了巨大的成就。它的影响，涉及到科学技术和社会生活的一系列领域。这一点，从固体能带理论的建立以及半导体器件和集成电路的发展，是可以看得很清楚的。由于这样的原因，固体物理学自然成为大学物理系有关专业学生的一门重要的基础理论课。其它理工科专业的学生和教师，以及科学技术人员，由于其专业发展需要从微观上了解固体材料和器件所涉及的物理性质，也有必要学习一些固体物理知识。考虑到这些情况，本书作为工科院校应用物理专业学生、研究生的教材，高等学校的教学参考书，科技人员的自学教材，在编写时，注意了以下的要求和特点：

1. 本书的起点取得不高，只要学过工科院校的《高等数学》、《工程数学》和《普通物理学》，具有初步的量子力学、统计物理热力学和电磁学知识，就能够接受，并且在书内适当的地方，结合固体物理的内容，穿插一些必需的理论物理知识，把它们在固体物理中的一些应用和推演过程，阐述得尽可能详细一些。实践证明，这样做显然可以减少自学遇到的许多困难。

2. 本书在体系上，主要是以固体的物理性质作为一条主线来展开的。就是说：用现代量子理论的基本原理来研究固体的力学性质、热学性质、电磁性质等；用声子等量子化粒子模型来分析研究问题，从而揭示出固体微观结构与宏观性质间的关系及其变化规律，使理论和实际结合得更为紧密。实际讲授时，可以只

讲解书中主要的章节，而把其余部分让学生自学，以培养他们的自学能力。例如第一章，可以扼要地在课堂讲解前五节的基本内容，第六节简单晶体结构，就可以让学生结合模型进行自学，第七节作为发展方向，使学生通过自学了解非晶结构的一些基本概念。再加上本书推导过程写得较为详细，即使在课堂讲解主要章节时，也只需要交代主要的思路，而让学生在课后自己对照教材去推导，从而使他们更好地掌握固体物理中分析问题、处理问题的方法。

3. 本书在内容上与综合大学固体物理教学大纲规定的内容基本一致。就是说：在理想模型(理想晶体)的基础上，运用现代量子力学和统计物理作为理论工具进行分析研究，而把固体中的杂质、缺陷等作为一种对理想结构的微小干扰加上去，这样来展开固体物理的全部内容。以研究晶态为主，适当反映非晶态；以研究固体材料为主，也介绍现代固态器件；以理论为主，也介绍主要实验和应用。因此，本书除了突出基本内容外，还增加了一些带“*”的章节。这样，一方面使教师能根据学生的实际情况和专业需要，在内容的选择上有更大的灵活性；另一方面，也使教材能充分反映现代固体理论的发展水平，使学生对这门学科有比较开阔的视野。

根据以上要求，把整个固体物理分为基础和专题两个部分。本书为基础部分，包括：固体的结构，衍射，结合，点阵振动，晶体缺陷，热学性质，能带理论，金属的导电性等内容。

4. 本书在教学法上作了如下安排：

- (1) 每章开始编有全章内容的纲要，便于读者掌握重点；
- (2) 概念阐述力求准确，理论分析做到条理分明，反映出既可作为教材，又可作为教学参考书的特色；
- (3) 充分运用插图，使抽象概念形象、直观；
- (4) 每章末尾附有小结、习题；
- (5) 指定了必要的参考文献。

考虑到学生做习题时所遇到的种种困难，书中除了对习题和教学内容作了统一处理外，还在习题中插入了一些典型例题，以引导掌握解题方法。

本书是根据作者近几年来在华中工学院应用物理专业讲授固体物理课所编写的讲义，经过几次修改、补充，整理而成。由于作者对这门学科的教学实践和科学实验积累的经验不多，编写的教材一定还存在不少缺点和问题，希望使用和阅读本书的教师和学生以及广大读者，多多提出改进意见。

本书在编写过程中得到中国科学院合肥分院霍裕平教授和中国科学技术大学近代物理系阮图南教授的多次指教，他们在百忙中还为本书写了序言。

本书的编写、出版得到了华中工学院物理系、固体电子学系的热情鼓励和大力支持，固体电子学系丘思畴、王敬义、郭汉强副教授和物理系李之芳、姚凯伦、张端明副教授曾仔细地审阅了本书的原稿，并提出了许多宝贵的修改意见，在此表示衷心的感谢。

作者

1986年10月于华中工学院

目 录

第一章 固体的结构	(1)
1.1 晶体点阵	(2)
1.2 晶体原胞	(7)
1.2.1 初基原胞	(8)
1.2.2 惯用原胞	(8)
1.2.3 维格纳-赛兹原胞	(9)
1.3 晶体的对称性	(10)
1.4 晶体点阵的基本类型	(17)
1.4.1 二维情况	(17)
1.4.2 三维情况	(19)
1.5 晶面和晶向指数	(22)
1.6 简单晶体结构*	(26)
1.6.1 金刚石结构	(27)
1.6.2 六角密堆积结构	(28)
1.6.3 氯化钠结构	(31)
1.6.4 氯化铯结构	(32)
1.6.5 立方硫化锌(闪锌矿)结构	(32)
1.6.6 六角硫化锌(纤锌矿)结构	(33)
1.7 非晶结构*	(34)
小结	(38)
习题	(39)
参考文献	(45)

