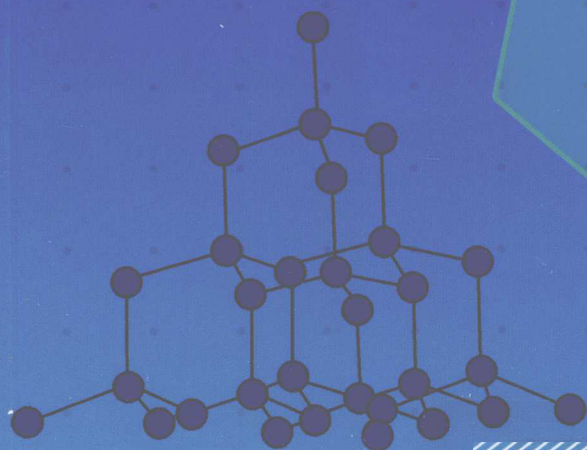


晶体结构与缺陷

魏光普 姜传海 甄伟 金灯仁 编著



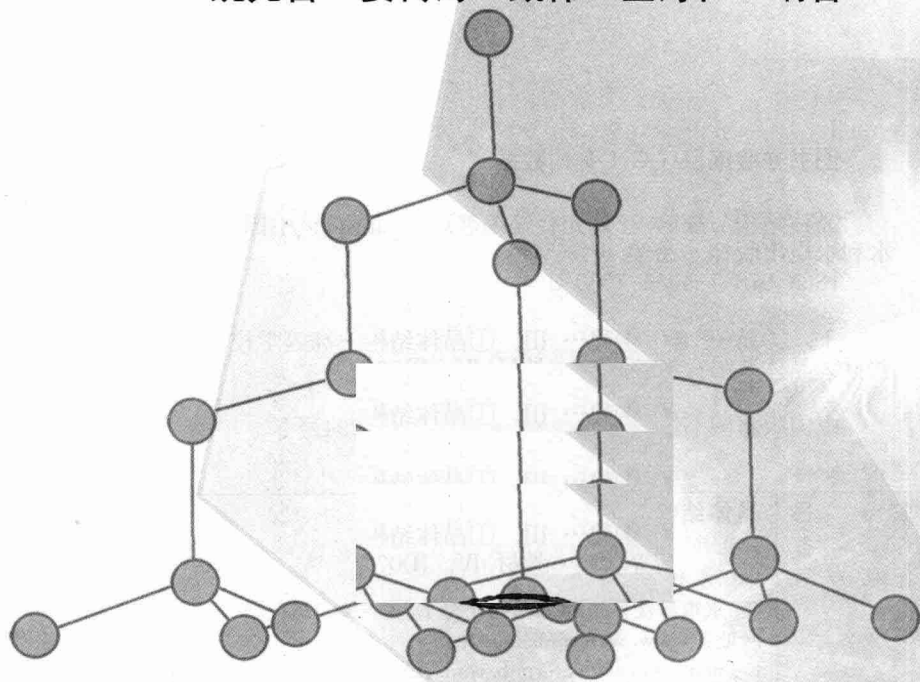
中国水利水电出版社
www.waterpub.com.cn

上海市高等学校本科高地建设基金资助

目录

晶体结构与缺陷

魏光普 姜传海 甄伟 金灯仁 编著



中国水利水电出版社
www.waterpub.com.cn

内 容 提 要

本书主要根据作者多年使用的教材改编而成。共分 12 章, 其中主要讲述了晶体的空间格子构造、对称特性及晶类、晶系的划分方法、晶体的一些典型结构、与晶向晶面相关的知识、晶体的投影方法、标准投影、倒点阵的定义及应用; 介绍了单质元素和离子晶体的一些典型结构和规律性因素、晶体缺陷以及它们的形成原因和观测方法、晶体取向测定的方法及应用、人工晶体的一些生长方法等; 本书可以作为材料科学与工程、物理学、化学等教育部一级学科的相关专业的教材, 也可供从事半导体、金属、陶瓷、晶体材料与器件等方面工作的科技工作者参考。

图书在版编目 (C I P) 数据

晶体结构与缺陷 / 魏光普等编著. — 北京: 中国水利水电出版社, 2010. 5
ISBN 978-7-5084-7630-8

I. ①晶… II. ①魏… III. ①晶体结构—高等学校—教材②晶体缺陷—高等学校—教材 IV. ①07

中国版本图书馆CIP数据核字 (2010) 第117294号

书 名	晶体结构与缺陷
作 者	魏光普 姜传海 甄伟 金灯仁 编著
出版发行	中国水利水电出版社 (北京市海淀区玉渊潭南路 1 号 D 座 100038) 网址: www. waterpub. com. cn E-mail: sales@waterpub. com. cn 电话: (010) 68367658 (营销中心)
经 售	北京科水图书销售中心 (零售) 电话: (010) 88383994、63202643 全国各地新华书店和相关出版物销售网点
排 版	中国水利水电出版社微机排版中心
印 刷	北京市兴怀印刷厂
规 格	184mm×260mm 16 开本 13.25 印张 314 千字
版 次	2010 年 5 月第 1 版 2010 年 5 月第 1 次印刷
印 数	0001—3000 册
定 价	28.00 元

