



**GH**

高等学校 规划教材  
工科电子类

# 材料物理导论

徐毓龙 阎西林

贾宇明 罗佳慧 曹全喜

CAI LIAO  
WU LI DAO LUN

电子科技大学出版社



TB303  
X91

441675

# 材料物理导论

徐毓龙 阎西林 贾宇明  
罗佳慧 曹全喜



00441675

电子科技大学出版社

[川] 新登字 016 号

EA09/19

### 内 容 提 要

本书为电子材料与元器件教材编审组在“八·五”期间组织编写的“材料物理学”的第二分册。有针对性地向材料科学与工程学科的学生讲述凝聚态物理的基本原理及其应用。主要内容有晶体结构；晶体结合；晶格振动；晶体缺陷；固体电子论及固体输运现象。

本书是电子材料与元器件专业的教材，也可作为无机非金属材料、微电子技术、磁性材料与器件、金属材料等专业的教材及有关学科的工程技术人员及青年自学用书。

## 材料物理导论

徐毓龙 阎西林 贾宇明

罗佳慧 曹全喜

\*

电子科技大学出版社出版

(中国成都建设北路二段四号) 邮编 610054

四川省仁寿县印刷厂印刷

四川省新华书店经销

\*

开本 787×1092 1/16 印张 16.125 字数 379 千字

版次 1995 年 10 月第一版 印次 1995 年 10 月第一次印刷

印数 1—1500 册

中国标准书号 ISBN 7-81043-260-5/O·21

定价：12.90 元

## 出版说明

根据国务院关于高等学校教材工作的规定，我部承担了全国高等学校和中等专业学校工科电子类专业教材的编审、出版的组织工作。由于各有关院校及参与编审工作的广大教师共同努力，有关出版社的紧密配合，从1978~1990年，已编审、出版了三个轮次教材，及时供给高等学校和中等专业学校教学使用。

为了使工科电子类专业教材能更好地适应“三个面向”的需要，贯彻国家教委《高等教育“八五”期间教材建设规划纲要》的精神，“以全面提高教材质量水平为中心，保证重点教材，保持教材相对稳定，适当扩大教材品种，逐步完善教材配套”，作为“八五”期间工科电子类专业教材建设工作的指导思想，组织我部所属的九个高等学校教材编审委员会和四个中等专业学校专业教学指导委员会，在总结前三轮教材工作的基础上，根据教育形势的发展和教学改革的需要，制订了1991~1995年的“八五”（第四轮）教材编审出版规划。列入规划的，以主要专业主干课程教材及其辅助教材为主的教材约300多种。这批教材的评选推荐和编审工作，由各编委会或教学指导委员会组织进行。

这批教材的书稿，其一是从通过教学实践、师生反映较好的讲义中经院校推荐，由编审委员会（小组）评选择优产生出来的，其二是在认真遴选主编人的条件下进行约编的，其三是经过质量调查在前几轮组织编写出版的教材中修编的。广大编审者、各编审委员会（小组）、教学指导委员会和有关出版社，为保证教材的出版和提高教材的质量，作出了不懈的努力。

限于水平和经验，这批教材的编审、出版工作还可能有缺点和不足之处，希望使用教材的单位，广大教师和同学积极提出批评和建议，共同为不断提高工科电子类专业教材的质量而努力。

电子工业部电子类  
专业教材办公室

# 前 言

本书由《电子材料与固体器件》教材编审委员会《电子材料与元器件》编审小组审定并推荐出版。

现代信息社会三大支柱之一的材料科学,涉及的范围很宽,从结构材料到功能材料,从单晶、多晶等常规材料到新型的纳米材料、智能材料、机敏材料。近年来材料科学得到了迅猛的发展。作为电子材料与元器件专业的学生必须熟悉和了解材料的基本性质、制造技术、器件设计、性能测试等多方面的知识。因此学生要学习理论力学、物理化学、热力学、统计物理、量子力学、固体物理等专业基础课;半导体物理、电介质物理、磁性物理等专业课;以及电子学、无线电技术、测量、计算机等“电”类课程。所以本专业的学生要学习的课程门数多,学时多,课程之间存在不必要的重复,学生负担重,影响教学质量。这一直是本专业教学改革中亟待解决的问题。

