

世行贷款“高教发展”项目资助出版

信息电子学物理基础

Basic Physics for Information Electronics

陈秀峰 杨冬晓 编著



浙江大学出版社

世行贷款“高教发展”项目资助出版

信息电子学物理基础

Basic Physics for Information Electronics

陈秀峰 杨冬晓 编著

Chen Xiufeng Yang Dongxiao

浙江大學出版社

内容简介

本书是面向 21 世纪工科电子信息类专业试用教材,它是现代物理思想、概念、研究方法和现代教育思想、教学方法为基础,根据信息工程技术对物理基础的需求而编写的。全书以能带理论作为统一和完整的物理基础理论,以电子的不同运动方式贯穿全书。全书共分九章:第一到第三章简介晶体结构和量子力学以及固体电子论基础,第四章为半导体物理和器件原理并简介集成器件和微细加工技术,第五章为光电子学和光电子器件,第六章为磁电子学,第七章为超导电子学并简介纳米科技的基本概念,第八章为电介质电子学,第九章简介介质中的光、声、电效应和应用。教学参考时数 50 学时。

本书可作为全国高校工科电子信息类学生的专业基础教材,也可供一般工程技术人员阅读、参考。

图书在版编目(CIP)数据

信息电子学物理基础 / 陈秀峰, 杨冬晓编著. — 杭州:
浙江大学出版社, 2002. 5
ISBN 7-308-02999-9

I. 信... II. ①陈... ②杨... III. 物理学—高等学校—
校—教材 IV. 04

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2002) 第 026307 号

责任编辑 杜希武

出版发行 浙江大学出版社

(杭州浙大路 38 号 邮政编码 310027)

(网址: <http://www.zjupress.com>)

(E-mail: zupress@mail.hz.zj.cn)

排版 浙江大学出版社电脑排版中心

印刷 德清第二印刷厂

开本 787mm×1092mm 1/16

印张 21.5

字数 523 千

版印次 2002 年 5 月第 1 版 2002 年 5 月第 1 次印刷

印数 0001—2000

书号 ISBN 7-308-02999-9/O · 280

定价 30.00 元

绪 言

《信息电子学物理基础》以固体中的电子过程为基础,阐明固态电子材料的各种特性和效应以及利用这些特性和效应构成的固态电子器件的基本原理。从1997年开始,“信息电子学物理基础”被采纳为浙江大学电子信息技术专业的一门基础课程。为适应教学需要,当年我们就编写了《信息电子学物理基础(1)》的教材,1999年又开始编写《信息电子学物理基础》第二版,前后已使用四届。本书经浙江大学电子信息类教材建设专业委员会评议,浙江大学教材建设委员会审定,列入《浙江大学2001年度教材出版计划》,正式出版。

以晶体和半导体激光器为代表的固体器件的发明和发展,导致集成电路、电子计算机、光纤通信、集成光学等许多应用领域成为当代信息电子学的支柱。这是近代物理和固体物理与电子学应用相结合的典型实例。由此产生信息电子学的物理基础,成为沟通科学和工程之间的桥梁。

随着科学技术的发展,信息电子学物理基础的内容不断充实和更新,固态电子器件已从应用单功能材料进而应用多功能材料或复合材料,利用单一效应发展到利用多种效应,以最大限度利用固态材料中的电、磁、光、声和热等自然效应和相关效应,成为目前发展固态材料和器件的一个重要趋向。例如:MOS半导体器件中的氧化层电介质采用铁电晶体薄膜,可获得非挥发性的半导体存储器;光子器件和电子器件的集成,不仅可以改善原有器件性能,还能得到单一器件不能得到的功能;在未来的集成光路中不仅包括了光电子集成的光源和检测器,还利用了电光效应、声光效应、超导效应、磁光效应和热光效应等许多相关效应构成的调制器和其他器件。