凡购买我社图书, 如有缺页、倒页、脱页的, 本社营销中心负责调换

版权所有·侵权必究

作者魏光普、姜传海简历

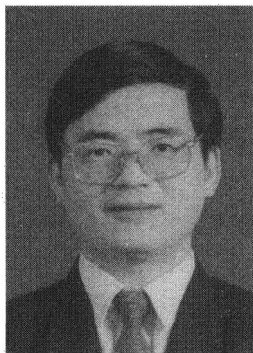


魏光普，男，汉族，1939 年生于浙江诸暨。上海大学材料科学与工程学院教授，上海市物理学会副理事长，上海新能源行业协会学术专家委员会主任，上海市太阳能学会光电专业委员会主任，“国际光伏科学与工程会议”国际委员会委员，“国际薄膜物理与应用会议”组织委员会委员，上海市欧美同学会理事、欧美同学会上海大学分会副会长。国务院政府特殊津贴获得者。

1956 年从浙江金华第二中学考入南京大学，1961 年从南京大学物理系毕业后，在上海科学技术大学（现上海大学）材料系从事 X 射线晶体学及材料科学方面的教学与科研工作。1984 年至 1986 年，受国家教委（现教育部）派遣，赴日本大阪大学进行访问研究，从事高效率非晶硅太阳能电池及光敏器件的研究工作，发明了非晶硅 X 射线探测器，获日本专利二项，以后获工学博士学位。1992 年晋升为教授，1995 年任日本神户大学客员教授。近十余年来，在国内外重要刊物上发表论文 70 余篇，获得专利十余项，并获得委、市、部级奖励四项：①“非晶硅器件的 X 射线照射效应及其应用”获得 1992 年国家教委科技进步奖；②“氧化锆增韧陶瓷（连续铸造）分离环”获得 1992 年上海市科技进步奖；③“无机非金属材料测试方法”获得 1997 年的国家建材部科技进步奖 [著作（合作）奖]；④“太阳能电池光电参数测试仪”获得 1999 年上海市科技进步奖。

有著作四部：

- 1)《半导体测量与仪器》（译著，上海科技出版社，1982 年）；
- 2)《无机非金属材料测试方法》（武汉工业大学出版社，1992 年）；
- 3)《点击中国——历史上的今天》（广西人民出版社，2006 年）；
- 4)《晶体结构与缺陷》（中国水利水电出版社，2010 年）。



姜传海，男，1963 年 9 月生，汉族，上海交通大学材料科学与工程学院，研究员，博士生导师。

1983 年 7 月毕业于兰州大学物理系，2000 年 1 月获哈尔滨工业大学材料科学与工程博士学位，2001 年 12 月于上海交通大学材料科学与工程博士后出站，并留校工作至今，2007 年法国国立高等工程技术学院（ENSAM）微结构实验室高级访问学者。多年从事晶体 X 射线衍射、残余应力分析与组织结构表征等领域的教学与科研工作。

开设《材料组织结构表征》、《X 射线衍射原理与技术》、《无损检测技术》、《材料近代物理测试方法》、《不完整晶体结构及其分析方法》、《同步辐射技术及其应用》等课程。主持参与国家及省部级科研项目 20 余项。发表学术论文 150 余篇，大多被 SCI 及 EI 等检索机构收录。编著《材料的射线衍射和散射分析》，高等教育出版社（2009 年），为材料学科的全國研究生推荐教材。

现担任中国残余应力学术委员会副主任兼秘书长、中国机械工程学会喷丸技术专业委员会常务副主任，中国机械工程学会失效分析专家、中国机械工程学会理化检验分会委员、中国物理学会 X 射线衍射专业委员、中国晶体学会理事、中国晶体学会粉末衍射专业委员、中国仪器仪表学会分析仪器分会高速分析专业委员、上海市物理学会 X 射线与同步辐射专业委员会主任等。

前 言

材料科学是现代物质文明的基础，而“晶体结构与缺陷”方面的知识是材料科学的基础，特别是在电子与信息技术高度发达的今天，需要多种多样物理性能的人工晶体，而这些晶体的物理化学特性都是与其内部结构及各种缺陷有关的。所以，了解“晶体结构与缺陷”的知识是研究高性能材料、探索材料物理化学性能的关键。

