



中国科学技术大学

UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY OF CHINA

固体物理

授课人：何力新

中国科学技术大学量子信息重点实验室



主要教科书:

《固体物理》黄昆, 高等教育出版社

推荐参考书:

《Introduction to Solid State Physics》by Kittel, 7th Edition



第一课：绪论

固体物理是一门研究物质的科学，是量子力学在20世纪最伟大的应用之一，是目前物理科学的最大分支

应用：材料科学

重要的功能材料

半导体材料

磁性材料

电极化材料（铁电，压电，介电…）

超导材料



微电子器件，光电器件，探测器件，等



基础科学：新奇的物理现象、新的物质状态

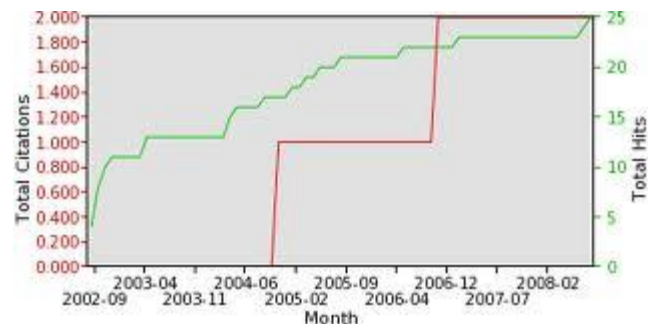
超导



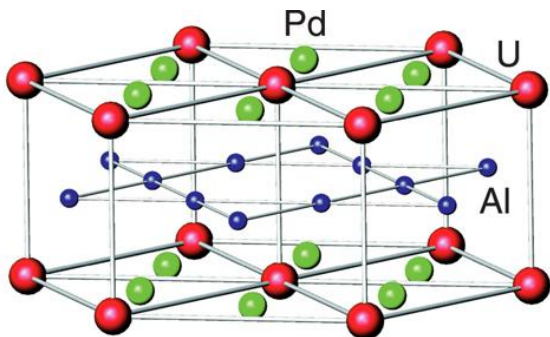
超固



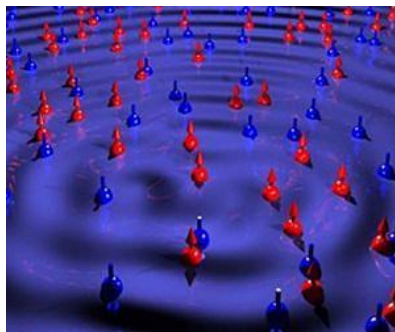
量子Hall效应



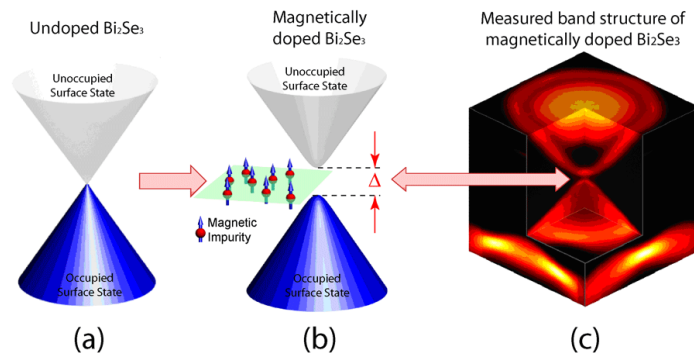
重费米子



自旋液体



拓扑绝缘体





研究手段

实验

X-ray, 中子散射, 光谱, 输运, STM, AFM
...

