

高等学校教材

# 固体物理基础

马本堃 杨先发 王若楨 孟宪仁 编

高等教育出版社

(京) 112 号

## 内 容 提 要

本书是固体物理教学丛书中的一本。

本书是师范和工科院校非固体物理专业的固体物理课程适用的教材。本书的篇幅与内容适度。在阐述中，尽量避免使用较深的数学，注重讲清物理内容。书中主要内容有：晶体的结构、晶体的结合力与结合能，晶体中的缺陷，晶格振动与晶体的热学性质，金属中的自由电子、固体的能带理论、半导体、固体的磁性、超导电性等共九章。书中介绍了固体物理中的基本概念、基本理论，并反映了国内外的最新进展。书中打\*号的内容可供选用。

本书可供师范院校非固体物理专业和工科院校的应用物理、材料科学、半导体、无线电等专业作教材使用，也可供有关科技人员参考。

高等学校教材

## 固体物理基础

马本堃 杨先发 王若楨 孟宪仁 编

\*

高等教育出版社出版

新华书店总店科技发行所发行

商务印书馆上海印刷厂印装

\*

开本 850×1168 1/32 印张 9.125 字数 216,000

1992年9月第1版 1992年9月第1次印刷

印数 00,001—1,400

ISBN 7-04-004030-1/O·1171

定价 3.50 元

71121/10

## 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，高等学校物理学教学指导委员会固体物理教材建设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。

## 编者前言

北京师范大学物理系设有几个非固体物理专业，为了适应当代科学技术发展，对这些非固体物理专业也设置固体物理课程。目前国内的固体物理教材，对非固体物理专业来说，内容份量一般偏重。联想到其他高等师范院校及一些工科院校某些专业的固体物理课程，使我们感到编写一本篇幅与内容适度，且尽量避免使用较高深数学工具和理论方法，又能适当反映固体物理最新进展的教材是有必要的。我们这本教材就是从这些考虑出发而编写的。

本书以晶态固体物理为主，其内容包括固体物理学的基础部分和若干固体物理分支学科的专题，全书共九章。基础部分包括：晶体的结构、晶体的结合力与结合能、晶体中的缺陷、晶格振动与晶体热学性质、金属中的自由电子、固体的能带理论等六章；专题部分包括：半导体、固体的磁性、超导电性等三章。为了反映固体物理学领域的新进展，提供了一些较新的内容，以星号(\*)标明，可供教学时选用或参考。

在编写过程中，王若桢副教授为晶体结构和能带理论二章，孟宪仁副教授为超导电性一章提供了初稿，再由马本堃按本书的宗旨加以改编。本书初稿写出后，在本校试用了几次，杨先发副教授以本书的初稿为教材讲授了这门课程，根据他的教学经验为本书的许多章节写了补充内容，对许多章节的内容作了必要的修改与完善，并配备了习题，对书起了很大作用。可以说本书是我们四个人合作的结果。葛起英高级工程师为本书做了大量的具体工作，在此表示诚挚的谢意。

## 主要符号表

$a_1, a_2, a_3$	初基平移基矢	$E_b$	结合能
$a, b, c$	惯用原胞基矢	$E_D$	施主能级
$b_1, b_2, b_3$	倒易点阵基矢	$E_F$	费密能级
$B$	磁感应强度	$E_g$	导带底能量, 即禁带宽度
$C$	耦合常数、晶 体热容、居 里常数	$E_I$	形成间隙原子 的能量
$C_e$	电子比热(容)	$E_p$	形成空位的能 量
$C_g$	晶格比热(容)	$F$	自由能、作用 力
$C_n$	正常态比热 (容)	$f_{FD}$	费密-狄拉克 分布函数
$C_s$	超导态比热 (容)	$G$	吉布斯自由能
$C_v$	定容比热(容)	$G_h$	倒格矢
$D$	扩散系数	$g$	朗德分裂因子
$D(\omega)$	频率分布函数	$g(E)$	电子态密度
$d$	晶面间距	$H$	磁场强度
$E$	晶格振动总能 量、自由电 子总能量	$H_c$	临界磁场
$E_0$	零点能	$I$	电流强度
$E_A$	受主能级	$I_c$	临界电流
$E_s$	激活能	$\hat{i}, (\mathbf{I})$	中心反演
		$J$	热发射流密度