本书主要根据作者在上海大学和上海交通大学讲课时多年使用的教材及研究成果编写而成。全书共分12章，其中第1~2章主要讲述晶体的空间格子构造、对称特性及晶类、晶系的划分方法；第3~4章讲述一些典型的晶体结构以及与晶向、晶面的有关知识；第5章讲述晶体的投影方法和标准投影；第6章介绍倒点阵的定义及应用；第7~8章介绍单质元素和离子晶体的一些典型结构，同时阐明决定晶体结构的规律性因素；第9章介绍了主要的晶体缺陷，其中包括点缺陷（空位、间隙原子、杂质原子）、线缺陷（棱位错、螺位错、混合位错）和面缺陷（层错、双晶面、小角晶界）等，分析研究了晶体缺陷的形成原因及它们对晶体性能的影响，并介绍了一些晶体缺陷的观测方法；第10章介绍了晶体取向测定的方法及应用，其中包括X射线衍射定向法，激光光学反射图像定向法及腐蚀坑方法；第11章介绍了人工晶体的一些生长方法，主要包括直拉法（CZ法）、悬浮区熔法（FZ法）、泡生法以及分子束外延（MBE）等外延生长技术；第12章介绍了一些晶体材料的测试方法，主要是与成分分析、物相分析、形貌分析、结构分析、结晶度测定等相关的方法与仪器，包括XRD、LEED、RHEED、SEM、TEM、EPMA、SIMS、UPS、XPS、AES等测试方法和仪器。

书中列出了很多晶体的结构资料及应用信息，更多的晶体结构信息读者可以在国际互联网的专业网站中查找。例如，可以在晶星网 www.crystalstar.com 等网址中查找。

本书可以作为材料科学与工程、物理学、化学等教育部一级学科的相关专业的教材，也可供半导体、金属、陶瓷、晶体材料与器件等方面的科技工作者参考。

本书第1~9章和11~12章主要由魏光普、姜传海、金灯仁编写，第10

章主要由甄伟编写，全书由魏光普负责统一定稿。

在本书的原稿教材的编写和试用过程中，高祥洪、李中和、曹连初、史伟民、杨传铮、陈忠传、徐润、秦娟等都做了很多工作。在编写出版时，王有林、龚利贤提供了一些照片资料，研究生李爱民、伍丽、陈盛、陈洁利、余俊阳、黄璐和马磊也协助做了不少工作。

自然界存在的矿物晶体与人工制造的晶体材料总共有数万种之多，晶体结构与缺陷方面的研究领域很广，作者的知识范围与水平有限，书中的内容若有错误和不妥之处，恳请读者批评指正。

本书的出版得到上海市高等学校本科高地建设基金的资助。

编著者

2010.3.10

目 录

前言

第 1 章 晶体的内部构造	1
1.1 晶体和非晶体	1
1.2 晶体的格子构造	4
第 2 章 晶体的对称性及晶体的分类	8
2.1 晶体的对称性	8
2.2 对称型、晶类与晶系	16
2.3 晶胞的选取与 14 种空间格子	18
第 3 章 几种典型的晶体结构	22
3.1 单质(元素)的典型结构	22
3.2 化合物的典型结构	25
3.3 晶体的键合	27
第 4 章 晶向、晶面及一些有关问题	30
4.1 晶向指数与晶面指数	30
4.2 密排面与密排方向	34
4.3 晶面间距	35
4.4 晶体的解理与解理面	36
4.5 晶面及晶向之间的夹角	38
4.6 双晶与双晶面	40
第 5 章 晶体的投影	42
5.1 球面投影	42
5.2 极射赤面投影	43
5.3 吴氏网及其应用	44
5.4 晶体的标准投影	45
第 6 章 倒点阵	46
6.1 倒点阵(倒格子)	46
6.2 晶面间距和晶面夹角的计算	49
6.3 晶带	51

第 7 章 元素的结构	53
7.1 球的密堆积和金属单质的结构	53
7.2 合金的结构和性质	58
7.3 非金属元素单质的晶体结构	60
7.4 单质晶体结构的过渡	61
7.5 硅、锗半导体单晶	63
第 8 章 离子晶体结构通论	64
8.1 离子半径	64
8.2 配位数与配位多面体	66
8.3 离子晶体的结构规则	68
8.4 同质多像(同素异构体)	70
8.5 离子极化	72
8.6 二元化合物晶体的结构	74
8.7 多元化合物晶体的结构	82
8.8 硅酸盐及其它矿物	98
第 9 章 晶体缺陷	103
9.1 点缺陷	103
9.2 线缺陷	107
9.3 面缺陷	114
9.4 位错的运动	122
9.5 晶体缺陷的观察方法	127
9.6 腐蚀法测量位错密度	130
第 10 章 晶体取向的测定	136
10.1 X 射线衍射定向法	136
10.2 晶体的激光定向	151
10.3 腐蚀坑法测定晶体取向	154
第 11 章 晶体生长方法概论	155
11.1 晶体生长的理论基础	155
11.2 杂质的添加与分凝	158
11.3 晶体生长方法	160
第 12 章 晶体材料的分析测试	173
12.1 成分分析	174
12.2 物相分析	177
12.3 形貌分析(断口分析)	178
12.4 晶体结构分析	180
12.5 晶粒度测定	180
12.6 应力应变测定	181

