

固体物理学

方可 胡述楠 张文彬 主编



重庆大学出版社

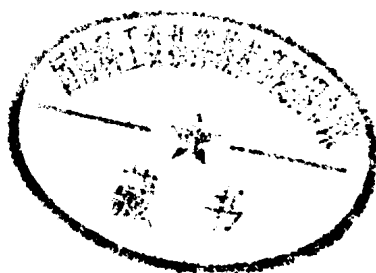


科工委字第802 2 0033155 0

固体物理学

方可 胡述楠 张文彬 主编

GF 131/19



重庆大学出版社

内 容 简 介

本书前四章介绍晶体结构与晶体结合、能带理论、晶格振动、晶体中的缺陷等基础知识；后五章介绍半导体、晶体的介电性与光学性质、固体磁性、超导电性和非晶态物理等专题知识。

全书力求加强基本概念和规律的阐述，理论联系实际，适当反映了固体物理和材料的新发展，系统性强，每章有小结、思考题和习题，各章内容可按具体要求作灵活取舍或适当调换，便于教学。

本书适合作高等师范院校和工科院校有关专业的教材，亦可供有关科技人员参考。

固 体 物 理 学

方 可 胡述楠 张文彬 主编
责 任 编 辑 黄开植

重庆大学出版社出版发行
新华书店经销
重庆大学出版社印刷厂印刷

开本：787×1092 1/16 印张：17.5 字数：437 千
1993年2月第1版 1993年2月第1次印刷

印数：1—4100

标准书号， ISBN 7-5624-0515-8 定 价：9.25元
O·68

(川)新登字020号

序

我国高等师范院校，在60年代中期以前很少有学校开设固体物理学这门课。80年代以来各校感到有必要并纷纷开设了这门课程。我想究其原因在于：第一，固体物理学是现代电子技术的基础又是现代材料科学的基础。第二，固体物理学本身有很多重要的新发展，特别是半导体，超导体，以及非晶体领域。第三，固体物理学中有很多范例可用物理学的基本原理来阐明，这些富有教益和启发性的范例对教学和培养人才非常有利。

自1980年以来，全国高等师范院校每年都在暑假举办固体物理学教学研讨会和讲习班。教师们有机会交流教学经验和科研成果，了解固体物理学领域的新进展，开阔视野。他们迫切需要一本适合高师院校使用的固体物理学教材。起点、容量都适当，叙述简明、概念清楚、联系实际。这本教材就是应此需要而编写的，是六所大学和高师院校教师们集体智慧和经验的结晶。虽然执笔人数较多，但行文流畅，明确，容易阅读，各章又附有小结，思考题和习题更便于教学和读者自学。这是一件好事，我相信这本教材出版会促进高师院校固体物理学的教学，对该领域的科研也会有所裨益，乐于向读者推荐。

陆 栋

1991年3月29日

前 言

从1980年起，全国高等师范院校的《固体物理学》教师及许多工科院校的教师举行了多次讲习班和教学研讨会。这些讲习和研讨活动，得到国家教委的批准和资助。方俊鑫，陆栋，高联佩，甘子钊，马本堃，秦国刚，韩汝琦，陈金富和赵敏光等著名教授先后应邀到会讲学，对提高全国高等师范院校《固体物理》教学水平和促进科学研究起了积极作用，受到普遍欢迎和尊敬。

高师教师普遍希望能有一本更适合师范院校用的《固体物理学》教材，并在试编教材方面作了许多努力。1987年在苏州大学举行固体物理教学研讨会时，几校决定联合编写《固体物理学》教材，由四川师大方可担任组织工作。北京师院秦大成，苏州大学张文彬，上海师大韩宝麟，苏州铁道师院王镇皋和重庆大学胡述楠等先后参加了拟订大纲工作。编写分工为：第一章，重庆大学胡述楠；第二、四章，上海师大韩宝麟；第三章，苏州大学张文彬；第五章，山东大学李敦银；第六章，四川师大陈凤祥；第七章，四川师大方可；第八章，重庆师院向永寿；第九章，苏州大学许裕生。王镇皋参加了部份修改工作后，全书又经方可、胡述楠、张文彬统一修改，保证了各章风格一致和完全统一协调。

编者力图做到叙述简明，物理概念清楚，联系实际，注重处理问题的方法，适当反映科学新进展。每章有小结，思考题和习题，便于高等师范和工科院校有关专业作教材，且可视学时多少而灵活取舍。本书也可供有关科技人员参考。限于时间和水平，错误和不当之处，欢迎批评指正。