本书主要介绍半导体、电介质、磁性、超导和纳米材料及器件的物理效应和物理过程,目的是为相关的固态电子器件建立统一的物理基础。

内容编排按照固态材料中的电子形态和运动方式,依次讨论晶体结构和量子力学概论;在此基础上,介绍半导体和金属电子学中的能带理论,并讨论这些物质中电子运动的特性和效应;第四章开始讨论作为固态器件基础的pn结理论和半导体器件原理、光电子器件原理;接着简要讨论磁电子学、超导电子学、纳米技术和电介质电子学;第九章讨论固体中的关联效应,介绍电介质中的电、光、声和热效应之间的相互作用。

第一版和第二版《信息电子学物理基础》教材已使用了四届,本书根据在教学中遇到的问题以及其他教师意见,进行了修改和补充,尤其补充了反映新技术发展的内容。在前五章末酌量增添固态电子学深浅不一的习题。

本书由浙江大学陈秀峰、杨冬晓编著,全书大量的文字处理工作由浙江大学杨丽英完成。由于作者水平有限,不妥之处肯定存在,敬请读者批评指正。

本书得到浙江大学资深教授陈抗生和李志能的热情关注,他们认真审阅了本书初稿并提出了许多建设性建议。本书也受到浙江大学出版社和教材科的大力支持,在此致以诚挚的感谢。

作者

2001年10月于浙江大学

重要符号表

a	晶格常数	g	朗德因子
A	面积; 交换积分	G	状态密度; 电导; 光增益
A	矢势	G_P	功率增益
B	频带宽度; 爱因斯坦系数	G_V	电压增益
B	磁感应强度	h	普朗克常数; 高度
B_0	真空中的磁感应强度	$\hbar$	$\hbar = h/2\pi$
c	真空光速; 比热; 弹性模量	H	磁场强度
c_n	介质中光速	H_C	矫顽力; 临界磁场
C_r	光能流密度	I	电流强度; 光强度
C	电容; 居里常数	I_B	晶体管基极电流
C_B	pn 结势垒电容	I_C	晶体管集电极电流; 约瑟夫森结临界电流
d	厚度; 光透入深度; 间距	I_D	暗电流
D	扩散系数; 探测率	I_E	晶体管发射极电流
D^*	探测灵敏度	I_r	复合电流
D_n	电子扩散系数	I_R	背景光电流
D_p	空穴扩散系数	I_S	约瑟夫森结超流
D	电通量密度	I_{ac}	声功率密度
e	电子电荷绝对值	I_{ph}	光电流
e^*	超导电子电荷	j	磁偶极矩
E	电子能量; 杨氏模量	j_n	电子流密度
E_A	受主电子态能量	j_p	空穴流密度
E_B	束缚能	J	电流密度; 磁极化强度
E_C	导带底能量	J_C	约瑟夫逊结临界电流密度
E_D	施主电子态能量	J_n	电子电流密度
E_F	费米能量; 费米能级	J_p	空穴电流密度
E_g	禁带宽度	J_S	超导电流密度
E_V	价带顶能量	J_{SN}	超导和常导电流密度之和
E_{Fn}	n 型半导体费密能级	k	电子波数
E_{Fp}	p 型半导体费密能级	k	波矢
E	电场强度	k_B	玻耳兹曼常数
f	分布函数; 占有几率; 频率	K	电子电离率与空穴电离率之比; 磁晶各向异性常数; 电耦合系数
f^*	声频率	l	长度
f_T	电流增益 — 带宽乘积	K	声波矢
F	力	L	扩散长度; 长度
F	自由能; 晶体管噪声系数; 过剩噪声因子		