12.7 结晶度测定.....	181
12.8 缺陷分析.....	181
12.9 痕量分析.....	182
12.10 均匀性测试	182
附录 A 点群和空间群的符号系统	183
附录 B 230 个空间群表	186
附录 C 元素的物理性质	195
附录 D 若干常见化合物的晶体结构	198
练习思考题.....	200
参考文献.....	202

第1章 晶体的内部构造

恩格斯说：“世界的真正的统一性是在于它的物质性。”环顾我们周围的事物，无一不是物质及其运动的表现。可是，统一性并不排除多样性，从另一方面看，物质及其运动的形式又是多种多样的。因而构成自然界千百万种的动、植物，有机物和无机物以及宇宙间各种奇异的自然现象。

物质的存在形态是物质内部质点运动状态的表征，最常见的有气态、液态和固态。在一定条件下，这些状态是可以相互转化的。例如：水在常压下， 100°C 以上就化为气态， $0\sim 100^{\circ}\text{C}$ 时为液态， 0°C 以下转变为固态的冰了。

对固态物质（常称固体）作进一步的分析表明，固体又大致可以分为晶态固体（晶体）与非晶态固体（非晶体）两大类。在一定条件下，它们也是可以相互转化的。

在材料科学领域，不论无机或有机材料，有很大一部分是晶体。理论与实践都证明，晶体的性质和晶体的制备与加工工艺，对于各种材料及器件的性能影响极大。因此，了解晶体的特性与其内部结构的规律性，是很有必要的。本章讲述一些有关晶体的基本概念。

1.1 晶体和非晶体

1.1.1 固体物质内部结构的区别

在日常生活中，稍加注意就会发现，通常见到的固态物质，可以明显地分为不同的两类：有些固体，例如食盐、水晶（石英）、方解石及其他很多矿物，它们往往呈现天然的而不是人为磨削的规则的多面体外形，具有明显的棱角与平面（通常称之为晶棱与晶面），而且当它们破裂时，也是按一定的平面分裂；而另一类固体，如玻璃、石蜡、松香、塑料等，则不具有规则的外形，也不是按一定的平面破裂。这些都是表面的现象，根据近代科学技术，特别是X射线衍射技术的分析，固体确实可以分为两大类，它们在内部结构及物理化学性质等方面都存在着本质的差别，我们称之为晶体与非晶体。

晶体是由质点（原子、离子或分子）在三维空间中按一定规律作格子状的周期性重复排列而构成的。因而我们又称晶体为具有格子构造的固体。在整个晶体中，各类质点都按照一定方式以一定距离很有秩序地排列着，形成所谓“长程有序”结构，如图1.1（a）所示。

晶体在自然界的分布非常广泛：天然的矿物、岩石和泥土等除极少数外几乎全都是晶体，大多数的工业产品如金属、合金、陶瓷等也都是晶体。在半导体材料中，几乎所有的元素和化合物半导体如锗、硅、砷化镓、磷化铟等也都是晶体。

如果一个物体，整体是由一个晶体构成的，则称之为单晶。例如人造的硅单晶、砷化镓单晶、红宝石单晶等；在天然矿物中也有水晶、方解石、金刚石等是以单晶形态存在



的。如果物体是由几个或很多个小晶体杂乱地堆聚而成，则称之为多晶。一般的金属、陶瓷、硅多晶等都是以多晶的形态存在。

非晶固体又称作过冷液体。这是因为其中质点（原子、离子或分子）的排列就像在气体和液体中一样，是无规则的、杂乱无章的，或者只有短距离内的规律性——短程有序，如图 1.1 (b) 所示。日常所见的玻璃、塑料、松香等属于非晶体；在各种工业和工程材料中，也有很大部分是非晶体。