本书的出版得到成都先锋电子公司经理谢峥、成都金牛区鸿森木材加工厂经营部袁祖金的支持，特表感谢。

编 者

一九九一年九月

目 录

第一章 晶体结构与晶体的结合	(1)
§1.1 晶体结构的周期性.....	(1)
§1.2 一些晶格的实例.....	(4)
§1.3 晶向、晶面和它们的标志.....	(8)
§1.4 倒格子和布里渊区.....	(9)
§1.5 晶体的对称性.....	(13)
§1.6 晶体的结合.....	(19)
小结.....	(28)
思考题.....	(28)
习题.....	(28)
第二章 能带理论	(31)
§2.1 索末菲自由电子论.....	(32)
§2.2 晶体周期势场中电子运动的特点.....	(37)
§2.3 近自由电子近似.....	(42)
§2.4 紧束缚近似.....	(47)
§2.5 能态密度.....	(50)
§2.6 布洛赫电子的准经典运动.....	(53)
§2.7 能带理论对导体、半导体和绝缘体的解释.....	(59)
§2.8 电子在恒定外磁场中的运动.....	(62)
小结.....	(69)
思考题.....	(71)
习题.....	(71)
第三章 晶格振动	(73)
§3.1 简谐近似.....	(73)
§3.2 一维晶格振动.....	(74)
§3.3 二维晶格振动 声子.....	(79)
§3.4 确定晶格振动谱的实验方法.....	(84)
§3.5 晶格振动的模式密度.....	(86)
§3.6 晶格热容的量子理论.....	(88)
§3.7 晶格的状态方程和热膨胀.....	(92)
§3.8 晶格的热传导.....	(95)
小结.....	(101)
思考题.....	(101)
习题.....	(102)

第四章 晶体的缺陷和相图	(104)
§4.1 点缺陷	(104)
§4.2 扩散及其微观机制	(106)
§4.3 离子晶体中的缺陷与离子性导电	(109)
§4.4 线缺陷——位错	(112)
§4.5 面缺陷	(116)
§4.6 晶体中缺陷的观察方法	(117)
§4.7 合金与相图	(118)
小结	(127)
思考题	(127)
习题	(128)
第五章 半导体	(129)
§5.1 半导体的基本能带结构	(129)
§5.2 半导体中的杂质	(135)
§5.3 半导体统计学	(137)
§5.4 半导体中的输运现象	(142)
§5.5 过剩载流子及其运动	(148)
§5.6 <i>PN</i> 结	(151)
§5.7 半导体表面层 和 <i>MIS</i> 结构	(157)
§5.8 半导体异质结和超晶格	(160)
§5.9 半导体器件简介	(163)
小结	(170)
思考题	(171)
习题	(172)
第六章 固体的介电性质与光学性质	(173)
§6.1 电介质中的宏观场和局域场 (有效场)	(173)
§6.2 几种基本极化机构	(176)
§6.3 极化弛豫和动态介电常数	(183)
§6.4 固体的光吸收和光发射	(186)
§6.5 铁电性	(190)
§6.6 驻极体 热电性和压电性	(193)
§6.7 绝缘固体介质的电击穿	(196)
小结	(197)
思考题	(198)
习题	(198)
第七章 固体的磁性	(200)
§7.1 原子和离子的磁性	(201)
§7.2 抗磁性和顺磁性	(204)
§7.3 技术磁化理论	(213)

§7.4 铁磁性的唯象理论.....	(214)
§7.5 分子场的起因 交换相互作用.....	(217)
§7.6 自旋波.....	(220)
§7.7 反铁磁性.....	(223)
§7.8 亚铁磁性(铁氧体).....	(226)
小结.....	(227)
思考题.....	(228)
习题.....	(228)
第八章 超导电性.....	(229)
§8.1 超导体的基本电磁学性质.....	(229)
§8.2 超导转变的热力学.....	(231)
§8.3 超导体的电动力学.....	(234)
§8.4 两类超导体.....	(236)
§8.5 超导电性的微观理论.....	(238)
§8.6 隧道贯穿现象和约瑟夫逊效应.....	(241)
§8.7 超导量子干涉效应.....	(245)
§8.8 高温超导体.....	(246)
小结.....	(249)
思考题.....	(249)
习题.....	(250)
第九章 非晶态物理.....	(251)
§9.1 非晶态材料的结构.....	(251)
§9.2 非晶态半导体.....	(256)
§9.3 金属玻璃.....	(263)
§9.4 非晶态磁性.....	(267)
§9.5 非晶态超导体.....	(269)
§9.6 非晶态材料的制备原理.....	(270)
主要参考书目.....	(272)

第一章 晶体结构与晶体的结合

固体材料是由大量原子（离子或分子）按一定方式排列而成，这种排列方式称为固体的结构。固体材料的宏观性质和各种微观过程均与固体的结构有关。

长期以来，人们将固体材料分为两大类：晶态材料（晶体）和非晶态材料（非晶体）。晶体中，原子按严格的规则排列，具有周期性或平移对称性，也称为具有长程序，晶态材料可以是天然的或人工生长的单晶体，如金刚石、岩盐、锗和硅单晶等，它们一般具有规则的几何外形，并具有各向异性的物理性质。晶态材料也可以是多晶体，它们由许多小单晶体（尺寸超过微米，称为晶粒）方向各异随机地堆砌成整块材料，因而不具有规则的外形，也不表现出各向异性，一般的金属和合金材料都是多晶体。若晶粒小到线度仅为几十埃（ $\text{\AA}$ ），则称为微晶，如磁记录材料 $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 磁粉，碳黑颗粒等，对于非晶态材料，原子的排列不具有周期性，即不具有长程序，但基本上保留了晶态材料的短程序，即近邻原子的数目和种类、近邻原子之间的距离（键长）及近邻原子配置的几何方位（键角）都与晶态材料相近，石蜡、松香、橡胶、玻璃、金属玻璃及非晶硅等是典型的非晶态材料。

1984年，D. Shechtman等报导他们发现了一类既区别于晶体又不同于非晶体的固体材料，它们具有局域的五重旋转对称性（晶态不存在五重旋转对称轴），称为准晶体。准晶体的发现开辟了固体结构研究的新领域。

