

十二五

微电子专业系列规划教材

固体物理基础教程

主编 贾护军



西安电子科技大学出版社
<http://www.xdph.com>

微电子专业系列

固体物理基础教程

主编 贾护军

西安电子科技大学出版社

内 容 简 介

本书主要包括结晶学理论、缺陷理论、晶格振动理论和能带理论四章,重点论述了组成晶体的微观粒子(原子、离子、电子等)之间的相互作用及运动规律,进而阐述了晶体的宏观性质及其应用。书中结合作者长期的教学研究和实践,对很多问题采取了新的处理方法,通过深入浅出的论述,使初学者易于理解和接受。书中每章后面都配有一定量的习题和思考题。

本书可作为理工院校物理类专业、电子科学与技术专业以及材料科学等相关专业本科生的基础课教材,也可作为研究生及相关工程技术人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

固体物理基础教程/贾护军主编. —西安:西安电子科技大学出版社,2012.11
微电子专业系列规划教材

ISBN 978-7-5606-2924-7

I. ①固… II. ①贾… III. ①固体物理学—高等学校—教材 IV. ①O48

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 212083 号

策 划 曹媛媛

责任编辑 陈 婷 曹媛媛

出版发行 西安电子科技大学出版社(西安市太白南路2号)

电 话 (029)88242885 88201467 邮 编 710071

网 址 www.xduph.com 电子邮箱 xdupfxb001@163.com

经 销 新华书店

印刷单位 西安文化彩印厂

版 次 2012年11月第1版 2012年11月第1次印刷

开 本 787毫米×960毫米 1/16 印张9.5

字 数 166千字

印 数 1~3000册

定 价 16.00元

ISBN 978-7-5606-2924-7/O·0141

XDUP 3216001-1

*** 如有印装问题可调换 ***

本社图书封面为激光防伪覆膜,谨防盗版。

前 言

本书不是一本学术专著，更不是一本固体物理学理论全集，而是一本针对普通高校工科电子类专业开设的固体物理基础课程的教材，它的读者对象是刚刚准备进行专业课学习的大学二年级本科生。对于专业技术人员来讲，这本书的内容显然是有些简单了。

对于大多数初学者而言，固体物理被公认为是一门很难学的课程。之所以难学主要是出于以下几方面的原因，首先因为它的抽象性，固体物理不但进入了原子、电子级的微观领域，而且很多概念和理论是建立在倒空间的基础上的，它对大家的空间想象力提出了很大的挑战；其次是因为它的多学科交叉性，它要求比较强的数学物理方面的背景知识，包括高等代数、原子物理、量子力学、数理方程、统计力学以及群论等，而由于高校教育体制的改革，课程设置以及学时数被大幅压缩，有些前修课程被弱化甚至取消，而高等代数、群论则被以任选课的形式设置在了研究生阶段，因此学生的知识背景相对薄弱；第三是学习方法上的新变化，不同于以往在数学和物理课程，尤其是经典力学的学习中大家所熟悉的演绎法，固体物理学中关于很多理论的推导往往具有很大的跳跃性，表面看起来似乎数学逻辑上不够严谨，这一点与大家以前理解和接受知识的习惯很不一样；第四点就是关于教材，目前关于固体物理学的书籍和著作非常多，有些已经堪称固体物理学领域的经典之作，然而作为教材，这些书籍中包含的信息量过大且过深，甚至有些书籍中阐述理论的角度偏离了人们所习惯的思维模式，反而会触发一些同学的畏难情绪，令初学者望而却步。

基于上述原因，作者根据多年从事固体物理学课程教学的经历和经验，结合对学生接受能力以及各种教材特点的分析和理解，编写了这本书。书中力求以一种相对简单、便于学生理解和接受的方式来介绍固体物理学中最基本的理论和知识，尽量避免过于深奥或繁琐的数学推导，帮助学生从概念和原理出发，建立固体物理学基本的理论框架，为后续课程的学习奠定必要的理论基础。

由于学时数的限制，本书中只涉及到了固体物理学中最基本的共性基础理论，并被浓缩为结晶学理论、缺陷理论、晶格振动理论和能带理论四部分，建议授课学时 54~76 学时。至于目前蓬勃发展的有关表面物理、非晶态物理、超

