



普通高等教育“九五”国家级重点教材

固体物理学

胡安 章维益



 高等教育出版社

普通高等教育“九五”国家级重点教材

固体物理学

胡安 章维益

高等教育出版社

内容简介

本书是普通高等教育“九五”国家级重点教材,是作者多年来在南京大学讲授固体物理的经验总结。作为一本面向大学本科生的教材,本书在内容取舍、顺序安排、难度处理等诸多方面都经过反复斟酌。本书在传统固体物理的理论框架和不增加篇幅的情况下,对一些一般教材讲解较少的内容做了比较深入的讲解,例如非完整晶格振动中的局域模、磁致电阻、范弗莱克顺磁性和超交换耦合等。同时,作者适当地引入了一些凝聚态研究领域的新进展,如准晶体、量子霍尔效应和自旋相关输运等,在尽量不涉及高等量子力学和复杂的教学处理的情况下,做到物理图像清晰、内容融会贯通,使学生能够掌握从事凝聚态物理研究工作的专业基础知识。全书内容包括晶体的结构及其对称性、晶体的结合、晶格动力学和晶体的热学性质、能带论、金属电子论、半导体电子论、固体磁性和超导电性 8 章。

本书可作为高等院校物理类专业本科生、研究生的固体物理教材,也可供其他专业的师生及社会读者参考。

图书在版编目(CIP)数据

固体物理学/胡安,章维益. —北京:高等教育出版社,2005.6

ISBN 7-04-017027-2

I. 固... II. ①胡...②章... III. 固体物理学-高等学校-教材 IV. O48

中国版本图书馆CIP数据核字(2005)第036721号

策划编辑 庞永江 责任编辑 董洪光 封面设计 刘晓翔 责任绘图 吴文信
版式设计 王艳红 责任校对 朱惠芳 责任印制 杨明

出版发行	高等教育出版社	购书热线	010-58581118
社 址	北京市西城区德外大街4号	免费咨询	800-810-0598
邮政编码	100011	网 址	http://www.hep.edu.cn
总 机	010-58581000		http://www.hep.com.cn
经 销	北京蓝色畅想图书发行有限公司	网上订购	http://www.landaco.com
印 刷	国防工业出版社印刷厂		http://www.landaco.com.cn
开 本	787×960 1/16	版 次	2005年6月第1版
印 张	23.25	印 次	2005年6月第1次印刷
字 数	430 000	定 价	29.00元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

物料号 17027-00

序 言

本书作为高等院校理工科讲授固体物理的教科书,目的在于希望通过本课程的学习,使学生掌握从事凝聚态物理研究工作的起码的物理基础,以及进一步学习固体理论和凝聚态物理学所需要的基本概念和知识。

作为凝聚态物理基础的固体物理学,主要把晶态物质作为讨论对象。在单粒子近似的基础上,充分利用晶格的平移对称性,统一处理周期结构中波的传播问题。格波在周期结构中传播导致晶格动力学,德布罗意波在周期结构中传播导致能带论,也包括自旋波和电磁波在周期结构中的传播。

固体物理学的基本任务是企图从微观上去解释固体材料的宏观物理性质,并阐明其规律性。系统的基态和激发态性质是理解固体物理性质的关键。固体的基态只依赖于体系中粒子之间的内禀相互作用。例如,考虑固体中不同类型的原子间的相互作用,可以构造成具有不同对称性的晶体结构,而建立在单电子基础上的金属电子论,体系的基态是电子按能级填充,一直到费米能级止,这是忽略了相互作用的基态。除此之外,不同的相互作用将在一定条件下构成形形色色的固体基态,例如,磁性离子之间的交换作用可以形成铁磁或反铁磁基态,电子与声子的相互作用使费米面附近的电子配对(称为库珀对)构成常规超导体的基态,等等。基态不仅是能量的最低状态,而且是某种有序状态。晶体在外场扰动下将从基态跃迁到激发态。在弱外场下,晶体的低激发态可以看作一些独立激发单元的集合,这些激发单元通常称为元激发。在本书的相应章节中,应用简单模型和处理方法去论述系统的基态和激发态属性,自然地引入各种类型的基态和元激发,这些元激发包括:准电子、空穴、声子、极化激元,等离激元、激子和自旋波量子等,而不将固体中的元激发作为专章讨论。