早在17世纪，阿羽依（Haüy）就推断晶体具有规则的几何外形是由于组成晶体的“小基石”规则排列的结果。18世纪，布拉伐（Bravais）在此基础上提出了空间点阵学说，用以概括晶格周期性的特征。19世纪末，熊夫利（Shoenflies）等发展了关于晶体微观几何结构的空群理论。1912年，劳厄（Laue）提出以晶体作为X射线的衍射光栅可以测定晶体中原子排列的具体形式，他和其他许多科学家进行了大量而长期的实验研究，证实了空间点阵学说和空群理论。对非晶态材料结构的研究远不及对晶态材料的充分，而对准晶材料结构的研究才开始不久。

本章的主要内容是介绍晶体中原子排列的几何规则性。在本章的后半部分将介绍关于固体结合的问题，即原子是通过怎样的相互作用（键）结合在一起成为固体的。

§1.1 晶体结构的周期性

本节介绍描写晶体结构周期性的方法和基本概念，包括布拉伐格子、复式晶格、基矢、原胞和晶胞等。

一、布拉伐格子

理想晶体可看成是由完全相同的基本结构单元（简称基元）在空间作周期性无限排列构成。基元可以是单个原子或离子，也可能是若干原子的集团。为了概括晶体结构的周期性，取基元的某一特定的点，例如，基元的重心作为代表点来表示基元的空间位置，这些呈周期性无限分布的几何点的集合形成的空间点阵，称为布拉伐（Bravais）格子或晶格。这些代表点

称为格点。显然，一切格点是等价的，亦即，每个格点的周围环境相同，因为一切基元的组成，位形和取向都相同。可以说，布拉伐格子加上基元就是晶体结构（图1.1）。

若在布拉伐格子中取某格点为原点。它至其他格点的矢量 $\mathbf{R}_l$ 称为格矢量，可表示为

$$\mathbf{R}_l = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3 \quad (1.1.1)$$

式中， $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$ 为一组基矢， (l_1, l_2, l_3) 为一组整数（正、负或零）。当 (l_1, l_2, l_3) 取遍一切整数时，便可得到全部格点位置。因此，可以给布拉伐格子下一个等价的数学定义：由（1.1）式 l_1, l_2, l_3 取一切整数值所确定的点的集合称为布拉伐格子。

作几点说明：（1）一个布拉伐格子基矢的取法不是唯一的。在图1.2所示的二维布拉伐格子中，基矢取法1-3都是正确的，因为它们都能产生同一个二维布拉伐格子；取法4却是错误的，因为利用 $\mathbf{R}_l = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2$ 只能达到一部分格点，或者说，这种基矢只能产生一种不同二维布拉伐格子。

（2）不同的基矢一般形成不同的布拉伐格子。图1.3中给出二维格子的例子：（a） $\mathbf{a}_1$ 垂直于 $\mathbf{a}_2$ ， $a_1 = a_2$ ，形成二维正方格子；（b） $\mathbf{a}_1$ 垂直于 $\mathbf{a}_2$ ， $a_1 \neq a_2$ ，形成二维长方格子；（c） $\mathbf{a}_1$ 与 $\mathbf{a}_2$ 夹角 120° （或取 60° ）形成二维六角格子。

