

“十三五”普通高等教育本科规划教材

材料物理基础

杨雷 编著



北京航空航天大学出版社

“十三五”普通高等教育本科规划教材

材料物理基础

杨雷 编著



清华大学出版社

北京

材料物理基础是探究材料结构以及材料性质的物理机理的科学,该教材主要内容有晶体结构、金属自由电子费米气模型、能带论、电子在电磁场中的运动、晶格振动与晶格热性质、晶体结合,全书共六章。每章开始设有学习导读,每章结尾有本章小结和本章主要脉络,便于读者学习。此外,本书还配有习题及详细解答,通过扫描二维码可以获得解题指导及答案。

本书可作为材料类专业及应用物理等相关专业本科生、研究生的教材或参考书,也可作为从事材料研究、生产、应用及其他相关行业科技人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

材料物理基础/杨雷编著. —北京:化学工业出版社,2016.9

“十三五”普通高等教育本科规划教材

ISBN 978-7-122-28227-9

I. ①材… II. ①杨… III. ①材料科学-物理学-高等学校-教材
IV. ①TB303

中国版本图书馆CIP数据核字(2016)第240206号

责任编辑:王婧 杨菁

装帧设计:张辉

责任校对:王素芹

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)

印—装:高教社(天津)印务有限公司

787mm×1092mm 1/16 印张16 字数395千字 2017年1月北京第1版第1次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价: 38.00 元

版权所有 违者必究



前言

材料物理基础是探究材料结构以及材料性质的物理机理的科学。材料专业的学生，物理学的基础相对薄弱。目前主要的相关教材内容比较难懂，知识点之间的跳跃性比较大，缺乏中间步骤。这些教材显然是针对具备一定物理基础的专业人才编写的。对于材料专业的本科生，学习起来相当吃力。因此需要为他们准备内容比较通俗易懂的教材。

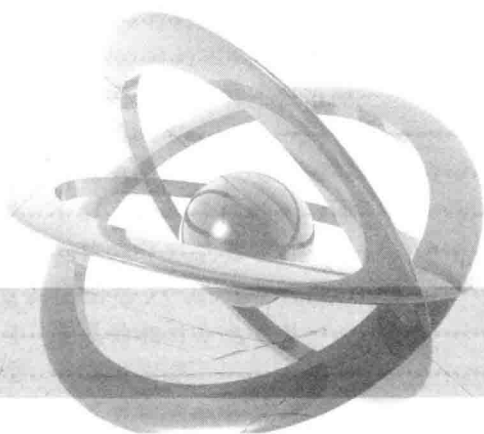
针对这一情况，编者选择材料物理基础中无法回避又相对浅显的知识点，如晶格结构与振动、晶体结合和材料中的电子进行探究。材料物理基础课程的很多知识点都是在探究过程中，抓住主要矛盾，避开次要矛盾，建立合理的物理模型，构建方程，获得结论。在这一过程中需要比较深厚的物理基础。编者在编写过程中注意到这一点。一方面通过补充必要的背景知识，另一方面，恢复了从模型到结论之间的中间步骤。在具体的公式推导过程中，中间步骤精确到了初等的代数运算，省去了读者重复中间过程花费的大量时间。读者在看书过程中不再感觉到跳跃性大，内容难懂，解除了读者对结论的疑惑。为了进一步方便读者掌握课程的内容，在每章开头设有学习导读，使作者看书时，对这一章知识有一个初步了解。在每章结尾，设有本章小结和本章主要脉络，使读者读完每一章，对这一章的大体内容有一个全方位的掌握，把书由厚变薄。

为了让读者能够充分掌握课程的主要知识点，本教材中每一个重点的概念都加黑表示。同时配有习题和配套习题解答，通过扫描二维码可以获得解题指导。读者在练习习题的过程中，能够再次加深对课程主要知识点的掌握。

由于编者水平有限，书中难免有错误，希望读者指正。

杨 雷

2016年7月



1	1
晶体结构	1
1.1 几种常见的晶格结构	2
1.1.1 简单立方结构	2
1.1.2 体心立方结构	3
1.1.3 面心立方晶格与密排六方晶格	4
1.1.4 金刚石结构	6
1.1.5 NaCl结构与CsCl结构	7
1.2 晶格的周期性	7
1.2.1 布拉菲点阵	7
1.2.2 简单立方布拉菲点阵	8
1.2.3 面心立方布拉菲点阵	9
1.2.4 体心立方布拉菲点阵	10
1.2.5 CsCl结构布拉菲点阵	10
1.2.6 密排六方点阵的描述	11
1.3 晶面指数和晶向指数	12
1.3.1 晶面指数	12
1.3.2 晶向指数	14
1.4 倒格子	15
1.4.1 倒格子的定义	15
1.4.2 倒格子的基本性质及晶面方程	16
1.4.3 倒格子在晶体几何中的应用	19
1.5 晶体点对称性的描述	24
1.5.1 晶体中对称操作的种类	24
1.5.2 晶体中的点对称操作	25
1.5.3 点对称操作矩阵为正交矩阵	26
1.5.4 点对称操作的矩阵描述	27
1.5.5 对称操作对物理量的简化	32
1.6 晶体学点群	35
1.6.1 群	35