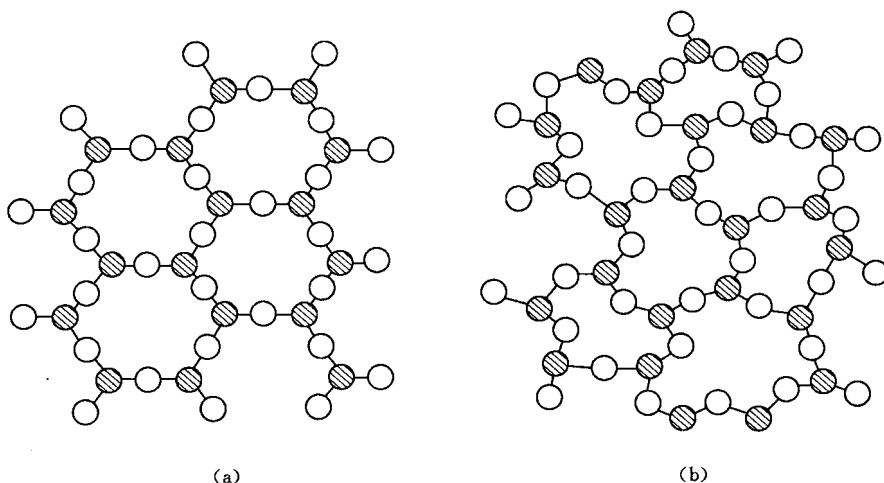


图 1.1 晶体与非晶体

(a) 晶体；(b) 非晶体

除了上述的晶体与非晶体之外，还有内部结构介于晶体与非晶体、晶体与液体之间的物质，例如木材、竹子等纤维构成物就是介于晶体与非晶体之间的物质。在这些纤维物质中，其有机长链状分子的排列总是使其长链相互平行，因而具有一维方向的规律性，但并无三维方向的规律性，这类物质的结构通常叫做纤维结构。内部结构介于晶体与液体之间的物质以液晶作代表。液晶又称液态晶体，近年来在电子、医学、工业及显示技术方面得到很多应用，发展前途极广。液晶是由细而长的有机分子构成的，在一定的温度范围内，它具有像液体那样的流动性，但其内部分子的排列又不像液体那样杂乱无章，而是有一维或二维方向的规律性，与晶体结构有部分相似。正因如此其很多物理性质也像晶体那样，具有各向异性的特点，故称为液态晶体。液晶有好几种，我们仅举向列型液晶的结构为例：在向列型液晶中，分子是长棒状的，分子排列的方向是长轴彼此平行，但不成层，因此是与纤维结构相似的。晶体、液晶（向列型）和液体的分子排列如图 1.2 所示。

1.1.2 晶体的基本性质

晶体与非晶体相比，由于其内部原子排列的规律性，具有很多物理化学性质方面的特点，最主要的有下列几点：

(1) 各向异性。非晶体由于其内部原子的排列是不规则的，因而宏观地看，在不同方

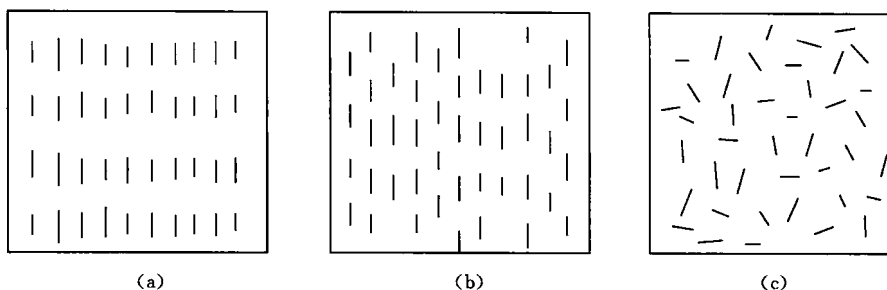


图 1.2 晶体、液晶与液体中分子排列示意图

(a) 晶体; (b) 液晶; (c) 液体

向上原子的排列情况基本上是一样的,反映在物理化学性质上也是各向同性的。晶体由于其内部原子排列的规律性,因而在各个不同的方向上,原子排列的疏密程度和排列方式都有显著不同,反映在物理化学性质上是各向异性的,即在不同的结晶学方向,很多物理化学性质如:生长速度、腐蚀速度、折光率、硬度、载流子的迁移率等都具有不同的数值。

(2) 晶体具有固定的熔点。晶体具有确定的熔化温度,例如拉硅单晶时,多晶硅只有加热到确定的温度—— 1420°C 时才开始熔化,一直至熔化完毕,其温度始终保持不变,当全部多晶硅熔化完毕后,温度才继续上升。这个过程反映在加热曲线上是有一明显的平台,如图 1.3 (a) 所示。而非晶体则没有固定的熔点,例如一般的玻璃在 $500\sim 600^{\circ}\text{C}$ 即开始软化,随着温度升高,软化程度增加,一直到 1500°C 左右才完全熔化为液体,反映在加热曲线上是没平台,如图 1.3 (b) 所示。