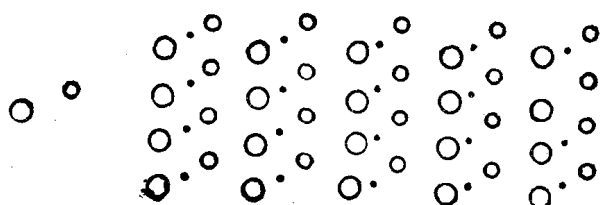


图1.1 晶体结构示意图。大小两圆圈表示两类不同的原子；黑点表示基元中特定的点，黑点的总体形成Bravais格子

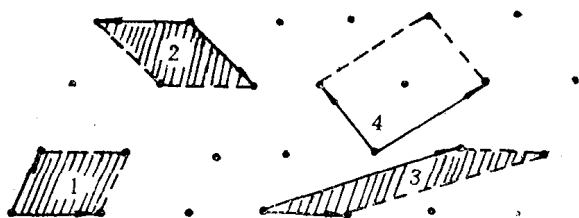


图1.2 二维布拉伐格子几种可能的基矢和原胞取法；1—3是正确的；4是错误的

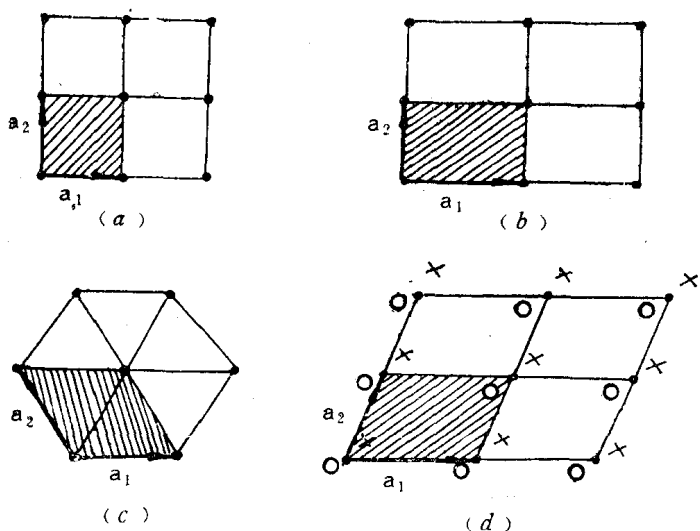


图1.3 二维晶格，（a）—（c）简单晶格；（d）复式晶格，三个不同原子·、○、×组成基元，三种不同原子分别构成一个简单晶格。

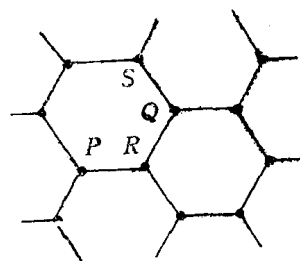


图1.4 二维蜂窝格子

(3)为直观表示晶体结构，常将组成晶体的各种原子以不同的符号在图中一并标出，这些记号在空间也形成点阵。若该点阵是某种布拉伐格子，便称该晶格为简单晶格，否则便称为复式晶格。复式晶格可看成是由若干个相同的简单晶格相对错位套构而成(图1.3(d))。注意，即使由同一种原子组成晶格，它也不一定是简单晶格。例如同一元素原子形成图1.4所示的蜂窝结构，不难看出， $P, Q, \dots$ 与 $R, S, \dots$ 分属于两类不同的点， P 原子和 R 原子与近邻原子成键的方位不同，所以 P 点和 R 点是不等价的，这些点的集合不是布拉伐格子，而是由两个二维六角格子套构成的复式晶格。

二、原胞

从图1.2和1.3给出的二维晶格例子可以看出，以基矢 $\mathbf{a}_1$ 和 $\mathbf{a}_2$ 为棱边的平行四边形是组成晶格的最小单元，称为原胞，整个晶格可看成是由无限多个原胞无间隙地紧密排列而成，或者说，将原胞平移一切可能的格矢量便可得到整个晶格，对于三维晶格，以基矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ 和 $\mathbf{a}_3$ 为棱的平行六面体是晶格体积的最小重复单元，即原胞。三维晶格原胞的体积 Ω 为

$$\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \quad (1.1.2)$$

二维晶格原胞的面积等于 $|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|$ ，一维晶格原胞的长度等于最近邻布拉伐格点的间距。

关于原胞作几点重要说明：(1)原胞的取法不是唯一的，这容易由基矢取法的非唯一性看出(图1.2)。

(2)平行六面体形原胞有时难以反映晶格的全部宏观对称性。魏格纳(Wigner)和赛兹(Seitz)提出了一种既是晶格体积的最小重复单元又能直观反映晶格全部宏观对称性的原胞(称为魏格纳-赛兹原胞或对称原胞)的取法：作某格点与所有其它格点连线的中垂面，被这些中垂面围在中央的最小多面体便是魏格纳-赛兹原胞(图1.5)。魏格纳-赛兹原胞的取法与倒格子空间中构成简约布里渊(Brillouin)区的方法相同(见§1.4)。

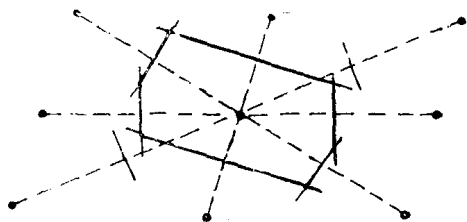


图1.5 二维晶格的魏格纳-赛兹原胞

是由 n 个简单晶格套构而成的复式晶格，则每个原胞包含 n 个原子。

(4)一般用格矢量 $\mathbf{R}_i$ 来标志原胞的空间位置，用 $\boldsymbol{\tau}_i$ 标志第 i 种原子在原胞中的位置，用

$$\mathbf{R}(i) = \mathbf{R}_i + \boldsymbol{\tau}_i = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3 + \boldsymbol{\tau}_i (i=1, 2, \dots, n) \quad (1.1.3)$$

表示位于 $\mathbf{R}_i$ 处的原胞中第 i 种原子的空间位矢。

(5)原胞反映了晶格的周期性，各原胞中等价点的一切物理性质相同。从而作为位置的函数的各种物理量，例如电荷密度 $\rho(\mathbf{r})$ ，应具有晶格的周期性(或平移对称性)，表示为

$$\rho(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i) = \rho(\mathbf{r}) \quad (1.1.4)$$

三、晶胞

由于平行六面体形原胞（常称为固体物理学原胞）往往不能直观反映晶格的宏观几何对称性，在结晶学中，一般选择能直观反映上述对称性的基本重复元素，称为晶胞或单胞，有时也称为晶体学原胞。常用 a 、 b 、 c 表示构成晶胞的轴矢。晶胞的边长称为晶格常数，它不一定等于近邻原子的间距。格点不仅出现在晶胞的顶角上，也可能出现在其它位置，例如体心或面心位置。有些晶格的晶胞与原胞一致，如后面将介绍的简单立方晶格和氯化铯晶格；许多晶格的晶胞体积是原胞体积的若干整数倍。

最后指出，在晶体学中已经对各种类型的布拉伐格子选取原胞和晶胞的方式作了统一的规定。

§1.2 一些晶格的实例

本节介绍一些典型的重要晶格结构。某些晶体，例如锗、硅和金刚石，原子排列的形式相同但间距不同，我们认为它们具有相同的晶体结构。常用原子球规则堆积的模型来直观地描写晶格的形成。原子的最近邻（原子）数目称为配位数。晶胞中原子所占体积与晶胞体积之比称为堆积比率或致密度。晶格的配位数和堆积比率愈高，则原子堆积成晶格时愈紧密。