$j$	流密度	$T$	温度
$j$	电流密度	$T_C$	居里温度、临界温度
$K$	体弹性模量、热导率	$T_N$	涅耳温度
$k$	电子的波矢	$U$	晶格的总能量
$L$	洛仑兹数、潜热	$u$	一个离子的平均势能
$l$	平均自由程	$V$	晶体体积、电压
$M$	马德隆常数、总磁矩	$v$	声子速度
$m, (\sigma)$	镜面	$v_F$	费密速度
$m^*$	电子的有效质量	$W$	耗尽区宽度
$N_A$	受主杂质浓度	$Z$	配分函数
$N_D$	施主杂质浓度	$\alpha$	线胀系数、电流放大系数
$n_s$	超导电子浓度	$\beta$	转移系数
$p$	压强、电子动量、杂质原子跃迁几率	$\gamma$	格林爱森常数、电子比热(容)系数、有效发射率
$P_1$	间隙原子跃迁几率	$\mathcal{E}$	外电场
$P_2$	空位跃迁几率	$\Theta$	德拜温度
$q$	晶格振动的波矢	$\kappa$	压缩系数热导率
$R$	霍耳系数	$\lambda$	波长、内场参数、穿透深度
$R_n$	正格矢		
$S$	熵		

$\mu$	迁移率	$\rho_0$	剩余电阻率
$\mu_B$	玻尔磁子	$\sigma$	电导率
$\mu_e$	电子迁移率	$\sigma_e$	电子电导率
$\mu_h$	空穴迁移率	$\sigma_h$	空穴电导率
$\mu_l$	电子绕原子核 运动的磁矩	$\tau$	平均自由时间
$\mu_m$	磁偶矩、离子 固有磁矩	$\Phi_0$	磁通量子
$\mu_r$	相对磁导率	$\phi$	功函数
$\nu$	杂质原子振动 频率	$\phi_{\text{eff}}$	功函数有效值
$\nu_{01}$	间隙原子振动 频率	$\chi$	顺磁磁化率
$\nu_{02}$	空位近邻原子 振动频率	$\chi_m$	磁化系数
$\rho$	电阻率	$\chi_p$	自由电子的顺 磁磁化率
		$\omega$	格波频率
		$\omega_D$	德拜频率
		$\omega_L$	拉摩频率

# 目 录

主要符号表 .....	1
<b>第一章 晶体的结构 .....</b>	<b>1</b>
§ 1.1 晶体的结构 .....	1
§ 1.2 晶列、晶面及其表示 .....	14
§ 1.3 X 射线衍射技术测定晶体结构的原理 .....	18
§ 1.4 晶体的宏观对称性, 点对称操作 .....	23
✓ § 1.5 晶体的 <u>七大晶系</u> , 十四种布喇菲点阵, 空间群 .....	27
§ 1.6 倒易点阵 .....	34
* § 1.7 非晶态, 准晶态 .....	36
<b>第二章 晶体的结合力与结合能 .....</b>	<b>41</b>
§ 2.1 晶体中原子之间的结合类型 .....	41
§ 2.2 结合力的一般特征 .....	53
§ 2.3 离子晶体的结合能 .....	54
<b>第三章 晶体中的缺陷 .....</b>	<b>62</b>
§ 3.1 点缺陷 .....	62
§ 3.2 杂质与缺陷的扩散运动 .....	68
§ 3.3 位错 .....	71
* § 3.4 堆垛层错 .....	79
<b>第四章 晶格振动与晶体热学性质 .....</b>	<b>84</b>
§ 4.1 一维晶格的本征振动 .....	84
§ 4.2 晶格振动能量量子化、声子 .....	99
§ 4.3 晶格比热 .....	102
§ 4.4 固体的热膨胀 .....	107
§ 4.5 晶格振动频谱的实验测定 .....	110
§ 4.6 非简谐项导致格波间的散射、热导 .....	111
<b>第五章 金属中的自由电子 .....</b>	<b>115</b>