L_n	电子扩散长度	S	熵;应变;赛贝克系数
L_p	空穴扩散长度	S	坡印廷矢
m	电子质量;调制度;大气质量数	t	时间
m	磁矩;交变磁化强度	T	温度;透射系数
m^*	超导电子质量	T_C	居里温度;临界温度
m_n^*	电子有效质量	T_F	费米温度
m_p^*	空穴有效质量	T_N	奈尔温度
M	雪崩倍增因子;磁化强度;声光优值	T_r	隧道贯穿几率
M	磁化强度	T_R	复合引起的损耗速率
M_S	自发磁化强度	u	布洛赫波的周期性调制函数
$\tilde{n}$	复折射率	U	内能
n	电子浓度;折射率	v	速度
n_i	本征载流子浓度	v_d	漂移速度
n_S	超导电子对浓度	V	晶体体积;电压;位函数
n_{SN}	超导电子对和常导电子浓度之和	V_a	正向偏置电压
n_{eff}	导模有效折射率	V_D	接触电势差
N	原子密度;分子密度;退磁因子	V_F	正向电压
N_A	受主浓度	V_n	约瑟夫森结电流阶梯处电压
N_C	导带有效态密度	V_R	反向偏置电压
N_D	施主浓度	V_S	表面电位
N_V	价带有效态密度	V_T	阈值电压
NA	数值孔径	w	能量密度
ρ	空穴浓度;热电系数;动量	x	化合物的组成成分;位移
p	电偶极矩;角动量	α	方向余弦;平面角;晶体管共基极 电流增益;光吸收系数
P	几率;光功率;应变弹光系数	α	衰减矢
P	角动量;电极化强度	α_n	电子电离率
p_F	费米动量	α_p	空穴电离率
q	电荷量	β	方向余弦;增益因子; 晶体管共发射极电流增益
q	电子波矢	β	位相矢
Q	电荷面密度;电荷;品质因素	γ	晶体管发射区注入效率;磁旋比; 磁畴壁能密度;传播系数; 线性电光系数;电子漂移参数
r	距离;半径;原子间距	Γ	位相差;克里斯托尔模量
R	电阻;霍耳系数;反射系数; 二次电光系数	δ	位相角;磁损耗角;电介质损耗角
R_C	接触电阻	Δ	超导体能隙参量
R_L	负载电阻		
R_N	非线性准粒子电阻		
R_{op}	光谱响应度		

ϵ_0	真空介电常数	μ_p	空穴迁移率
ϵ_r	相对介电常数	ν	频率; n 型高阻半导体;
$\bar{\epsilon}$	复介电常数		泊松比声光调制度参量
ϵ'	复介电常数实部	ξ	位移量; 相干长度
ϵ''	复介电常数虚部	π	p 型高阻半导体; 圆周率
η	晶体管基区输运系数; 效率;	Π	珀尔帖系数
	量子效率; 光电转换效率;	ρ	电阻率; 密度
	发光效率; 有序度	σ	电导率; 应力; 电荷面密度
θ	角度; 平面角; 天顶角	τ	寿命; 驰豫时间; 汤姆逊系数;
κ	消光系数		声渡越因子
λ	光波长; 外斯分子场常数;	τ_p	位相延迟
	磁致伸缩系数; 第一拉姆系数	τ_{eff}	有效准粒子寿命
Λ	声波长	φ	位相角; 平面角超导体量子位相
λ_c	半导体本征吸收波长限	ϕ	功函数; 宏观波函数
λ_L	伦敦穿透深度	Φ	噪声谱密度
μ	迁移率; 磁导率; 刚性系数	ϕ_{bn}	金属-n型半导体接触肖特基势垒高度
$\tilde{\mu}$	复磁导率	ϕ_{bp}	金属-p型半导体接触肖特基势垒高度
μ'	复磁导率实部	Φ_0	磁通量子
μ''	复磁导率虚部	χ	电子亲和势; 磁化率; 电极化率
μ_+	正圆偏振波磁导率	ψ	电子波函数; 平面角;
μ_-	负圆偏振波磁导率		超导电子对宏观波函数
μ_B	玻尔磁子	Ψ	全波函数
μ_H	霍尔迁移率	ω	圆频率
μ_n	电子迁移率	Ω	声圆频率
μ_0	真空磁导率	ω_0	晶格振动固有频率