固体物理是建立在周期性和单粒子近似下的简单理论。对于偏离周期性的系统(包括准周期系统、无序系统、含缺陷的晶体、表面和界面等)以及由于无序导致的局域化问题,并不做全而的论述,只是在适当的章节,穿插某些典型例子点到为止,以此说明简单理论的局限性和解决问题的思路。超越单粒子近似而计入粒子间相互作用的多体效应问题,诸如金属磁性和超导电性,只在本书第七章和第八章中做简单讨论。至于窄能带系统中电子关联导致的金属-绝缘体相交等问题也只以典型例子在相应章节中加以讨论。

本书是根据作者多年来在南京大学讲授固体物理的讲稿整理而成的。凝聚

态物理是一门发展迅速、涉及范围广泛的学科。作为凝聚态物理基础的固体物理学,自然要适应学科发展的需要,不断地增添一些新的内容。但是作为一本面对大学本科阶段的教科书,如果一味贪新求全,必然得之东隅,失之桑榆,以致教材理论艰涩、内容臃肿,篇幅浩繁,不利施教。因此在内容取舍、顺序安排、处理深浅诸方面都颇多斟酌。本书力求在传统固体物理的理论框架下,穿插一些新的进展内容,尽量不涉及高等量子力学和复杂的数学处理,做到物理图像清晰,内容融会贯通。全书共包括晶体的结构及其对称性、晶体的结合、晶格动力学和晶体的热学性质、能带论、金属电子论、半导体电子论、固体磁性和超导电性等8章。前七章由胡安执笔,第八章由章维益执笔,全书由章维益和胡安讨论定稿。

本书的最后附有习题选编。习题可分为两类:一类是基本题目,目的是为了使学生巩固和加深对授课内容的理解;另一类涉及凝聚态物理的许多重要物理效应,诸如X射线衍射线宽、德拜-瓦勒因子、 K_3C_{60} 晶格的马德隆常数、科恩反常、软声子模、派尔斯失稳、反铁磁自旋波、近藤效应等。由于教材篇幅的限制,不拟将后一类题目的内容纳入教材正文,而将其作为习题使之与正文的固体物理基本理论前后呼应,相得益彰。这样不仅可以充分发挥学生的独立思考的潜质,也可以培养他们将来从事科学研究的能力。

在成书的过程中,我们始终得到冯端教授、李正中教授和张杏奎教授的热情指导和鼓励。在文字处理和插图绘制方面,得到张维、盛雯婷、孙亮、陈峥嵘、游彪等先生的热情帮助,谨此致谢。由于作者学识浅陋,书中必定存在许多错误和不妥之处,祈请各位专家及广大读者予以批评指正。

胡安 章维益

2005年1月

目 录

第一章 晶体的结构及其对称性	1
§ 1.1 晶格及其平移对称性	1
一、晶体结构及基元	1
二、结点和点阵	6
三、基矢和元胞	7
§ 1.2 晶列和晶面	11
一、晶列及其晶向标志	11
二、晶面及有理指数定律	11
三、晶面指数和密勒指数	13
§ 1.3 倒点阵	14
一、点阵傅里叶变换, 倒点阵	14
二、倒点阵的性质	16
§ 1.4 晶体的宏观对称性	19
一、宏观对称性的描述	20
二、宏观对称性破缺	21
三、实例	24
四、晶体的宏观对称性与宏观物理性质	25
§ 1.5 晶体点阵和结构的分类	27
一、群的概念	27
二、7 个晶系和 14 种点阵	28
三、晶体结构的 32 种点群和 230 种空间群	33
§ 1.6 晶体 X 射线衍射	37
一、布拉格反射公式	38
二、劳厄方程	39
三、原子散射因子与几何结构因子	41
四、三种重要的 X 射线晶体学分析方法	46
§ 1.7 准晶体	48
一、维准周期 (Fibonacci) 点阵	50
二、投影理论及其衍射谱	51