一、简单立方晶格（SC格子）

简单立方的英文缩写符号为SC，SC格子的晶胞和原胞一致，是边长为 a 的立方体， a 称为晶格常数，如图1.6所示。每个原子的上下左右前后各有一个最近邻原子，故配位数为6。顶角上的原子为8个晶胞所共有，故平均每个晶胞包含一个原子，原子半径为 $a/2$ ，故堆积比率为

$$1 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2} \right)^3 / a^3 = \frac{\pi}{6} \approx 0.52$$

尽管没有实际晶体具有SC晶体结构，但不少较复杂晶格的布拉伐格子是SC格子。例如，后面将详细介绍的氯化铯晶格和闪锌矿结构。

二、体心立方晶格（bcc格子）

体心立方的缩写符号为bcc，bcc格子的立方晶胞如图1.7所示。显然，配位数为8，每个晶胞包含两个格点。原子半径为晶胞立方对角线的 $1/4$ ，故堆积比率为

$$2 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}a}{4} \right)^3 / a^3 = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \approx 0.68$$

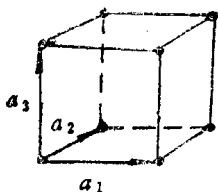


图1.6 SC格子的晶胞和原胞

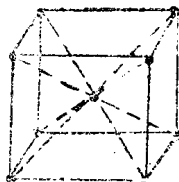


图1.7 bcc格子的立方晶胞

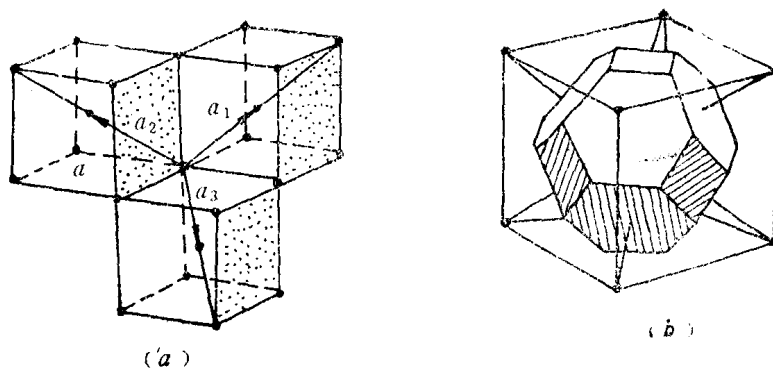


图1.8 (a)bcc格子的基矢和原胞和
(b)bcc格子的魏格纳-赛兹原胞

图1.8(a)给出了bcc格子基矢和原胞的取法, 按图

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{a}{2}(-i + j + k), \quad a_2 = \frac{a}{2}(i - j + k), \\ a_3 &= \frac{a}{2}(i + j - k) \end{aligned} \quad (1.2.1)$$

原胞体积 $\Omega = a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = \frac{1}{2}a^3$, 等于晶胞体积的1/2。图1.8(b)给出了bcc格子的魏格纳-赛兹原胞, 它是截去正八面体的6个顶角所形成的十四面体。

许多金属, 如Li、Na、K、Rb、Cs、Fe等, 具有bcc晶格结构。

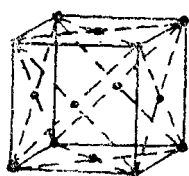
三、面心立方晶格 (fcc格子)

面心立方的英文缩写符号为fcc, fcc格子的立方晶胞如图1.9(a)所示, 除8个顶角有格点外, 6个面心位置分别各有一个格点。平均每个晶胞包含4个格点。在紧密堆积情况下, 原子的半径等于立方体表面对角线1/4, 故堆积比率为

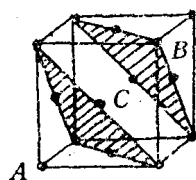
$$4 \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sqrt{2}}{4}a \right)^3 / a^3 = \frac{\sqrt{2}}{6}\pi \approx 0.74$$

配位数为12。图1.10(a)给出了fcc格子基矢和原胞的取法, 按图

$$a_1 = \frac{a}{2}(j+k), \quad a_2 = \frac{a}{2}(k+i), \quad a_3 = \frac{a}{2}(i+j) \quad (1.2.2)$$

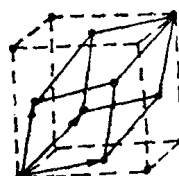


(a)

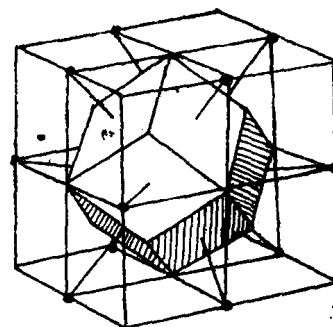


(b)

图1.9 (a)fcc格子的立方晶胞和
(b)原子密排面的堆积方式



(a)



(b)