1.6.2	晶体学点群的对称元素	36
1.6.3	对称元素组合规律	37
1.6.4	关于立方体对称与四面体对称	41
1.6.5	晶体学点群	43
1.7	晶体空间群	44
1.7.1	转动平移算符	44
1.7.2	晶格点阵对转动平移算符的要求	45
1.7.3	空间群实例	50
1.8	晶体、非晶和准晶的结构	52
1.8.1	布拉菲点阵的 7 个晶系	52
1.8.2	空间群的 14 种布拉菲格子	53
1.8.3	二维空间的布拉菲点阵	54
1.8.4	非晶体的结构	55
1.8.5	准晶体的结构	56
1.9	晶体结构的实验确定	56
1.9.1	X 射线衍射的几何原理	56
1.9.2	几何结构因子和原子形状因子	58
1.9.3	多晶体衍射的总强度	59
1.10	常见晶体结构的类型	61
1.10.1	常见单质晶体结构	61
1.10.2	AX 型结构	67
1.10.3	AX ₂ 型结构	69
1.10.4	A ₂ X ₃ 型结构	72
1.10.5	ABO ₃ 型结构	73
1.10.6	AB ₂ O ₄ 型结构	76
1.10.7	离子晶体离子排列规律	77
第 1 章小结		78
第 1 章主要脉络		79

2

金属自由电子费米气模型

80

2.1	自由电子费米气模型	80
2.1.1	本征态和本征能量	82
2.1.2	费米面与费米能	85
2.1.3	自由电子气平均每个电子的能量	86
2.1.4	自由电子气态密度	87
2.2	金属自由电子气的热性质	88
2.2.1	费米分布函数	88
2.2.2	计算积分	88
2.2.3	$T \neq 0$ 时的费米能	91
2.2.4	电子比热容	91
2.3	金属自由电子气的泡利顺磁性	93

2.3.1	$T=0\text{K}$ 时的磁化率	94
2.3.2	$T\neq 0\text{K}$ 时的磁化率	95
2.4	金属自由电子气的导电性	97
2.4.1	准经典模型	97
2.4.2	自由电子在电磁场中运动的动力学方程	97
2.4.3	金属自由电子气的电导率	98
2.5	金属自由电子气的霍尔效应	101
2.6	金属自由电子气的光学性质	104
2.6.1	金属的相对介电系数	104
2.6.2	金属折射率	105
2.6.3	金属吸收系数和反射率	106
2.6.4	关于金属自由电子气光学性质的讨论	106
2.6.5	等离子振荡	107
2.7	热电子发射	108
2.7.1	发射电流密度	108
2.7.2	功函数	110
2.7.3	接触电势	110
第2章小结		111
第2章主要脉络		112

3

能带论

113

3.1	电子运动的分离和多体问题的简化	114
3.1.1	绝热近似	114
3.1.2	单电子近似	114
3.1.3	周期场近似	115
3.2	布洛赫定理	115
3.2.1	布洛赫定理	115
3.2.2	波矢 k 的物理意义	117
3.2.3	能带及其图示	118
3.3	近自由电子近似	119
3.3.1	弱周期势近似下, 一维晶体的本征函数和本征能量	120
3.3.2	简并态微扰与能隙	123
3.3.3	弱周期势近似下, 三维晶体平面波方法	127
3.4	紧束缚势近似	132
3.4.1	紧束缚近似下的波函数与能带	132
3.4.2	万尼尔函数	138
3.5	晶体的能带结构、布里渊区和费米面	140
3.5.1	晶体能带的对称性	140
3.5.2	布里渊区	141
3.5.3	布里渊区中的费米面	146
3.5.4	态密度	148