第二章 固体的衍射	(46)
2.1 X射线谱	(46)
2.2 布喇格定律和劳厄方程	(48)
2.2.1 布喇格定律	(48)
2.2.2 劳厄方程	(50)
2.3 倒易点阵	(53)
2.3.1 倒易点阵概念的引出	(53)
2.3.2 晶体点阵和倒易点阵的关系	(55)
2.3.3 厄瓦尔德图解	(56)
2.4 晶体衍射的实验方法*	(59)
2.4.1 劳厄法	(59)
2.4.2 周转晶体法	(62)
2.4.3 粉末法	(63)
2.5 布里渊区	(65)
2.6 晶体内电子密度的付里叶分析	(71)
2.7 原子散射因子	(74)
2.7.1 一个电子对 X 射线的散射	(74)
2.7.2 一个原子对 X 射线的散射	(76)
2.7.3 原子散射因子的计算	(77)
2.8 几何结构因子	(78)
小结	(81)
习题	(83)
参考文献	(89)
第三章 固体的结合	(90)
3.1 晶体中原子间的相互作用力和相互作用势能	(90)
3.2 晶体的内能	(92)

3.3 离子键和离子型晶体	(96)
3.3.1 离子晶体的结合能	(96)
3.3.2 离子半径和晶体结构间的关系*	(101)
3.4 共价键和共价型晶体	(105)
3.4.1 共价键的能量	(105)
3.4.2 轨道的杂化和共价晶体结构	(113)
3.5 金属键和金属型晶体*	(118)
3.6 范德瓦斯力和分子型晶体	(120)
3.6.1 范德瓦斯互作用势能	(122)
3.6.2 分子晶体的结合能	(125)
3.6.3 分子型晶体和非晶体	(126)
3.7 氢键和氢键型晶体*	(128)
小结	(130)
习题	(131)
参考文献	(137)
第四章 点阵振动	(138)
4.1 一维点阵振动	(139)
4.1.1 一维单原子的点阵振动	(139)
4.1.2 一维双原子的点阵振动	(147)
4.2 晶体中原子振动的简正坐标和简正频率	(152)
4.3 三维点阵振动	(156)
4.3.1 三维单原子的点阵振动	(156)
4.3.2 带有基元的三维点阵的点阵振动	(164)
4.4 点阵振动的量子化	(167)
4.4.1 点阵振动的量子化	(167)
4.4.2 声子的动量	(169)
4.4.3 爱因斯坦模型	(172)

4.5 晶体对光子和中子的散射*	(175)
4.5.1 X射线的热散射	(175)
4.5.2 中子的散射	(177)
小结	(179)
习题	(180)
参考文献	(182)

第五章 晶体缺陷

5.1 点缺陷的统计热力学理论	(183)
5.1.1 单一原子晶体中的点缺陷	(186)
5.1.2 离子晶体中的点缺陷	(188)
5.1.3 统计理论的进一步修正	(189)
5.2 扩散	(192)
5.2.1 扩散方程	(192)
5.2.2 扩散的微观机构	(193)
5.2.3 测定扩散系数的实验方法	(196)
5.3 合金及其有序化	(198)
5.3.1 固溶体	(200)
5.3.2 休谟-饶塞里定律.....	(204)
5.3.3 合金的有序—无序转变	(206)
5.4 位错	(210)
5.4.1 晶体的塑性和滑移	(211)
5.4.2 位错及其主要类型	(216)
5.4.3 位错的应力场	(218)
5.4.4 位错源和位错增殖	(221)
5.5 固体的强度*	(224)
5.5.1 固体的脆性强度	(224)
5.5.2 固体强度与时间的关系	(227)

5.5.3 增大固体强度的方法	(230)
小结	(232)
习题	(233)
参考文献	(238)

第六章 固体的热学性质

6.1 德拜的固体热容量理论	(239)
6.1.1 德拜理论	(240)
6.1.2 德拜理论和实验的比较	(245)
6.2 晶体的状态方程和热膨胀	(247)
6.2.1 晶体的状态方程	(248)
6.2.2 晶体的热膨胀和非简谐作用	(249)
6.3 晶体的热传导	(251)
6.3.1 声子-声子相互作用	(251)
6.3.2 晶体的热导率	(252)
6.3.3 热导率与温度的关系	(253)
6.4 金属自由电子气模型	(255)
6.5 费密-狄拉克分布	(258)
6.6 电子气的性质	(262)
6.7 电子气的热容量	(267)
6.8 金属的电导率和热导率	(270)
6.8.1 金属的电导率	(270)
6.8.2 金属的热导率	(272)
6.8.3 金属的热导率与电导率之比	(274)
小结	(275)
习题	(277)
参考文献	(280)