1991年11月,电子材料与元器件教材编审组在电子科技大学召开电子材料与元器件专业基础课教学改革研讨会。与会的有:西安电子科技大学,西安交通大学、华中理工大学、天津大学、上海交通大学、东南大学、四川大学、电子科技大学等学校的专业基础课教师和部分编委。会上对本专业基础课教学现况、存在问题和解决方案等进行了认真的讨论,会议建议将专业基础课合并为两门:热力学、统计物理、量子力学合并,称《材料物理基础》,将固体物理的内容与材料科学相结合,称《材料物理导论》。并初步确定了两门课程的内容框架。1992年3月在东南大学召开的教材编审会上,通过了研讨会的建议,决定由电子科技大学恽正中教授为这两本书的责任编委。

《材料物理导论》的起点是《材料物理基础》。学生已有热力学、统计物理和量子力学基础,在本课程中继续引导学生应用热力学统计物理方法在量子力学基础上从宏观或微观角度分析固体材料(主要是晶态固体材料)的内部结构、缺陷及其运动规律,以及固态材料的性质。本书共七章,可分为两大部分。第一部分论述晶体的结构、结合、晶格振动及晶体缺陷,是了解晶体力学性质、热学性质的基础,它由前四章组成。后三章组成第二部分,主要讨论电子在晶体中的运动规律,它是研究晶体的电学、磁学、光电性质和超导性质的基础。为帮助同学复习和抓住核心内容,每章末都有小结。为供同学通过练习熟悉课文的重要概念和公式,并作初步应用,各章末还附有精选的习题。

本教材授课的建议学时为72—90学时,前三章为38—46学时,后三章为34—44学时。第六章的§6.2六(三)三维能带结构的表示方法和§6.4实际的能带结构内容较深,不是本科生必须掌握的内容,各任课教师可以根据具体情况取舍。本书采用国际单位制(SI制),但个别地方根据国内材料科学工作者的习惯,也采用其他单位,如长度单位 $\text{\AA}$ 和能量单位 $\text{eV}$ 。

本书由西安电子科技大学徐毓龙教授主编,电子科技大学恽正中教授主审。第一、五两章由电子科技大学贾宇明副教授,第二、四两章由电子科技大学罗佳慧副教授,第三章

由西安电子科技大学曹全喜副教授，第六、七两章由西安电子科技大学阎西林副教授编写。本书的编写大纲由主编按研讨会确定的框架制定。各编者根据编写大纲写出第一稿，经主编主审共同审查，提出修改意见和修改参考资料，再由编者修改出第二稿，经主编主审审阅同意后，送教材编审组评审通过，主编综合评审意见交各编者进一步修改，出第三稿，最后由主编统稿，主审通过。我们对本教材编写过程中与我们通力合作的各位编者，对关心支持我们的电子材料与元器件教材编审组和电子科技大学出版社表示衷心的感谢。

材料物理导论是电子材料与元器件专业十分重要的专业基础课，我们尽最大努力把教材写好，但由于经验不足，学识有限，错误和遗漏难免，选材和处理不当之处，敬请读者指正。

徐毓龙

恽正中

1994年10月

# 目 录

第一章 晶体结构	1
§ 1.1 晶体的宏观特征	1
§ 1.2 晶体的微观结构	3
一、空间点阵与基元	4
二、初基元胞 (Primitive cell)	5
三、惯用元胞 (Conventional cell)	6
四、初基元胞与惯用元胞的关系	7
五、W-S 元胞	10
§ 1.3 常见的晶体结构	11
一、氯化钠结构	12
二、氯化铯结构	13
三、金刚石结构	14
四、闪锌矿结构	15
五、钙钛矿结构	15
六、密堆积结构	16
七、晶体结构的一些重要概念	19
§ 1.4 晶体的对称性	22
一、晶体的宏观对称性	22
二、晶体的微观对称性	26
§ 1.5 晶面与晶向	29
一、晶向及其标志	29
二、晶面及其标志	31
三、六方晶系中的晶向与晶面指数	33
§ 1.6 倒格子与布里渊区	34
一、倒格子的引入与定义	34
二、正格子与倒格子的关系	36
三、晶体的傅里叶变换与波矢空间	37
四、布里渊区	39
§ 1.7 晶体 X 射线衍射	42
一、布拉格定律	42
二、劳厄方程	43
三、厄瓦尔德 (Ewald) 反射球	44

