

高等院校公共选修课多媒体课件

晶体结构几何学基础

(光盘使用手册)

李冠告 主编

Jingti Jiegou Jihexue Jichu

教育部高等学校公共基础课程专业基础课程教材

晶体结构几何学基础

（第二版）

李发荣 主编



66

076

L31

多媒体课件配套用书

适用专业:化学,物理学,分子生物学,材料科学,矿物学,药理学,环境科学,数学等

晶体结构几何学基础

李冠告 编著

本书附盘可从本馆主页 <http://lib.szu.edu.cn/>
上由“馆藏检索”该书详细信息后下载,
也可到视听部复制

南开大学出版社

·天津·

序

《晶体结构几何学基础》一书及其多媒体课件的问世,大致用了三年时间,经历三个阶段:

(1)从“固体物理学”的角度,为解决多年该课程“第一章”这个教学难点而工作。

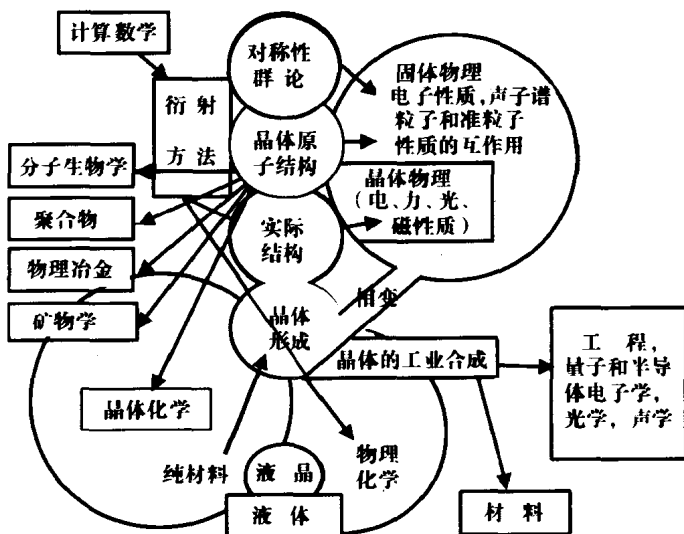
(2)在第一个回合工作取得初步的结果之后,经大家讨论,感到这部分内容应该是凝聚态物理专业课的共同基础,相关课程有固体物理学、晶体物理学、X射线衍射晶体学、晶格振动光谱学等课程,以及晶体X射线衍射实验和光谱实验(含现代物理实验、专业实验和研究生实验三个层次)。

(3)随着工作的深入,在取得较好成果的基础上,又把要求提高,以适应多个学科领域的需要,如:物理学、化学、材料学、生物学、数学、信息电子学等。

在本课件及其用书的完成过程中,通过努力学习、探索和创新,我们试图把握多媒体技术所具有的速度快、信息量大和通过二维动态画面构成“三维虚拟世界”达到展现真实世界的表现能力;把握面向21世纪教学改革的真谛,对传统的教学内容和学科发展的过去、现在与未来进行整合;把握多媒体技术与整合教学内容和谐统一,这样使教材的载体不单是纸(书),还有光盘(软件)。有了这些新教材,加上多媒体教室,在老师的主导作用下,有可能最大限度地活跃课堂氛围和调动师生的教与学的潜能,达到一个新的教学境界。

B. K. 伐因斯坦在《现代晶体学》的“序”中指出:晶体学中

的分支以及它的相邻学科间的联系可以用下面的示意图表示出来。各个分支之间的严格界限是不存在的，它们互相渗透、互相影响。图中的箭头也是有条件的，它只是表示占优势的作用方向，一般来说相反的作用也存在，影响总是双向的。



与这段文字相对照，“晶体结构几何学基础”有着自己的深度和广度以及创新之处。读者可以在学习过程中逐步加以体会。

参与本课件及其用书的创作人员比较多，可以说它是集体智慧的结晶。郭振亚教授提供绪论和第一章“晶体结构的周期性与正格子描述”的文字初稿，王宏根高级工程师和姚心侃教授提供“四圆衍射仪”的文字初稿，李兵副教授从“晶体物理学”的角度提出了宝贵的意见，朱亚平副教授从“X射线晶体

学”的角度提出宝贵意见,博士生导师兰国祥和丁大同二位老教授起到了很好的促进作用。

在多媒体制作过程中,郭振亚教授还指导学生完成第一章的初步制作,金庆华教授、朱亚平副教授都提过宝贵意见,贡献了宝贵的经验;陈晓军副教授也做了许多有益的工作;而制作的生力军是学生,他们完成了大量工作,有的还有创新,他们是:王树春,杨新征,戴武涛,冯少新,由超,杨军民,王振伟,张潮波,曲宝壮,乔海军,张彬,刘增强,王钦,刘健,吴华。在这里对他们的积极参与和辛劳表示衷心的感谢。