模型理论

一般性的规律

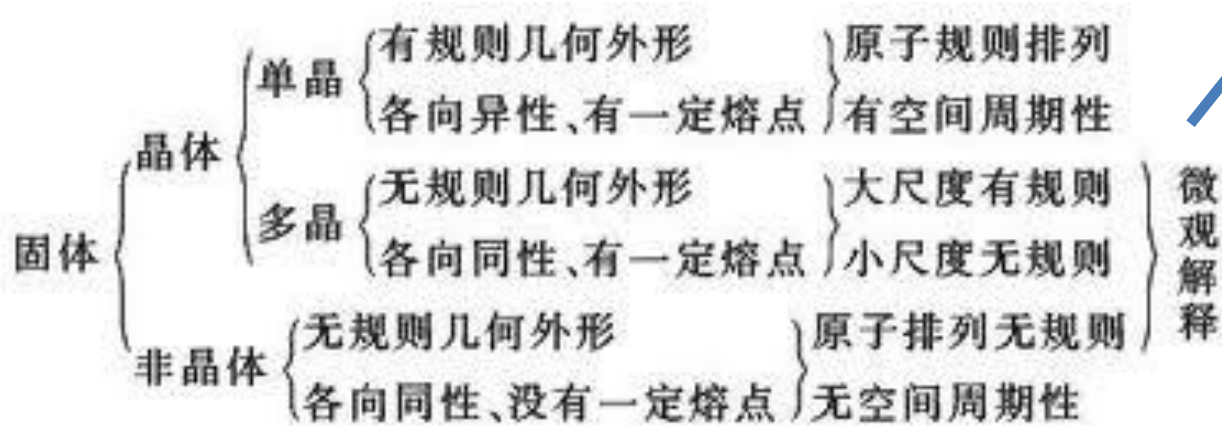
第一性原理计算

密度范函理论：精确
可与实验对比的结果



第一课：绪论

什么是固体？！



凝聚态物理

P. W. Anderson



晶体：具有周期性排列的原子结构，有长程序，具有与非晶体不同的物理特性



晶体 { 单晶体：水晶、岩盐、金刚石
多晶体：金属、陶瓷 长程有序

非晶体：橡胶，塑料，松香，石蜡，无定形态

长程无序，短程有序（类似液体）



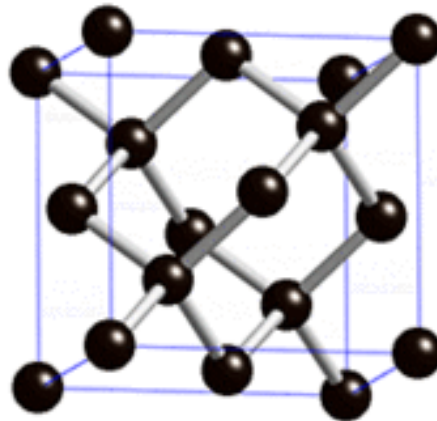
1.1 晶格

固体的物理性质与晶格的排列密切相关：

例子：C，金刚石，石墨，石墨烯，等



金刚石



绝缘体，高硬度



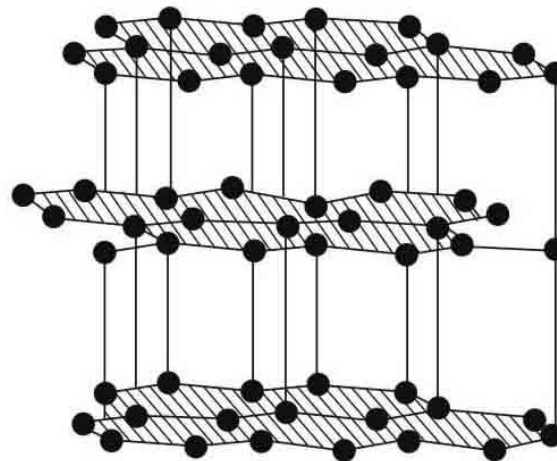
