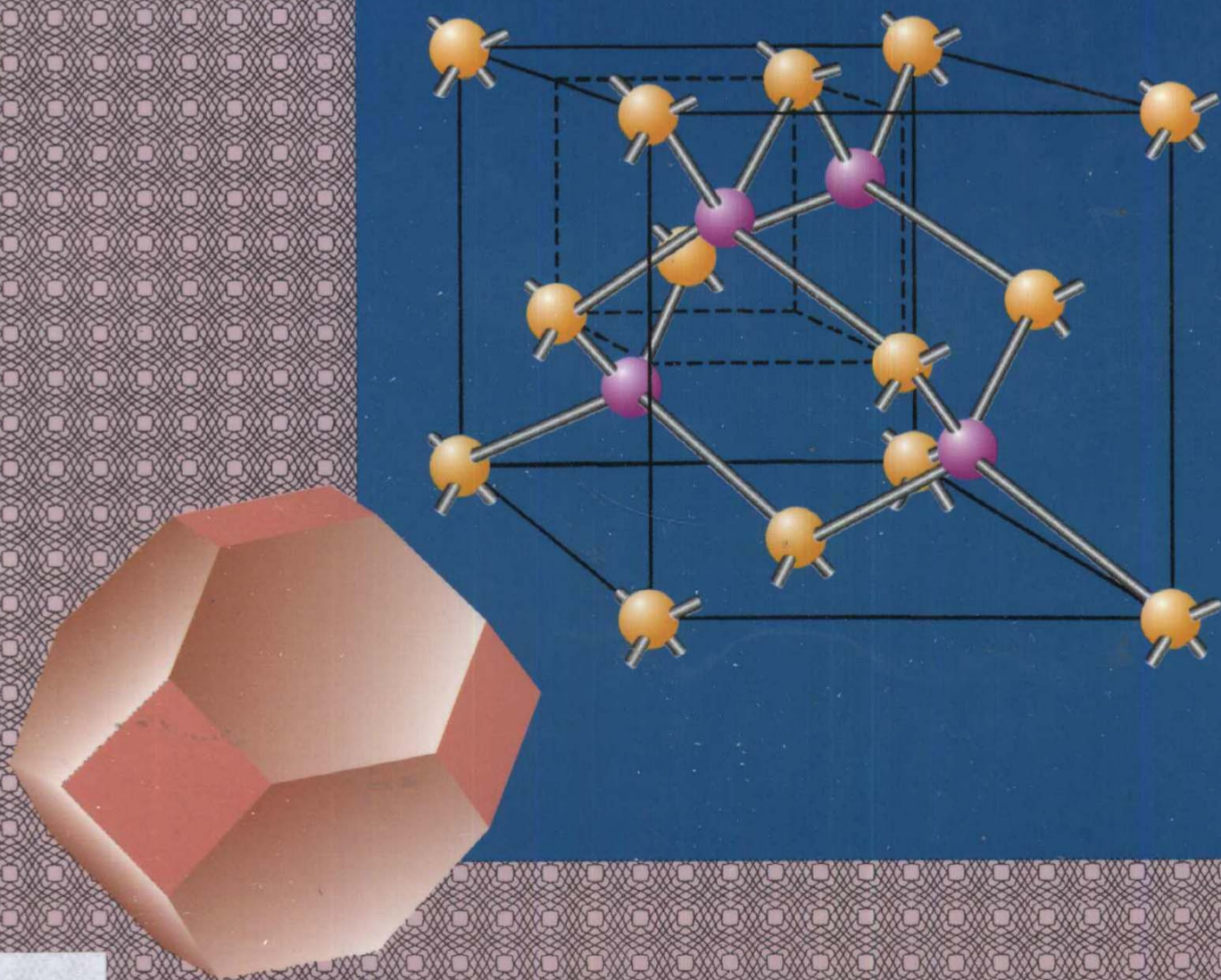


固体物理简明教程

GUTI WULI JIANMING JIAOCHENG

蒋平 徐至中 编著



复旦大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

固体物理简明教程/蒋平,徐至中编著. —上海:复旦大学出版社,2000.9
ISBN 7-309-02534-2

I. 固… I. ①蒋…②徐… III. 固体物理学-高等学校-教材 IV. 048

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2000)第 20323 号

出版发行 复旦大学出版社
上海市国权路 579 号 200433
86-21-65102941(发行部) 86-21-65642892(编辑部)
fupnet@fudanpress.com http://www.fudanpress.com

经销 新华书店上海发行所

印刷 上海第二教育学院印刷厂

开本 787×1092 1/16

印张 23.75

字数 592 千

版次 2000 年 9 月第一版 2000 年 9 月第一次印刷

印数 1—4 000

定价 36.00 元

如有印装质量问题,请向复旦大学出版社发行部调换。

版权所有 侵权必究

内 容 提 要

本书介绍固体物理的基本知识,包括晶体结构、晶体中原子和电子的运动、晶体结合等,并在此基础上叙述固体的机械、热学、电学、磁学、光学、超导电性等物理性质。本书注意吸纳近年来有关领域的最新成就,同时尽量避免繁琐的数学推演,而着重物理原理的阐述。

本书可作为综合性大学非物理专业和工科、师范类院校的本科基础课程“固体物理”的教材,亦可作物理类专业本科生、研究生及有关领域科学技术工作者的参考用书。

前 言

40年前,当我们还是复旦大学物理系本科生的时候,谢希德和方俊鑫两位先生就为我们首次开设了“固体物理”这门课程,只是当时还没有正式出版的教材。不久,在1960年代初,上海科学技术出版社出版了两位先生编著的《固体物理学》(上下两册);后来,在改革开放之初又由同一出版社出版了方俊鑫、陆栋两位先生主编的《固体物理学》(上下两册)。几十年来,复旦大学物理系一直沿用这两套《固体物理学》教材,为培养一批又一批的本科生发挥了不可磨灭的作用。迄今,它们仍不失为极有价值的教学参考用书。