§ 5.1	自由电子模型中的态密度	116
§ 5.2	电子按能量状态的分布	118
§ 5.3	自由电子顺磁性	122
§ 5.4	功函数, 热电子发射	124
<b>第六章</b>	<b>固体的能带理论</b>	<b>131</b>
§ 6.1	引言	131
§ 6.2	由微扰计算看能带的形成	136
§ 6.3	紧束缚近似	140
§ 6.4	布里渊区和能带中的量子态	143
§ 6.5	晶体中电子在外力作用下的运动和有效质量	149
§ 6.6	金属、绝缘体和半导体的判别	154
§ 6.7	金属的电导和热导	159
<b>第七章</b>	<b>半导体</b>	<b>164</b>
§ 7.1	本征半导体	164
§ 7.2	杂质半导体	168
§ 7.3	半导体的电导率	174
§ 7.4	半导体的霍尔效应	178
§ 7.5	非平衡载流子	181
§ 7.6	在热平衡中的 P-N 结	183
§ 7.7	整流作用	187
§ 7.8	半导体的放大作用	190
*§ 7.9	金属-半导体结	195
*§ 7.10	隧道二极管	198
*§ 7.11	场效应管	201
<b>第八章</b>	<b>固体的磁性</b>	<b>204</b>
§ 8.1	逆磁与顺磁现象的机制	204
§ 8.2	磁有序现象, 铁磁性	210
§ 8.3	磁畴和技术磁化曲线	215
*§ 8.4	反铁磁性、亚铁磁性	218
*§ 8.5	磁共振	220
<b>第九章</b>	<b>超导电性</b>	<b>224</b>

§ 9.1	基本的实验现象	225
§ 9.2	超导热力学	228
§ 9.3	超导的微观图象	230
§ 9.4	金兹堡-朗道理论	233
§ 9.5	能隙, 隧道效应	239
§ 9.6	超导电子对的隧道效应——约瑟夫逊效应	242
§ 9.7	氧化物超导体	245
<b>习题</b>		<b>249</b>
<b>参考书目</b>		<b>261</b>
<b>索引</b>		<b>262</b>
<b>基本物理常数</b>		<b>275</b>

# 第一章 晶体的结构

## §1.1 晶体的结构

由 X 射线衍射对固体的结构进行分析得知, 晶态物质和非晶态物质区别之点就在于: 晶态物质是由原子、分子、或原子团在三维空间中有规则地重复排列而组成的, 这种组成晶体的原子、离子、分子或原子团通常称为晶体的基本结构单元, 简称基元。有些简单的晶体, 如铜、金、银等, 它的基元是单个原子。有些晶体包括化合物晶体, 如金刚石、氯化钠( $\text{NaCl}$ )、氟化钙( $\text{CaF}_2$ )等, 它的基元是由两个或两个以上的原子组成。有些无机物晶体的基元可多达 100 个以上的原子, 如金属间化合物  $\text{NaCd}_2$  的基元包含 1000 多个原子, 而蛋白质晶体的基元包含多达 10000 个以上的原子。如果忽略晶体基元的具体细节, 用一个数学上的几何点来代表它,

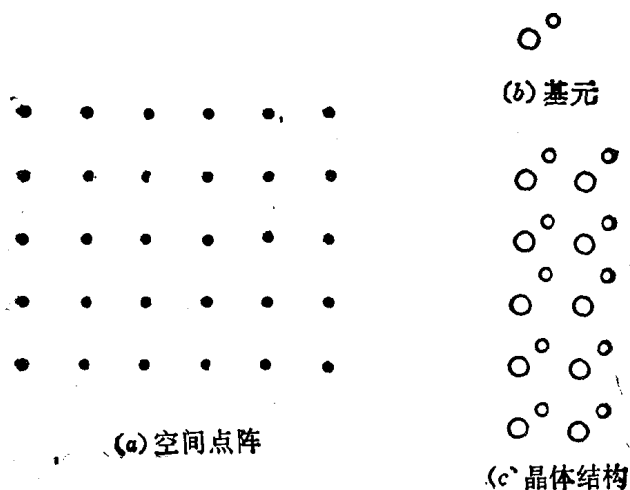


图 1.1

那么,在空间中,这种几何上的点规则地周期地无限分布的  
 总体称为空间点阵,这些几何点称为空间点阵的阵点,因此空间点  
 阵是组成晶体的基元在空间分布的几何表示.组成晶体的基元形  
 成空间点阵是晶体最基本的特征.晶体的结构是由组成晶体的基  
 元加上空间点阵来决定的.如图 1.1 所示,(a)为空间点阵,(b)为  
 由两个原子组成的基元,(c)为将基元(b)安置在点阵(a)上形成的  
 晶体结构.当然,我们也可以由晶体结构(c)识别其基元为(b)并  
 引出空间点阵(a)来.本章主要讨论与晶体结构有关的问题,因为  
 它是研究晶体的宏观性质和微观物理过程的基础.