主持人李冠告教授提供了第二、三、四、五章的文字初稿,并全面负责全书的校对、修改及多媒体课件制作的指导。由于水平有限,错误在所难免,希望能得到广大读者的批评指正。

编者

2000.8 于南开园

内容提要

本课件充分利用计算机三维动画图像和速度快、信息量大等优点，建立晶体结构几何学基础的新体系，在阐述晶体结构的空间周期性、平移不变性、对称性、正倒格子描述以及布里渊区和如何利用物质波（包括 X 射线）与晶体的相互作用理论与实验方法等基本问题、基本概念和基本规律上，大大突破传统教学手段与方法所达到的境界。

本课件适用于大专院校和相关专业培训数学、物理、化学、材料学、生物学、矿物学、药理学、环境科学与信息科学等多个学科领域的教学中使用，可作为高校公共选修课和相关专业基础课的教材，对于任何一个对本课件所涉及的内容感兴趣的人，也都可以作为自学的良师益友。

绪 论

大自然的力量造就了多种天然矿物晶体. 只有在理想条件下晶体物质才能发育成具有完整多面体形态的单晶体, 然而自然条件千变万化, 使物质世界呈现千姿百态的自然景观, 同一种物质可以有多种不同的外形, 甚至形成同质异构晶体. 而不同杂质原子的加入会使晶体具有不同的颜色. 自古以来, 各种晶体以其独特的外形与美丽的颜色吸引了人类, 至今仍是人们观赏与佩戴的物品, 并在人类生产和生活中得到了应用.

自人类学会用人工方法制作晶体以来, 晶体的品种数以万计, 而且增长的势头不减. 我国在这方面的的工作处于世界先进水平. 晶体尤其是人工晶体, 对于人类生活水平的提高, 对于社会的进步所起的巨大作用, 无论怎样估计也不会过高.

1942 年第一支晶体管在贝尔实验室诞生, 标志着“电子时代”的开始. 五十多年的时间所达到的辉煌是有目共睹的, 回顾这段历史进程, 人们发现“电子时代”成功的秘诀就是人工晶体, 其代表就是人工制作的单晶硅(Si)(一种半导体). 在单晶硅中掺入微量三价元素如硼(B)就形成 P 型半导体; 而在单晶硅中掺入微量五价元素如磷(P)就形成 N 型半导体. 把 P 型和 N 型半导体结合在一起就形成 PN 结, 其本质物理性能是单向导电性, 这就形成了“0”和“1”二进制数学和逻辑线路的物理基础和载体. 这是今天“电子时代”的辉煌所在.

还可以举出好多例子. 如 1960 年制作第一个固体激光器

的红宝石晶体(掺铬 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$),近年来用掺钛蓝宝石晶体制作可调谐激光器.还有铈酸锂晶体及不同掺杂铈酸锂晶体,其广阔的应用前景正呈现在人们面前,有可能成为一个新的技术时代(光学电子技术时代)的物质载体.

综观这些例子,我们看到真正有用的是人工可控掺杂晶体,而不是理想化的晶体.

人类最初对晶体的研究,只能靠肉眼观察天然矿物晶体的多面体外形.我国古书上对雪雉晶的六次对称形态,对食盐晶体的立方体外形,水晶的六棱柱状以及方解石的菱面体解理块等等均有记载.

17世纪以后,晶体学开始作为研究晶体的一门科学得到发展:

1669年丹麦学者斯丹诺(N. Steno, 1638—1687)对石英(SiO_2)和赤铁矿(Fe_2O_3)晶体进行研究后,首先发现了晶体的面角守恒定律(又称斯丹诺定律).

1801年法国学者阿羽依(R. J. Haiiy, 1743—1882)首先发表了晶体的晶面整数定律(又称有理指数定律).

1805—1809年间德国学者魏斯(C. S. Weiss, 1780—1856)总结出晶体的对称定律,并确定出结晶学中另一个重要定律——晶带定律,并于1813年首先提出晶体分为六大晶系.

1830年法国学者赫赛尔(I. F. Ch. Hessel, 1792—1872)首先推导出晶体外形可能的一切对称组合即32种对称型,但在当时这一成果未被重视.

1867年俄国学者加多林(A. B. Гадюлин, 1828—1892)用

严谨的数学方法加以推导,得出了相同的 32 种对称型,引起人们的重视,从而完成了晶体宏观对称性的总结.