第3章小结	151
第3章主要脉络	152
4	153
电子在电磁场中的运动	
4.1 能带中电子运动的准经典模型	153
4.1.1 布洛赫电子的平均速度	153
4.1.2 能带中的电子在电磁场中运动的模型	155
4.1.3 有效质量张量	155
4.2 恒定电场作用下电子的运动	158
4.2.1 恒定电场作用下的电子	158
4.2.2 能带结构与导电性关系	159
4.3 恒定磁场作用下电子的运动	163
4.3.1 自由电子在恒定磁场中的经典运动	163
4.3.2 自由电子在磁场中运动的量子理论	165
第4章小结	172
第4章主要脉络	173
5	174
晶格振动与晶格热性质	
5.1 离子实运动的分离和多体问题的简化	174
5.1.1 体系的哈密顿量	174
5.1.2 绝热近似	175
5.1.3 简谐近似	176
5.2 一维单原子链的振动	176
5.2.1 一维单原子链振动方程及其解	176
5.2.2 波矢 q 的取值区间	178
5.2.3 一维单原子链的色散关系	178
5.3 一维双原子链的振动	180
5.3.1 一维双原子链的运动方程及其解	180
5.3.2 光学支和声学支的物理图像	181
5.4 三维晶格的振动	183
5.4.1 波矢 q 的取值	183
5.4.2 简单晶格与复式晶格的格波	184
5.4.3 金刚石的振动谱	185
5.4.4 $\omega(q)$ 的对称性	185
5.5 晶格振动的量子理论	185
5.5.1 离子实运动的哈密顿量	185
5.5.2 一维单原子链简谐振动的哈密顿量以及简正坐标	186
5.5.3 利用简正坐标化简哈密顿量	187
5.5.4 简正坐标满足的运动方程及其物理含义	189
5.5.5 声子	191

5.6	晶格振动谱的实验测定	193
5.6.1	声子参与的能量守恒方程与动量守恒方程	193
5.6.2	热中子的非弹性散射	195
5.6.3	可见光的非弹性散射	196
5.7	晶格比热容	196
5.7.1	晶格振动对晶格比热容的贡献	196
5.7.2	晶格比热容理论结果以及与实验比较	202
5.7.3	爱因斯坦模型	203
5.7.4	声子态密度	205
5.8	晶格振动的非简谐效应	207
5.8.1	晶格热膨胀	207
5.8.2	晶格热导率	210
	第5章小结	214
	第5章主要脉络	215

6

216

晶体结合

6.1	离子键结合	216
6.1.1	马德隆常数	216
6.1.2	晶体的结合能	217
6.1.3	弹性模量	219
6.2	共价键结合	221
6.2.1	电子薛定谔方程	221
6.2.2	两个同种原子之间的共价键结合	222
6.2.3	两个不同原子间的共价键结合	224
6.2.4	金刚石结构的共价键结合	226
6.2.5	共价键结合的两个基本特征	226
6.3	金属性结合与范德瓦耳斯结合	227
6.3.1	金属性结合	227
6.3.2	范德瓦耳斯结合	227
	第6章小结	228
	第6章主要脉络	229

230

习题

242

参考文献

243

附录

主要符号表	243
常用的物理常数	245



1 晶体结构

学习导读

固体材料是由大量的原子（或者离子）组成的复杂体系，每 1cm^3 的体积中大约有 10^{23} 个原子。与气体不同，在固体中的原子以一定方式排列，形成晶格。本章的内容主要包括格子、对称性和 X 射线衍射等几个部分，首先从简单的晶格排列入手，先介绍几种简单的晶格，然后将原子在空间的排列抽象成空间点阵。这样可以根据晶格的周期性，引入原胞和布拉菲格子，将晶格抽象成布拉菲点阵或者基元加布拉菲点阵的形式。引入点阵后，晶格中的晶面和晶向可以用三个指数的形式表示。为了使傅里叶变换得方便，任何布拉菲格子都可以引入相应的倒格子。根据倒格子的基本性质，可以方便地确定晶格中晶面的间距和晶面或晶向之间的夹角。本章 1.5 节开始介绍对称性的概念。晶体的点对称操作都可以用一个矩阵表示。晶体所有对称操作的集合就构成群。晶体的对称操作可以使晶体的相关物理量（如介电系数）得到简化。根据晶体的对称性，可以把晶体分成 32 个点群和 230 个空间群。根据这些群，可以把晶体分成 7 个晶系 14 个格子。最后本章介绍 X 射线衍射确定晶体的晶格。通过引入几何结构因子，发现有些晶格会发生几何消光。

根据固体中原子排列方式的不同，人们把固体分为晶体、非晶体和准晶体。图 1-1 列出了晶体与非晶体结构上的差异。晶体中的原子在较长的尺度范围内原子的排列十分有规则，具有长程有序性，常见的晶体有石英晶体、单晶硅、金属等。晶体可以分为单晶体和多晶体。单晶体是由一个晶粒组成，在整个晶体中晶格取向（原子的排列方向）完全一致。而多晶体由很多晶粒构成，在每一个晶粒中，原子的排列完全一致。不同晶粒间，原子的排列方向一般不同。非晶体则类似液体，不具备长程有序性。晶体的长程有序性对对称性具有一定要求，原子的排列不能具备像五角星这样的 5 重对称。但是 1984 年，Shechtman 等报道了原子排列具有 5 次对称性的 AlMn 合金，这是一种准晶体。简单地说，准晶具有取向序性而不具备平移对称性。常见的单晶体有金刚石晶体、红宝石和单晶硅等，常见的多晶体有铁、铝、铜、多晶硅等，常见的非晶体有非晶玻璃、非晶硅等。根据组成材料的原子排布可将材料分为单晶、多晶、非晶等，一般而言，同种材质的材料可以具有不同的形态。比如硅材料，根据不同的工艺可以生产单晶硅、多晶硅和非晶硅，根据材料物性、成本等差别应用于不同的地方。甚至常见的金属材料（一般为多晶体）也可以根据不同的工艺生产单晶金属和非晶态玻璃金属。