1.1 晶格

固体的物理性质与晶格的排列密切相关：

例子：C，金刚石，石墨，石墨烯，等



石墨



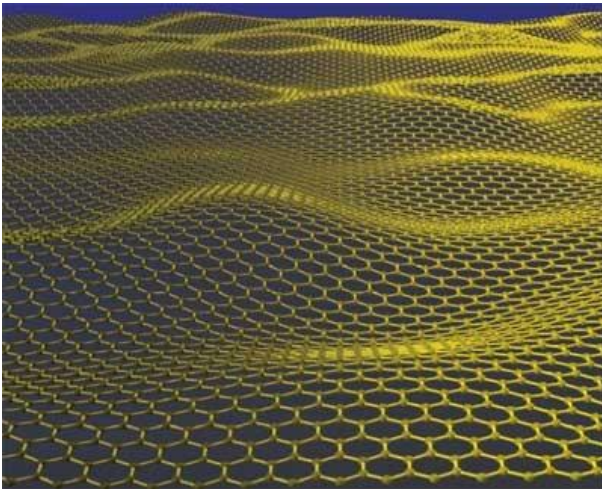
导体，很软



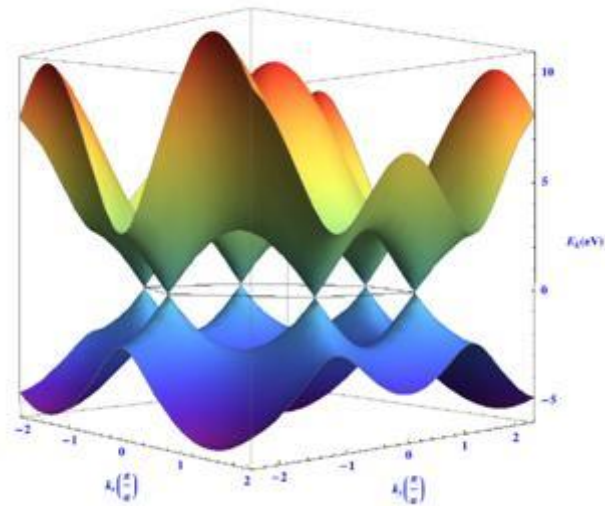
1.1 晶格

固体的物理性质与晶格的排列密切相关：

例子：C，金刚石，石墨，石墨烯，等



石墨烯

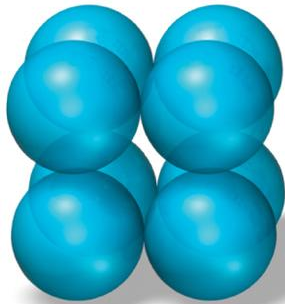
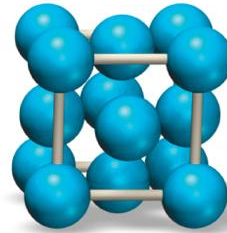
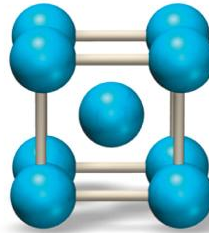
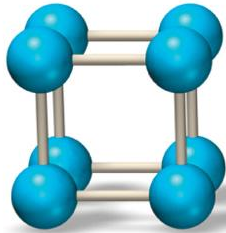