伴随对晶体外形与性质的研究,人们开始对晶体内部微观结构进行推测,提出了多种设想.

1678 年,荷兰学者惠更斯(C. Huygens, 1629—1695)根据方解石晶体的解理性和双折射性质提出:晶体是具有一定形状的物质质点(呈椭球形的物质分子)作规则的累叠而成的.

1729 年,俄国学者罗蒙诺索夫(M. B. Ломоносов, 1711—1765)创立了“微分子学说”,认为晶体是由球形的微分子堆砌而成的.

1784 年,法国学者阿羽依基于对方解石晶体沿解理面裂开性质的观察,提出晶体是由无数个具有多面体形状(如平行六面体)的原始“组成单位”在三维空间无间隙地平行堆砌而成的.

1842 年,法国学者弗兰肯汉姆(M. L. Frankenheim, 1801—1869)认为晶体的内部构造应以点为单位在三度空间呈周期性的重复排列.同时他又提出了平行六面体的概念,并据此推出 15 种可能的空间格子形式.

1848 年法国学者布喇菲(A. Bravais, 1811—1863)用数学方法推导出晶体结构中一切可能的空间格子共有 14 种不同类型,成为近代晶体构造理论的奠基人.

1879 年,德国学者松克(L. Sohncke, 1842—1897)将 14 种空间格子的等同点系发展成为包括平移、旋转和螺旋旋转群的 65 种规则点系(松克点系).

1889年俄国结晶学家、现代结晶学的奠基人费多洛夫(E. С. Федоров, 1853—1919)第一个提出反映滑移这一新的对称变换,进而用数学方法推导出了晶体结构中一切可能的对称要素组合方式——230种空间群(费多洛夫群).它全面而完整地描述了晶体中原子排列的规律.

1891年和1894年法国学者熊夫利(A. M. Schönflies, 1853—1928)和英国学者巴罗(W. Barlow, 1848—1934)相继用不同方法得出了与费多洛夫的结果同样的结果.至此,晶体结构的分析建立了理论基础.

自从1912年德国学者劳厄(M. V. Laue, 1879—1960)第一次成功地进行了X射线通过晶体发生衍射的实验以来,几十年间用X射线衍射方法确定了数万种晶体的原子结构.实验结果充分表明晶体原子结构模型概论的真实性和晶体结构几何理论的正确性.20世纪70年代后,由于电子衍射、X射线能谱与高分辨透射电子显微镜的结合,使晶体学家在结构分析和元素分析的同时,直接拍摄晶胞常数为几个埃(\AA)的晶体结构像.人们对晶体微观结构的理解已不限于抽象的晶体原子结构模型,而且直接观察到实际晶体的结构和缺陷,从而大大推动了晶体结构几何理论的新发展.

本课件从固体物理学的角度把晶体学中传统与现代的、理论与方法的诸多方面知识的精华,加以整理,拓宽提高,形成一个完整的新体系.本课件力图突出几个思想:

(1)从微观的角度、原子和分子尺度看晶体的空间周期性.

(2)把晶体对称性提到物理学基本问题的高度.

(3) 彻底发挥坐标空间(正格子)和波矢空间(倒格子)描述晶体的功能.

(4) 力争实现理论和方法的完美结合,前者指的是让学生从固体物理的角度尽最大的可能去吸收前人关于晶体的空间属性及组成原子在空间的占位的系统理论和丰富实践,后者指的是让学生知道如何用实验方法确定晶体中原子的实际空间位置.

(5) 给予“多媒体课件”适当的地位.

我们认为,一种新的有生命力的教学手段,它应该不排斥一切被历史实践所证明行之有效的传统方法.因此,我们突出其创意三维动画、信息库以及速度快三大特点,服务于教学相长,使学生懂得快,学得多.

我们仍然坚持“教师的主导作用”不动摇,因此,课件内容应该是所学知识的精华,以利于教师在课堂上引导学生进行“讨论式”教学,切莫使之变成教科书的“拷贝”.