然而,随着时间走向新的世纪,固体物理学课程的教学在新的历史条件下已面临前所未有的机遇和挑战,也碰到了许多难以回避的新情况、新问题。一方面,由于现代科学技术的发展和国民经济建设的需要,越来越多的理科非物理专业的毕业生,以及工科类、师范类有关专业的学生要求掌握必要的固体物理学的知识,而这方面的知识又主要表现为通晓固体的物理性质,了解固体物理学的概念与规律,却不要求熟悉各种繁琐复杂的理论计算方法;另一方面,过去沿用的固体物理学的教材要求学生有比较广博深厚的统计物理和量子力学的基础,而随着近年来教育改革的深入,特别是实行宽口径培养有创新精神的学生的方针,学生选课灵活性大为增加。对相当一部分学生来说“四大力学”已非必选课程,使得许多学生传统基础理论课的修读时数明显减少。这就相应地使现有的固体物理学教材的某些内容,由于缺少必要的前设课程的理论准备,而显得过于艰深而难以掌握。加上自方俊鑫、陆栋主编的《固体物理学》教材出版以来的近20年间,作为凝聚态物理核心的固体物理学学科本身又有了迅猛的、极具特色的发展,也需要使新世纪的建设者有所了解。这些新出现的情况使得重新编写一本适合于非物理专业学生(包括部分未修读“四大力学”的物理专业的学生)学习的固体物理学教材的必要性日益明显。这就是促使我们编写本书的缘由所在。

在本书中我们力求避免繁琐的数学推演,而着重固体性质和固体物理规律的阐述。即使为此必须应用数学方法也力求予以简化,甚至有时只列出结果,以便深化概念、突出物理。对于近年来重大的前沿性发展,我们尽可能以本科生易于接受的形式予以介绍。

多年从事低温、超导研究的邱经武教授在百忙中为本书撰写了第九章超导

电性,对此我们深致谢忱。

恩师谢希德院士 40 年前亲手将我们领进固体物理学的科学殿堂以来一直未间断过对我们的关心和指导,包括对本书的编写也多次给予了热情的关注,并慨然答允为本书撰写序言。不料就在本书定稿之际,她病重不起,终于驾鹤西去,给我们留下了永久的遗憾。我们愿本书能化作一瓣心香,祷祝我们敬爱的老师谢希德教授在天之灵。

蒋 平 徐至中

2000 年 3 月

目 录

第一章 晶体结构

1.1 布拉菲格子	1
1.2 几种典型的晶格结构	3
1.3 晶体的宏观对称性	11
1.4 晶列指数与晶面密勒指数	15
1.5 晶 系	17
1.6 倒 格 子	22
1.7 二维晶体结构	26
1.8 确定晶体结构的方法	29

第二章 晶体中的电子和声子

2.1 布洛赫定理	36
2.2 布里渊区	40
2.3 克龙尼克-潘尼问题	42
2.4 许可带与禁带	47
2.5 一维布拉菲格子的晶格振动	49
2.6 一维复式格子的晶格振动	52
2.7 声 子	55

第三章 外场作用下晶体电子的运动

3.1 晶体中电子的速度	58
3.2 电子在外电场作用下的加速度,有效质量,等能面	60
3.3 导体、绝缘体和半导体,布洛赫振荡,空穴	64
3.4 金属的电导	70
3.5 霍尔效应	75

第四章 固体的热学性质

4.1 电子气的状态密度	79
4.2 电子气的费米能级	81
4.3 电子气的热容	83
4.4 固体的热容	85

4.5	爱因斯坦模型	87
4.6	德拜模型	88
4.7	固体的热膨胀	93
4.8	固体的热传导	97

第五章 固体的机械性质

5.1	固体的结合类型	103
5.2	晶体的弹性	108
5.3	范性形变和滑移	113
5.4	滑移与位错	116
5.5	晶体中的其他缺陷	120

第六章 半导体中的电子过程

6.1	半导体的能带结构	124
6.2	杂质	131
6.3	载流子统计	137
6.4	半导体的输运特性	144
6.5	热载流子效应	150
6.6	非平衡载流子	156
6.7	p-n 结和晶体管	159
6.8	金属-氧化物-半导体(MOS)结构	167

第七章 固体的介电性质及光学性质

7.1	介电常数及极化率	171
7.2	各种固体的介电性质	172
7.3	光学常数与介电常数	183
7.4	非线性光学	187
7.5	带间跃迁光吸收	191
7.6	激子的光吸收	198
7.7	杂质及缺陷的光吸收	201
7.8	自由电子光吸收	204
7.9	晶格吸收光谱	211
7.10	喇曼光谱	215
7.11	固体光发射	218
7.12	受激发射及激光	221

第八章 固体的磁性

8.1	磁化率及固体磁性材料的分类	226
8.2	朗之万顺磁性	228

8.3	朗之万逆磁性	234
8.4	泡利顺磁性及朗道逆磁性	235
8.5	铁磁性	242
8.6	反铁磁性及亚铁磁性	247
8.7	自发磁化的局域电子模型及巡游电子模型	250
8.8	自旋波	255
8.9	磁共振	259

第九章 超导电性

9.1	超导电现象	272
9.2	超导电理论	283
9.3	超导隧道效应	305
9.4	传统超导体和高温超导体	324
9.5	超导电的应用	334

第十章 低维体系的电子性质

10.1	MOS 反型层异质结与量子阱中的二维电子气	343
10.2	量子霍尔效应	345
10.3	超晶格的电子微带	351
10.4	点接触量子化电导与电子波导	356
10.5	量子点和单电子隧穿	359
10.6	介观体系中的 AB 效应	362
10.7	量子器件	364