固体中原子的排列形式是研究固体材料的宏观性质和各种微观性质的基础。本章的主要内容是阐明晶体中的原子排列（晶体与非晶体原子排列如图 1-1）。

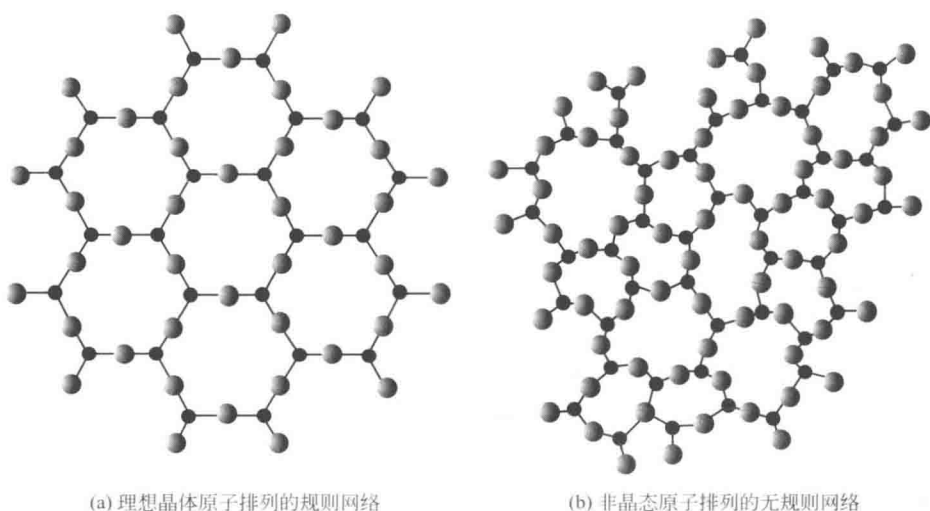


图 1-1 晶体与非晶体的二维示意图

1.1 几种常见的晶格结构

晶体中原子排列的具体形式称为晶格。如果晶体原子的排列形式不同，我们就说它们具有不同的晶格。比如铁的奥氏体与铁素体中铁原子排列完全不同，它们具有不同的晶格。如果晶体原子的排列形式相同，我们就说它们具有相同的晶格。

1.1.1 简单立方结构

在通常情况下，我们考察原子排列的一个结构单元，对其排列的整体就有了充分了解。能完整反映晶体内部原子或离子在三维空间分布的化学-结构特征的单元，其中既能够保持晶体结构的对称性而体积又最小的单位称为晶胞。

把晶格看成原子球的规则堆积，有助于比较直观地理解晶格。在所有晶格中，最简单的堆积形式是简单立方晶格，其晶胞如图 1-2 所示。原子球占据立方晶格的 6 个顶点位置。表面看来一个立方体单元含 8 个原子，其实每个原子与 8 个立方体单元共有，因此一个立方体单元仅含一个原子。通常我们用配位数和堆积系数来描述晶体堆积的紧密程度。配位数是指一个原子周围最近邻原子的数目。堆积系数，又称填充率，是指晶胞中原子所占的体积与晶胞体积之比。简单立方结构的配位数为 6。

设原子半径为 r ，立方体单元的边长为 a ，可以计算简单立方晶格的填充率。由图 1-2，立方体棱边上两个原子球相切，可以得到 a 与 r 之间的关系： $a = 2r$ ，由于简单立方的晶胞仅含一个原子，所以简单立方结构的填充率为

$$x = \frac{1 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{1 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{(2r)^3} = \frac{\pi}{6} \approx 0.52$$

可见简单立方晶格的填充率是比较低的，几乎没有单一元素的晶体结构为简单立方结构。

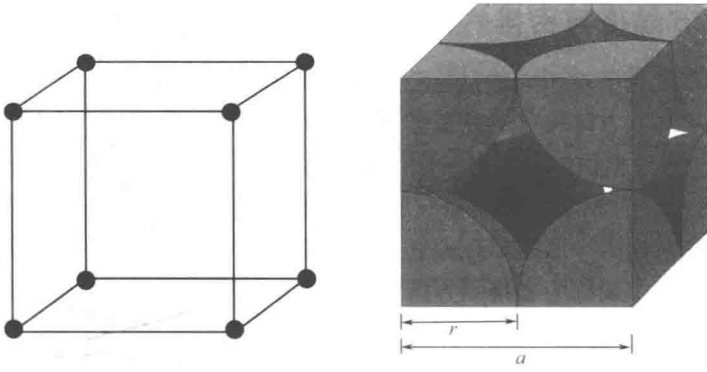


图 1-2 简单立方结构晶胞

1.1.2 体心立方结构

实际晶体中 Li、Na、K、Rb、Cs 为体心立方结构。与简单立方结构不同，体心立方晶格除了在立方体顶角位置有原子之外，在立方体体心位置还有一个原子，如图 1-3 所示。体心立方晶格的配位数为 8。