四、晶体衍射的几种方法 .....	45
五、原子散射因子与几何结构因子 .....	47
本章小结 .....	49
习题 .....	50
参考文献 .....	51
<b>第二章 晶体的结合</b> .....	<b>52</b>
§ 2.1 晶体结合的普遍特征 .....	52
一、结合力的普遍性质 .....	52
二、内能函数 .....	53
三、内能函数与晶体的物理性质 .....	54
§ 2.2 离子键与离子晶体 .....	57
一、离子键 .....	57
二、离子晶体的结合能 .....	57
§ 2.3 共价键与原子晶体 .....	61
§ 2.4 金属键与金属晶体 .....	63
§ 2.5 分子晶体 .....	64
§ 2.6 氢键晶体与混合型晶体 .....	65
一、氢键晶体 .....	65
二、混合型晶体 .....	66
本章小结 .....	68
习题 .....	69
参考文献 .....	69
<b>第三章 晶格振动</b> .....	<b>71</b>
§ 3.1 一维单原子晶格的振动 .....	71
一、物理模型与运动方程 .....	71
二、玻恩-卡曼 (Born-Karman) 周期性边界条件 .....	73
三、色散关系等问题的讨论 .....	74
§ 3.2 一维双原子链的晶格振动 .....	76
一、模型与色散关系 .....	76
二、关于声学波和光学波的讨论 .....	77
三、三维晶格振动 .....	81
§ 3.3 晶格振动量子化与声子 .....	84
一、晶格振动和谐振子 .....	84
二、能量量子化和声子 .....	85
三、平均声子数 .....	86
四、确定声子谱的方法 .....	87

五、软模 .....	90
§ 3.4 晶体的比热 .....	91
一、概述 .....	91
二、爱因斯坦模型 .....	92
三、德拜模型 .....	93
四、实验和理论比较 .....	93
五、关于德拜温度 $\theta_D$ 的几点讨论 .....	96
§ 3.5 晶体中的非简谐效应 .....	97
一、简谐近似的局限性 .....	97
二、热膨胀 .....	98
三、声子碰撞与热传导 .....	101
四、N过程和U过程 .....	103
五、声子热导率 $\lambda$ 与温度的关系 .....	103
本章小结 .....	106
习题 .....	107
参考文献 .....	108
<b>第四章 晶体缺陷</b> .....	<b>109</b>
§ 4.1 点缺陷 .....	109
一、点缺陷的类型及形成能 .....	109
二、热缺陷及其统计计算 .....	111
三、色心 .....	113
四、杂质原子 .....	114
§ 4.2 线缺陷——位错 .....	115
一、范性形变与位错 .....	115
二、位错的基本类型 .....	119
三、位错的基本性质 .....	120
四、位错的运动 .....	121
§ 4.3 面缺陷与体缺陷 .....	123
一、层错 .....	123
二、晶粒间界 .....	124
三、小角晶界 .....	124
四、体缺陷 .....	126
§ 4.4 晶体中的扩散 .....	126
一、扩散的宏观规律 .....	127
二、扩散的微观机制 .....	130
三、扩散系数 .....	132
本章小结 .....	134

习题	135
参考文献	136
<b>第五章 金属自由电子论</b>	<b>137</b>
§ 5.1 经典自由电子论	137
一、特鲁德模型	137
二、金属的直流电导	137
三、金属的比热	138
§ 5.2 量子自由电子论	139
一、自由电子的波函数与能量	139
二、波矢空间与电子能量分布	141
三、费米分布与电子密度分布	142
§ 5.3 金属的比热、电导与热导	147
一、金属的比热	147
二、金属的电导	149
三、金属的热导	151
§ 5.4 功函数与接触电势差	152
一、功函数及热电子发射	152
二、接触电势差	154
本章小结	156
习题	157
参考文献	157
<b>第六章 固体的能带理论</b>	<b>159</b>
§ 6.1 布洛赫 (Bloch) 定理	159
一、周期性势场	159
二、布洛赫定理	159
三、克龙尼克-潘纳 (Kronig-penney) 模型	161
四、布洛赫定理的一些重要推论	164
五、周期性边界条件与波矢 $K$ 的取值	166
六、状态密度	167
§ 6.2 近自由电子近似	168
一、定态微扰法	169
二、简并微扰	170
三、近自由电子能量和波函数的讨论	171
四、色散关系的三种图式	175
五、近自由电子的状态密度	176
六、三维情况下的近自由电子近似	177