第一章 晶体结构

初等常识性教材常将物质按其常温下的状态分成三类：气体、液体和固体，固体被界定为既有确定的形状又有确定的体积的物质形态。这样的定义既包括晶体也包括无定型材料或非晶体（前者如金、铝、铁等金属，硅、砷化镓等人工晶体，以及岩盐、方解石等天然晶体；后者如玻璃、塑料），甚至也包括了像骨头、木材这样的生物类材料。然而大多数固体物理学教材，包括本书在内，都将讨论的对象基本上局限于无机物质构成的晶体。因此，如非特殊说明，本书中的“固体”一词即指由元素或化合物构成的晶体。

1.1 布拉菲格子

固体具有许多独特的宏观物理性质，介绍、分析这些性质就是固体物理学教材的内容。我们知道材料的宏观物理性质、化学性质取决于构成材料的元素种类，更取决于这些组成元素的原子以何种质粒形态（原子、离子、分子或它们的集团）、以何种方式排列于材料之中。质粒在固体中的空间排列方式称为晶体结构，这是研究固体的宏观性质首先要解决的问题。

晶体结构的最大特点在于其周期性，即构成晶体的质粒在三维空间作周期性的重复排列。质粒可以是原子，例如低温下的惰性气体；可以是原子实，例如金属；可以是离子，例如碱卤族化合物以及化合物半导体；可以是分子；也可以是它们的集团，例如硅、锗中的质粒就可看作是两个原子构成的集团，又如 20 世纪 90 年代发现的 C_{60} 晶体，其中每个质粒都是由 60 个碳原子组成的笼状分子。然而，尽管这些质粒形态各异，我们都可以先将它们抽象成一个点，这些点在空间的排列就代表相应的晶体结构。

晶体结构的周期性就表示为点在空间的周期性排列，这种周期性的点的阵列有的书中称作空间点阵，而在本书中称为空间格子，格子中的点亦称为格点。上面提到的质粒乃是晶体中的结构单元，单元在空间作周期性重复排列就形成晶体。如果这种单元是最小的，即单元不能再划分成更小的重复单元，则称之为基。上面列举的质粒的例子都是相应晶体中的基。我们将代表基的点周期性排成的空间格子称为布拉菲格子。显然如单元只包含一个原子，则晶体结构必为布拉菲格子。为明确起见，今后凡本书中所提及的空间格子都指布拉菲格子。这样我们可以将晶体结构看作：

$$\text{晶体结构} = \text{基} + \text{布拉菲格子} \quad (1.1-1)$$

布拉菲格子最明显的特点是其周期性。因此，格子中的每个点都是绝对等价的，每个点的周围环境也都是完全相同的。这里我们作了一个理想化的假定，即认为格子在空间是无限

延伸的,而不管实际晶体的体积总是有限的事实。布拉菲格子的周期性也可以用数学公式的形式表达。为清楚起见,我们以图 1.1-1 所示的二维情形加以说明。在格子中选取某一点 O 作为原点。并在两条由格点组成的通过 O 的直线链 OC 与 OD 中取出最靠近 O 点的 A 与 B ,并作矢量

$$\begin{cases} \overrightarrow{OA} = \mathbf{a}_1 \\ \overrightarrow{OB} = \mathbf{a}_2 \end{cases} \quad (1.1-2)$$

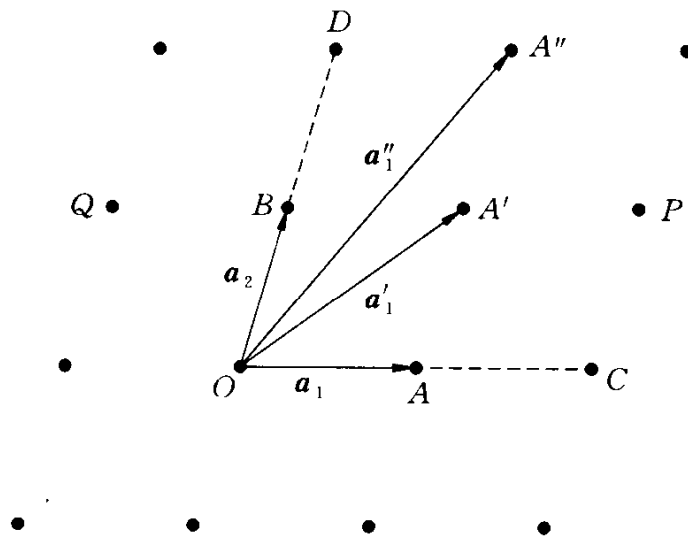


图 1.1-1 二维布拉菲格子及其基矢

使格子中的任何一点的位置矢量 \mathbf{R}_n 都可表示为

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 \quad (1.1-3)$$

其中 n_1 与 n_2 均为整数。例如 P 点的位置即可表示为

$$\mathbf{R}_P = 2\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 \quad (1.1-4)$$

由此,我们看出,如果 \mathbf{a}_1 与 \mathbf{a}_2 一经确定,则当 n_1 与 n_2 取包括零的任意正、负整数时,(1.1-3)式即能概括格子中的任何格点的坐标。换言之,利用 \mathbf{a}_1 与 \mathbf{a}_2 ,通过(1.1-3)式可以完全表达一个二维的布拉菲格子,因此 \mathbf{a}_1 与 \mathbf{a}_2 称为基矢。如用 \mathbf{a}_1 与 \mathbf{a}_2 为边构成一平行四边形,则此平行四边形在空间沿 \mathbf{a}_1 及 \mathbf{a}_2 方向的重复排列填满全部二维空间(纸面)而无任何空隙。常将这一由基矢围成的平行四边形称作原胞。不难看出,每个原胞内只包含一个格点(在图示情形,每个原胞顶点的格点均为四个相邻的原胞所共有,四个顶点仍相当于一个格点),或者说原胞面积与一个格点在平面上平均所占的面积相等。以上情形很容易推广到三维情形。在三维空间格子中选择某一格点为原点,类似地选择从原点出发的三条非共面的矢量 \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 、 \mathbf{a}_3 作为基矢,就可由