目 录

绪言

第一章 固体的晶体结构简介	1
§ 1.1 固体类型	1
§ 1.2 空间点阵	1
1.2.1 晶格、原胞、元胞	1
1.2.2 基本的晶体结构	2
1.2.3 晶面和密勒指数	3
§ 1.3 金刚石结构	5
§ 1.4 原子键	6
§ 1.5 固体中的缺陷和杂质	7
1.5.1 固体中的缺陷	7
1.5.2 固体中的杂质	8
习题一	9
第二章 量子力学导论	11
§ 2.1 量子力学原理	11
2.1.1 能量子	11
2.1.2 波粒二象性	12
2.1.3 测不准原理	13
§ 2.2 薛定谔波动方程	13
2.2.1 波动方程	13
2.2.2 波动方程的物理意义	14
2.2.3 边界条件	15
§ 2.3 薛定谔波动方程的应用实例	15
2.3.1 自由空间中电子	15
2.3.2 无限深势阱	17
2.3.3 阶跃位函数	19
2.3.4 势垒	21
§ 2.4 原子的波动理论	22
2.4.1 单电子原子	22
2.4.2 周期表	24
习题二	25
第三章 固态电子论基础	28
§ 3.1 周期势场中的电子和能带论	28
3.1.1 能带的形成	28

3.1.2	Kronig-Penney 模型(K-P 模型)	30
3.1.3	k 空间图	33
3.1.4	能带论的其他模型	35
§ 3.2	固体的导电性、有效质量和空穴	36
3.2.1	能带和键的模型	36
3.2.2	晶体中电子运动的速度和加速度	37
3.2.3	有效质量和空穴	38
3.2.4	满带和部分填充的能带	39
3.2.5	金属、绝缘体和半导体	40
3.2.6	一维概念的三维扩展	41
§ 3.3	半导体中载流子	43
3.3.1	态密度函数	43
3.3.2	费米分布函数	46
3.3.3	半导体中的载流子	47
3.3.4	半导体的连续性方程	53
§ 3.4	金属中的自由电子	55
3.4.1	电子气的能量状态和费米能量	55
3.4.2	电阻率和温度的关系	56
3.4.3	导电、电阻合金材料	58
§ 3.5	半导体材料	59
3.5.1	Ⅲ-V 族化合物半导体	59
3.5.2	Ⅱ-VI 族化合物半导体	60
3.5.3	非晶态半导体	60
3.5.4	有机半导体	61
§ 3.6	几种固态电子的体效应	62
3.6.1	磁电效应	62
3.6.2	热电效应	63
3.6.3	耿氏(Gunn)效应	64
§ 3.7	固态电子能谱	66
3.7.1	电子、光子、离子同固体相互作用概貌	66
3.7.2	俄歇电子能谱(AES)	67
3.7.3	X 射线光电子能谱(XPS)	67
习题三		68
第四章	半导体器件原理	71
§ 4.1	pn 结特性概述	71
4.1.1	平衡 pn 结	71
4.1.2	整流特性	75
4.1.3	电容特性	79