导物理、低维系统和无序系统，以及多体效应、相变和临界现象等，作者认为它们应该放在固体物理高级教程(或者现代固体物理)中进行讲述。

书中每章在讲述基本理论的同时，也适当穿插介绍了部分相关领域的最新发展以及理论和技术的前沿问题，以期激发学生进一步学习的兴趣。另外每章最后还配有一定量的习题和思考题，用以帮助大家加深和巩固对相关理论的理解。通过本课程的学习，帮助学生顺利完成后续课程的学习，是编写这本教材的出发点和基本目标。而如果还能有部分同学在学习本课程之后对自然科学的发展产生兴趣，并且愿意投身到自然科学研究的事业中来，那将是作者最美好的愿望。

在本书的编写过程中，作者参考了多本相关教材或专著并列于书后的参考文献中，在此对那些致力于我国固体物理学理论研究和教学工作的前辈和同行表示崇高的敬意。在成书过程中也得益于与徐毓龙教授、柴常春教授、曹全喜教授多次有益的探讨和交流，杨银堂教授、段宝兴博士等在部分章节内容的编排和编写方面也给予了很好的指导和建议。另外，王瑞红同志和成涛同志对书稿中所有的图表进行了系统的编辑和处理；西安电子科技大学出版社曹媛媛编辑在书稿的排版、审校、出版方面做了大量细致的工作。对所有关心和帮助本书的编写和出版的人们，作者在此表示诚挚的谢意。

由于本人水平有限，书中不妥之处在所难免，恳请大家批评指正。

贾护军

2012年3月

目 录

第 1 章 结晶学理论	1
1.1 晶体结构.....	2
1.1.1 简立方结构.....	2
1.1.2 氯化铯结构.....	3
1.1.3 体心立方结构.....	3
1.1.4 密堆积结构.....	4
1.1.5 氯化钠结构.....	5
1.1.6 金刚石结构.....	6
1.1.7 闪锌矿结构.....	6
1.1.8 钙钛矿结构.....	6
1.2 原胞和晶胞.....	7
1.2.1 基元.....	7
1.2.2 布拉非格子.....	8
1.2.3 原胞和晶胞.....	10
1.2.4 魏格纳-赛兹元胞.....	13
1.2.5 原子半径、配位数和致密度.....	14
1.3 晶向和晶面.....	16
1.3.1 晶向和晶向指数.....	17
1.3.2 晶面和晶面指数.....	18
1.3.3 金刚石结构的各向异性.....	19
1.3.4 六方晶系的四指数表示法.....	22
1.4 倒格子和布里渊区.....	23
1.4.1 倒格子.....	23
1.4.2 布里渊区.....	26
1.5 晶体结构的测定.....	28
1.5.1 布拉格定律与劳厄方程.....	28
1.5.2 晶体衍射的方法.....	30
1.5.3 原子散射因子与几何结构因子.....	31
1.6 原子负电性与化学键.....	31
1.6.1 原子负电性.....	31

1.6.2	金属键和金属晶体	32
1.6.3	离子键和离子晶体	33
1.6.4	共价键和共价晶体	38
1.6.5	混合键和混合晶体	41
1.6.6	弱键和弱键晶体	43
	习题与思考题	44
第2章	缺陷理论	46
2.1	点缺陷	46
2.1.1	费仑克尔缺陷	47
2.1.2	肖特基缺陷	47
2.1.3	间隙(填隙)原子	48
2.1.4	反结构缺陷	49
2.1.5	杂质	49
2.1.6	色心	50
2.2	线缺陷、面缺陷和体缺陷	52
2.2.1	线缺陷	52
2.2.2	面缺陷	53
2.2.3	体缺陷	58
2.3	晶体中的原子扩散	58
2.3.1	扩散的必要条件	59
2.3.2	扩散的微观机制	59
2.3.3	扩散系数	61
2.3.4	扩散的宏观规律	61
2.3.5	微电子器件制造中的两种扩散工艺	62
	习题与思考题	63
第3章	晶格振动理论	65
3.1	一维单原子链	66
3.1.1	晶格模型与受力分析	66
3.1.2	长波近似	67
3.1.3	色散关系	68
3.1.4	周期性边界条件	69
3.2	一维双原子链	71
3.2.1	晶格模型与受力分析	71
3.2.2	色散关系	72
3.2.3	声学波与光学波	74
3.3	三维晶格的振动	76
3.3.1	三维晶格振动的特点	76