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (1.1-5)$$

确定全部格子。这里 n_1 、 n_2 、 n_3 均为包括零的任意整数。同样,由基矢 \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 、 \mathbf{a}_3 作边可构成一平行六面体,这就是三维布拉菲格子的原胞,原胞体积与每个格点在空间平均占有的体积相等,每个原胞内只包含一个格点。

值得注意的是,基矢 \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 、 \mathbf{a}_3 的选择并不是唯一的。从图 1.1-1 中很容易看出,选取 \mathbf{a}'_1 或 \mathbf{a}''_1 都与 \mathbf{a}_1 一样满足基矢的要求,例如 \mathbf{a}'_1 与 \mathbf{a}_2 构成的原胞面积和 \mathbf{a}_1 与 \mathbf{a}_2 构成的完全相

同。显然这是布拉菲格子的周期性的必然结果。如果没有周期性,每个格点所平均占据的空间就不一定相同。通常对于一个给定的布拉菲格子,其基矢往往有已经约定的选取方法以克服任意性带来的困难,下一节中将给出一些具体的例子。

1.2 几种典型的晶格结构

组成晶体的原子(这里为简单计,也包括原子实或离子)在空间作周期性的排列,当然同上节介绍的格点一样,也形成一种格子,这种由具体原子而非抽象格点排成的格子称作晶格。原子在晶格中的排列方式就是晶体结构,或称晶格结构。世界上存在无数晶体材料,也就存在各式各样的晶格结构,具体都表现为不同的基排列在不同的布拉菲格子上。本节将通过一些典型的晶格结构使我们对此有一具体的印象。

通常将晶格分成简单格子与复式格子两种。如果基中只包含一个原子则为简单格子。显然此时晶格即为一布拉菲格子。换言之,简单格子必为布拉菲格子,而原胞中也只包含一个原子。如果基中包括的原子数不止一个,则称为复式格子。设基中包含 n 个原子,由于代表基的格点在空间重复排成某种布拉菲格子,则基中每一个原子也相应地在空间重复排成相同的布拉菲格子,我们称其为子晶格。因此,这种晶体结构可看作 n 个相同的子晶格复合而成。子晶格都是布拉菲格子,彼此相同,只是相互在空间有一定的相对平行移动,子晶格间的这种相对穿套移动与基中相应原子间的相对位置相同。可以想到,此时每个原胞中必包含 n 个原子。

一、简立方结构

简立方结构如图 1.2-1 所示。在边长为 a 的立方体的每个顶角处都有一原子占据。原胞的三个基矢 \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 、 \mathbf{a}_3 长度相等,方向垂直,各自构成立方体的三条边,可表示为

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = \mathbf{e}_1 a \\ \mathbf{a}_2 = \mathbf{e}_2 a \\ \mathbf{a}_3 = \mathbf{e}_3 a \end{cases} \quad (1.2-1)$$

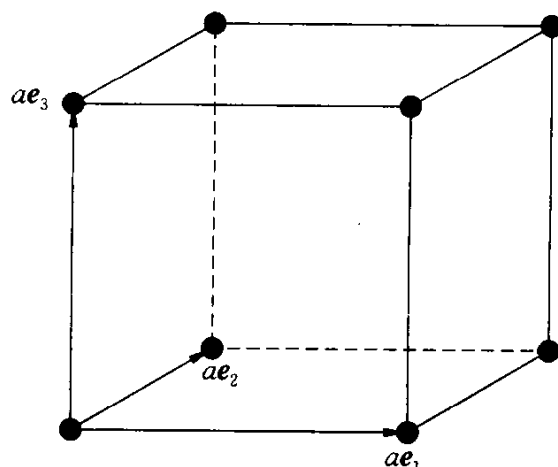


图 1.2-1 简立方结构

其中 \mathbf{e}_1 、 \mathbf{e}_2 、 \mathbf{e}_3 为沿立方体边的单位矢量, a 为立方体边长,称作晶格常数,也是这一结构中

最近邻原子之间的距离。显然简立方结构为一简单格子,或者说简立方是一种布拉菲格子,因为不难看出其中任何一个格点都是等价的。设想我们处于任何一个格点或原子的位置观察其上下、前后、左右,看到的环境都是完全相同的,只需想象晶体是图示原胞在三个相互垂直的方向无限延伸即可。虽然在自然界中几乎没有哪一种简单格子的晶体,其中原子按简立方排列,却有不少复式格子的晶体可以看作是由简立方结构的子晶格穿套而成的,下面将介绍的氯化铯结构即为一典型的例子。

二、氯化铯型结构

氯化铯晶体的原胞形状也是一个立方体,如图 1.2-2 所示。基矢也是三个沿立方体边长的矢量。与简立方的区别在于,如果立方体顶角为氯离子的话,则在立方体的中心——称为体心的位置上存在一个铯离子。具有类似于图 1.2-2 的结构,即在立方体顶角与体心处存在不同的离子的晶体,统称为具有氯化铯型结构。不难看到,在图 1.2-2 的情形,氯离子构成一个子晶格;铯离子也构成一个相同的子晶格。它们都是简立方布拉菲格子,只不过后者相对于前者有沿立方体对角线方向一半对角线长度的相对移动。换言之,这是由两个简立方穿套而成的。如果取某一顶角处的氯离子与位于体心的铯离子组成基,并将其连线上的某一点选做基的代表点即格点的位置,例如取其中心或重心,则格点排成的布拉菲格子也就是简立方。这时(1.1-1)式就表现为