4.1.4 击穿特性	81
§ 4.2 pn 结二极管	81
4.2.1 变容二极管(varactor)	82
4.2.2 开关二极管	84
4.2.3 隧道二极管	86
4.2.4 雪崩二极管	88
§ 4.3 双极型晶体管	89
4.3.1 晶体管的基本结构和工作原理	89
4.3.2 晶体管的放大作用	91
4.3.3 电流—电压特性	93
4.3.4 击穿电压与穿通电压	95
4.3.5 频率特性	95
4.3.6 开关特性	97
4.3.7 晶体管噪声	98
§ 4.4 金属—半导体接触和肖特基势垒二极管	99
4.4.1 理想肖特基势垒	99
4.4.2 表面态和界面层对接触势垒的影响	100
4.4.3 肖特基势垒的 I - V 特性	101
4.4.4 肖特基势垒二极管	104
4.4.5 欧姆接触	105
§ 4.5 场效应晶体管(FET)	107
4.5.1 JFET	107
4.5.2 MOSFET	109
4.5.3 MESFET	112
§ 4.6 异质结及其器件	113
4.6.1 异质结的材料	113
4.6.2 异质结的能带结构	114
4.6.3 异质结特性	114
4.6.4 异质结的电流输运机构	116
4.6.5 异质结中二维电子气和超晶格	117
4.6.6 HBT 和 MODFET	119
§ 4.7 半导体集成器件和微细加工技术	120
4.7.1 集成电路的构成	121
4.7.2 微细加工技术	123
4.7.3 集成器件发展的主要极限	126
习题四	127
 第五章 光电子学和光电子器件	130
§ 5.1 固体的光吸收	130

5.1.1	光吸收系数	130
5.1.2	光吸收过程	132
5.1.3	电子—空穴对产生速率	133
§ 5.2	pn 结光生伏特效应和太阳电池	133
5.2.1	基本原理	133
5.2.2	光电池的 I - V 特性	134
5.2.3	太阳电池的光电转换效率	135
5.2.4	非均匀吸收效应	136
5.2.5	新结构 Si 太阳电池	136
5.2.6	异质结肖特基势垒和 MIS 太阳电池	137
5.2.7	薄膜太阳电池	138
§ 5.3	非增益型半导体光电探测器	139
5.3.1	基本原理	139
5.3.2	主要参数	140
5.3.3	PIN 光电二极管	142
5.3.4	肖特基势垒光电二极管	143
5.3.5	光电导探测器件	144
§ 5.4	增益型和异质结半导体光电探测器	145
5.4.1	雪崩光电二极管(APD)	145
5.4.2	异质结的窗口效应和光限制作用, 异质结光电二极管	148
5.4.3	异质结雪崩光电二极管	149
5.4.4	光晶体管	150
§ 5.5	固体的光发射	151
5.5.1	发光过程中的激发	151
5.5.2	基本跃迁类型	152
5.5.3	发光效率	153
5.5.4	材料	154
§ 5.6	发光二极管(LED)	154
5.6.1	发光效率与量子效率	154
5.6.2	LED 材料	156
5.6.3	LED 的结构和性能	157
5.6.4	LED 的应用	159
§ 5.7	半导体激光器(LD)	159
5.7.1	半导体受激光发射的产生	160
5.7.2	半导体激光器的主要特性	164
5.7.3	异质结激光器	166
5.7.4	分布反馈式(DFB)半导体激光器	169
5.7.5	新型器件	170
习题五		172

第六章 磁电子学	175
§ 6.1 原子磁矩	176
6.1.1 单电子原子的磁矩	176
6.1.2 多电子原子的磁矩	177
6.1.3 洪德(Hund)定则	178
§ 6.2 逆磁性和顺磁性	179
6.2.1 半经典理论	179
6.2.2 稀土族和铁族离子的顺磁性	180
6.2.3 金属的逆磁性和顺磁性	181
§ 6.3 铁磁质	182
6.3.1 铁磁质的宏观特性	182
6.3.2 外斯(Weiss)分子场理论	183
6.3.3 铁磁性的起源	184
§ 6.4 反铁磁质和亚铁磁质	187
6.4.1 反铁磁性的奈尔(Neel)理论	187
6.4.2 亚铁磁性和铁氧体	188
§ 6.5 铁磁体的磁畴理论	189
6.5.1 铁磁体的各种相互作用能	190
6.5.2 磁畴的形成	192
6.5.3 单畴颗粒	192
6.5.4 磁泡畴	193
§ 6.6 动态磁化过程和磁共振	194
6.6.1 磁化的时间效应和复数磁导率	194
6.6.2 旋磁性和铁磁共振	195
6.6.3 动态磁化过程中的损耗	198
§ 6.7 磁性元器件	200
6.7.1 微波器件	200
6.7.2 磁性记忆器件	201
6.7.3 磁记录	203
§ 6.8 磁性材料	204
6.8.1 软磁材料	204
6.8.2 永磁材料	205
6.8.3 矩磁、磁记录和磁头材料	206
6.8.4 旋磁材料	207
6.8.5 非晶磁性材料	207
第七章 超导电子学和纳米技术	208
§ 7.1 超导的基本特性	208