3.3.2	格波波矢	76
3.3.3	晶格振动谱	77
3.3.4	频率分布函数	79
3.4	声子	81
3.4.1	声子的概念和特征	81
3.4.2	平均声子数	82
3.5	晶格振动谱的实验测定	83
3.5.1	实验原理	83
3.5.2	光子散射	84
3.5.3	中子散射	85
3.6	晶格热容的量子理论	85
3.6.1	晶格热容	86
3.6.2	爱因斯坦模型	87
3.6.3	德拜模型	87
3.6.4	两种模型的比较	88
3.7	晶体的非简谐效应 热膨胀和热传导	89
3.7.1	非简谐效应	90
3.7.2	晶格热导率	91
3.7.3	N 过程和 U 过程	91
3.7.4	晶格热导率随温度的变化	92
	习题与思考题	94
第 4 章	能带理论	96
4.1	晶体中电子的共有化运动	96
4.1.1	真空自由电子	96
4.1.2	氢原子中的单电子	97
4.1.3	孤立原子中的多电子	98
4.1.4	晶体中电子的共有化运动	98
4.2	布洛赫定理	102
4.2.1	单电子近似	102
4.2.2	Bloch 定理	103
4.2.3	Bloch 定理的特点	104
4.2.4	Bloch 定理的证明	104
4.2.5	Bloch 定理的推论	106
4.2.6	克龙尼克-潘纳模型	107
4.3	近自由电子近似	112
4.3.1	定态非简并微扰	113
4.3.2	定态简并微扰	114

4.4 紧束缚近似.....	116
4.4.1 紧束缚近似.....	116
4.4.2 模型与计算.....	117
4.5 三维实际晶体的能带.....	121
4.5.1 能带交叠.....	121
4.5.2 直接带隙和间接带隙.....	122
4.5.3 半导体的简化能带.....	123
4.6 能态密度和费米能级.....	124
4.6.1 电子波矢.....	124
4.6.2 能态密度.....	125
4.6.3 费米能级.....	127
4.6.4 功函数和接触电势.....	129
4.7 晶体中电子在外力作用下的运动.....	132
4.7.1 晶体中电子的准经典运动.....	132
4.7.2 导体、半导体和绝缘体的能带论解释.....	138
习题与思考题.....	141
参考文献	144



第1章 结晶学理论

1912年到1913年,德国物理学家劳厄(Laue)和英国物理学家布拉格(Bragger)分别从实验上和理论上研究了固体中的X射线衍射,从而证明了晶体中原子排列的周期性和对称性,并且用数学上已经研究过的点群和空间群的概念来描述这些性质。人们常把这一重要进展看做近代固体物理学的一个新开端,他们也因此分别获得了1914年和1915年的诺贝尔物理学奖。

本章研究的思路是:首先研究组成固体的微观粒子(主要从原子和离子的角度)能够形成什么样的晶体结构(微观粒子的具体排列方式);然后讨论晶体结构如何决定晶体的宏观性质;最后通过原子本身的性质(包括原子半径、核外电子构型、负电性等)以及原子之间的相互作用(化学键),来分析为什么原子堆积成晶体时会形成特定的晶体结构。当然,在研究的过程中,也会适当介绍晶体结构的一些描述方法,如原胞、晶胞、晶向、晶面等。

自然界中的固体通常可以分为晶体和非晶体,晶体中的原子(或离子)规则排列,长程(微米以上)有序;而非晶体中的组成粒子则不具有长程有序(周期性)的特点。自然界中大家所熟悉的晶体比如NaCl、钻石、石英、雪花等,都具有规则的几何外形、固定的熔点、各向异性和解理性等特点(晶体的宏观特性);而玻璃、石蜡等非晶体则不具有这些宏观性质。当然,后来在实验中又发现了晶体和非晶体之外的称为准晶体的材料,准晶体材料中组成粒子的排列方式也具有某种规律性,但却不是严格的周期性。准晶体的发现是固体物理学中的一个新兴领域,这部分内容不在本教材中讨论,可以参考其他相关书籍。

晶体又可划分为单晶和多晶。如果组成晶体的原子或离子按照一种排列方式贯穿始终,具有严格的周期性,则称为单晶;而如果晶体是由大量小的单晶颗粒(微米级)构成,则称为多晶。多晶材料除了具有固定的熔点以外,其他宏观性质更接近非晶材料。显然,天然形成的晶体大多为多晶材料。