二维材料，非凡的电学性质



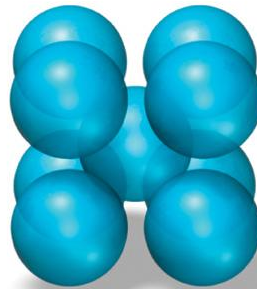
原子排列方式

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



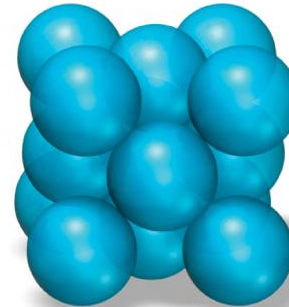
Primitive cubic

简单立方



Body-centered cubic

体心立方

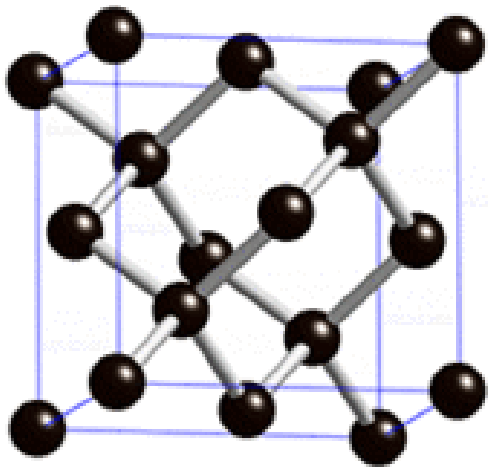


Face-centered cubic

面心立方

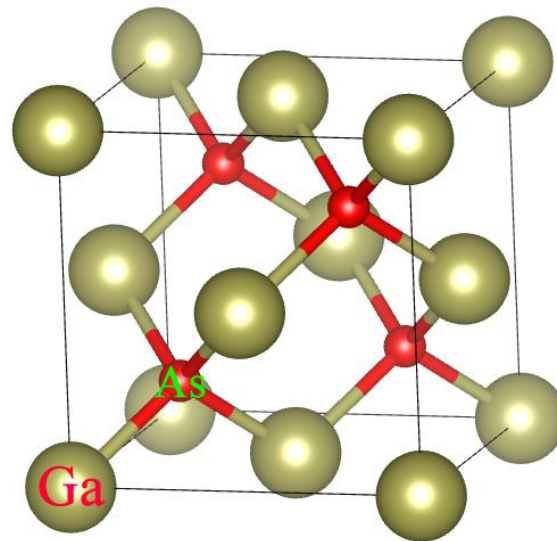


闪锌矿结构



金刚石结构

C, Si, Ge 等IV族元素

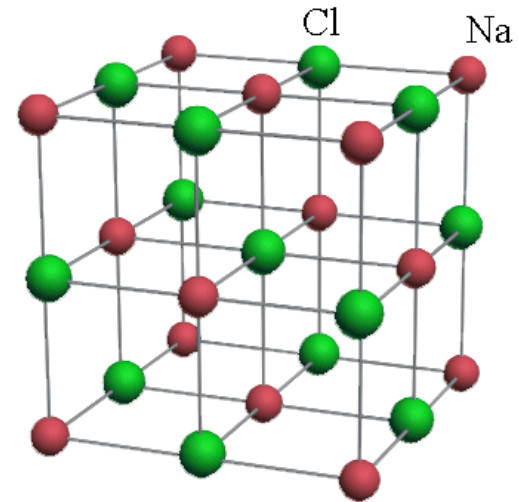
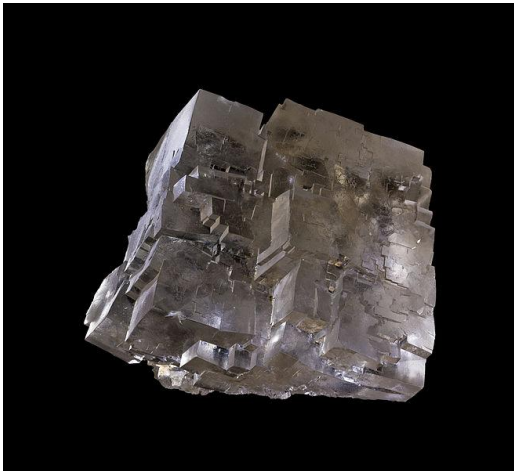


闪锌矿结构

InAs, GaAs, InP 等III-V族
元素化合物

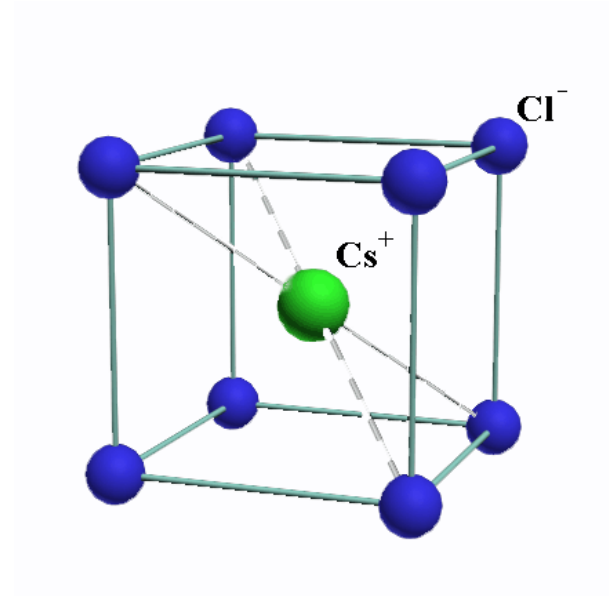
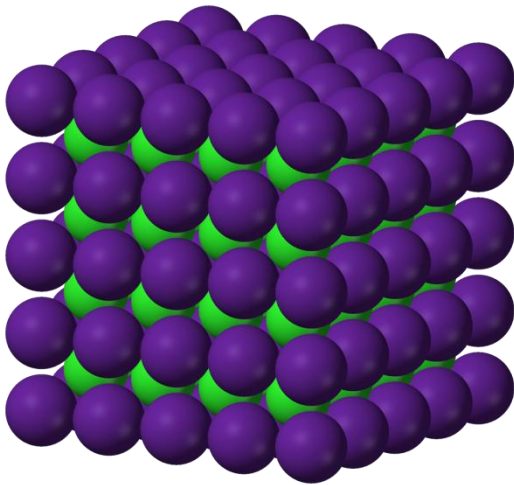