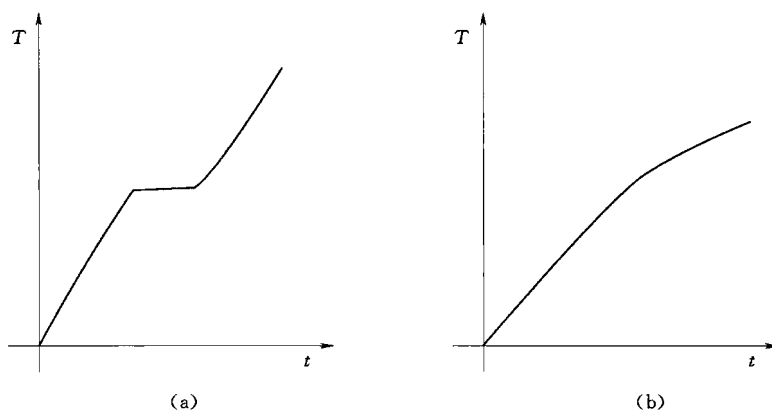


图 1.3 晶体与非晶体的加热曲线

(a) 晶体的加热曲线; (b) 非晶体的加热曲线

为什么晶体具有固定的熔点,而非晶体则没有呢?这是因为晶体中各部分原子排列状况相同,原子间距也相同,因此要破坏晶体的不同部分,使其原子分离而熔化所需要的温度是一样的,即有固定的熔点。而非晶体中各个不同的原子之间没有一定的原子间距,有些原子相距较近,而有些原子相距较远,它们之间的结合力也不同,因此要破坏它们间的



结合使其熔化所需要的温度是不同的，即没有固定的熔点。另外，破坏晶体需要一定的能量，生成晶体则会放出一定的能量。当晶体被加热到熔点时，加入的热量愈多，则晶体熔化愈快，吸收了大量的热量，致使温度保持不变。

不同的晶体，其原子间的结合力大小不同，因此熔点亦不同，表 1.1 列出了一些常见半导体的熔点。

表 1.1 常见半导体的熔点

晶体名称	熔点 (℃)	晶体名称	熔点 (℃)	晶体名称	熔点 (℃)
Ge	958	AlSb	1080	InSb	525
Si	1420	GaP	1467	ZnS	1830
GaAs	1238	GaSb	712	CdS	1750
BN (立方)	3000	InP	1070	CdTe	1098

(3) 对称性。由于晶体的内部原子排列具有规律性，因此在某些方向上原子的排列方式有重复再现的情况，形成了原子排列的对称性。原子排列的对称性反映在宏观的物理化学性质上，就出现其物理化学性质和晶体外形的对称性，这一点我们将在第 2 章中详细讨论。

(4) 晶体常具有规则外形和解理性。自由生长的晶体常常具有规则的、自然的、而不是人为磨削的几何多面体外形，具有明显的棱角与平面，而非晶体则无此特点。晶体的规则外形是其内部原子规则排列的宏观反映，但并不是说任何晶体都具有规则的外形，实际上晶体的外形还受着生长条件（外因）的限制。随着生长条件的不同，晶体可以形成任何的形状。

晶体在其某些方向上原子间的结合力特别弱，因此受外力作用时常沿着这些方向破裂，这叫解理性，例如云母可以撕成很薄很大的薄片、具有极其明显的解理性。半导体单晶硅、锗、砷化镓等也有明显的解理性。

同一种物质，可以按不同的固态（晶态或非晶态）存在。例如二氧化硅（ SiO_2 ），它既能以石英晶体（即水晶）的结晶态形式存在，又能以石英玻璃的非结晶态存在。理论与实践都证明，对同一成分的固态物质而言，以结晶态形式存在时，其内能最小，因而最稳定；非晶态物质，其内能较高，因而不是不稳定的，在一定条件下，它会自发地向结晶态转变。例如，一般的玻璃在经过较长的年代以后，其中会产生一些由细小晶体构成的白色羽毛状花纹，这些小晶粒就是非晶态玻璃自发地转变为晶体而产生的。

1.2 晶体的格子构造

为了便于理解晶体内部的规律性，先讨论一个常见的现象。我们平时应用的花布、花纸等，很多都是一些有规律的图案，在这些图案中，由一个花样到另一个花样，只要作适当的平移（平行移动）就可以了，如图 1.4 所示。如果不要了解具体的图案而只需知道图案中同一花样（重复单元）的重复规律，那么只要考察各个花样中的一些环境相同的等同点的重复规律就可以了，由于图案的周期性，可以看出这样的等同点都分布在平行四边形的角顶上，构成一个二维平面格子。

前面已经讲过，晶体是由一定的重复单元（原子、离子、分子或原子团）在空间作周



期性平移排列而构成的。正像图 1.4 那样具有周期性，所不同的是晶体内部结构的周期性是立体的（三维空间的），其重复周期在 10^{-8}cm 的数量级，而图 1.4 所示的平面图案的周期性是平面上的（二维的），周期在 1cm 的数量级，因此，我们也可以用等同点组成的空间格子来描述晶体内部质点的重复规律。了解空间格子对于研究晶体的结构是很有用的，这是因为世界上晶体的种类有成千上万种，其中有些晶体的结构非常复杂，要对数量巨大的晶体一一加以研究是有困难的，但是各种晶体中质点的重复规律即空间格子的种类却很少，仅有 14 种不同的类型，研究起来就方便多了。

