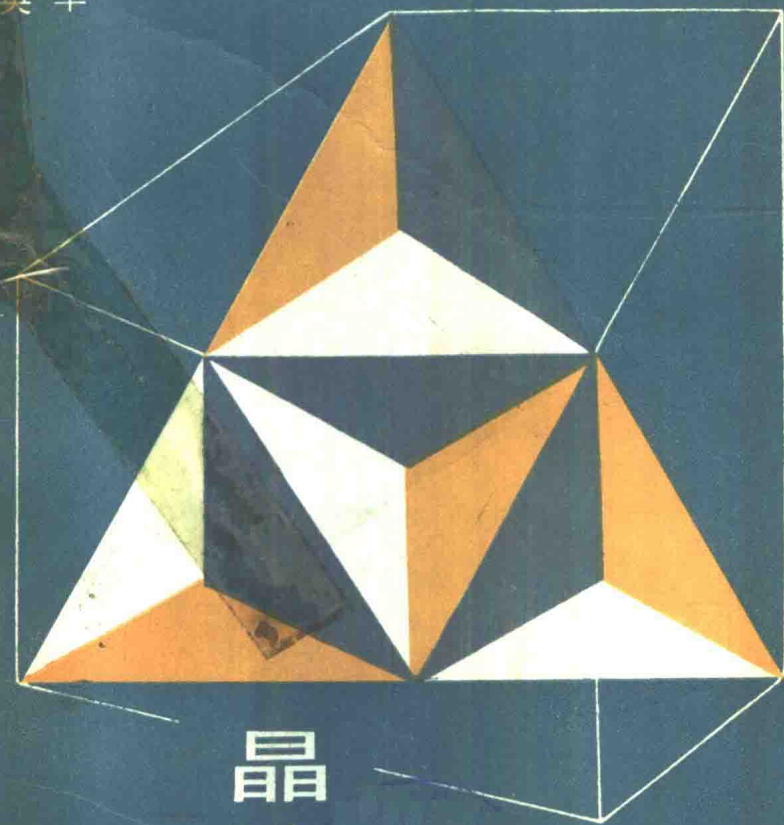


王英华



晶体学导论

清华大学出版社

晶体学导论

王英华 编著

清华大学出版社

内 容 提 要

《晶体学导论》以简明的语言阐述了晶体的几何规律，介绍了点阵、对称、点群、空间群等概念以及典型的晶体结构及晶体学中常用的三种变换，即投影变换、倒易变换和坐标变换。

本书的基本特征是从材料科学工作者的角度去阐述晶体学问题，从而它避免了常规晶体学书籍中的冗长的推演，仅将清晰的物理概念呈现给读者。

本书可作为金属、陶瓷、半导体等材料专业的本科生、研究生教材和材料工作者的参考书，也可供生物、药物、高分子材料等方面的学生和工作者的参考。

晶 体 学 导 论

王英华 编著

☆

清华大学出版社出版

北京 清华园

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

☆

开本：850×1168 1/32 印张：9 5/8 字数：250 千字

1989 年 8 月第 1 版 1989 年 8 月第 1 次印刷

印数：0001—3000

ISBN 7-302-00369-6/TG·2(课)

定价：2.30 元

前 言

晶体几何学是多门学科的基础，它不仅对晶体结构测定者具有重要意义，而且对所有材料——金属、陶瓷、高分子、半导体、矿物、药物、生物等工作，都具有重要的意义。可以说，了解晶体结构规律，掌握描述晶体的方法和语言，熟悉晶体学中所用的数学方法是材料工作者通晓本学科的基础和在本学科内得到发展的入门向导。

本书的对象是材料工作者，而不是晶体结构测定者。所以它不着重于历史的追述、点群、空间群理论的推导，而是着重于材料工作者应了解和熟悉的内容。书中前面介绍晶体内部结构的规律，对称特征，国际上通用的晶体学语言、符号和典型的晶体结构，后面着重讨论晶体学中常用的三种变换——投影变换、倒易变换、坐标变换和它们在材料科学中的应用。