7.1.1	完全导电性	208
7.1.2	完全逆磁性	209
7.1.3	临界磁场 H_C 和临界电流 I_C	209
§ 7.2	二流体模型	211
§ 7.3	伦敦方程	213
§ 7.4	超导 BCS 理论的物理图像	214
7.4.1	库柏电子对	214
7.4.2	能隙	215
7.4.3	超导 BCS 理论的要点	215
§ 7.5	超导结的隧道效应和约瑟夫逊效应	216
7.5.1	超导体单电子隧道效应	216
7.5.2	约瑟夫逊效应	218
§ 7.6	超导电子器件	223
7.6.1	超导器件的优点	223
7.6.2	二端超导器件	223
7.6.3	超导量子干涉器件	224
7.6.4	超导结型晶体管	227
7.6.5	超导场效应晶体管	229
§ 7.7	高 T_C 氧化物超导性和材料	230
§ 7.8	纳米科学技术(Nano-ST)的基本概念	231
7.8.1	纳米材料	232
7.8.2	纳米结构	234
7.8.3	纳米半导体	235
7.8.4	纳米微粒的基本理论	237
7.8.5	纳米功能器件	241
第八章	电介质电子学	247
§ 8.1	电介质极化	247
8.1.1	极化的宏观现象	247
8.1.2	极化的基本形式	249
8.1.3	内电场	250
8.1.4	介电常数与极化率的关系	252
§ 8.2	电介质损耗与色散	253
8.2.1	电介质损耗的参数	253
8.2.2	弛豫损耗及介电谱	255
8.2.3	谐振极化及色散	259
§ 8.3	电介质电导和击穿	261
8.3.1	电介质中的导电现象	261
8.3.2	离子导电	262

8.3.3	电子导电	263
8.3.4	本征击穿	266
8.3.5	热击穿和放电击穿	267
§ 8.4	电介质材料和应用	267
8.4.1	单晶、玻璃和陶瓷电介质材料	267
8.4.2	聚合物电介质材料	269
8.4.3	电介质的应用	272
§ 8.5	压电性	273
8.5.1	压电效应	273
8.5.2	压电方程组和特性参数	274
8.5.3	压电材料及其应用	276
§ 8.6	热电性	278
8.6.1	热电效应	278
8.6.2	热电方程组和特性参数	278
8.6.3	热电材料及其应用	279
§ 8.7	铁电性	281
8.7.1	铁电现象	281
8.7.2	铁电理论	283
8.7.3	铁电材料及其应用	286
§ 8.8	驻电性	288
8.8.1	驻电现象	288
8.8.2	驻电体形成方法	288
8.8.3	驻电体材料及其应用	289
第九章	电介质中的电、光、声效应	291
§ 9.1	光波在电介质中的传播	291
9.1.1	麦克斯韦(Maxwell)方程	291
9.1.2	折射率和双折射	292
9.1.3	单轴晶体和双轴晶体	293
9.1.4	衰减与色散	294
§ 9.2	光导波现象	295
9.2.1	光波导中的内全反射	295
9.2.2	光导波模	296
9.2.3	消逝波	297
§ 9.3	声波在固体中的传播	298
9.3.1	体声波	298
9.3.2	表面声波	302
§ 9.4	电声效应	304
9.4.1	声波在压电半导体中的传播	304