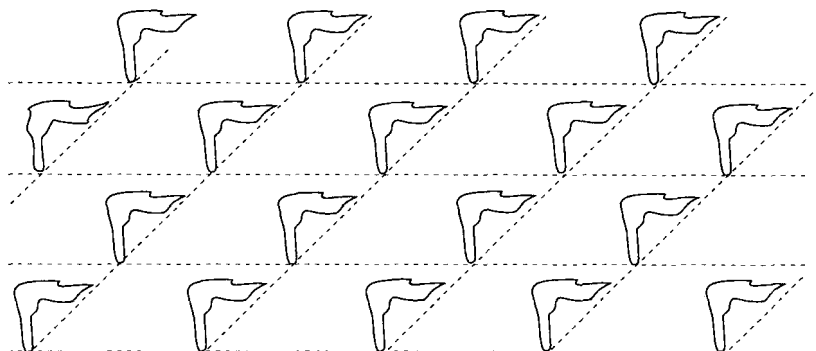


图 1.4 一些有规律的图案

下面以氯化铯 (CsCl) 晶体结构为例，来说明晶体的空间格子。氯化铯的结构如图 1.5 (a) 所示，无论是氯离子或者是铯离子，都分布在一些形状大小相同而且平行排列的立方格子的体中心上。铯离子处在氯离子构成的立方格子的体中心上，反之，氯离子也是处在铯离子构成的立方格子的体中心上。每个立方格子的边长相当于两个相邻的氯离子或铯离子的距离，约为 4.11 埃（埃为很小的长度单位，常以符号 $\text{\AA}$ 表示， $1\text{\AA}=10^{-8}\text{cm}$ ），这是一个非常小的数值，因而纵然晶体尺寸很小，例如粒度为 0.1mm 的晶体，其中也包含着 $10^{18}\sim 10^{19}$ 个这样的格子， 10^{18} 是个非常大的数目（相当于地球上全部人口的几十亿倍），因此可以近似地认为晶体中这样的格子具有无限多个。现在让我们考察氯化铯晶体中的任何一点，这一点可以取在氯离子或铯离子上，也可以取在任何其他地方，这时必然可

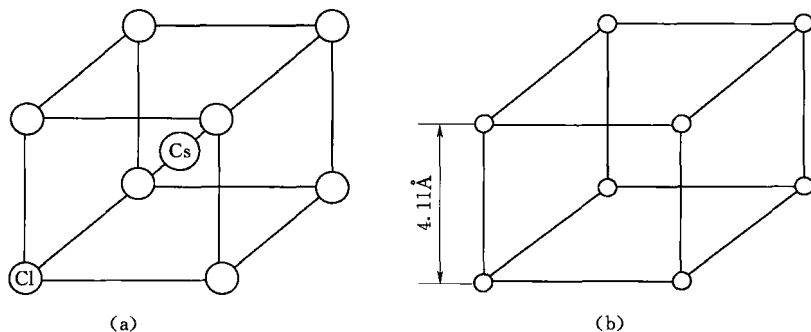


图 1.5 氯化铯结构及其空间格子

(a) 氯化铯结构；(b) 氯化铯的空间格子



在晶体中找到无数多个与这一点环境相同的等同点。仔细分析这些点的排列，可以看出它们也是排列在以 4.11 埃为边长的立方格子上，这就是氯化铯的空间格子，如图 1.5 (b) 所示。对于其他晶体作相似的分析，也可以求得它们的空间格子。

总之，对于任何晶体，由于其结构的周期性，存在着无数多个环境相同的等同点，这种等同点又称为结点。这些结点在空间呈格子状的周期性重复排列，它们的总体称为空间格子或空间点阵。空间格子是表示晶体内部构造规律性的抽象的几何图形。为了使它适用于各种大小不同的晶体，可把它想象为一个无限的图形，而实际晶体的大小总是有限的。

为了使空间格子的概念更加形象化，常用一些想象的线或面把其中的结点连接起来，从而构成以下几个要素。

(1) 结点列。通过空间格子中的任意两个结点，可作一直线，其上包含着无数个等距

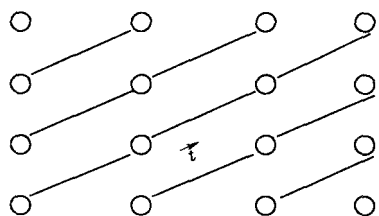


图 1.6 结点列及其平移矢量

离的结点，称为结点列。结点列上相邻点之间的距离称为结点间距。整个空间格子中，具有无数个方向不同的结点列，它们的结点间距一般说来也是不同的。而另一方面，与某结点列平行，又存在着无数个完全相同的结点列，它们具有相同的结点间距，构成一个族。一族结点列的特征是它的方向与结点间距，因此可以用平移矢量 $\vec{t}$ 来描述结点列。矢量的长度等于结点间距，而矢量的方向即是结点列的方向，如图 1.6 所示。