为了研究的方便,固体物理中又提出了一个“理性晶体”(也叫做完美晶体)的概念,即组成晶体的微观粒子(原子、离子)按照某种排列方式周期性无限重复排列,构成的晶体无限大且不含任何杂质或缺陷。这是一个假想的模



型, 主要是为了在研究晶体的特征和性质时抓住主要矛盾, 排除其他非理想因素的干扰。比如, 实际晶体中总是存在表面, 表面原子排列的周期性发生了中断, 而晶体中存在各种缺陷时也会对晶体中微观粒子的运动以及晶体的宏观性质产生影响等。在无特别说明的情况下, 本书后续章节中提到的“固体”或“晶体”均指单晶, 而且是理性晶体。

从上面的定义中, 我们不难注意到, 所谓晶体结构(也叫做晶格结构或晶格), 实际上就是指组成晶体的微观粒子的具体排列方式。那么, 如果某些晶体中原子的排列方式相同, 只是原子种类、原子半径或者原子间的距离不同, 我们就可以说这些晶体具有相同的晶体结构, 否则称它们具有不同的晶体结构。显然, 晶体结构是一个比晶体更抽象的概念, 即不同的晶体可以具有相同的晶体结构。

下面我们通过比较通俗的描述感性地认识一下自然界中常见的晶体结构, 然后通过分析逐步引出相关专业概念和术语。

1.1 晶体结构

为了便于理解, 先不考虑原子本身的性质, 而将其视为刚性的球体, 不同原子暂时可以理解为大小不同的刚性球体。通过一些简单的实验来看看它们可以形成什么样的结构, 并且和自然界中的实际晶体进行联系。

1.1.1 简立方结构

图 1.1 给出了同种原子在一层内的一种最简单的排列形式, 即正方排列。如果把这样的原子层严格地重复堆积成三维结构, 即每一层原子的投影都严格重合, 就构成了所谓简立方结构(Simple Cubic, SC 结构), 其典型的重复单元如图 1.2 所示。这是为了研究晶体结构的共性而进行的一种数学上的抽象, 可以理解为一个立方体的八个顶角上各有一个相同的原子, 整个晶体就是按照这个单元沿不同方向重复排列而成的。

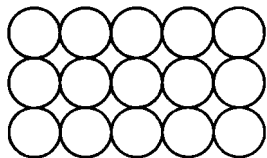


图 1.1 同种原子在层内的正方排列

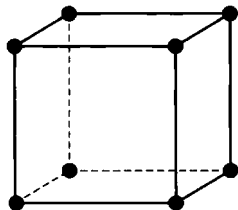


图 1.2 简立方结构的重复单元



常识告诉我们，显然这种结构是不稳定的，因而自然界中不会存在这种结构的晶体。尽管近来在实验室中发现，放射性元素钋(Po)会临时以简立方结构的形式存在，但随即发生衰变，这与我们的结论是不矛盾的。

1.1.2 氯化铯结构

尽管自然界中不存在简立方结构的晶体，但有些晶体却是在简立方结构的基础上形成的，比如氯化铯(CsCl)晶体。氯化铯结构的典型重复单元如图 1.3 所示，不难想象，整个晶体中的所有氯原子和铯原子各自形成的都是简立方结构，因此氯化铯结构可以理解成是由两个简立方结构体心套构而成的。

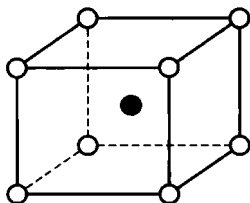


图 1.3 氯化铯结构的重复单元

1.1.3 体心立方结构

如果同种原子在每一层内都是正方排列的，只是第二层原子的投影正好都位于第一层原子的间隙位置，如图 1.4 所示，以此方式重复排列就得到了体心立方结构(Body Centred Cubic, BCC 结构)。它的一个典型的重复单元如图 1.5 所示。可以看到，这时在立方体的八个顶角和体心位置上各有一个相同的原子，它与图 1.3 所示的氯化铯结构的最大区别就是后者在体心位置上是另一种原子。那么体心立方结构也可以理解成是由所有奇数层和偶数层原子分别组成的 SC 结构体心套构而成的，但是应该注意，由于晶体中同种原子的不可区分性，一般不采用这种说法。