§ 6.3 紧束缚近似 .....	181
一、紧束缚近似 .....	181
二、紧束缚近似下晶体中电子能量 $E_c(K)$ 的计算 .....	183
三、能带计算的例子 .....	184
§ 6.4 实际的能带结构 .....	186
一、半导体 Ge、Si 等的能带结构 .....	187
二、金属的能带结构 .....	189
§ 6.5 电子的准经典运动 .....	191
一、准经典近似和波包 .....	191
二、电子的速度 .....	193
三、外力作用下电子状态的变化——加速度与有效质量 .....	194
§ 6.6 导体、绝缘体和半导体 .....	197
一、满带对电导无贡献 .....	197
二、空穴 .....	198
三、导体、绝缘体和半导体 .....	200
本章小结 .....	202
习题 .....	203
参考文献 .....	204
<b>第七章 晶体中的电子输运 .....</b>	<b>206</b>
§ 7.1 电子分布函数 .....	206
§ 7.2 晶体中的散射机制 .....	207
一、半导体中的电子散射机制 .....	208
二、金属中的电子散射机制 .....	210
§ 7.3 玻尔兹曼方程 .....	211
§ 7.4 电导率公式 .....	213
一、弛豫时间近似解 .....	213
二、金属电导率公式 .....	215
三、半导体电导率公式 .....	216
§ 7.5 迁移率与温度的关系 .....	218
一、高温情况 .....	218
二、低温情况 .....	218
§ 7.6 电导率与温度的关系 .....	220
一、金属的电导率与温度的关系 .....	220
二、非简并半导体的电导率与温度的关系 .....	222
§ 7.7 超导电性 .....	225
一、引言 .....	225
二、超导临界参数 .....	227

三、迈斯纳 (Meissner) 效应 .....	228
四、伦敦 (London) 方程 .....	228
五、两类超导体 .....	229
六、BCS 理论 .....	230
七、磁通量子化 .....	234
八、约瑟夫森 (Josephson) 效应 .....	235
九、超导量子干涉效应 .....	238
十、高温超导电性 .....	238
本章小结 .....	240
习题 .....	241
参考文献 .....	242
附录 A 基本物理常数 .....	244
附录 B 原子和离子半径 (单位 $\text{\AA}$ ) .....	245

# 第一章 晶体结构

## 【本章提要】

本章的核心是讨论晶体微观结构的周期性和对称性,共有七节。第一节从晶体的宏观特征出发,揭示晶体微观结构的几何特征;第二到第五节阐明晶体结构周期性、对称性两大特点,介绍布喇菲格子、基元、元胞、晶格、对称操作、晶体指数等重要概念,并举例说明典型的晶体结构;六、七两节简要介绍晶体X射线衍射的原理和方法以及晶体衍射分析的有力工具倒格子和布里渊区等概念。

## § 1.1 晶体的宏观特征<sup>[1~2]</sup>

人们很早就注意到,固体材料可以分为两大类:一类是晶态材料,又称晶体,例如天然生长的水晶、云母、岩盐等,它们一般具有规则的几何外形、解理性、各向异性的物理性质以及固定的熔点等宏观特征;另一类是非晶态材料,又称非晶体,例如玻璃、石蜡等,它们都没有上述晶体的宏观特征。

典型的晶体往往是一个凸多面体,围成这个凸多面体的光滑平面称为晶面。一个理想完整的晶体,其晶面是规则配置的,因而具有规则而对称的外形。图 1-1 是几种不同品种晶体的外形。