由于原子球要紧密排列，立方体体对角线上的原子相切，立方体边长 a 与原子球半径 r 之间满足

$$\sqrt{3}a = 4r, \text{ 即 } r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$$

与简单立方不同，体心立方体单元含有两个原子，所以体心立方结构的填充率为

$$x = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \approx 0.68$$

应该指出，体心立方结构立方体顶角处的原子球并不是紧密靠在一起的，存在间隙，如图 1-3 所示，间隙大小为

$$\Delta = a - 2r = \frac{4}{\sqrt{3}}r - 2r = \frac{4\sqrt{3}-6}{3}r \approx 0.31r$$

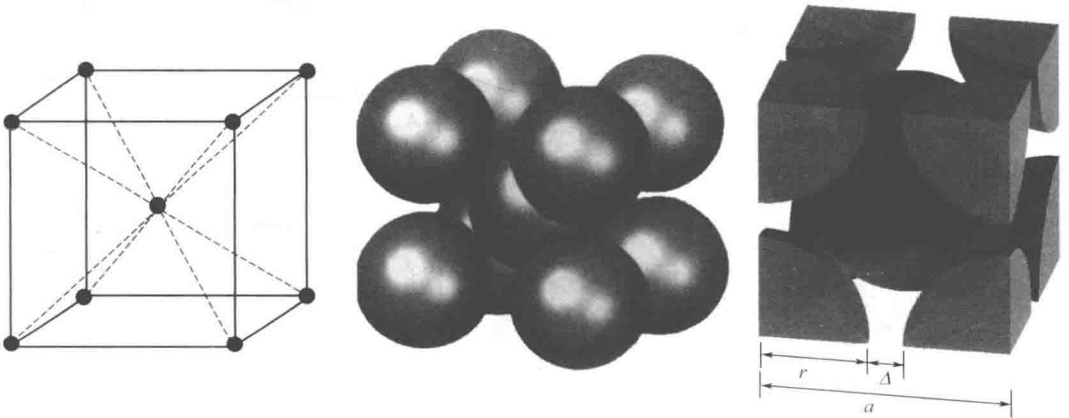


图 1-3 体心立方晶胞

1.1.3 面心立方晶格与密排六方晶格

在一个平面内最紧密的堆积方式是，一个球与周围 6 个球相切，在中心的周围形成 6 个凹位，这样的面称为面心立方结构（或者密排六方结构）中的密排面。将密排面作为第一层（记为 A 层），若要使原子球堆积为最紧密结构，需把第二层密排面的球心对准下一层的球隙位置（记为 B 层），如图 1-4(b) 所示。对于第三层密排面可以有两种最紧密的堆积方式，第一种是将第三层的原子球心对准第一层的球心位置，于是每两层形成一个周期，构成 ABAB... 的堆积方式，形成六方紧密堆积或称为密排六方结构，如图 1-5 所示。密排六方结构的配位数为 12。

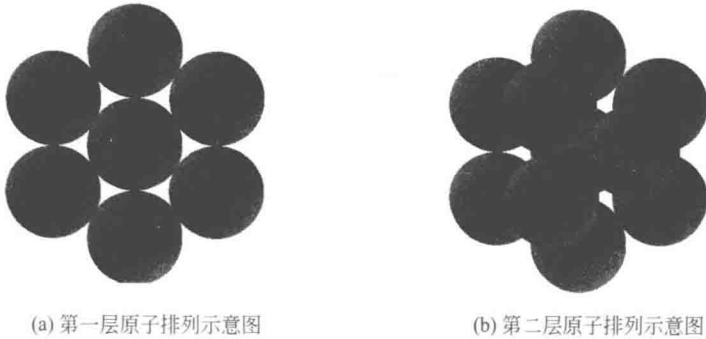


图 1-4 原子的最密排结构示意图

另一种是将第三层球对准第一层与第二层的球隙位置，这一层的位置不同于 AB 两层的位置，记为 C 层。第四层再排 A，于是形成三层一个周期的 ABCABC... 排列。得到面心立方堆积，如图 1-6 所示，面心立方结构的配位数为 12。

如图 1-6(d) 所示，面心立方晶格中，立方体面对角线上的原子相切，因此立方体边长 a 与原子球半径 r 之间满足

$$\sqrt{2}a = 4r, \text{ 即 } r = \frac{\sqrt{2}}{4}a$$

面心立方结构中，立方体单元含有四个原子，所以面心立方结构的填充率为

$$x = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2}}{4}a\right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0.74$$