本书在内容取舍上的特点是：对材料工作者常用的晶体学特有内容给以较大的篇幅，例如极射投影的概念与应用，与现代衍射技术密切相关的倒易点阵概念与应用等。对点群和空间群的处理不是着眼于来源推导，而是着眼于介绍国际通用符号的意义，国际资料的阅读，和从这些资料中能获得的材料结构特征，以帮助材料工作者在自己的研究工作中利用这些资料。同时，为了帮助初学者掌握书中的内容，文字力求通俗易懂，并在每章后附有思考与练习题。

本书可作为金属、陶瓷、半导体等材料专业本科生、研究生的教材和材料工作者的参考书，也可供生物、药物、高分子材料等方面的学生和工作参考。

由于作者水平有限，写书只是基于发展我国科学文化的热情和对教育工作的感情，有错误和不妥之处，希望读者批评指正。

本书在编写过程中曾得到李恒德、张洪涛等教授的支持，张孝文教授在百忙之中对本书的初稿提出过宝贵的修改意见，在此一并表示感谢。

作者

一九八六年九月于清华大学

• ■ •

目 录

第一章 重复图形与点阵	1
一、重复图形与点阵.....	2
二、平移矢.....	7
三、阵胞.....	9
四、点阵阵胞与结构晶胞.....	12
练习题.....	14
复习题.....	16
第二章 晶体中的对称操作与对称元素	17
一、宏观对称操作与对称元素.....	17
二、微观对称操作与对称元素.....	24
练习题.....	29
复习题.....	31
第三章 阵胞内几何元素的表示方法	32
一、阵胞中点的位置.....	32
二、阵胞中直线的方向.....	33
三、阵胞中平面的取向.....	34
四、阵胞中的等价点、方向和面.....	35
五、六方晶系中的米勒指数和米勒-布拉维指数.....	36
六、面间距.....	43
练习题.....	44
复习题.....	47
第四章 点阵类型	48
一、5种平面点阵.....	48
二、4种平面晶系.....	53
三、14种空间点阵.....	54

四、7个晶系·····	64
练习题·····	66
复习题·····	67
第五章 晶体的点群 ·····	68
一、点群概念·····	68
二、点群及其符号·····	70
三、点群与形·····	76
四、劳埃群与重复因数·····	82
五、三维点群与二维点群·····	88
练习题·····	91
复习题·····	93
第六章 晶体的空间群 ·····	94
一、17种平面群·····	94
二、空间群·····	97
三、实例分析·····	100
练习题·····	103
复习题·····	104
第七章 典型的晶体结构 ·····	105
一、晶体结构的几何规律·····	105
二、元素的晶体结构·····	116
三、固溶体与中间相的结构·····	122
四、具有离子键的晶体结构·····	127
五、具有共价键的晶体结构·····	134
六、有机化合物·····	135
七、高聚物、液晶和生物有机体的结构概述·····	135
八、《结构报告》中使用的符号·····	147
练习题·····	150
复习题·····	151
第八章 晶体中的投影变换 ·····	152
一、球面投影·····	152
二、极射投影·····	155

三、吴氏网与极网	159
四、标准投影	166
五、心射投影	174
六、极射投影的应用	176
练习题	196
复习题	197
第九章 晶体中的倒易变换	198
一、倒易点阵概念	198
二、正、倒点阵之间的倒易关系	202
三、晶带与倒易面	205
四、主要晶体学关系的计算	208
五、加权倒易点阵与倒易空间	217
六、倒易面的对称性	232
七、六方晶系倒易点阵中的指数问题	237
八、利用倒易空间解释衍射现象	241
练习题	249
复习题	250
第十章 晶体中的坐标变换	251
一、坐标变换	251
二、两组倒易阵胞基矢群之间的变换	257
三、对应两组基矢群对阵胞内几何元素指数的变换	259
四、应用举例	262
练习题	267
复习题	268
附录	270
附录一、电子衍射图的角范围	270
附录二、晶面的衍射斑与极点之间的关系	271
附录三、极射投影中两个基本性质的证明	278
附录四、立方晶系的标准投影	281
主要参考书	300