第二章 晶体的结合	56
§ 2.1 原子的负电性	57
一、原子的电离能	57
二、原子的亲和能	57
三、原子的负电性	57
§ 2.2 晶体结合的类型	58
一、金属结合	58
二、共价结合	59
三、离子结合	62
四、范德瓦耳斯(van der Waals)结合	63
五、氢键	65
六、混合键	66
§ 2.3 结合能	68
一、内能函数与结合能	68
二、离子晶体的结合能	69
三、惰性气体晶体的结合能	72
第三章 晶格动力学和晶体的热学性质	75
§ 3.1 简正模和格波	76
一、微振动理论——简正模	76
二、格波	79
§ 3.2 一维单原子链振动	80
一、运动方程及其解	80
二、格波特性	81
三、玻恩-卡曼(Born-Karman)边界条件	83
四、简正坐标	84
§ 3.3 一维双原子链振动	87
一、运动方程及其解	87
二、声学波和光学波	88
三、玻恩-卡曼边界条件	89
§ 3.4 三维晶格振动, 格波量子—声子	90
一、三维晶格振动	90
二、格波量子	93
§ 3.5 离子晶体中的长光学波	95
一、离子晶体中长光学晶格振动产生的内场	95
二、长光学波的宏观运动方程	96
三、不考虑横场耦合时, 离子晶体长光学波的本征频率 ω_m 和 ω_{L0}	99

四、极化激元	100
§ 3.6 非完整晶格的振动,局域模	104
一、一维完整单原子链的扩展模式	104
二、含单个缺陷的一维原子链的振动频率	106
三、局域模	107
§ 3.7 晶格比热容	110
一、声子谱密度	110
二、爱因斯坦模型和爱因斯坦比热容	113
三、德拜模型和德拜比热容	114
§ 3.8 晶格状态方程和热膨胀	118
一、自由能和格律乃森(E Grüneisen)状态方程	118
二、热膨胀及其格律乃森关系	120
三、热膨胀与非谐效应	121
第四章 能带论	125
§ 4.1 布洛赫定理和布洛赫波	126
一、平移算符,周期场中单电子状态的标志	127
二、布洛赫定理和布洛赫波	129
三、布洛赫波能谱特征	130
§ 4.2 平面波法	133
§ 4.3 近自由电子近似	135
一、零级近似	136
二、非简并微扰	136
三、简并微扰	138
四、布里渊区、能隙、能带和禁带	138
五、能隙的成因	141
六、简约波矢 $\vec{k}$ 和自由电子的波矢 $\vec{k}$	143
七、能带的能区图式	144
§ 4.4 紧束缚近似	147
一、旺尼尔(Wannier)函数	147
二、紧束缚近似	148
§ 4.5 正交平面波法	151
§ 4.6 赝势方法	154
§ 4.7 能态密度	156
一、自由电子的能态密度	157
二、能带电子的态密度	158
§ 4.8 布洛赫电子的动力学性质	160
一、准经典近似	161

二、皮包在外场中的运动,布洛赫电子的准动量	163
三、加速度和有效质量	165
四、准经典近似的物理含义	166
§ 4.9 布洛赫电子在恒定电场中的准经典运动	167
一、恒定电场下的动力学	167
二、碰撞,弛豫时间,金属电导率公式	168
三、满带电子不导电	169
四、近满带和空穴	170
五、导体、绝缘体和半导体的能带特征	171
§ 4.10 布洛赫电子在恒定磁场中的准经典运动	172
一、恒定磁场下的动力学	172
二、轨道量子化	176
§ 4.11 布洛赫电子在相互垂直的恒定电场和磁场中的运动	179
一、霍尔效应和磁致电阻	179
二、双能带模型—霍尔效应和磁致电阻	182
§ 4.12 能带论的局限性	186
一、电子之间的关联效应	186
二、无序系统中皮的局域化	188
第五章 金属电子论	191
§ 5.1 费米分布函数和自由电子气比热容	191
一、费米分布函数	191
二、基态 ($T=0\text{ K}$) 下的分布函数 $f_0(E)$ 和自由电子气的费米能 E_F^0	191
三、激发态 ($T\neq 0\text{ K}$) 时,自由电子气的费米能 E_F	193
四、自由电子气的比热容	195
§ 5.2 金属的费米面	198
一、金属费米面的构造,哈里森构图法	199
二、实际金属的费米面	201
§ 5.3 费米面的实验测定	202
一、回旋共振	202
二、德哈斯—范阿耳芬效应	204
§ 5.4 输运现象	207
一、非平衡分布函数	207
二、玻耳兹曼方程	209
§ 5.5 金属的电导率	211
一、弛豫时间近似	211
二、电导率公式	212
§ 5.6 弛豫时间 $\tau(k)$ 与碰撞概率 $\theta(k, k')$ 的关系	214