在实际晶体中，与结点列对应的是原子列，与结点列对应的方向称为晶向，结点列反映在晶体外形上就是晶棱。

(2) 面网。通过空间格子中任意 3 个不在一条直线上的点，可作一平面，其上包含着无数个结点。它们有规则地分布在很多相同的平行四边形的角顶上，构成二维面网。面网上单位面积内的结点数称为面网密度。在整个空间格子中，存在无数个方向不同的面网，它们的面网密度一般是不同的。而另一方面，与某一面网平行，又存在着无数个完全相同的面网，它们具有相同的面网密度，构成一面网族。两个相邻的平行面网之间的距离称为面网间距。

在实际晶体中，与面网对应的是原子面，称为晶面。面网族即晶面族，面网间距则称为晶面间距。对一晶面族而言，最重要和最常用的是晶面的方向、晶面上原子密度及晶面间距。

空间格子的面网可以用两个不平行的平移矢量 $\vec{a}$ 和 $\vec{b}$ 来描述，也就是用这两个矢量所构成的平行四边形来描述。对同一面网，平移矢量 $\vec{a}$ 与 $\vec{b}$ 的取法可以有很多种，也就是说，平行四边形的取法有很多种，如图 1.7 所示。

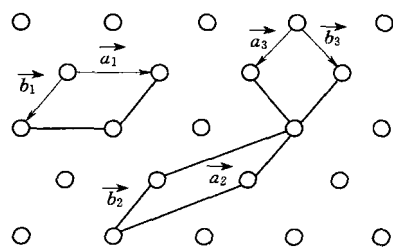


图 1.7 面网及其平行四边形

(3) 平行六面体 (晶胞)。通过空间格子中的结点可以作 3 组互相交叉的平面族，每组平面族中包含着无数个完全相同的等距离的面网，它们将整个空间划分为无数个体积相等、形状相同的平行六面体，整个空间格子可以认为是由这样的平行六



面体平行地重复堆砌而成的。正因如此，可以用平行六面体的形状和大小来描述空间格子的状况，如图 1.8 (a) 所示。

在实际晶体中，与这样的平行六面体相对应的重复单元称为晶胞，通常将平行六面体与晶胞视为同义词。严格说来，这是有区别的，因为平行六面体是对抽象的空间格子而言的，而晶胞则是晶体中真实的重复单元，对每种不同晶体都具有不同的内容，包括原子、离子或分子的种类、数量及其相对位置。

晶胞（或平行六面体）的形状和大小可用晶胞棱边方向的三个不共面的平移矢量 $\vec{a}$ 、 $\vec{b}$ 、 $\vec{c}$ 来描述，也可用这三个矢量的长度 a 、 b 、 c 和夹角 α 、 β 、 γ 等六个标量来描述。如图 1.8 (b) 所示， a 、 b 、 c 和 α 、 β 、 γ 称为晶胞的六个参数。

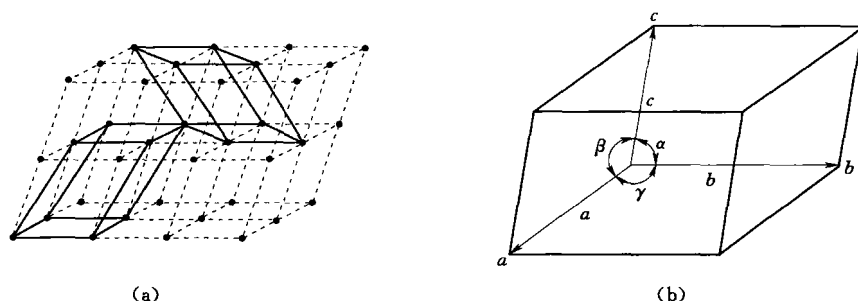


图 1.8 空间格子和晶胞参数

(a) 空间格子及晶胞的不同选取方法；(b) 晶胞参数

正像同一面网可以用不同的平行四边形来描述一样，同一空间格子也可以用很多不同的平行六面体（晶胞）来描述。这说明如果仅仅从反映晶体结构的周期性这一要求出发，则晶胞的取法并不是唯一的，而是有很多种。但在结晶学中，往往要求所取的晶胞不但反映晶体结构的周期性，而且也反映出晶体的宏观对称性，为此规定了一些晶胞的选取原则。按这些原则选取晶胞时，每种晶体只能有一种晶胞的选择方式，这将在第 2 章的 2.4 节中加以说明。