图1.10 (a)fcc格子的基矢和原胞和
(b)魏格纳-赛兹原胞

原胞体积 $\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = \frac{1}{4}a^3$, 等于晶胞体积的1/4, 每个原胞包含一个格点. 图1.10(b)给出了fcc格子魏格纳-赛兹原胞, 它是一个正十二面体。

fcc晶格子是一种最紧密的排列方式, 常称为立方密排晶格。Cu、Ag、Au、Al等具有fcc晶格结构。

四、六角密排晶格 (hcp 格子)

六角密排的缩写符号为hcp, 图1.11给出了hcp格子的晶胞和原胞图形. 基矢 $\mathbf{a}_3$ 垂直于 $\mathbf{a}_1$ 和 $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_1$ 与 $\mathbf{a}_2$ 夹角 120° , $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$, $|\mathbf{a}_3| = c \neq a$. 每个原胞中包含两个原子。hcp 晶格两个简单六角晶格套构而成。或者说, 基元由两个原子组成, 如图中的原子O和原子M, 它们在六角坐标系的坐标分别为 $(0, 0, 0)$ 和 $(\frac{2}{3}a, \frac{1}{3}a, \frac{1}{2}c)$, 两原子的间距 $\overline{OM} = \sqrt{(\frac{a^2}{3}) + (\frac{c^2}{4})}$. 在理想密堆积的情况下, 原子与其12个近邻的距离相同, $\overline{OM} = a$, 给出 $c/a = \sqrt{8/3} = 1.633$. 具有 hcp 结构的实际晶体的 c/a 值与理想值很相近, 如 $c/a = 1.68$ (Be), 1.89 (Cd), 1.63 (Co). 理想情况下的堆积比率为

$$2 \times \frac{4}{3} \pi (a/2)^3 / \frac{1}{2} \sqrt{3} a^2 c = \frac{\sqrt{2}}{6} \pi \approx 0.74$$

hcp和fcc晶格的配位数和堆积比率相等, 都是密堆积结构。hcp是原子密排面按 $ABABAB \dots$ 的方式堆积而成 (图1.11), fcc则是原子密排面按 $ABCABCABC \dots$ 的方式堆积而成 (图1.9(b)). fcc的一切格点是等价的, 属简单晶格; hcp 则是复式晶格, 因A面内原子的上、下各3个最近邻原子所分别形成的正三角形的空间取向, 不同于B面内原子的上、下各3个最近邻原子所分别形成的正三角形的空间取向。

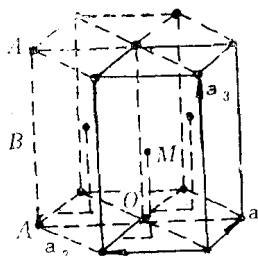


图1.11 hcp 格子的晶胞和原胞

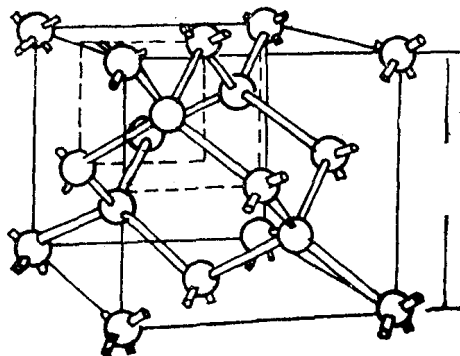


图1.12 金刚石晶格结构的立方晶胞

五、金刚石晶体结构

金刚石结构是一种由相同原子构成的复式晶格。图1.12示出其立方晶胞图形。由面心立方晶胞的中心到顶角引8条连线, 在互不相邻的4条连线的中点各加一个原子就得到金刚石晶格结构。它也可看成是由两个fcc晶格沿立方晶胞体对角线错开1/4长度套构而成。在这种晶格中, 处在不同fcc晶格中的原子是不等价的 (共价键的空间取向不同)。这种结构的一个重要特点是, 每个原子有4个最近邻, 它们处在一个正四面体的顶角位置. 不难证明, 金刚石结构的堆积比率为

$$8 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}}{8} a \right)^3 / a^3 = \frac{\sqrt{3}}{16} a \approx 0.34$$

金刚石、Si、Ge及半金属 α -Sn（灰锡）都具有金刚石结构。

以上介绍的都是由同一种元素原子组成的元素晶体，下面介绍几种化合物晶体的结构。

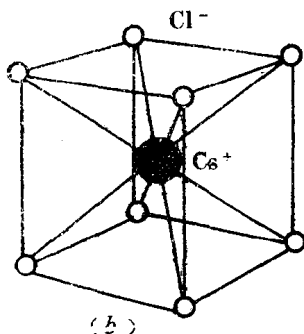
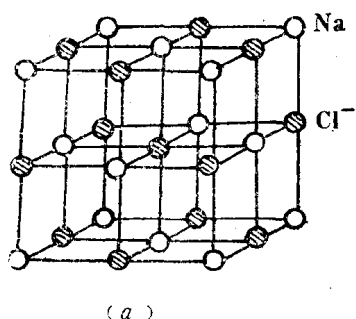


图1.13 (a)NaCl结构和(b)CsCl结构的立方晶胞

六、氯化钠 (NaCl) 结构

岩盐是具有氯化钠 (NaCl) 结构的典型晶体，它是由正离子 Na^+ 和负离子 Cl^- 相间排列组成，其立方晶胞如图1.13(a)所示。NaCl结构的布拉伐格子是fcc格子，基元由相距半个晶格常数的一对正负离子组成。或者说，正、负离子各自组成一个fcc晶格，它们沿轴矢方向相互错位半个晶格常数，便构成氯化钠晶格结构。碱金属Li、Na、K、Rb和卤族元素F、Cl、Br、I的化合物都具有NaCl结构。