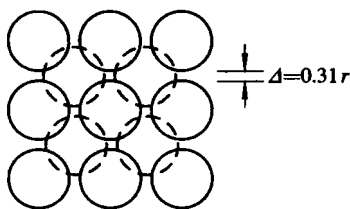


图 1.4 体心立方结构的原子堆积方式

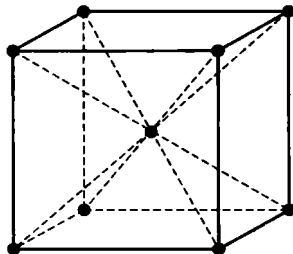


图 1.5 体心立方结构的重复单元



另外从图 1.4 中还会看到，为了得到体心立方结构，同一层内的原子尽管仍是正方排列，但却不再是紧密挨着的，而是存在一定的间隙，容易证明，如果原子半径为 r ，则同一层内的原子间隙为 $\Delta=0.31r$ 。研究已经证明，自然界中的锂、钠、钾、铷、铯、铁(Li、Na、K、Rb、Cs、Fe)等金属，就具有体心立方结构。

1.1.4 密堆积结构

同种原子在同一层内除了正方排列以外，还具有如图 1.6 所示的一种最紧密的排列方式，称为密排原子面。如果再把这种密排原子面以最紧密的方式堆积成三维晶体，就得到了密堆积结构。那么，密堆积结构具有什么样的特点呢？

我们先来分析一下密排原子面中原子间隙的特点，在图 1.6 中，我们先把这第一层密排原子面标注为 A ，其中的原子间隙可以区分为三角形开口朝上和朝下的两种，并分别标注为 B 和 C ，显然，在 A 层原子面上堆积第二层密排原子面时，原子只能占据 B 位置或 C 位置中的一种，而不可能同时占据。如果第二层密排原子面占据的是 B 位置(称之为 B 层)，那么可以想象， B 层上的原子间隙又会对应 A 位置和 C 位置，即第三层可以排 C 层原子，也可以排 A 层原子，以此类推。根据晶格周期性的特点，我们就可以得到两种最典型的密堆积结构，按照密排原子面的堆积方式可以表示为

$$ABABAB\cdots\cdots$$

$$ABCABCABC\cdots\cdots$$

其中第一种密堆积结构的一个典型的重复单元如图 1.7 所示，这是一个六方棱柱，其 12 个顶角和上下两个面心位置上各有一个相同的原子，还有 3 个相同的原子位于六方棱柱的内部，即 B 层原子，我们把这样的结构称为六方密堆积结构(Hexagonal Close Packed, HCP 结构)，自然界中铍、镁、锌、镉(Be、Mg、Zn、Cd)等金属就具有 HCP 结构。

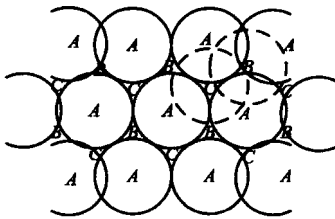


图 1.6 密排原子面

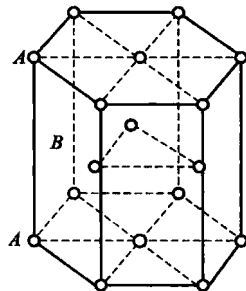
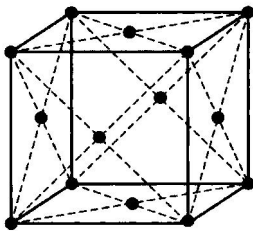


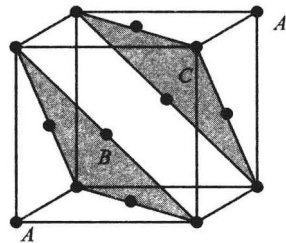
图 1.7 六方密堆积结构的重复单元



第二种密堆积结构的典型的重复单元如图 1.8 所示,即在一个立方体的 8 个顶角和 6 个面心位置上各有一个相同的原子,我们把这样的结构称为立方密堆积结构(Face Centred Cubic, FCC 结构)。从密排原子面的“ABCABCABC……”堆积方式中如何提炼出这一重复单元呢?这个问题的正向思维可能有一点困难,但反过来则很容易理解:试想将图 1.8(a)的结构沿某一条体对角线立起来,并将其中的原子半径逐渐放大,使得最近邻的原子相互挨起来(相切),那么按照立体几何的知识不难证明,这时的原子将分别位于几个平行的平面内,并且都是密排原子面,而沿着体对角线方向正好就是 ABCA 的排列方式(如图 1.8(b)所示),即立方密堆积结构。研究表明,自然界中铜、银、金、铝(Cu、Ag、Au、Al)等金属就具有 FCC 结构。