氯化铯型晶格 = 两个不同种离子组成的基 + 简立方格子

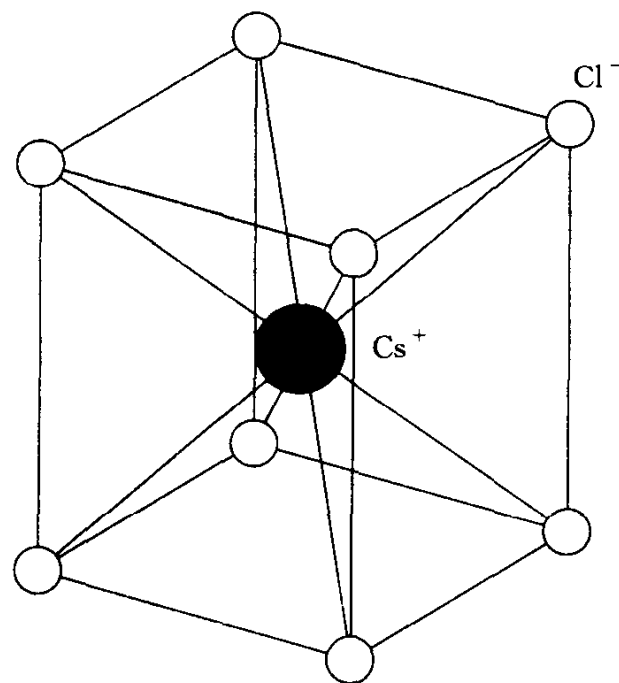


图 1.2-2 氯化铯结构

现在不难看出,每个原胞内包含一个基,其中包含的原子数即为子晶格的数目。我们还可以看出,基中包含的原子是不等价的,在现在的情形,氯离子与铯离子当然不同,是显而易见的。其实,这是基的必要条件,如果基中含有等价的原子或离子,即如果它们周围的情况都一致,则必可将基划分成更小的重复单元,即能找到更小的名副其实的基,使其中所包含的原子或离子都不等价。

三、体心立方结构

如果在氯化铯型结构中立方体的顶角与体心均为同种原子所占据,则形成体心立方结构,如图 1.2-3 所示。碱金属与铁、铬、钼等金属材料具有体心立方结构。在这些材料中,金属原子实(以下简作原子)占据立方体顶角与体心的位置。

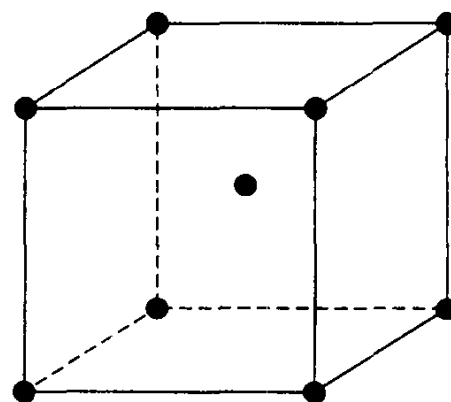


图 1.2-3 体心立方结构

值得注意的是,与氯化铯结构不同,体心立方是一种布拉菲格子,因为位于顶角和体心上的同种原子是完全等价的,它们具有完全相同的周围环境,只要注意实际晶体乃是图示立方单元的无限重复延伸。因此在这种结构中基只包含一个原子,而不像氯化铯中基是由位于顶角和体心的两个不同种类的离子构成。但是图 1.2-3 的立方单元中包含了两个原子,每个顶角原子为 8 个相邻的立方单元所共有,即立方单元包含了两个基,因此并不是原胞,原胞基矢也不沿立方体的边。通常将体心立方结构的原胞基矢取成如下形式:

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3) \\ \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3) \\ \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3) \end{cases} \quad (1.2-2)$$

这里 a 与 \mathbf{e}_1 、 \mathbf{e}_2 、 \mathbf{e}_3 的意义和(1.2-1)式相同。实际上,上式所表达的三个基矢正好是从一个顶角到三个相邻的体心的矢量,如图 1.2-4 所示。

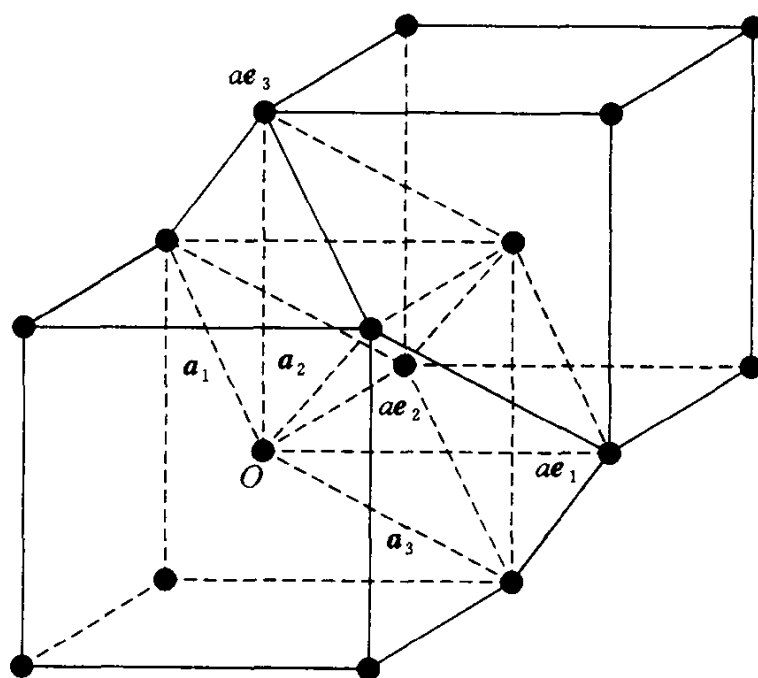


图 1.2-4 体心立方结构的原胞与基矢

由(1.2-2)式知,原胞的体积 $\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = a^3/2$, 恰为立方单元的一半,这与图 1.2-3 所示的立方单元中包含两个原子(或两个基)是一致的。

四、面心立方结构

面心立方结构也可用边长为 a 的立方单元来表示,如图 1.2-5 所示。除去立方体的顶角以外,每个立方体面的中心也为同种原子所占据,而体心上并无原子。根据与上面介绍的类似的分析,可知面心立方也是一种布拉菲格子,因为处于面心的原子与处于顶角的同种原子是完全等价的。同时,图示立方单元也非这一结构的原胞,因为这一单元中包含了四个原子(每个面心原子为两个相邻的立方单元共有)。通常取原胞基矢为