图 1-5 密排六方结构示意图

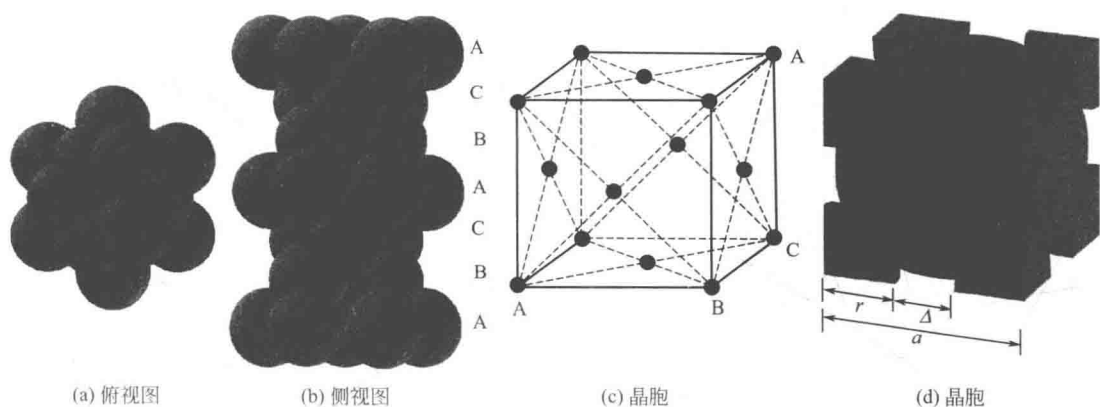


图 1-6 面心立方结构示意图

应该指出，面心立方结构立方体顶角处的原子球并不是紧密靠在一起的，存在间隙，其大小为

$$\Delta = a - 2r = \frac{4}{\sqrt{2}}r - 2r = 2(\sqrt{2} - 1)r \approx 0.82r$$

比体心立方结构的间隙略大。

面心立方结构中，典型晶体有 Ca、Sr、Al、Cu、Ag 等。

密排六方晶格中，六边形边上两个原子相切，因此六边形边长 a 与原子球半径 r 之间满足 $a = 2r$ 。考虑到图 1-7 中 O、A、B、E 原子相互接触，形成正四面体，正四面体的边长等于六边形的边长，于是可以算出正四面体的高。具体做法是找到等边三角形 OAB 的中心 H，连接 AH 并延长，与 OB 相交于 F，连接 EH。

由于 $\triangle OAB$ 是边长为 a 的等边三角形，因此

$$AF = \frac{\sqrt{3}}{2}a, AH = \frac{2}{3}AF = \frac{\sqrt{3}}{3}a$$

$$EH = \sqrt{AE^2 - AH^2} = \sqrt{a^2 - \frac{1}{3}a^2} = \sqrt{\frac{2}{3}}a$$

密排六方晶体结构单元的高 c 是正四面体高 EH 的两倍，得到

$$c = 2EH = \sqrt{\frac{8}{3}}a, \text{ 即 } c/a = \sqrt{8/3} \approx 1.633$$

这正是理想密排六方晶体晶格常数的比值。实际晶体 c 与 a 的比值在 1.633 附近，与理想值有一些偏差。比如 α -Be 为 1.57， α -Ti、 α -Zr 和 α -Hf 为 1.59， α -Co 和 Mg 为 1.62，Zn 为 1.86，Cd 为 1.89。

密排六方结构的晶胞（六棱柱单元）含有 6 个原子，因此填充率为

$$x = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{6 \times \frac{\sqrt{3}}{4}a^2 c} = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{1}{2}a\right)^3}{6 \times \frac{\sqrt{3}}{4}a^2 \times \sqrt{\frac{8}{3}}a} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0.74$$