NaCl 结构





CsCl 结构





钙钛矿结构

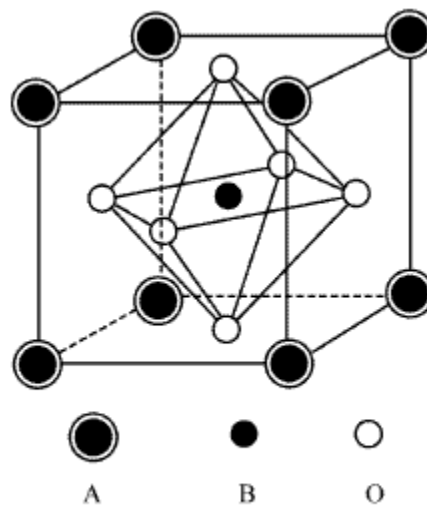
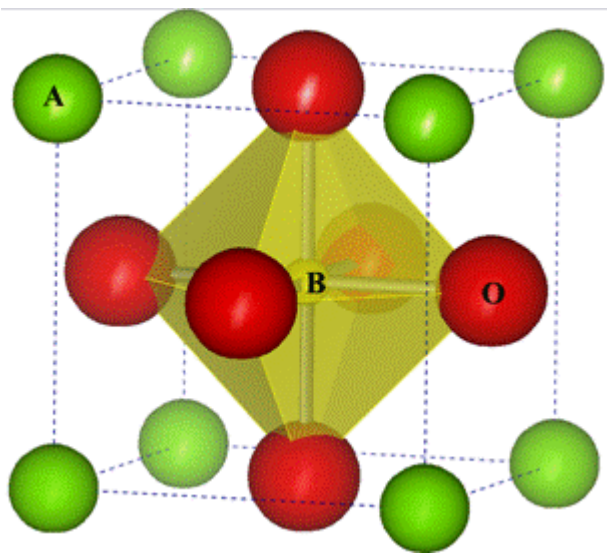


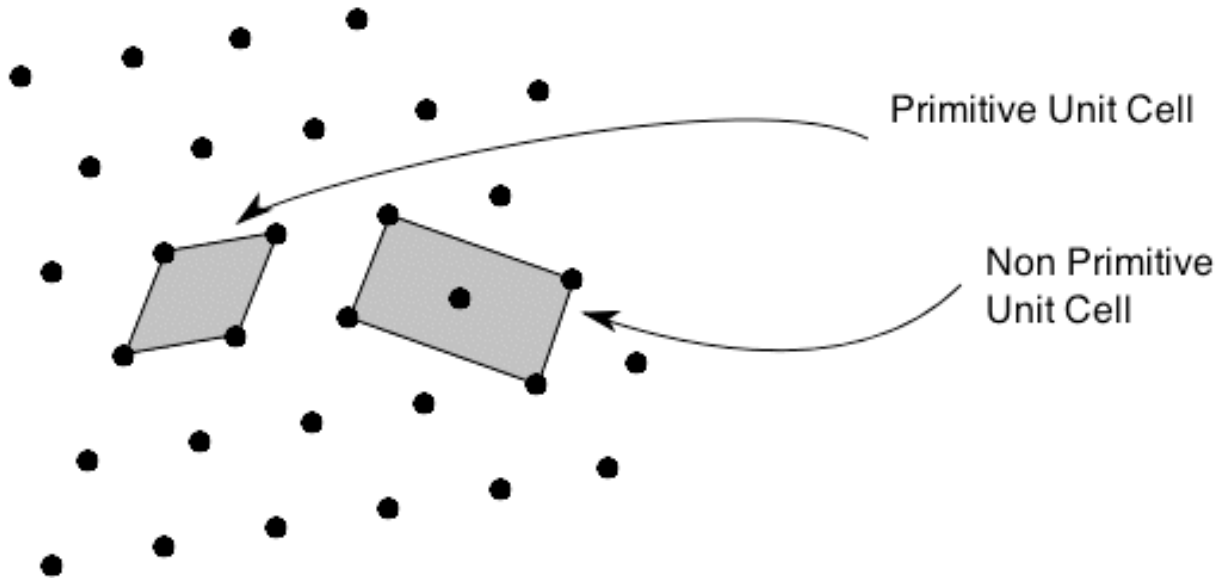
图 1 理想的钙钛矿结构 ABO_3 原始晶胞

重要的功能材料：电极化材料（ $ATiO_3$ ），磁性材料（ $AMnO_3$ ）



1.2 晶格的周期性

- 原胞 (primitive cell): 晶格最小的周期性单元
- 基矢: 原胞的边矢量
- 基矢的大小又称为晶格常数





- 简单晶格：每个原胞只有一个原子
- 复式晶格：每个原胞含两个或更多的原子
- 基元：一个原胞中所有的原子

用位于基元平衡位置的几何点替代每一个基元，结果得到一个与晶体几何特征相同、但无任何物理实质的几何图形。处于基元平衡位置的几何点被称为格点(Lattice site)。格点在空间周期性排列的总体连成的网格称布拉菲格子，也称 晶格。