§ 5.7 电子和声子的相互作用——金属电阻率与温度的关系	216
一、随时间变化的微扰势	216
二、散射概率 $\theta(k', k)$	217
三、电阻率的温度关系	219
§ 5.8 等离激元与准电子	222
一、等离激元	222
二、电子气的个别激发	224
三、静电屏蔽, 准电子	225
四、等离子体中的横振动	227
第六章 半导体电子论	229
§ 6.1 半导体的基本特征和分类	229
一、本征半导体	229
二、杂质半导体	230
三、半导体的带隙	232
四、激子	234
§ 6.2 半导体带边的能带结构和有效质量	237
一、能带计算的 $k \cdot p$ 方法	237
二、回旋共振实验	241
§ 6.3 半导体载流子的浓度	244
一、半导体载流子的统计分布	244
二、载流子浓度	244
三、费米能的确定	245
四、半导体载流子的简并	247
§ 6.4 接触效应	248
一、P-N 结	249
二、金属-半导体结	253
三、MOS 结和 MOS 晶体管	257
§ 6.5 半导体载流子的输运问题	259
一、电导率	259
二、霍尔效应	262
二、量子霍尔效应	262
第七章 固体磁性	267
§ 7.1 原子磁性及外场响应	268
一、轨道磁矩, 自旋磁矩和原子磁矩	268
二、洪德定则	270
三、原子的外磁场响应	271

§ 7.2 抗磁性	273
§ 7.3 顺磁性	274
一、居里定律	275
二、理论的局限性	278
§ 7.4 载流子的磁性	284
一、自由电子的泡利顺磁性	284
二、自由电子气的朗道抗磁性	286
三、非简并载流子的顺磁性和抗磁性	287
§ 7.5 铁磁性	289
一、实验事实	289
二、分子场理论	289
三、自发磁化的局域电子模型	292
四、铁磁体在外场中的磁化过程	293
§ 7.6 铁磁自旋波	297
一、平均场近似的困难	297
二、铁磁自旋波	299
§ 7.7 铁磁金属自发磁化的巡游电子模型	304
§ 7.8 自旋相关输运	305
一、电子隧穿电导	306
二、自旋极化	307
三、电子的自旋相关隧穿电导	308
四、自旋阀结构	309
§ 7.9 反铁磁性	311
一、实验事实	311
二、反铁磁性的奈耳理论	313
三、超交换作用	316
第八章 超导电性	319
§ 8.1 超导体的基本物理性质	320
一、超导体的输运性质	320
二、超导体的磁学性质	322
三、超导体的热力学性质	324
四、同位素效应	325
§ 8.2 超导电性的物理机制与理论	325
一、超导电性的物理起源	326
二、Gorter 和 Casimir 的二流体模型	328
三、London 唯象理论模型	330
四、Pippard 非局域理论扩展	332

五、Ginzburg-Landau 理论	334
§ 8.3 超导弱连接和宏观量子效应	337
一、Josephson 效应	337
二、超导量子干涉仪	342
§ 8.4 超导电性的展望	343
习题选编	344
主要参考书	357

第一章

晶体的结构及其对称性

凝聚态物质包括液体、固体以及介于其间的软物质(如液晶、凝胶等),它们是原子、离子或分子的聚集体。固体是凝聚态物质中的一种特殊聚集形态。在压强和温度一定,且无外力作用时,它的形状和体积保持不变。液体则没有这种性质。根据组成粒子在空间排列的有序度和对称性,固体可以分为晶体、准晶体和非晶体三类。

晶态固体的组成粒子在空间周期性排列,具有长程序。由于周期性的限制,它不能保持对任意的平移和旋转不变,其对称性是破缺的。

与晶态固体相反,非晶态固体的组成粒子在空间的分布是完全无序或仅仅具有短程序。若不考虑可能存在的短程序,根据物性测量的判断,在统计意义上,可以认为无序固体中粒子的分布与气体和液体相似,是均匀球对称的,因此具有高度的对称性,对任意的平移和旋转不变。

准晶体介于晶体和非晶体之间。虽然粒子的分布是完全有序的,但不具有周期性,仅仅具有长程取向序。因此可以具有晶体所不允许的旋转对称性。

固体物理把晶态物质作为主要讨论对象,基本的出发点在于强调周期性,考虑破缺的对称性、偏离周期性的问题,仅仅作为固体物理学基本理论的向外延拓。本章将简要地阐明晶体中原子周期性排列及其对称性的一些基本规律、基本概念和数学描述。此外,也简要地叙述晶体的X射线衍射学,为描述晶体结构提供实验基础。

§ 1.1 晶格及其平移对称性

一、晶体结构及基元

1. 晶体结构

晶体中原子的规则排列称为晶格。不同的晶体中原子的排列形式可能是不相同的,我们把晶体中原子的具体排列形式称为晶体结构。下面介绍几种最常见

的晶体结构.