9.4.2 声放大	306
§ 9.5 声光效应	307
9.5.1 声波对光的衍射	307
9.5.2 声光调制和声光偏转	309
§ 9.6 电光效应	311
9.6.1 电光效应	311
9.6.2 电光效应的应用	311
§ 9.7 热光效应	314
9.7.1 折射率随温度的变化	314
9.7.2 二次谐波发生的非临界相位匹配	315
§ 9.8 纤维光学和集成光学	316
9.8.1 光纤通信和光信号处理	316
9.8.2 纤维光学	317
9.8.3 集成光学	320
附表	322
参考书目	325

第一章 固体的晶体结构简介

本书涉及到的信息电子固体器件,均与构制器件的固体材料所具有的电学性质、磁学性质、介电性质、光学性质相关。信息电子器件所用的固体材料,一般是单晶材料。单晶材料的光、电、磁学等性质不仅由化学组分,而且由固体中原子排列决定。因此有必要了解固体的晶体结构知识。有关单晶材料的生长形成技术本章也作简单介绍,目的是为后续各章讨论器件结构提到的一些技术名词作些说明。

§ 1.1 固体类型

固体一般可分成无定形、多晶和单晶体三类。每一类将以材料中的有序区域大小为特征。所谓有序区是一个空间体积,其内的全体原子或分子具有规范的几何排列,即原子是按一定周期性排列。无定形材料,只在数个原子尺度内有序,而多晶体在许多个原子范围内维持有序。这两种材料内存在多个有序区也即单晶区,彼此的大小和取向是互不相同的。因此有时称单晶区为晶粒,彼此由晶粒边界分隔。理想化的单晶体,在整个材料的空间内应具有高度有序,或者具有高度的规范几何周期性。单晶材料的磁光电学性质,一般远远优于非单晶材料,因为晶粒边界使其磁光电学性质恶化。图 1.1.1 为无定形、多晶体和单晶体材料的二维示意图。

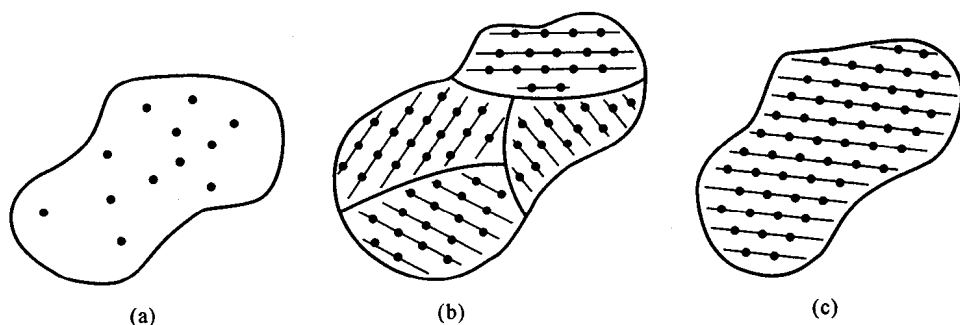


图 1.1.1 三类晶体的二维示意图 (a) 无定形 (b) 多晶 (c) 单晶

§ 1.2 空间点阵

1.2.1 晶格、原胞、元胞

单晶体中具有代表性的单元(原子群),沿着三维方向,按一定规则的间隔重复排列而形成单晶。晶体中原子的周期性排列称为晶格(点阵)。

我们常用一些叫格点(阵点)的点子表示原子阵列。图 1.2.1 为格点的一个无限大二维阵列。欲将原子阵列重复展开,最简单的办法是平移。图 1.2.1 中每个格点,沿某一方向平移距离

a_1 ,沿与第一个方向非平行的第二个方向上平移 b_1 距离,重复以上平移就可产生二维点阵。若再作与前两个非平行的第三个方向平移,可得三维空间点阵。三个平移方向不需互相垂直。