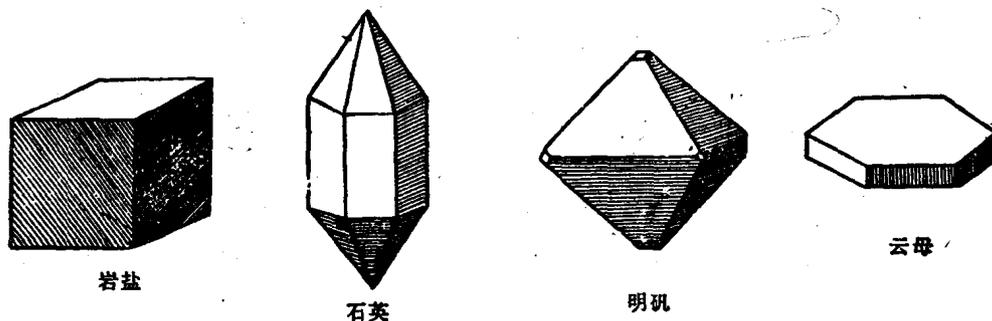


图 1-1 几种晶体的外形

由于生长条件的不同,同一品种的晶体其外形不尽相同。图 1-2 给出了几种不同外形的石英晶体,这表明由于外界条件的差异,晶体表面的某些晶面可以相对地变化,甚至还会完全消失。可见,晶体表面的晶面大小和形状并不是晶体品种的固有特征。

大量实验表明,对于一定品种的晶体,不论其外形如何,总存在着的一组特定的晶面间夹角,这就是晶体外形的固有特征。图 1-2 所示的几种不同外形的石英晶体其  $a, b$  晶面之间的夹角总是  $141^{\circ}47'$ ,  $b, c$  晶面之间的夹角总是  $120^{\circ}00'$ ,  $a, c$  晶面的夹角总是  $113^{\circ}08'$ 。对于其它品种的晶体,晶面间则有另一组特征夹角。这一普遍规律称之为晶面角守恒定律,即同一品

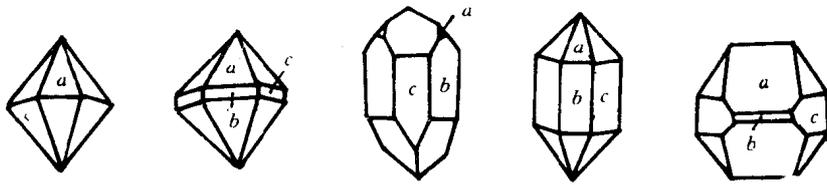


图 1-2 几种不同外形的石英晶体

种的晶体在相同的温度和压力下,其对应晶面之间的夹角恒定不变。因而,测定晶面间夹角的大小是判定晶体品种类别的依据。

当晶体受到敲打、剪切、撞击等外界作用时,它有沿某一个或几个具有确定方位的晶面劈裂开来的性质。例如云母晶体很容易沿与自然层状结构平行的方向劈裂为薄片。晶体的这一性质称为解理性,这些劈裂的晶面则称为解理面。自然界中的晶体显露于外表的晶面往往就是一些解理面。

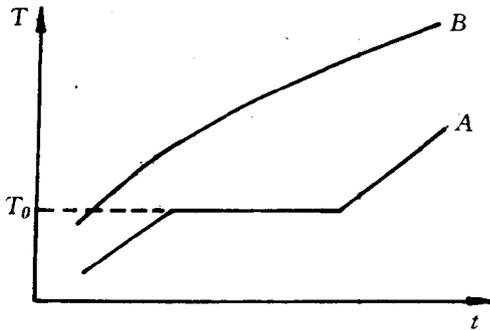


图 1-3 晶体与非晶体的加热曲线

如果测量石墨晶体的电导率,会发现令人惊奇的结果:当沿石墨的某一方向测量时,电导率是某一数值,而将石墨转动一下后沿石墨的另一方向测量,电导率的数值便会改变。晶体的物理性质随观测方向而变化的现象称为各向异性。晶体的很多物理性质,如压电性质、光学性质、磁学性质、热学性质等都表现出各向异性。

各种晶体都有自己固定的熔点,例如,石英晶体的熔点为  $1470^{\circ}\text{C}$ ,硅晶体的熔点为  $1420^{\circ}\text{C}$ 。当晶体被加热到某一特定温度时,晶体开始熔化,且在熔化过程中晶体温度保持不变,直到晶体全部熔化完温度才开始上升。晶体熔化时的温度称为熔点。如图 1-3 中曲线 A 所示,曲线横坐标  $t$  为晶体加热时间,纵坐标  $T$  为晶体温度, $T_0$  为晶体的熔点。另一方面,玻璃等非晶体则没有固定熔点,在加热过程中,整个固体先变软,然后逐渐熔化成液体,如图 1-3 中曲线 B 所示。