上面谈到的空间点阵是由几何点规则地周期地排列而成的无  
 限点阵,可看成由几何点沿空间三个不共面的方向各按一定距离  
 无限重复地平移构成,每个方向上一一定的平移距离称为点阵在该  
 方向上的周期,在一定方向上有一定的周期,不同方向上的周期的  
 大小一般不相同,于是可选用三个不共面的方向上的最小周期作  
 为这三个不共面方向上的天然长度单位.并选取任一阵点作为原  
 点.由此原点引出这三个方向上的天然长度单位以构成三个初基  
 平移矢量  $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$  形成一个坐标  
 系统,这样一个坐标系便可用来  
 描述整个空间点阵.这空间点阵的  
 所有阵点的位矢可用矢量  $\mathbf{R}_n$  来描  
 述.

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (1.1)$$

其中  $n_1$ 、 $n_2$ 、 $n_3$  可取所有整数,  $\mathbf{a}_1$ 、  
 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$  通常称为基矢.我们把所有阵  
 点可用位矢(1.1)来描述的点阵称

为布喇菲点阵,这是描述晶体结构的最重要概念.图 1.2 给出的是  
 一个简立方的三维布喇菲点阵,点阵中任一阵点的位矢均可由式

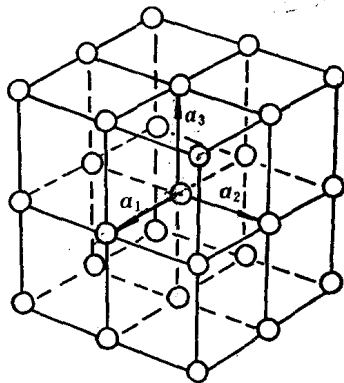


图 1.2 简立方点阵

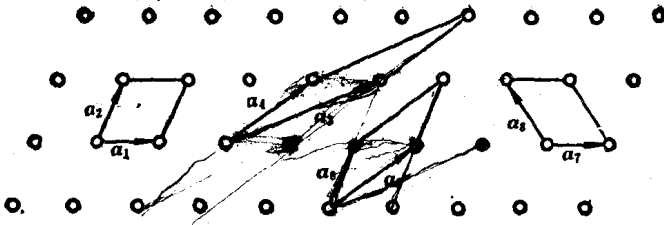


图 1.3 同一平面点阵可能选取的几组基矢

(1.1)形式的矢量来描述。图 1.3 是一个一般的二维布喇菲点阵，其基矢为  $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 。点阵中的任一阵点的位矢可由矢量  $\mathbf{R}_n$  给出。

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 \quad (1.2)$$

由这两个例子可以看出，布喇菲点阵最基本的特征是：若把整个空间点阵平移由式(1.1)所表达的矢量，平移的结果将与原来的点阵重合，这种特征称为平移对称性。可以看出布喇菲点阵中所有阵点都是等价的，每一个阵点的周围情况都相同。这包括任一阵点的周围阵点的排布及取向将完全相同。应当指出不是所有点阵都是布喇菲点阵，如图 1.4 所示的点阵就不是布喇菲点阵，可以看出，点  $P$  与点  $Q$  是等价的，而点  $R$  则不能由点  $P$  或点  $Q$  平移而得，还需要转动  $180^\circ$  才行。还应指出的是布喇菲点阵的基矢  $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$  的选择有一定的任意性，这可从图 1.3 看出，这个二维布喇菲

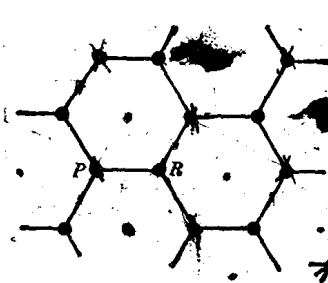


图 1.4 平面正六角形各顶点不构成一个布喇菲点阵

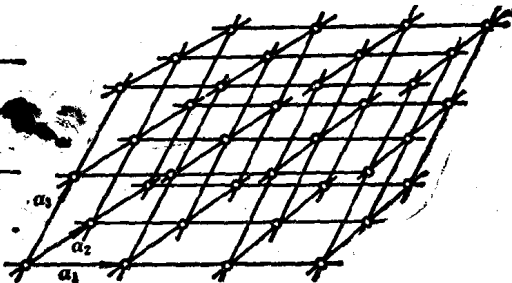


图 1.5 晶格

点阵的基矢可以选择  $a_1$  与  $a_2$ , 也可以选择  $a_3$  与  $a_4$ , 或者选择  $a_5$  与  $a_6$ ;  $a_7$  与  $a_8$ .