七、氯化铯 (CsCl) 结构

图1.13(b)给出CsCl结构的立方晶胞图形。CsCl结构的布拉伐格子是SC格子，其基元由相距为体对角线一半的一对正负离子组成。或者说，CsCl晶格是由 Cs^+ 和 Cl^- 离子分别形成的SC格子套构而成的复式晶格。CsCr、CsI、TiCl、TiBr、TiI等化合物晶体属于氯化铯结构。

八、闪锌矿结构和纤锌矿结构

闪锌矿结构也称为立方硫化锌 (ZnS) 结构，图1.14(a)给出其立方晶胞图形。与图1.12所示的金刚石结构相比，闪锌矿结构是由两种不同元素的原子分别组成fcc晶格，两fcc晶格套构的相对位置与金刚石结构的相对位置相同。闪锌矿结构也具有四面体结构：每个原子以4个异类原子为最近邻，后者位于四面体的顶点。图1.14(a)所示。

纤锌矿结构也称为六方硫化锌结构，图1.14(b)示出其晶胞图形。显然，它是由两种不同元素的原子分别组成h.c.p.晶格适当错位套构而成的，并且，也具有四面体结构。闪锌矿结构具

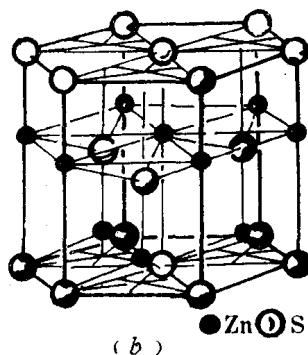
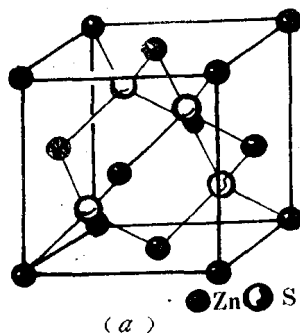


图1.14 (a)闪锌矿结构和(b)纤锌矿结构的晶胞

有立方对称性，纤锌矿结构具有六方对称性。

许多重要的化合物半导体，如Ⅲ-Ⅴ化合物GaAs、InSb、GaP等，Ⅱ-Ⅵ化合物CdTe、HgTe（半金属）等以闪锌矿结构结晶；SiC、GaN等具有纤锌矿结构；有些化合物，如CdS、ZnS等则可以上述两种方式结晶。

§1.3 晶向、晶面和它们的标志

晶体一般是各向异性的，沿晶格不同方向的物质性质不同。因此，有必要标志晶格中的不同方向。

在布拉伐格子中，所有格点可以分列在一系列相互平行的直线系上，这些直线系称为晶列。图1.15分别用实线和虚线表示出2个不同的晶列。每一个晶列定义了一个方向，称为晶向。若从一个原子沿晶向到最近的原子的位移矢量为 $l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3$ ，则用 $[l_1l_2l_3]$ 标志晶向，称为晶向指数。若某晶向指数为负值，按惯例，负值指数用阿拉伯数字顶上加一横表示。

例如， $\bar{[2]12}$ 表示 $l_1 = -2$ ， $l_2 = 1$ ， $l_3 = 2$ 。图1.16示出了立方晶格中的 $[100]$ 、 $[110]$ 和 $[111]$ 晶向。显然，立方边OA的晶向为 $[100]$ ；面对角线OB的晶向为 $[110]$ ，体对角线OC的晶向为 $[111]$ 。立方边共有6个不同的晶向，其它5个为 $[010]$ ， $[001]$ ， $\bar{[100]}$ ， $\bar{[010]}$ 和 $\bar{[001]}$ 。由于立方晶格的对称性，实际上这6个晶向没有什么区别，可写成 $\langle 100 \rangle$ 来统称这6个晶向。同理，可以用 $\langle 110 \rangle$ 统称12个等效的面对角线晶向，用 $\langle 111 \rangle$ 统称8个等效的体对角线晶向。