上面所述晶体与非晶体宏观特征的差别,其根本原因在于它们具有不同的微观结构。图 1-4 是石英晶体和石英玻璃的微观结构示意图,由图可见,两者都是由  $\text{SiO}_2$  构成,但石英晶体内部原子的分布无论沿哪一个方向都具有周期性,而石英玻璃中原子的分布却没有这样的周期性。迄今为止,科学家已经对各种晶体进行了详细的 X 射线微观结构分析研究,结果表明,组成晶体的原子(离子或分子)在空间的排列都是严格周期性的、非常有规则的,这称之为长程有序;而非晶体则不具备长程有序。因此严格说来,晶体是由其原子(离子或分子)在三维空间按长程有序排列而成的固体材料。

晶体又可分为单晶体(单晶)和多晶体(多晶)。如果在整块材料中,原子都是规则地、周期性地重复排列的,一种结构贯穿整体,这样的晶体称为单晶,如石英单晶、硅单晶、岩盐单晶等。而实际的晶体绝大部分是多晶,例如各种金属材料 and 电子陶瓷材料。多晶体是由大量

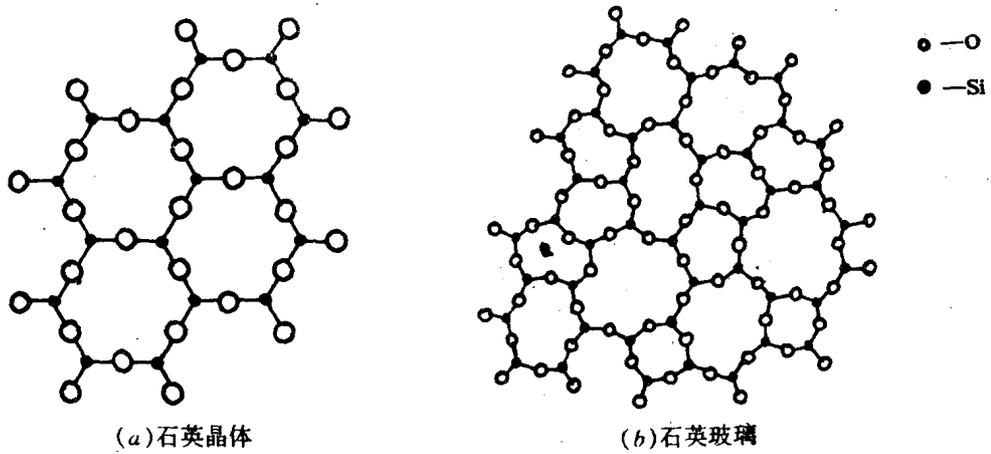


图 1-4 石英晶体和石英玻璃的微观结构

的微小单晶体(称为晶粒)随机堆砌成的整块材料。多晶中的晶粒可以小到纳米量级,也可以大到肉眼可以看到的程度,如图 1-5 所示。由于多晶中各晶粒排列的相对取向各不相同,其宏观性质往往表现为各向同性,外形也不具有规则性。

固体物理学主要研究晶态材料,这不仅是因为晶体具有上述结构和性能上的特点,更重要的是它在现代科学技术上有着极其广泛的应用。

由于晶体具有周期性,因此在固体物理中,通常都是从分析一个完整而无限的单晶模型开始,这个模型叫做理想晶体。但实际存在的晶体体积总是有限的,组成晶体的原子在表面和体内存在一定的差别;晶体中的原子在有限温度下不是在体内固定不动,而是作杂乱的、经久不息的热振动;再加上晶体内部还可能出现某些缺陷,夹含某些杂质等。这样,问题就变得十分复杂。然而在固体物理中,总是在理想模型的基础上,把热振动、缺陷、杂质等作为对理想结构的一种微小干扰来考虑。尽管理想晶体并不存在,但它却近似而又本质地反映了实际晶体。为了深刻理解和利用晶体的宏观特征,我们从理想晶体的微观结构开始研究。