通过点阵中的阵点, 想象地连许多平行直线族或平行晶面族. 如图 1.5 所示. 形成一个网格, 称为晶格. 现在取一个阵点为顶点, 作一边长等于基矢大小的平行六面体, 以这平行六面体作为重复单元, 整个晶格可看成这种重复单元无缝隙地重复排列而成. 这种重复单元称为晶格的原胞. 这种原胞反映了晶格的周期性, 一个平行六面体有八个顶点, 每个顶点上的一个阵点与八个原胞相联系, 因此平均来说每一个原胞中分到一个阵点. 由于基矢的选择可以有不同的方式, 因此原胞的形状可以不同, 但它们的体积是相等的, 都是体积最小的重复单元, 如图 1.3 所示, 在固体物理学中经常使用反映晶格平移对称性且体积最小的同时尽可能对称的原胞, 通常称为初基原胞. 使用晶格的术语后, 通常把阵点又称为格点, 描述阵点位置的位矢式(1.1)称为格矢. 在以后的叙述中, 我们将以习惯的方式来使用这些术语.

在结晶学中, 为了使原胞能反映晶体的宏观(即外形)对称性, 所选取的原胞不一定是体积最小且阵点都在顶角上的初基原胞, 而是选择阵点不仅可在顶角上, 而且可以在底心、面心、体心的非初基原胞, 亦称惯用原胞(在结晶学上惯用). 这种原胞平均分到不止一个阵点, 每一阵点安置一个晶体的基元, 因此这种惯用原胞中包括不止一个基元, 结晶学上惯用原胞的三个基矢常用  $a$ 、 $b$ 、 $c$  表示, 则任一阵点的位矢可表为:

$$R_n = ma + nb + lc \quad (1.3)$$

其中  $m, n, l$  为有理数. 图 1.6 所示的是立方晶系中简立方, 体心立方三种结晶学原胞. 立方晶系的三个基矢长度相等  $|a| = |b| = |c|$ , 并且相互垂直:  $a \perp b$ ,  $b \perp c$ ,  $c \perp a$ . 它们的初基上惯用原胞的基矢表达如下:

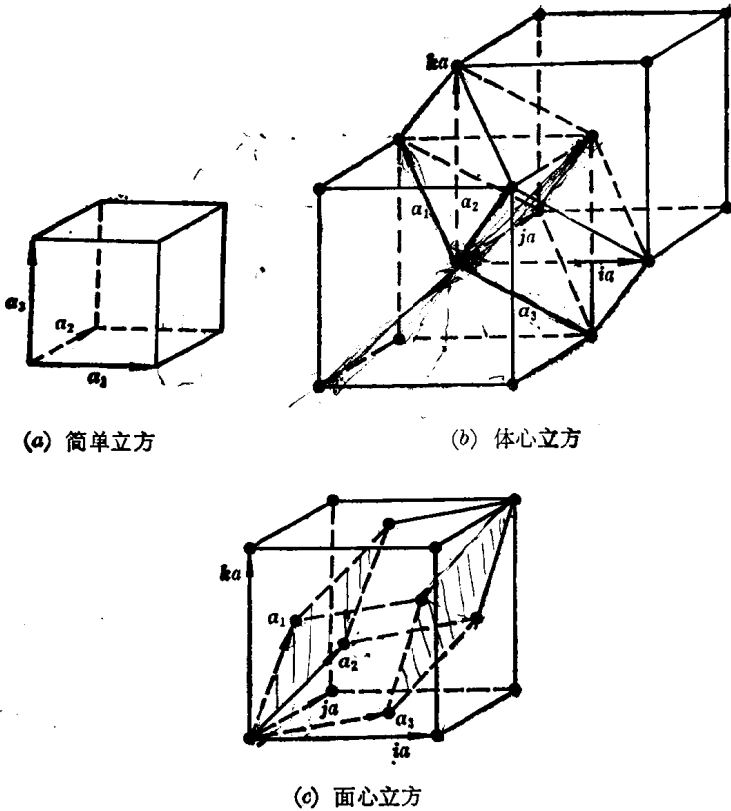


图 1.6 固体物理学中原胞选取示例图

对于简单立方晶格, 初基原胞的基矢为:

$$\mathbf{a}_1 = i\mathbf{a}, \mathbf{a}_2 = j\mathbf{a}, \mathbf{a}_3 = k\mathbf{a}$$

惯用原胞与初基原胞一致, 都含一个基元.