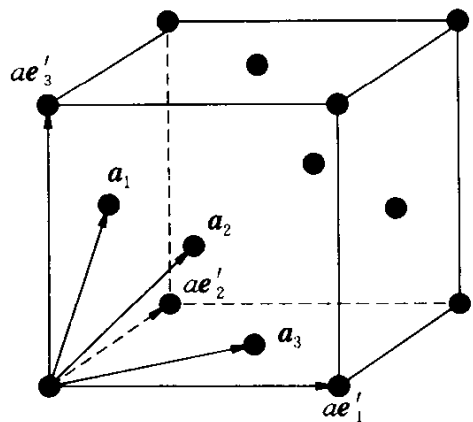


图 1.2-5 面心立方结构

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3) \\ \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_1) \\ \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2) \end{cases} \quad (1.2-3)$$

它们是由一个顶角到同属一个立方单元的三个相邻面心的矢量。容易验证由这三个基矢围成的原胞的体积 $\Omega = a^3/4$,符合布拉菲格子原胞基矢的要求。

五、金刚石结构

这是一种典型的、也是极为重要的晶体结构,因为重要的半导体材料锗和硅就具有这种形式的结构。金刚石结构也可以一立方单元表达,如图 1.2-6 所示。我们看到碳原子除去占有立方体的顶角与面心以外,还有四个碳原子分别占据四条体对角线上距顶角 $\frac{\sqrt{3}}{4}a$ 处,即对角线长度的 $\frac{1}{4}$ 处, a 为立方单元边长。图中为清楚起见,我们将这四个位于立方单元内部的原子涂黑并用带撇(')的字母 A' 、 B' 、 C' 与 D' 代表,它们与位于顶角和面心的一样,都是

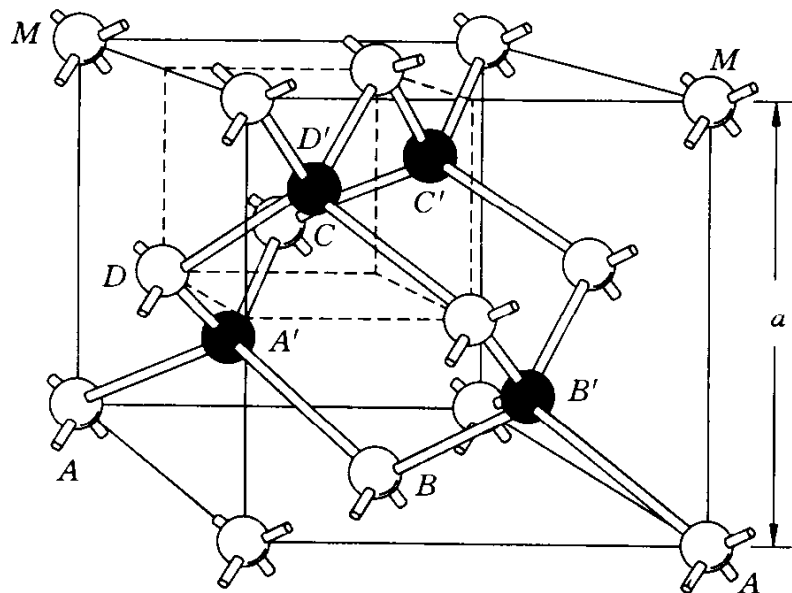


图 1.2-6 金刚石型结构

碳原子。仔细观察图 1.2-6,我们会发现最近邻原子间的距离正好也就是体对角线长度的 $1/4$,而且每个原子有四个最近邻,例如图中 A' 的四个最近邻分别是位于顶角的 A 与三个位于面心的 B 、 C 、 D 。它们恰好形成一个正四面体结构,这是金刚石结构的一个突出的特点。金刚石型结构并不是布拉菲格子,因为相邻的两个原子虽然相同却并不等价,例如 A 与 A' 。如果位于 A 处沿体对角线向上观察,在 $1/4$ 对角线处有一个原子,即 A' ;但如位于 A' 作同样的观察,在体心处并没有原子,可见它们有不同的周围环境,因而是不等价的。晶格中存在不等价的原子必非布拉菲格子。但是金刚石结构中位于立方体顶角与面心的原子却是等价的。同时,位于图 1.2-6 中体对角线上的原子也是彼此等价的,因为它们都可看作立方单元顶角或面心上的原子顺立方体对角线 AM 方向平移 $1/4$ 对角线长度而得到。图中的 A' 、 B' 、 C' 与 D' 就可分别由 A 、 B 、 C 与 D 平移而得到。既然前者互相等价,后者也互相等价。它们各自形成两个相同的子晶格——都是面心立方。整个晶体结构就可看作这两个面心立方子晶格沿立方体对角线平移 $1/4$ 对角线长度相互穿套而成。因此,金刚石结构是一个由两个面心立方布拉菲格子穿套成的复式格子。其基矢可以采用任一子晶格的基矢,亦即(1.2-3)式的面心立方的基矢。基则由两个不等价的原子,例如 A 与 A' 组成。不难看出由基矢决定的原胞正好包含一个基,因为 A 在原胞的顶角,而其内部还有一个,也只有一个原子 A' 。

六、闪锌矿(立方 ZnS)型结构

如果在图 1.2-6 中,顶角与面心处为硫离子,而在立方单元的内部,即 A' 、 B' 、 C' 与 D' 处为锌离子,就形成闪锌矿结构。换言之,闪锌矿结构为由硫离子与锌离子各自构成的面心立方子晶格沿立方体对角线平移 $1/4$ 长度相互错开穿套而成,显然亦为复式格子;其基即由一对硫离子与锌离子组成。重要的 III-V 族与 II-V 族化合物半导体材料都具有闪锌矿型结构。