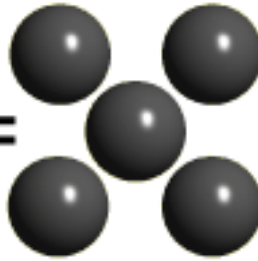
Bravais
lattice



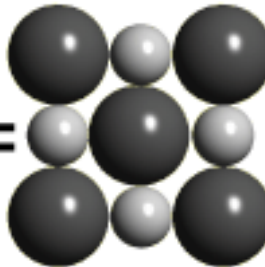
basis



crystal



简单晶格



复式晶格

晶体=布拉伐格子+基元



晶体中原子位置的表示

$$\mathbf{r}_\alpha + l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3$$

l_1, l_2, l_3 是整数

$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 是晶格矢量

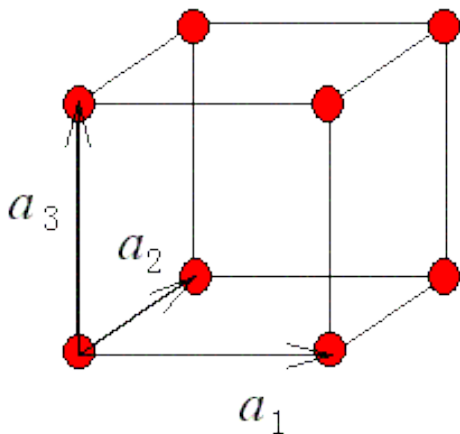
\mathbf{r}_α 是第 α 个原子在原胞中的位置

原胞的体积: $\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$

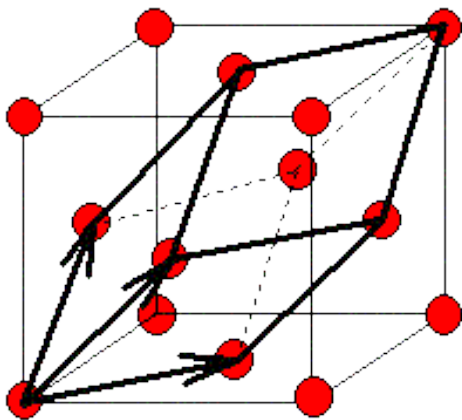
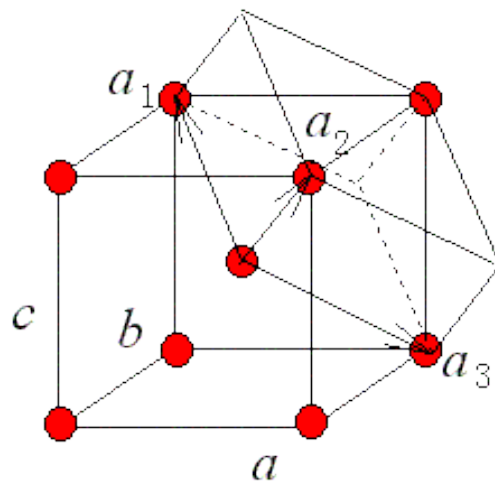