第七章 能带理论

7.1 电子在周期势场中运动的波函数	(283)
7.1.1 平移算符	(284)
7.1.2 波函数的平移性质	(285)
7.1.3 布洛赫波	(287)
7.1.4 波函数在有限晶体的归一化	(288)
7.2 电子在周期势场中运动的速度和加速度	(291)
7.2.1 准动量	(292)
7.2.2 电子的有效质量	(295)
7.2.3 速度和准动量间的关系	(299)
7.2.4 加速度	(302)
7.3 微扰理论	(305)
7.4 准自由电子近似	(308)
7.4.1 模型和零级近似	(308)
7.4.2 微扰计算	(310)
7.4.3 简并微扰计算	(312)
7.4.4 能带的形成	(318)
7.5 准束缚电子近似	(323)
7.5.1 零级近似波函数	(324)
7.5.2 微扰分析	(326)
7.5.3 能量计算	(328)
7.5.4 简立方、体心立方和面心立方晶体的能带	(330)
7.6 能带的计算*	(335)
7.6.1 原胞法, 金属的结合能	(336)
7.6.2 级加平面波 (APW) 法	(343)
7.6.3 赝势法	(344)
7.7 导体、半导体和绝缘体	(345)

7.8 能态密度	(350)
7.9 X 射线谱和能带结构	(354)
7.10 能带理论的限制, 金属—绝缘体转变*	(355)
小结	(357)
习题	(358)
参考文献	(368)
第八章 金属的费密面和导电性	(369)
8.1 金属的能带结构和费密面	(369)
8.1.1 单价金属的能带结构和费密面	(370)
8.1.2 多价金属费密面的构成	(373)
8.1.3 过渡金属的能带结构	(378)
8.2 测定费密面的实验方法	(379)
8.2.1 晶体电子在磁场中的运动	(379)
8.2.2 电子轨道的量子化	(382)
8.2.3 德哈斯-范阿耳芬效应	(386)
8.3 分布函数和玻耳兹曼方程	(390)
8.4 金属的电导率	(394)
8.5 各向同性弹性散射和弛豫时间	(398)
8.5.1 用 $\tau(k)$ 表述碰撞项的条件	(398)
8.5.2 弛豫时间	(401)
8.6 点阵散射和电导*	(401)
8.6.1 点阵振动引起的点阵势能的变化	(402)
8.6.2 点阵振动对电子的散射几率	(403)
8.6.3 微扰矩阵元的计算	(405)
8.6.4 弛豫时间的计算	(406)
8.7 合金的性质和能带结构*	(410)
8.8 合金的电导*	(415)

小结.....	(417)
习题.....	(419)
参考文献.....	(424)
附录1 基本物理常数	
附录2 MKS (SI) 单位和CGS或高斯单位的关系	

第一章 固体的结构

在通常条件下，自然界的物质总是以气态、液态、固态的形式存在。物质呈什么形态与外界条件有密切关系，例如大多数非固态物质，在足够低的温度下通常都可以凝聚成固态。物质能够形成固态，主要依靠化学键把大量原子紧密结合在一起。固体物理学作为研究固态物质的微观机构和它的各种物理性质的相互关系及其变化规律的一门学科，依据组成固体的大量原子的电子结构和它们的空间排列，用这些原子和电子运动的集体行为，来探索固态物质的各种宏观特性，因而对发展现代各种新型固体材料，研究各种新型固体器件，具有极大的促进和指导作用。

固态物质可以分为晶体和非晶体。晶体从宏观上来看，有一定规则的外形；它的很多物理性质具有各向异性的特征，有一定的熔点等。这些都是非晶体所不完全具备的。晶体的上述宏观特征是它内部微观粒子(原子、分子或离子)规则排列的反映。从微观结构来看，晶体具有远程有序性，也就是说在一定方向的直线上，粒子有规则地重复排列千百万次，形成结构上的周期性。而非晶体中粒子的分布只具有近程有序性，即只有邻近的一些粒子才形成有规则的结构。

人们对于晶体的认识是从天然晶体开始的。例如岩盐、石英和宝石等，它们的外形高度对称而内部又非常纯净、完整。这种纯净而完整的晶体叫做单晶体。而有些物质则是由大小、形状和取向各不相同的小晶体结合而成的。例如金属从熔融的状态凝聚成固态时，在液体中产生了很多随机取向的晶核；每个晶核最终生长为一个个小的单晶体，即晶粒；这些晶粒互相结合，成为金属晶块。这样的晶块显然是各向同性的，叫做多晶体。单晶体和