第一章 重复图形与点阵

一定的结构单元按一定的方式重复而成的图形称为重复图形。图 1-1 是二维重复图形，它的结构单元为图左下角方框内的花样，整个重复图形是由这一结构单元一个紧挨一个地构成。

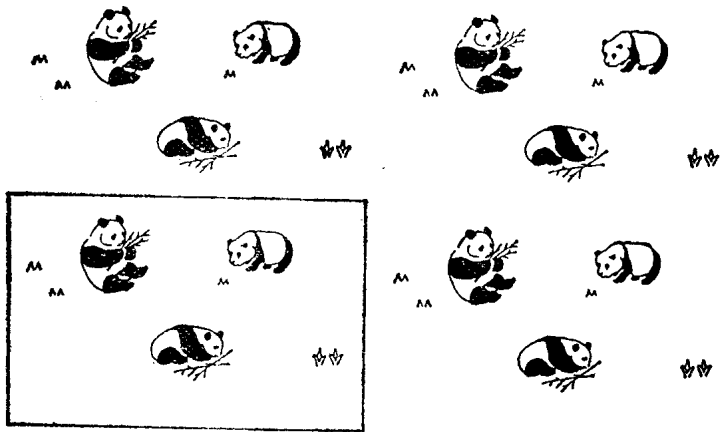


图 1-1 二维重复图形

晶体是三维重复图形，它的结构单元是由组成晶体的原子或原子团构成。

本章将从重复图形出发，讨论晶体内部结构的规律性，从而获得晶体学中的基本概念：点阵、阵胞和晶胞等。

一、重复图形与点阵

图 1-2 是一条花边，是一维重复图形。它是由图 1-3 所示的结构单元沿 α 方向一个挨一个地排列而成。为了表明重复图形的重复规律，在其中找一系列环境相同的点。所谓环境相同的点，是



图 1-2 一维重复图形



图 1-3 图 1-2 中的结构单元

指这些点周围的物理环境（周围的物质类型）和几何环境（与周围物质的配置关系）都相同。图 1-2 中的“•”点，彼此之间的环境都相同；“×”点，彼此之间的环境也相同。从图 1-2 中抽出一套环境相同的点，“•”或“×”，则形成如图 1-4 所示的点列，相邻两点之间的距离为 a 。称此点列为重复图形图 1-2 的点阵。点阵就是重复图形中环境相同点的排列阵式，它仅是图形或物质排列规律的一种数学抽象，并没有具体的物质内容。点阵中的点称为阵点或结点。



图 1-4 一维点阵——点列

上面谈到，一维重复图形的重复规律可以用一维点阵——点列来描述。同样，二维重复图形的重复规律可以用二维点阵来描述。图 1-5 就是二维重复图形图 1-1 的点阵。

图 1-5 二维点阵——点网

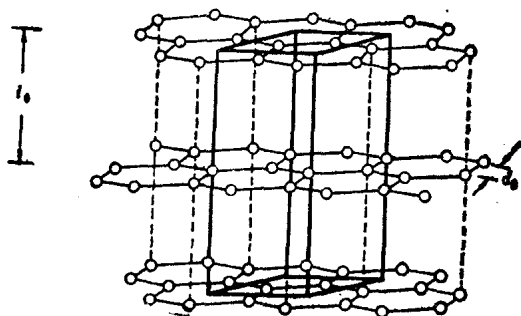


图 1-6 石墨的晶体结构与晶胞

一般情况下，晶体是三维重复图形。图 1-6 是石墨晶体的结构，它是由一层层的碳-碳六边形网面排列而成。各层之间间距相等，记为 l_0 。如果把石墨晶体中的原子都投影到层面上，则奇数层上的碳原子相互重叠，如图 1-7 中的黑点所示。偶数层上的碳原子也相互重叠，如图 1-7 中的小圆圈所示。通常称像石墨层这样的排列方式为 $ABAB\cdots$ 排列。为考察石墨晶体的点阵，首先分析石墨层(图 1-8)的点阵。为此，在石墨层中寻找环境相同的点。