原胞 vs. 单胞

立方



体心立方



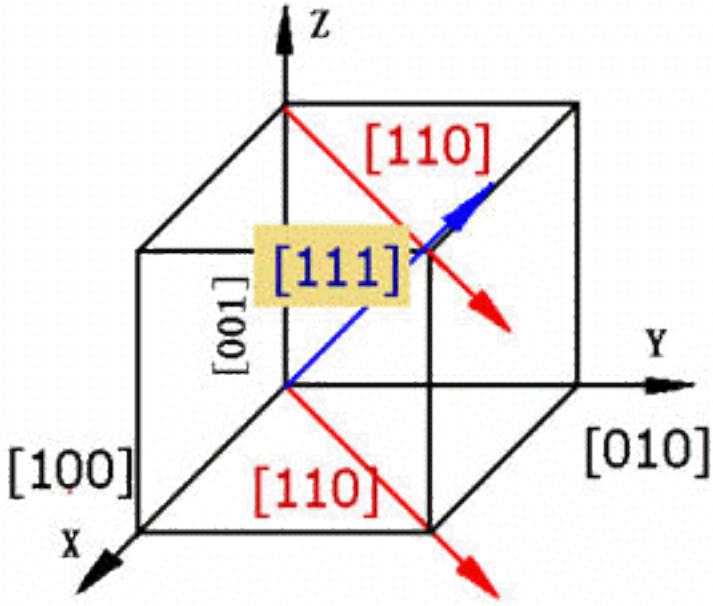
面心立方

原胞：最小的晶格单元

单胞：常用的晶胞，反映较高的对称性



1.3 晶向与晶面

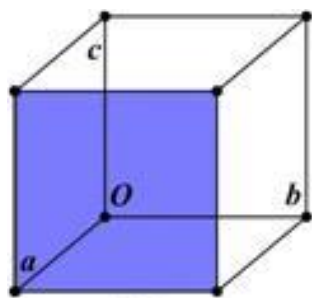


晶向指数的标定示意

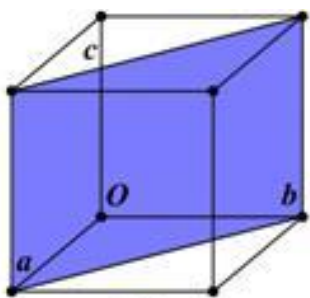
如果一个原子沿晶向到最近等价原子的位移矢量为：

$$l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3$$

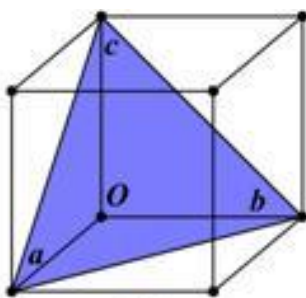
晶向： $[l_1, l_2, l_3]$



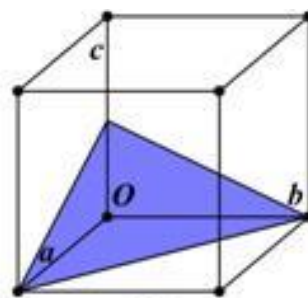
(100)



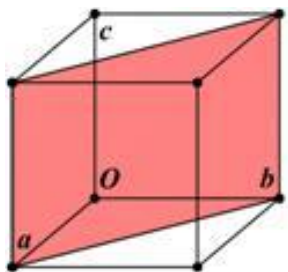
(110)



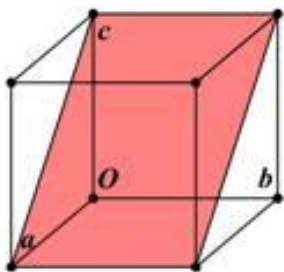
(111)



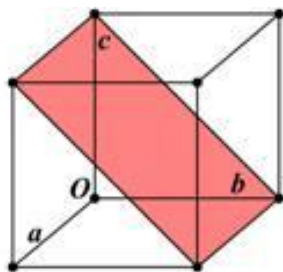
(112)



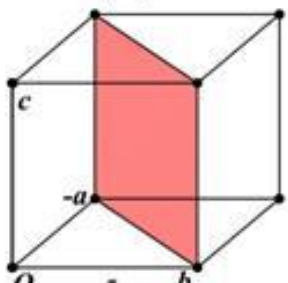
(110)



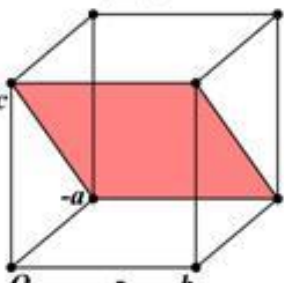
(101)



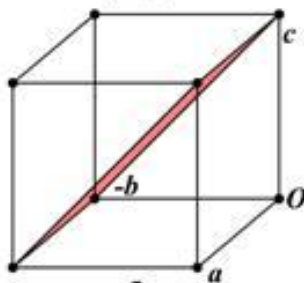
(011)



(110)



(101)



(011)

晶面：布拉伐格子
中平行等距的平面

晶面指数（米勒指数）：
 (h, k, l)

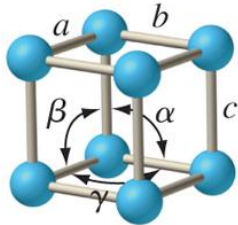
1. 确定该晶面在晶胞坐标轴上的截距
2. 取这些值的倒数（ ∞ 的倒数为0）
3. 将这些倒数化作最简整数比



1.4 7大晶系

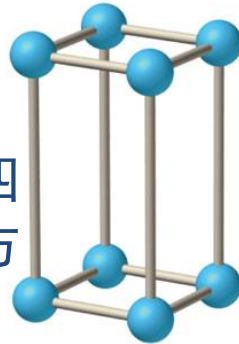
Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

立方



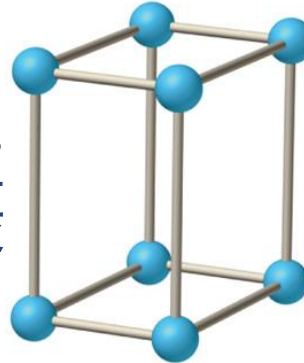
Simple cubic
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