也可将布拉伐格子的所有格点看成分列在平行等距的平面系上，这样的平面称为晶面。对于同一晶格，存在无穷多个方向不同的晶面系。在取向不同的晶面上，原子的排列方式和

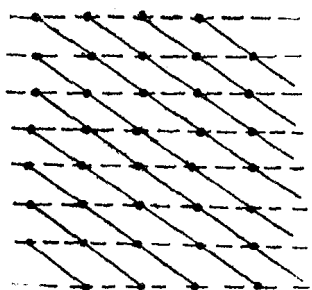


图1.15 晶列

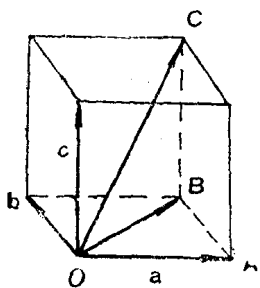


图1.16 立方晶格中的 $[100]$ ， $[110]$ ， $[111]$ 晶向

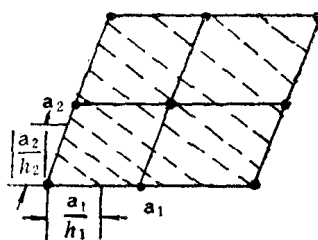


图1.17 晶面指数的确定

面密度不同，对 χ 射线和电子波的反射能力不同，其它物理性质可能也不相同，因而采用适当方法来标志晶面，在理论和实际工作中是重要的。常用晶面指数来标志晶面。

晶面指数的定义和确定方法如下：任选一格点为原点，并沿 $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$ 作三条轴线。既然所有格点都在某一晶面系的晶面上，所以原点和3个基矢的端点必然位于该晶面系的某些晶面上；由于晶面间距相等，所以晶面将等分各基矢（参看图1.17）；设某晶面系的晶面将3个基矢分别截成 h_1 、 h_2 、 h_3 等份，则靠近原点的晶面在3个基矢上的截距为 $\mathbf{a}_1/h_1$ ， $\mathbf{a}_2/h_2$ ， $\mathbf{a}_3/h_3$ （ h_1 、 h_2 和 h_3 为正或负的整数）。我们用 $(h_1h_2h_3)$ 标志该晶面系，称为晶面指数。若以基矢长度 $|\mathbf{a}_1|$ 、 $|\mathbf{a}_2|$ 、 $|\mathbf{a}_3|$ 分别作为3个轴的长度单位，则晶面指数便是上述晶面截距的倒

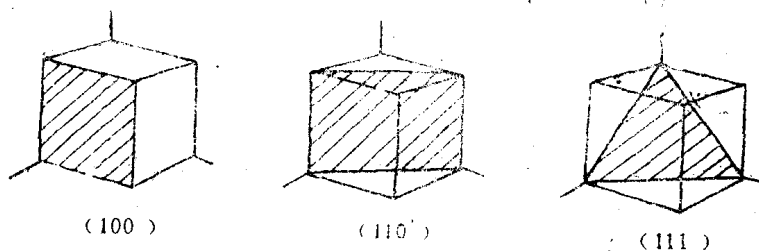


图1.18 立方晶格重要晶面的密勒指数

数。如果该晶面平行于某一基矢，截距为 ∞ ，相应的指数应取为0。在结晶学中，常以 a ， b ， c 为晶胞基矢，则相应的面指数称为密勒（Miller）指数，用 (hkl) 表示。在图1.18中给出了简单立方（SC）晶格中几个重要晶面的密勒指数。

为了在晶向和晶面的标志上反映晶体的对称性，通常以晶体学晶胞的基矢为基础，或者说，以晶格所属晶系中最简单的布拉伐格子作为基础来标志晶向和晶面。前面介绍过的SC、bcc、fcc、NaCl、CsCl、金刚石、立方ZnS等晶格都属于立方晶系，通常都按SC晶格的方式来规定它们的晶向和晶面。不难看出，对于立方晶系，若按上述方式规定的晶向指数和晶面密勒指数的数值相同，则相应的晶向和晶面互相垂直。

类似于等效晶向，也存在等效晶面。在统称某一类等效晶面时，用花括号代替圆括号。例如，用 $\{100\}$ 统一代表等效的 (100) ， (010) 等6种晶面。图1.19示出了属于立方晶系的

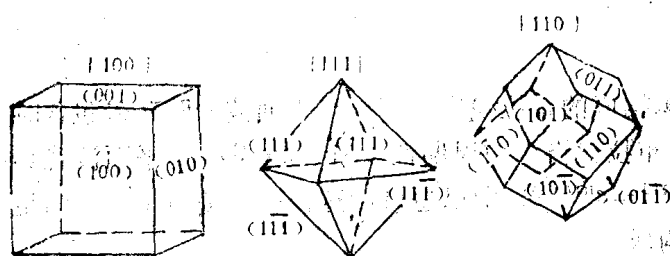


图1.19 立方晶格中的等效晶面

$\{100\}$ 、 $\{110\}$ 和 $\{111\}$ 等效晶面，可以用正立方体、正八面体和正十二面体的表面分别表示上述几种等效晶面。顺便说明，符号相反的晶面，例如 (100) 和 $(\bar{1}00)$ ，实际上所代表的是同一晶面系， $\{100\}$ 、 $\{110\}$ 、 $\{111\}$ 的等效晶面数应当是3，6，4。符号相反的晶面指数

只是在区别晶体的外表时才是有意义的。

最后指出，对于一定晶格，由于单位体积中原子数是一定的，因此，Miller指数较简单的面族，晶面间距离较大，格点的面密度大，单位面积能量较小，生长晶体时，这样的面容易露在外表面。例如金刚石 (111) 面的原子面密度最大，面内原子相互作用又强，在晶体生长，晶面解理，化学腐蚀等情况下，表面往往倾向于成为 (111) 面。与金刚石有相同结构的半导体Si和Ge，在生长单晶时，沿 (111) 面生育生长，较易排除无用杂质而得到较纯的单晶体。掺入有用杂质时，沿 (111) 面进行扩散，杂质分布得较均匀。

§1.4 倒格子和布里渊区

倒格子和布里渊(Brillouin)区的概念在固体物理学中极为重要。晶体结构的周期性，可以用坐标空间（ r 空间）的布拉伐格子进行描写，这在前几节已经作了介绍。实际上，晶体结构的周期性也可以用波矢空间（ k 空间）的所谓倒格子进行描写。特别是，晶体中原子和