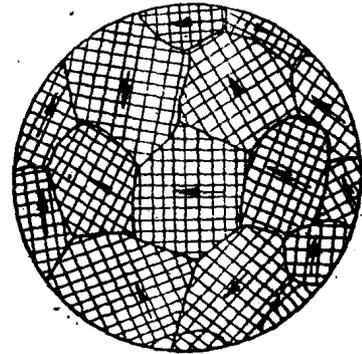


图 1-5 多晶体示意图

## § 1.2 晶体的微观结构<sup>[1~7]</sup>

晶体的微观结构包括两个方面的内容:第一,晶体是由什么原子(离子或分子)组成的;第二,原子是以怎样的方式在空间排列的。为了描述晶体微观结构的长程有序,引入空间点阵、基元及元胞等概念。

## 一、空间点阵与基元

晶体的空间点阵理论是十九世纪法国晶体学家布喇菲(A. Bravais)提出来的。按照这个学说,理想晶体的内部结构可以看成是由全同的基本结构单元——基元,在空间按一定方式作周期性无限排列而构成的。基元可以是单个原子,也可能是包括若干原子的原子集团,由具体晶体而定。为了概括晶体结构的周期性,不考虑基元的具体细节,用一个数学上的几何点来代表基元,这种点称为阵点或格点。把晶体中所有基元的阵点都抽象出来,这些阵点在空间作有规则的周期性无限分布,阵点排列的总体称为空间点阵或布喇菲点阵。显然,空间点阵中阵点分布的规律性,形象直观地反映了原子(离子或分子)在晶体中排列的规律性。为了研究方便,人们常用一些直线将阵点连结起来,就构成了空间格子,又称布喇菲格子。图 1-6 是晶体、基元及空间点阵的二维示意图。

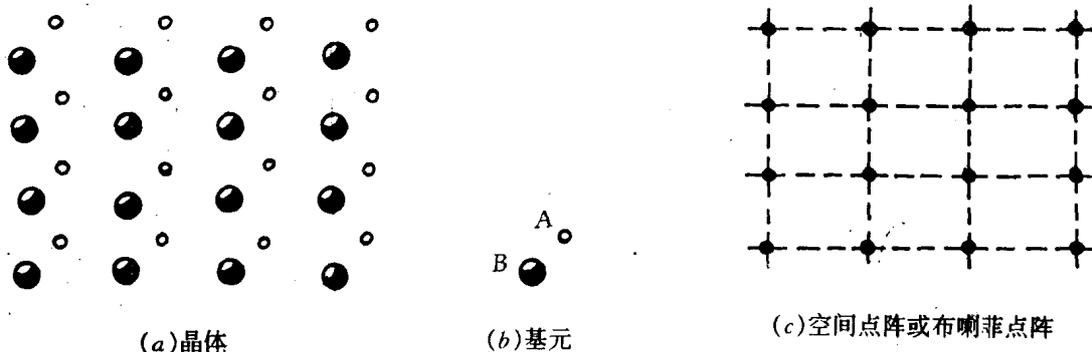


图 1-6 晶体基元与空间点阵示意图

由于基元是晶体的基本结构单元,所以每个基元内所含的原子数应当等于晶体中原子的种类数。在这里,化学成分不同的原子或化学成分虽然相同但所处周围环境不同的原子,都被看作是不同的种类的原子。例如图 1-6 中的晶体由 A、B 两种不同化学成分的原子构成,因而其基元包含了两种原子(图 1-6b)。又如金刚石晶体是由相同化学成分的碳原子构成的,但在本章第三节中将会看到,它包含了两类周围环境不一样的碳原子,因而其基元含有两种碳原子。

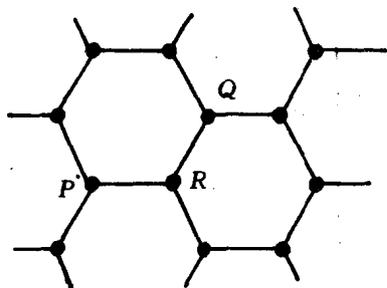


图 1-7 二维六角蜂房形点阵不是布喇菲点阵

阵点是基元的代表点,它们必须选在各基元的相同位置上,这个位置可以是重心,也可以是各基元的相同原子中心。为了便于作出某一晶体所对应的空间点阵,通常将阵点取在各基元的相同原子中心,或者说将阵点取在晶体中所有同种类的原子位置上。例如在图 1-6 中画晶体的空间点阵时,就是将阵点取在所有 A 类(或 B 类)原子上得到的。