七、氯化钠型结构

这也是一种子晶格为面心立方的复式格子晶体结构,即其相应的布拉菲格子也是面心立方。如图 1.2-7 所示,互相穿套的两个面心立方子晶格分别由氯离子和钠离子组成,彼此沿立方体边错开 $a/2$ 的距离而穿套, a 为立方体边长。原胞基矢就是面心立方的基矢(1.2-3),原胞内包含两个异号离子 Cl^- 与 Na^+ ,例如图中位于面心的 A 与位于体心的 A' 。

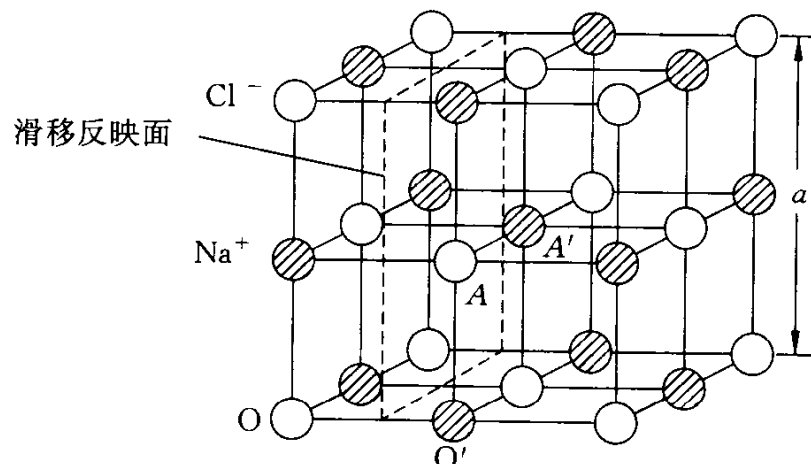


图 1.2-7 氯化钠型结构

注意:不要将这种结构误视为原胞边长为 $a/2$ 的简立方,因为氯离子与钠离子是不等价的。

八、 C_{60} 晶体结构

C_{60} 是 20 世纪 90 年代初发现的由 60 个碳原子结合而成的分子,具有类似于足球形状的笼形结构,如图 1.2-8 所示,分子直径约为 10.9 纳米。以 C_{60} 分子作基形成的晶体相应的空间格子是面心立方,每个 C_{60} 分子均位于面心立方的格点上。因此,原则上这是由 60 个面心立方子晶格穿套而成的复式格子,每个原胞内均包含一个 C_{60} 分子。不过在常温下 C_{60} 分子往往绕基中心迅速转动,而不是稳定地位于格点上。

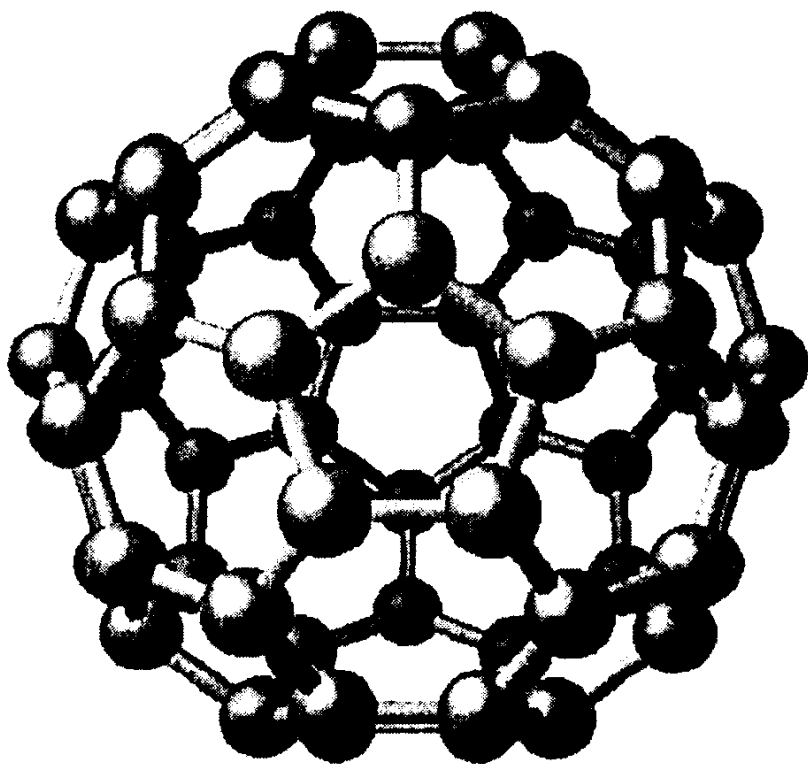
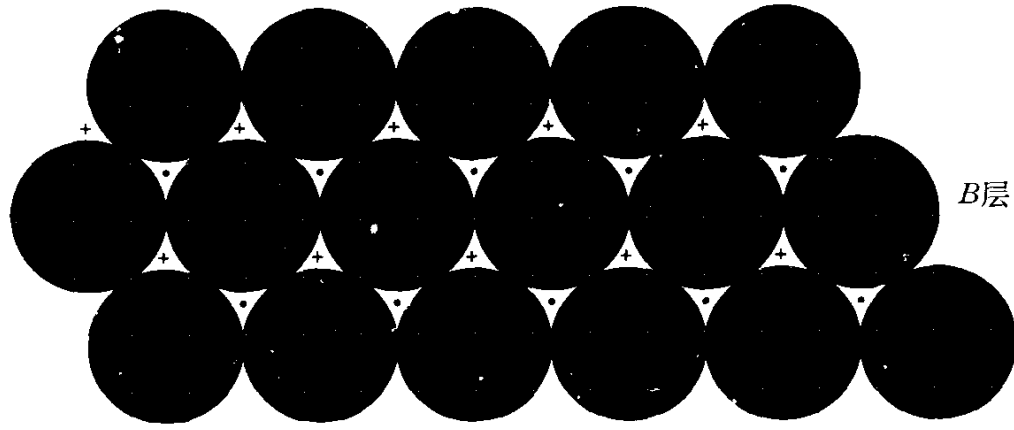