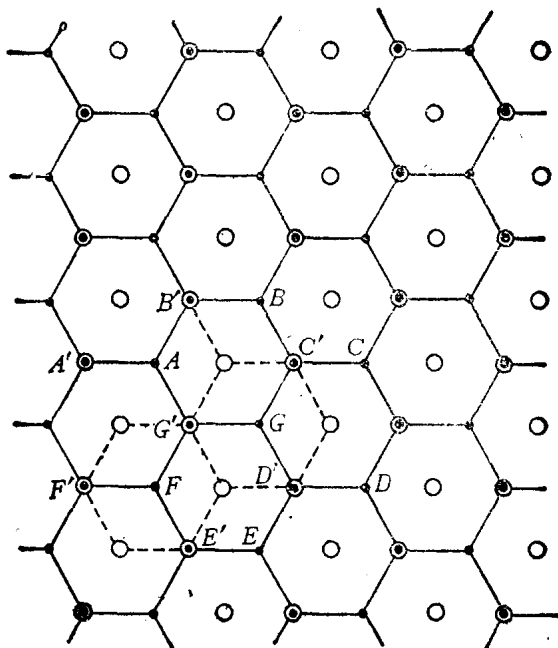


图1-7 石墨晶体中的碳原子在石墨层面上的投影, 图中“●”为奇数层上碳原子的投影位置; “○”为偶数层上碳原子的投影位置

观察图 1-8, 发现 A 、 B 、 C 、 D 、 E 、 F ... 等处的原子环境相同, A' 、 B' 、 C' 、 D' 、 E' 、 F' ... 等处的原子环境也相同。环境相同的点, 不仅可以处在原子上, 也可以处在图形中的任意位置, 如图 1-8 中六角形的中心等。因此, 在图形中可以找到无穷多组环境相同的点, 但任意抽取一组环境相同的点, 都有如图 1-9 所示的形貌。也就是说, 图 1-9 是石墨层的点阵。如果石墨层中原子之间的最小间距为 d_0 (图 1-6), 那么它的点阵中结点之间的最小间距为 $a_0 = 2d_0 \cos 30^\circ$ 。现在再回过头来分析三维石墨晶体 (图 1-6) 和其在层面上的投影 (图 1-7)。现以图 1-7 中的奇数层为 $ABAB$... 排列中的 A 层原子 (“●”), 偶数层为 $A'B'A'B'$... 排列中的 B 层原子 (“○”)。考察图中 A 、 B 层中的碳原子, 发现在

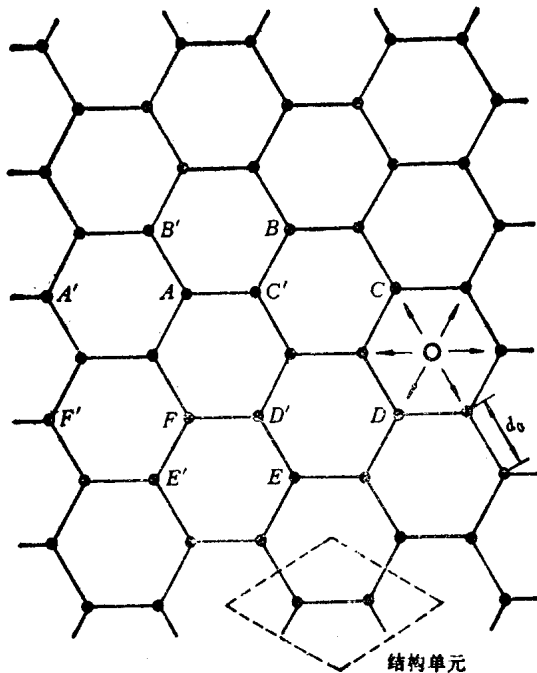


图 1-8 石墨层中的碳原子分布

层内环境相同的原子它们的空间环境并不相同，例如 A 层中 G 原子和 B 层中的 G' 原子就属于这种情况。因此，环境相同的点不可能同时处在 A 层和 B 层内。于是，对于石墨晶体来说，环境相同的点组是 A 层上的 $A、B、C、D、E、F、G \cdots$ 或是 B 层上的 $A'、B'、C'、D'、E'、F'、G' \cdots$ 等。总之，石墨晶体的点阵在石墨层面上的投影与图 1-9 所示的石墨层片的点阵相同，只是晶体点阵的层间距为 $2l_0$ 。图 1-10 是石墨晶体的点阵。