空间点阵中所有阵点是严格的等同点,各阵点的周围环境完全相同,这包括任一阵点周

围阵点的排布及取向将完全相同。打一个形象的比喻,无论我们站在哪一个阵点上,都察觉不出周围有任何差别。作为一个鉴别的例子,我们在图 1-7 中画出了一个二维六角蜂房形点阵。从  $P$  点和  $Q$  点来看,周围环境是完全相同的;但从  $R$  点来看,周围的点排布及取向和在  $P$ 、 $Q$  点看到的则不同,周围环境不一样。因此这个点阵不是空间点阵或布喇菲点阵。

总之,只要知道了某种晶体的基元和空间点阵的情况,就知道了该晶体的原子组成和空间排列方式,晶体的微观结构也就完全确定了。晶体结构是由组成晶体的基元加上空间点阵来决定的,即

$$\text{晶体结构} = \text{基元} + \text{空间点阵(布喇菲点阵)}$$

在表达空间点阵的几何形貌时,为便于观察和描写其周期性和对称性,引入元胞的概念。

## 二、初基元胞(Primitive Cell)

所有晶体的特点是其结构的周期性,通常用初基元胞和基矢来描述晶体的周期性。

初基元胞又称固体物理学元胞,是指一个晶体及其空间点阵中最小的周期性重复单元。在图 1-8 中表示的二维点阵中,(1)、(2)、(3)都是最小周期性重复单元,(4)则不是。可见对一定的空间点阵,初基元胞的选取不是唯一的,原则上只要是最小的周期性重复单元都可以。在后面将会看到,各种晶体及其空间点阵已有习惯的初基元胞选取方式。三维空间点阵的初基元胞通常是一个平行六面体。以初基元胞的一个顶点为原点,可以引出三个不共面的边矢量  $a_1$ 、 $a_2$ 、 $a_3$ ,称之为基矢。沿三个基矢方向用平行的直线族将空间点阵中的全部阵点联接起来,便构成如图 1-9 所示的空间格子或布喇菲格子,这时的阵点成为格点。

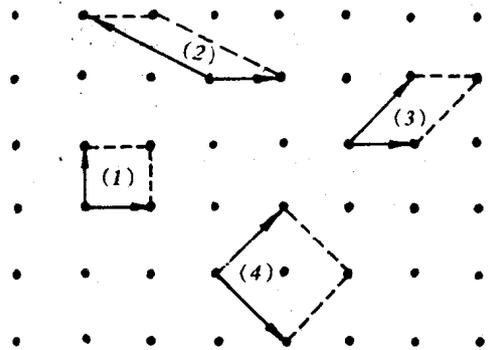


图 1-8 初基元胞的选取

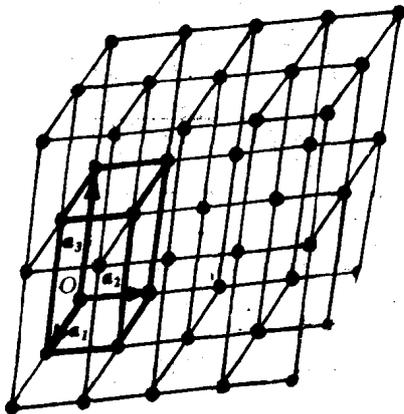


图 1-9 基矢、初基元胞与空间格子

初基元胞是空间点阵中最小的周期性重复单元,这有两个方面的含义。首先,它是最小的重复单元,每个初基元胞平均只包含一个格点(阵点)。如图 1-9 所示,格点只处于初基元胞的八个顶角上,而每个顶角上的格点又为周围八个元胞所共有,所以平均说来属于一个初基元胞的格点只有一个( $8 \times \frac{1}{8} = 1$ );其次,它是周期性重复单元。将初基元胞在空间逐步平移矢量  $a_1$ 、 $a_2$ 、 $a_3$  就可以构成整个空间格子,这正显示了晶体结构的周期性,这又称为晶体空间格子自身的平移对称性。

仍以图 1-7 为例作一个练习。如果图中的圆点都