四方



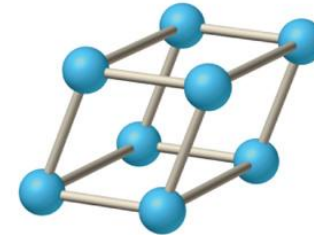
Tetragonal
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

正交



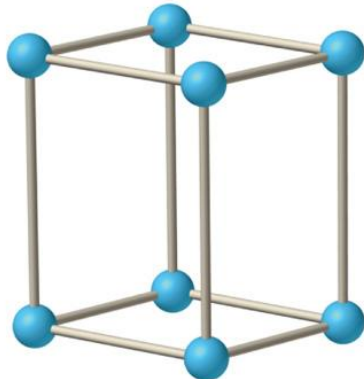
Orthorhombic
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

三角



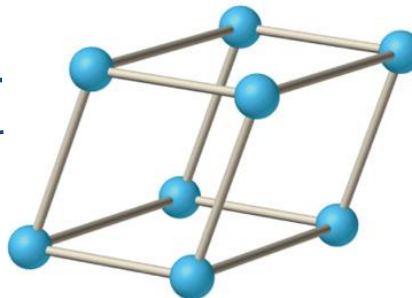
Rhombohedral
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

单斜



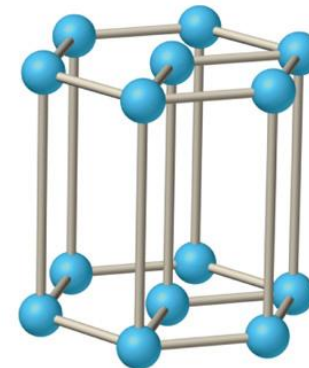
Monoclinic
 $a \neq b \neq c$
 $\gamma \neq \alpha = \beta = 90^\circ$

三斜



Triclinic
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

六角

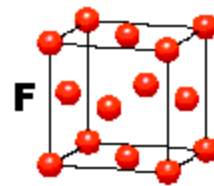
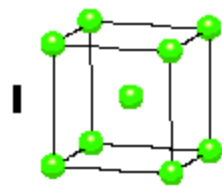
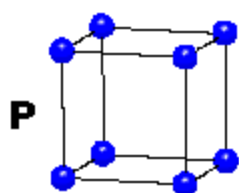


Hexagonal
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

立方

CUBIC

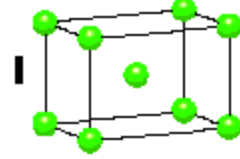
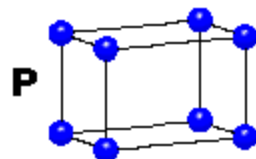
$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



四方

TETRAGONAL

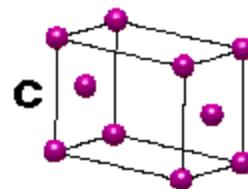
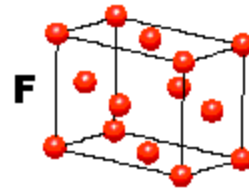
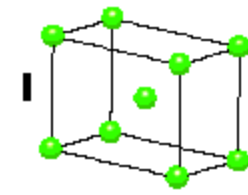
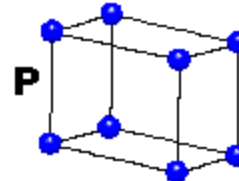
$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



正交

ORTHORHOMBIC

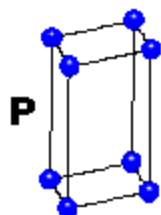
$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



六角

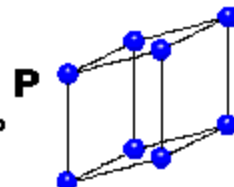
HEXAGONAL

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$
$$\gamma = 120^\circ$$



TRIGONAL

$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

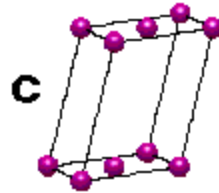
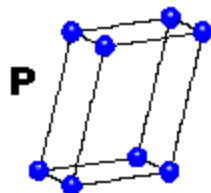


三角

单斜

MONOCLINIC

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$
$$\beta \neq 120^\circ$$



三斜

TRICLINIC

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



4 Types of Unit Cell

P = Primitive

I = Body-Centred

F = Face-Centred

C = Side-Centred

+

7 Crystal Classes

→ **14 Bravais Lattices**