比较图 1-10 所示的石墨晶体点阵和图 1-6 所示的石墨晶体结构，会发现可以取图 1-6 中所示的平行六面体为石墨晶体的结构单元，它与图 1-10 中的平行六面体相对应：结构单元中包含 4

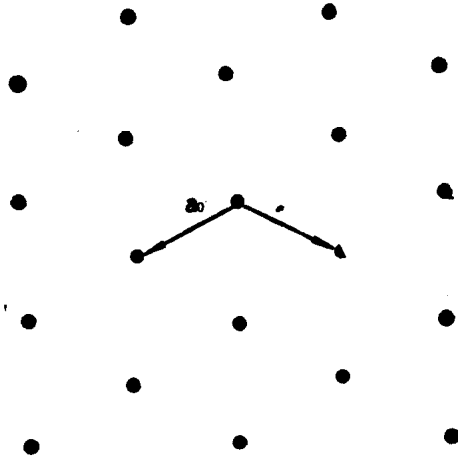


图 1-9 石墨层的点阵

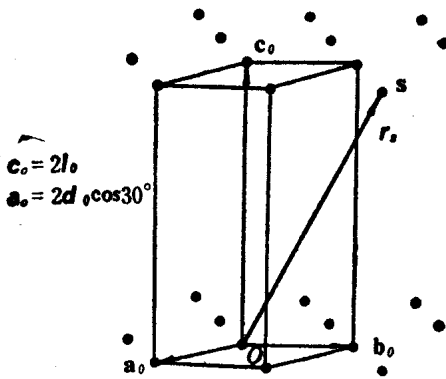


图 1-10 石墨晶体的点阵

个碳原子。

金属的晶体结构一般都比较简单,金属氧化物,陶瓷等的晶体结构则较为复杂,有机晶体的结构就更为复杂,往往结构单元由多种元素的上百个原子组成。然而,不管晶体结构多么复杂,总可以

从其结构中抽象出比此结构简单得多的点阵，并由该点阵描述结构的重复规律。

二、平 移 矢

前面以画点的办法来描述点阵，这种办法在描述三维点阵时，极不方便。所以常采用其他办法来描述点阵，矢量法就是其中之一。矢量法就是采用矢量来描述点阵中各结点之间的相对位置，称任意两结点之间的矢量为平移矢。对于一、二和三维点阵，都是先取点阵中某一结点为原点，再分别作一个矢量 \mathbf{a}_0 ，不在同一直线上的两个矢量 \mathbf{a}_0 和 \mathbf{b}_0 与不在同一平面中的三个矢量 \mathbf{a}_0 、 \mathbf{b}_0 和 \mathbf{c}_0 ，使 \mathbf{a}_0 、 \mathbf{b}_0 、 \mathbf{c}_0 整数倍的线性组合能表达点阵中所有结点的位置。称这些矢量为初级平移矢，简称初级矢。一对或一组初级平移矢称为初级矢群。点阵中任意两结点之间的矢量为点阵的平移矢。在图 1-11 所示的一维点阵中，原点为 O ，初级矢为 \mathbf{a}_0 ，可以用下列矢量式描述点阵中任一结点的位置