可见密排六方结构与面心立方结构原子的填充率相等。

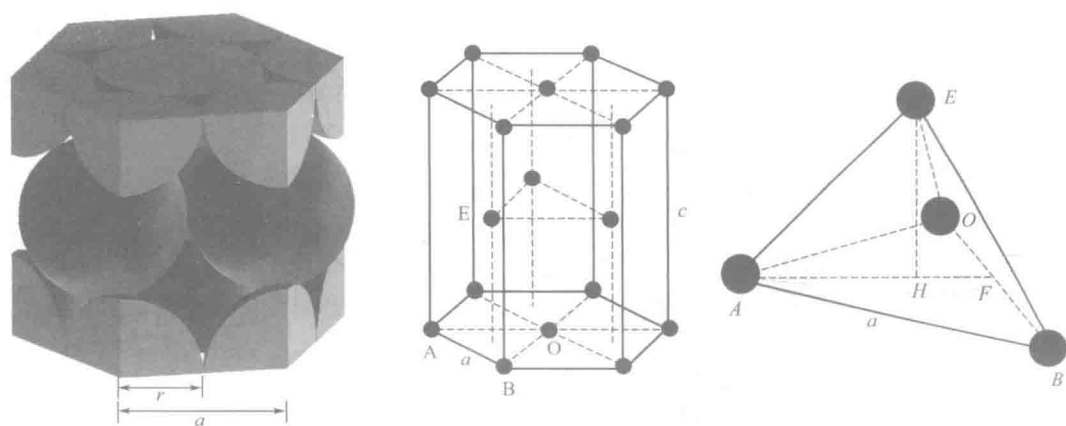


图 1-7 密排六方结构

1.1.4 金刚石结构

金刚石结构是一种基本晶格结构。它的典型单元如图 1-8 所示。由面心立方的中心到顶角引出 8 条体对角线，在互不相邻的对角线的中心引入 4 个原子，就构成金刚石结构。

金刚石结构可以看成两组面心立方格子相互穿套而成。其中一个面心立方格子沿着另一组体对角线方向平移体对角线长度的 1/4。如果把图 1-8 中立方体顶点的原子和相邻体对角线上的原子看成一个整体，那么金刚石结构与面心立方结构具有相同的点阵形式。

设金刚石结构单元的立方体长度为 a ，原子球半径为 r ，由于金刚石结构体对角线 1/4 长度上两个原子球相切，于是可以得到 a 与 r 的关系为

$$\frac{\sqrt{3}}{4}a = 2r, \text{ 即 } r = \frac{\sqrt{3}}{8}a$$

一个金刚石结构单元含 8 个原子，于是可以计算出金刚石结构的填充率为

$$x = \frac{8 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{8 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}}{8}a\right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{16} \approx 0.34$$

可知，金刚石结构的填充率是很低的。

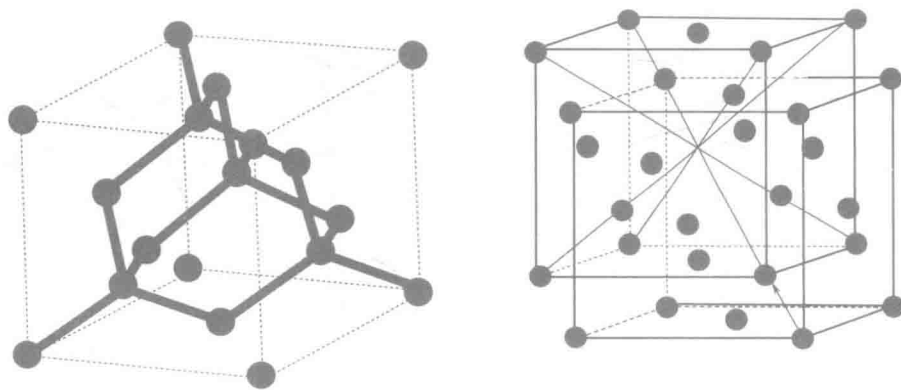


图 1-8 金刚石结构

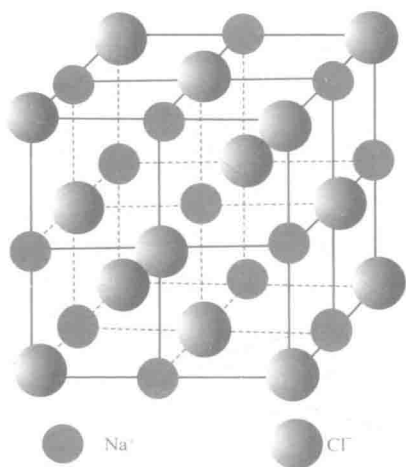


图 1-9 NaCl 结构

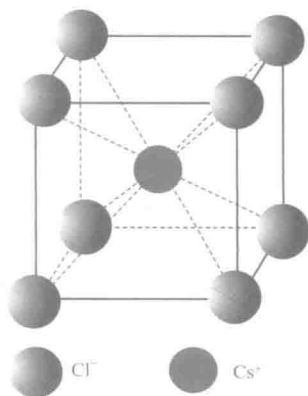


图 1-10 CsCl 结构

1.1.5 NaCl 结构与 CsCl 结构

NaCl 由 Na^+ 和 Cl^- 结合而成, Cl^- 和 Na^+ 相间等间距地排列, 如图 1-9 所示。在 NaCl 结构中 Cl^- 构成面心立方结构, Na^+ 也构成面心立方结构, NaCl 由这两种格子相互穿套而成。如果把相邻的 Cl^- 和 Na^+ 看成整体, NaCl 将是面心立方结构。常见晶体如 NaCl、LiF、KBr 等与 NaCl 具有相同的晶格结构。

CsCl 也是一种典型的离子晶体, 其结构如图 1-10 所示。CsCl 的晶格中 Cs^+ 与 Cl^- 分别形成简单立方结构, 两种晶格互相穿套, Cs^+ 在 Cl^- 立方体的体心位置。如果把 Cs^+ 及与 Cs^+ 近邻的 8 个 Cl^- 看成整体, CsCl 晶格是简单立方结构。与简单立方相似, 基元中的 Cl^- 与 8 个立方体单元共有, 因此上述基元只含 1 个 Cl^- 1 个 Cs^+ 。