图 1.2-8 C_{60} 分子

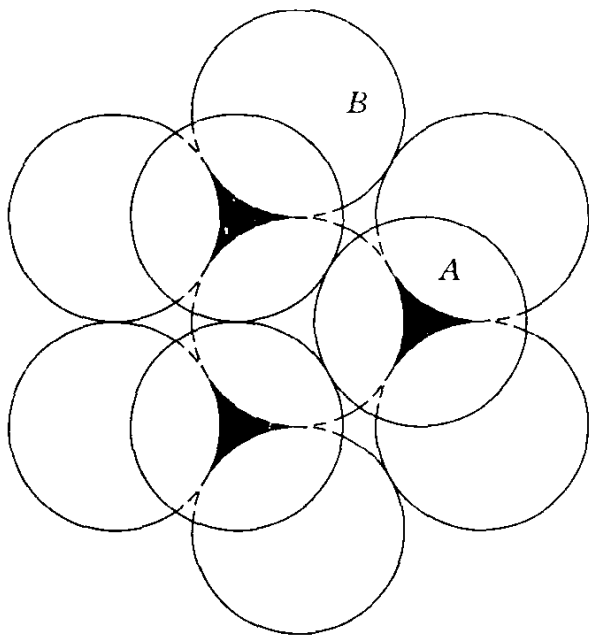
九、六角密集结构

一般而言,金属原子在结合成晶体的时候,由于其结合力的特性(见第五章),倾向于形成最近邻原子数比较多的结构形式。例如,碱金属所呈现的体心立方结构,从图 1.2-3 可见最近邻就有 8 个原子。常将最近邻原子的数目称为配位数,8 在配位数中位列第二,仅次于最高配位数 12。如果将原子看作刚性球,则配位数为 12 的结构乃是排列得最为紧密、余下空隙最小的结构。在平面上用同样大小的球排成最密集的结构,使相邻球彼此接触,必然是每个球的周围有 6 个最近邻,如图 1.2-9a 所示。将此平面上的原子整体称为层,并将其中每个原子周围的 6 个空隙依次相间标为 A 类空隙与 C 类空隙。在每个 A 类空隙上放置一个相同的球,并在层(B 球)下方相同的位置上也安放 3 个球。如此在 B 层上下紧密安放的 6 个球也同中心球紧密接触,形成了 ABA 式的三层结构,如图 1.2-9b 所示。如果原子按同样的形式在与纸面垂直的方向上排成 ABAB……的重复结构,就构成所谓的六角密集,配位数为 12。不少金属,如镁、钴、锌、镉等都具有六角密集型结构。

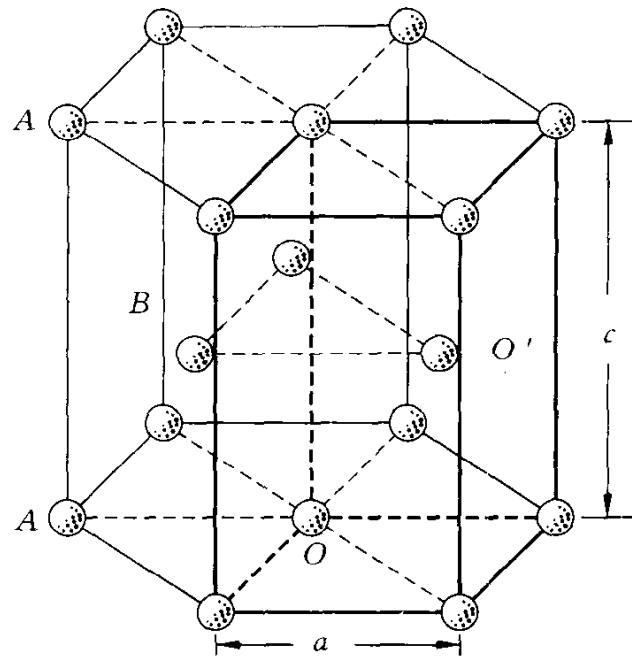


(a)

+——A类空隙；•——C类空隙；纸面为B层



(b) ABA 型结构



(c)

图 1.2-9 六角密集结构

如果我们也同前面一样，将六角密集结构画成原子间用短棍相连接的形式，则如图 1.2-9c 所示。其中粗线画出的的是一个垂直棱柱，高为 c ，底面为边长 a 、夹角 120° 的菱形。这一棱柱正是六角密集的原胞。原胞的顶角都是 A 层原子，而内部有一个 B 层原子 O' ，位于距底面 $c/2$ 的高度。理想的六角密集结构中 $c/a = \sqrt{8/3}$ 。不难看出图中 O 与 O' 是不等价的，因此六角密集也是一个复式格子，由分别位于 A 层与 B 层的子晶格沿 OO' 方向穿套而成。子晶格称为简单六角格子。图 1.2-9c 中所画的原胞也正是 A 层原子构成的子晶格的原胞，原胞中包括两个原子 O 与 O' ，它们正好构成这一复式格子的基。

有趣的是如果将图 1.2-9b 中 B 层上方的原子绕通过中心原子的垂直轴线转动 60° ，使其不处于 A 类空隙，而处于 C 类空隙，即使 B 层上下方的原子层彼此错开 60° ，如图 1.2-10a 所示，并在垂直于纸面的方向按如此形成的 ABC 型次序重复排列，就得出了另一种配位数也是 12 的密集结构。其实这正是面心立方结构，因此 ABCABC……型密集排列又称立方密集。事实上从图 1.2-5 已不难看出，面心立方的配位数是 12，例如处于原点顶角处的原子正好有 12 个处于面心的原子在其最近邻的位置上，这 12 个面心正好在立方体对角线的方向