$$\mathbf{r} = n\mathbf{a}_0 \quad (1-1)$$

式中 n 为整数， \mathbf{r} 为平移矢。



图 1-11 一维点阵的初级矢

在图 1-12 所示的二维点阵中，取 \mathbf{a}_0 和 \mathbf{b}_0 为初级矢，则其结点位置由下式描述

$$\mathbf{r} = u\mathbf{a}_0 + v\mathbf{b}_0 \quad (1-2)$$

式中 u 、 v 为整数， \mathbf{r} 为平移矢。

图 1-10 所示的三维点阵中， \mathbf{a}_0 、 \mathbf{b}_0 和 \mathbf{c}_0 为初级矢群，其平移矢为

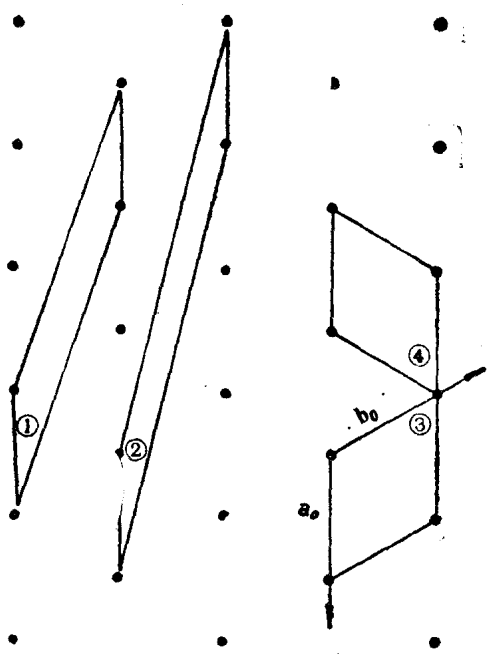


图 1-12 二维点阵中的初级矢群的各种取法

$$r = ua_0 + vb_0 + wc_0 \quad (1-3)$$

式中 u, v, w 为整数。

对于一维点阵，初级矢的取法唯一的，对于二维和三维点阵，初级矢群的取法则是多种多样的。在图 1-12 所示的二维点阵中，画出了①、②、③、④组初级矢。这些初级矢的取法虽然不同，但是它们都有着共同的特点，即在以初级矢群为边棱的平行四边形或平行六面体中仅包含着一个结点。在图 1-13 所示的点阵中，第一对矢量为初级矢，以它们为边的平行四边形内所包含的结点数为 $4 \times 1/4 = 1$ ，乘 $1/4$ 是因为处在四边形顶角上的结点为四个相邻的四边形所共有；第二对矢量则不是初级矢，因为以它们为边的

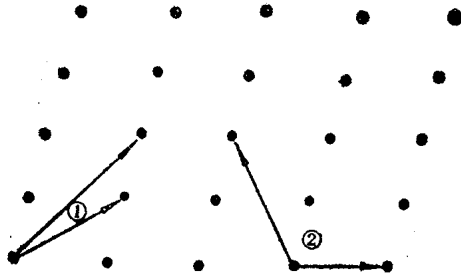


图 1-13 初级矢群与非初级矢群

平行四边形中包含的结点数为 2。因此，由矢量群所形成的形体中所包含的结点数目，就成为它们是否是初级矢群的判据。

三、阵 胞

初级矢群虽然能给出点阵中所有结点的相对位置，但它们并不能直观地给出点阵的形貌。为了弥补矢量法的这种不足，人们引入阵胞的概念。所谓阵胞，就是以初级矢或特定的平移矢为边棱作成的平行四边形或平行六面体。如图 1-14 中的粗实线所示。

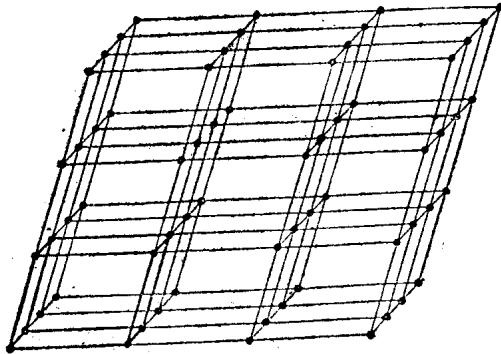


图 1-14 点阵的阵胞与点阵