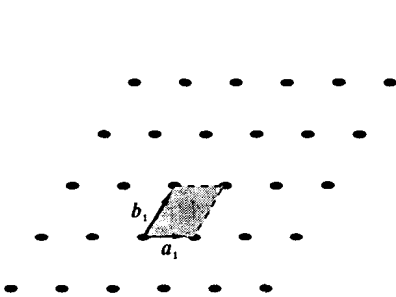


图 1.2.1 单晶的二维点阵

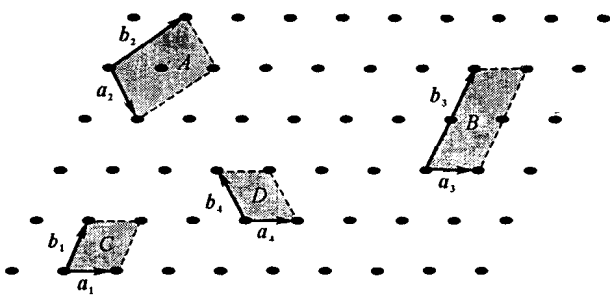


图 1.2.2 单晶二维点阵中各种可能的元胞

因为三维点阵是原子群的周期性重复,所以没有必要针对整个晶格(或点阵)来考虑问题,一般只需讨论作为重复的单元就够了。因此把产生整个晶体的小晶体体积元称为元胞。元胞不是惟一的,可有多种取法。图 1.2.2 中给出二维点阵中数种可能取的元胞。元胞 A 有 a_2 和 b_2 两个平移方向,而元胞 B 可有 a_3 和 b_3 两个平移方向,所以整个二维点阵可以用以上两个元胞中任一个作平移后得到。还可用图 1.2.2 中的元胞 C 和 D,作合适的平移,构制整个二维空间点阵。在对二维元胞讨论的基础上,很容易扩展到描写真实单晶材料的三维元胞。

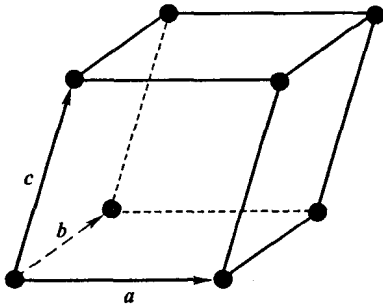


图 1.2.3 广义主元胞

最小的元胞称原胞。在多数情况下,讨论点阵用的是元胞而非原胞。因为使用元胞,可以选择具有正交边线的元胞,而原胞的边线就不一定正交,这会使问题复杂化。

图 1.2.3 所示为广义的三维元胞。这一元胞与晶格之间关系将以三个矢量 a, b, c 为标志,不需要三者互相垂直,长度也可以不相等。对于三维晶体中每一个等效格点,其位置可用以下矢量表达

$$r = pa + qb + sc \tag{1.1.1}$$

式中 p, q, s 为整数。因为原点位置是任选的,所以为了简化,常选 p, q, s 为正整数。

1.2.2 基本的晶体结构

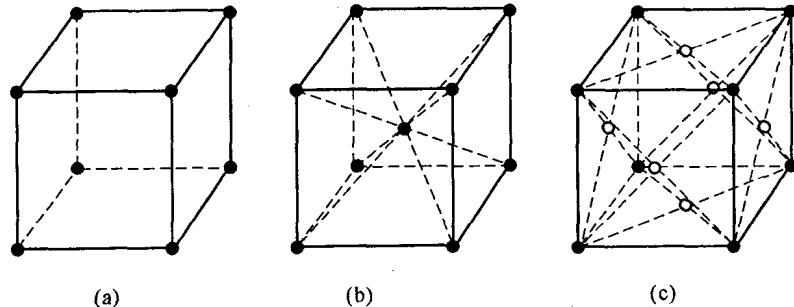


图 1.2.4 三种类型晶格 (a) 简单立方 (b) 体心立方 (c) 面心立方