1.2 晶格的周期性

经过研究一些晶格的具体例子我们可以发现, 晶格中原子的排列十分有规律, 原子占据的格位离散分布, 形成点阵。晶格中所有与起始点在化学、物理和几何环境完全相同的点的集合称为等同点阵。由等同点系所抽象出来的一系列在空间中周期排列的几何点的集合称为空间点阵。简单的晶格可以直接抽象成空间点阵, 比如体心立方晶格可以抽象成体心立方点阵。对于比较复杂的晶格, 可以把每一个格点所代表的物理实体定义为基元。对于具体晶格, 基元可以是一个原子或一个分子, 也可以是由多个原子或多个分子所组成的原子团或分子团。这样, 可以把晶体结构抽象成基元加点阵的形式。比如对于 NaCl 晶格, 可以把相邻的 Cl^- 和 Na^+ 看成基元, NaCl 是面心立方点阵。对于 CsCl 结构, 把 Cs^+ 及与 Cs^+ 近邻的 8 个 Cl^- 看成整体, CsCl 晶格是简单立方点阵。

1.2.1 布拉菲点阵

所有晶格都具有周期性, 或者平移对称性。因此仅仅需要了解原子排列的一个结构单

元，就能充分了解原子排列的全部。对于理论研究而言，把晶胞作为结构单元还是显得太大了，因为晶胞还必须满足晶体结构的对称性要求。因此需要引入更小的单元，我们称为原胞。原胞是晶格最小周期性单元。

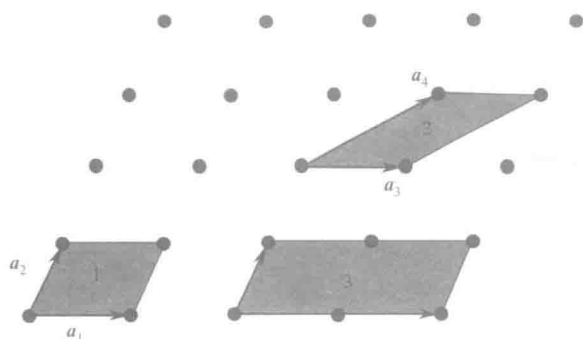


图 1-11 晶格原胞示意图

根据原胞的定义，对于二维格子，如图 1-11，1、2 两种取法均符合原胞的定义，取法 3 形成的结构单元不是原胞。三维晶格的原胞通常为平行六面体，原胞的边矢量就是原胞基矢。在晶体学中晶胞基矢所对应的棱一般称为晶轴。虽然原胞的取法不唯一，为简单起见，常常取尽可能短的矢量作为原胞基矢。实际上各种晶体结构已有习惯的原胞。根据原胞所含原子数量的不同，晶格可以分为简单晶格和复式晶格。简单晶格是指每个原胞中只含有一个原子的晶格。晶格中所有原子在化学、物理和几何环境上都是完全等同的。例如简单立方、体心立方、面心立方晶格均为简单晶格。复式晶格是指每个原胞中含有两个或两个以上的原子的晶格。在复式晶格中，存在两种或两种以上的等同原子。比如 NaCl 和 CsCl 晶格。值得一提的是，虽然金刚石结构由同种元素构成，但是金刚石的 C 原子有两种位置，因此必须把立方体顶点位置和对角线 1/4 位置处两个 C 原子看成一个基元，金刚石才会是面心立方点阵。因此金刚石结构是复式晶格。将晶体结构抽象成基元加点阵的形式并选取合适的原胞后，点阵中任何一个格点的矢量（格矢）都满足： $\mathbf{R}_l = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3$ ，其中 l_1, l_2, l_3 为整数。

布拉菲格子是矢量 $\mathbf{R}_l = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3$ 全部端点的集合，其中 l_1, l_2, l_3 为整数， $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 为原胞基矢。

值得一提的是，除了习惯原胞，人们常选取维格纳-塞茨原胞（WS 原胞）来研究晶体点阵。以晶格中某一点为中心，作其与所有格点的垂直平分面，这些垂直平分面所围成的以该点为中心的最小体积单元是该点的 WS 原胞。

1.2.2 简单立方布拉菲点阵

简单立方、面心立方和体心立方的原胞如图 1-12 所示。其中简单立方点阵的晶胞是最小周期单元，三个原胞基矢可以选择为

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = a\mathbf{i} \\ \mathbf{a}_2 = a\mathbf{j} \\ \mathbf{a}_3 = a\mathbf{k} \end{cases}$$

其中， $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ 为右手系直角坐标系三个坐标轴的单位矢量。

简单立方结构的原胞仅含 1 个原子，是最小周期单元。建立原胞后，简单立方格子的任