对于体心立方晶格, 惯用原胞的基矢可表示为:

$$\mathbf{a} = i\mathbf{a} \quad \mathbf{b} = j\mathbf{a}$$

$$\mathbf{c} = k\mathbf{a}$$

(1.5)

而初基原胞的基矢则为:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{\mathbf{a}}{2} (-i + j + k)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2}(\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}) \\ \mathbf{a}_3 &= \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (1.6)$$

惯用原胞的体积为  $a^3$ 。包含两个阵点即两个基元，而初基原胞的体积为

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = \frac{1}{2} a^3$$

其中包含一个基元。

对于面心立方晶格，其惯用原胞的基矢仍由(1.5)式表示，而初基原胞的基矢则为

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2}(\mathbf{j} + \mathbf{k}) \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2}(\mathbf{k} + \mathbf{i}) \\ \mathbf{a}_3 &= \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j}) \end{aligned} \quad (1.7)$$

惯用原胞的体积为  $a^3$ 。包含四个阵点即四个基元，而初基原胞的体积为

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = \frac{1}{4} a^3$$

其中包含一个基元。

如果基元是一个原子，则布喇菲点阵的每个阵点安置一个原子，这时阵点形成的网格与原子形成的网格是一回事，这样的晶格称为简单晶格。在简单晶格中，在这一阵点上原子与另一阵点上的原子，它们的性质及在晶格中的地位将没有任何差别，即所有原子都是等价的。

如果基元是由两个或两个以上的原子构成的，阵点形成的网格与原子形成的网格不相重合，基元中有几个原子就表明晶格由几个原子构成，每一种等价原子形成的网格与阵点形成的网



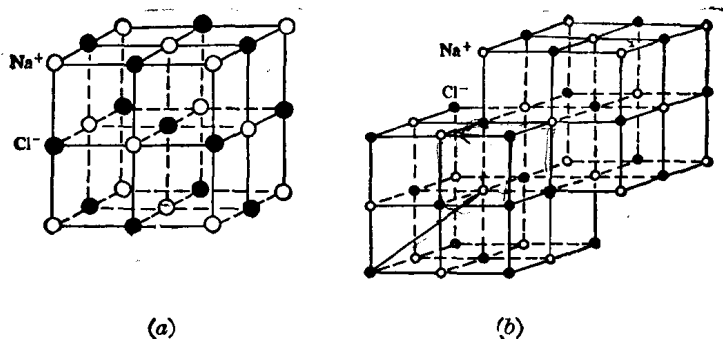


图 1.7 氯化钠结构

格有相同的几何结构,与一种简单晶格相当.整个晶格可看成各个等价原子形成的简单晶格相互位移套构而成的,故称为复式晶格.现在举几个常见的重要晶格为例,来说明上述有关晶格的概念.

(a) 氯化钠结构:氯化钠结构的一个基元是由两个离子组成.一个正离子  $\text{Na}^+$ ,一个负离子  $\text{Cl}^-$ ,而几何结构是一个面心立方结构,见图 1.7(a)所有正离子  $\text{Na}^+$  形成一个面心立方结构的简单晶格,所有负离子  $\text{Cl}^-$  形成相同面心立方结构的简单晶格,这两个简单晶格沿惯用原胞的体对角线位移体对角线一半的距离.见图 1.7(b).每个结晶学惯用原胞包含 4 个基元,可以以钠为顶点(以氯为顶点也是一样)作面心立方结构的初基原胞,可以看出其中包含一个氯离子与一个钠离子,即包含一个基元.通常把一个原子的最近邻原子数目称为配位数,可以看出氯化钠结构中每一个离子有六个异类离子作为最近邻,故其配位数为 6.通常把惯用原胞的边长称为点阵常数.经测定,常见的氯化钠结构的点阵常数,见表 1.1.

(b) 氯化铯结构:氯化铯结构的布喇菲点阵是简立方结构.如图 1.8(a)所示,基元中包含一个氯离子和一个铯离子,它们分别形成简立方结构的简单晶格,沿立方体的体对角线位移  $1/2$  体对