(a) FCC结构的重复单元



(b) FCC结构沿体对角线方向的ABCA排列方式

图 1.8 立方密堆积结构的重复单元

1.1.5 氯化钠结构

图 1.9 给出了氯化钠(NaCl)结构的一个典型的重复单元,可以看到,它是由 Na^+ 和 Cl^- 正负离子均匀交替排列构成的,但由于正负离子的不同,它并不是一个简单的 SC 结构。如果我们只看其中的某一种离子(正离子或负离子),则构成一个 FCC 结构,而由于正负离子的等效性,另一种离子同样也构成了一个 FCC 结构,因此,NaCl 结构可以理解成是由正负离子各自组成的 FCC 结构

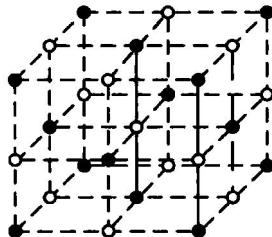


图 1.9 NaCl 结构的重复单元



沿棱边 $1/2$ 套构而成的。研究已经证明，自然界中除了铯(Cs)以外的碱土金属的卤化物都具有这种结构。

1.1.6 金刚石结构

图 1.10 给出的是金刚石结构的一个典型的重复单元。我们先来认识一下这个结构的特征，该重复单元总共由 18 个同种原子组成，其中在立方体的 8 个顶角和 6 个面心位置各有一个原子，另外 4 个原子则位于体内的 4 条体对角线上，且与最近邻顶角的距离为 $1/4$ 体对角线长度。自然界中除金刚石晶体外，重要的半导体材料硅(Si)和锗(Ge)也具有这种结构。

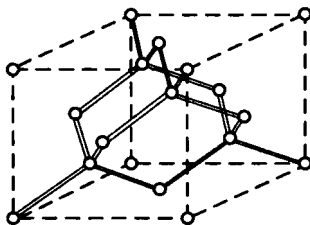


图 1.10 金刚石结构的重复单元

1.1.7 闪锌矿结构

如果将图 1.10 中立方体内部的四个原子换成不同的原子，则构成了如图 1.11 所示的闪锌矿结构。自然界中一些重要的化合物半导体材料如硫化锌(ZnS)、砷化镓(GaAs)、磷化铟(InP)等，就具有这种闪锌矿结构。显然闪锌矿结构与金刚石结构有一定的类似之处。

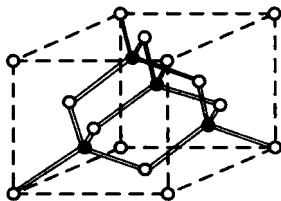


图 1.11 闪锌矿结构的重复单元

1.1.8 钙钛矿结构

自然界中很多 ABO_3 型化合物材料，如钛酸钡($BaTiO_3$)、钛酸锶($SrTiO_3$)、铬酸锶($SrCrO_3$)等，都具有如图 1.12 所示的典型的重复单元，统称



为钙钛矿结构。以钛酸钡为例，立方体的 8 个顶角各有一个 Ba 原子，6 个面心各有一个 O 原子，体心位置上是一个 Ti 原子。

除了上面介绍的几种常见的晶体结构以外，自然界的晶体结构还有很多，比如图 1.13~图 1.15 所示的红镍矿结构、金红石结构以及 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ 结构等，这里不再一一列举。不同的学科领域所关心的晶体结构有所不同，大家可以根据自己的兴趣或需要查阅不同的参考书籍。