目 录

序	1
绪论	1
第一章 晶体结构的周期性与正格子描述	1
一、晶体的空间点阵	1
二、空间点阵的描述	3
三、十四种布喇菲格子和七个晶系	6
四、二维布喇菲格子	14
五、晶体空间的划分	15
六、晶体定向、晶向和晶面符号	17
第二章 晶体结构对称性	32
一、线性变换与对称性	32
二、对称操作与宏观对称元素	34
三、极射赤面投影图	41
四、平移群与点群	42
五、微观对称元素	63
* 六、空间群简介	69
七、准晶的对称性简介	84
* 附录	86
第三章 倒格子与布里渊区	103
一、倒格子与倒格子原胞	103

二、正倒格子关系	105
三、布里渊区	108
四、倒易空间对称性	112
第四章 晶体的投影	113
一、前言	113
二、极射赤面投影法	113
三、标准化极图	114
四、乌氏网	116
五、原子位置投影法	117
第五章 晶体的 X 射线衍射	118
一、前言	118
二、X 射线源	121
三、X 射线衍射几何理论	126
四、X 射线衍射强度	130
五、X 射线衍射实验简介	138
思考题	157
习题	158
参考书目	160

第一章 晶体结构的周期性和正格子描述

一、晶体的空间点阵

1. 晶体结构的基本性质 —— 空间周期性

晶体的含义: 晶体是组成粒子在三维空间作周期性重复排列而成的固体。

NaCl 晶体(岩盐)是第一个用 X 射线衍射方法确定其结构的晶体物质, 是典型的离子晶体. 它是由 Na^+ 和 Cl^- 在晶体空间规则排列而成, 如图 1.1 所示。

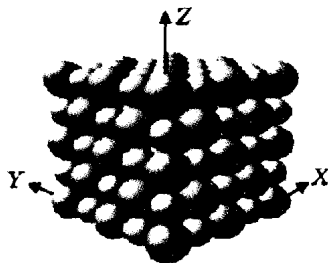


图 1.1

Na^+ 和 Cl^- 空间分布的特征是:

(1) 每种离子周围最近邻为 6 个异号离子, 如图 1.2 所示。

(2) 在相互垂直的 3 个方向上两种离子在选定的方向上相间等距离分布. 同一种离子在 3 个相互垂直方向的重复周期均为 Na^+ 和 Cl^- 半径之和的 2 倍, 如图 1.1 所示.

$$R_{\text{Na}^+} = 1.21 \text{ \AA} = 0.121 \text{ nm}$$

$$R_{\text{Cl}^-} = 1.62 \text{ \AA} = 0.162 \text{ nm}$$

$$R_{\text{NaCl}} = 2(1.21 + 1.62) \text{ \AA} = 5.66 \text{ \AA}$$

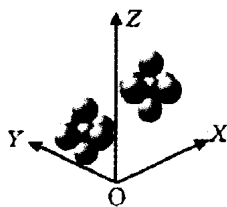


图 1.2

实测为 5.63 \AA .

2. 等同点系

晶体结构中原子排列的规律性最基本的是周期性.

等同点: 晶体结构中在同一取向上几何环境和物质环境皆相同的点称为等同点. 当把晶体看作无限大时, 对任意一点都会有无数多个等同点在晶体空间呈周期性分布着.

等同点系: 由于原子的周期性分布, 必然造成等同点在晶体结构中的周期性出现.

例如, NaCl 晶体中所有 Na^+ 核心位是一组周期分布的等同点, 称作一个等同点系; 同样, 所有 Cl^- 核心位也是一组等同点, 构成另一个等同点系; 从晶体中任意一点 (如钠离子与氯离子相切的一点) 出发能够找出与之对应的一组等同点, 它们也构成一个等同点系.

显然, 不同位置的等同点系性质各异, 然而每个等同点系中等同点的空间分布方式都是相同的. 对于不同的晶体, 其空间分布方式是不同的.

3. 空间点阵

空间点阵:表示晶体结构中等同点排列规律(空间分布方式)的几何图像(点集合)称为空间点阵或空间格子.

晶体结构中的两个要素是结构基元和空间点阵.

结构基元:晶体的物质组成的最小单位称作结构基元(可以是一个原子或一个分子或一个原子集团).

空间点阵:结构基元代表点(一个等同点系)及其空间分布称为空间点阵.

$$\text{晶体结构} = \text{点阵} + \text{基元}$$

此关系式的含义为:将结构基元完全等同地放在每个阵点上,就构成了晶体结构.

结论:

(1) 空间点阵是从晶体结构中抽象出来的几何图形.

(2) 空间点阵理论把晶体抽象为一组周期分布的点子(格点或阵点),并以此出发讨论晶体的分类.

二、空间点阵的描述

1. 点阵直线

任意二格点所确定的直线上,必有无限多个格点按相同的周期分布着.空间点阵可以用一束平行点阵直线来描述,一束点阵直线将全部格点包括无遗,如图 1.3 所示.

一条点阵直线可视为一维点阵(一维格子),以 0 格点为原点时,任意格点的位矢表示为:

$$\vec{T} = n \cdot \vec{i} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$