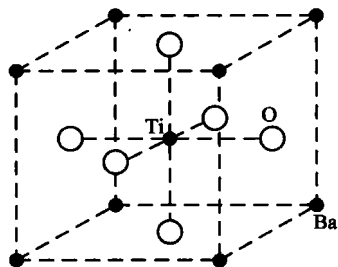
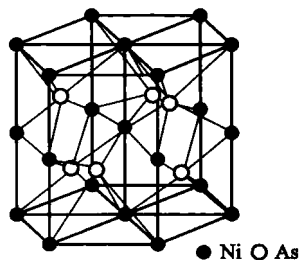
图 1.12 BaTiO_3 晶体的重复单元

图 1.13 红镍矿结构

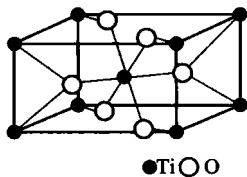
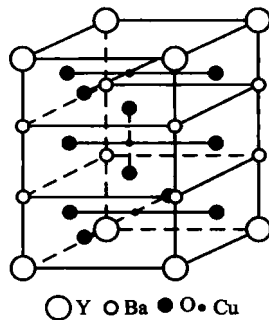


图 1.14 金红石结构

图 1.15 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ 结构

1.2 原胞和晶胞

前面我们用相对通俗的语言介绍了一些常见的晶体结构，认识到周期性是所有晶体结构中一个贯穿始终的特征。在研究晶体结构的共性时，还形成了很多约定的专业术语或概念，下面我们逐一进行介绍。

1.2.1 基元

基元是指组成晶体的基本结构单元，基元中所包含的原子数应当等于晶体



中原子的种类数，其中化学成分不同或化学成分相同但“周围环境”不同的原子应视为不同种类的原子。晶体就是由大量完全相同的基元在空间按照一定方式作周期性重复排列构成的。

对基元的概念进行理解时最关键的就是“周围环境”，我们不妨做这样的理解，即对任意一个原子而言，它的“周围环境”就是指在该原子的哪个方向上、多远距离上有一个什么样的原子。如果完全相同，那就是同一种原子，否则就应该被看做是不同的原子。比如，Na 晶体是由 Na 原子组成的体心立方结构，设立方体的边长为 a ，这时，对于任意一个 Na 原子而言，它的周围环境就是：沿棱边方向距离为 a 处以及沿体对角线方向距离为 $\frac{\sqrt{3}}{2}a$ 处各有一个 Na 原子。于是 Na 晶体中所有 Na 原子是完全等效的，即 Na 晶体的基元中就只含有一个 Na 原子。类似地，Cu 原子组成的 FCC 结构中所有 Cu 原子也是完全等效的，因此 Cu 晶体的基元中也只含有一个 Cu 原子。而 AB 型化合物晶体中，由于不同原子化学成分的不同，其周围环境显然是不同的，于是 NaCl 晶体的基元中必然同时包含一个 Na 原子和一个 Cl 原子，而 CsCl 晶体的基元中则同时包含一个 Cs 原子和一个 Cl 原子，尽管它的重复单元与体心立方(BCC)结构有相像之处，但却属于不同的晶体结构。

下面我们重点来理解一下“化学成分相同但周围环境不同”的情况。以金刚石结构为例，其中立方体八个顶角和六个面心上的原子正好组成一个 FCC，这些原子的周围环境显然是完全相同的，另外所有体内原子的周围环境也完全相同，但这两者之间却是不同的，比如，体内原子和顶角原子之间的距离虽然相同，但方向却正好相反，因此应被视为两种原子，即金刚石晶体的一个基元中应该同时包含两个 C 原子。再比如，由 Zn 组成的六方密堆积结构中，六方棱柱顶角和表面的原子应归为一类，而体内的原子则应归为另一类，于是 Zn 晶体的一个基元中也应同时包含两个 Zn 原子。再来看看钙钛矿结构，BaTiO₃ 晶体的一个基元中同时应该包含 Ba、Ti 和 O 原子是比较容易理解的，但为什么会是 3 个 O 原子？显然，对于 6 个面心上的 O 原子，尽管 Ba 原子和 Ti 原子在其周围分布的距离都是确定相同的，但方向却是不同的，因此必然被分为 3 类，于是 BaTiO₃ 晶体的一个基元中就同时包含了 1 个 Ba、1 个 Ti 和 3 个 O 原子总共 5 个原子。

1.2.2 布拉菲格子

为了进一步从数学上研究晶体结构的共性，如果我们不考虑基元的具体细节(内容)，而将其抽象成数学上的点(称为阵点或格点)，那么由于晶格的周期