(1) 简单立方(sc)晶体结构

将同一种元素的原子置于立方体的顶角上,便得到简单立方晶体结构,如图 1.1.1 所示.实际的晶格应是这一单元在三维空间无限重复排列.显然,这是一种自然界非常常见的结构,因为这种结构往往并不对应能量最低的基态,通常它对于切变是不稳定的.至今在自然界中,正常条件下,发现的唯一例子是钋(Po)的 α 相晶体.从图 1.1.1 可以看到,在这种结构形成的晶格中,任一个原子的位置都是完全等价的.无论从哪一个原子去看,周围原子的分布和排列方位都是完全相同的.将整个晶格作从一个原子到任何一个原子的平移,都能完全复原.通常把每个原子周围的最近邻原子数称为配位数,简单立方结构原子的配位数为 6.

(2) 体心立方(bcc)晶体结构

将一个相同的原子置于简单立方结构的立方体的中心,便得到体心立方晶体结构,如图 1.1.2 所示.注意,在这种结构中,每个原子的位置也是完全等价的,因为每个原子都处于 8 个同类原子构成的立方体的中心.其配位数为 8.相当多的金属,如碱金属 Li、Na、K、Rb、Cs 和难熔金属 W、Mo、Nb、Ta 等,具有体心立方晶体结构.

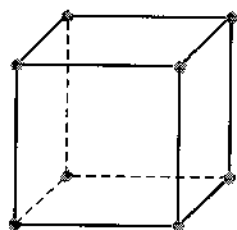


图 1.1.1 sc 晶体结构

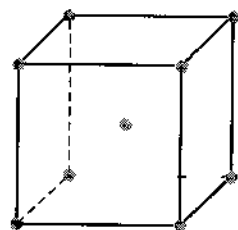


图 1.1.2 bcc 晶体结构

(3) 密堆晶体结构

如果将晶体结构看成是原子球的规则堆积,显然体心立方结构的堆积密度大于简单立方晶体结构.但是它们都不是最密的堆积方式.图 1.1.3 表示原子球在一个平面内的最紧密的排列方式,称为密排面.把密排面叠起来可以形成三维结构.为了堆积最密,上一层的球心必须对准下一层的球隙.如果把第一层原子球心位置记为 A,第二层原子可以放在第一层原子的球隙 B 处,也可以放在球隙 C 处,但是为了保证第二层原子排列为密排面,选择了 B 位就不能占据 C 位.由此可知,存在各种各样可能的周期性堆积的序列.

如果按照...ABCABC...序列堆积,便构成面心立方(fcc)晶体结构.图 1.1.4 表示面心立方晶体结构.原子处于立方体的顶角和每个面的中心.为了弄清密排

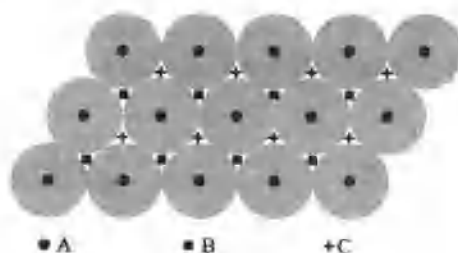


图 1.1.3 密排面

面与堆积方向,图中用阴影表示密排面,它是立方体的空间对角面,堆积方向沿空间对角线方向.在这种结构里,每个原子的周围环境,就形式和取向都是相同的,每个原子周围有 12 个最近邻的相同原子,配位数为 12.有很多金属,例如 Cu、Ag、Au、Al、Ni 等晶体具有面心立方晶体结构.

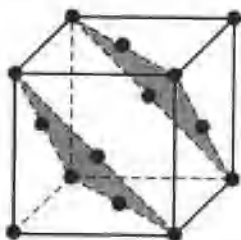


图 1.1.4 fcc 晶体结构,阴影表示密排面

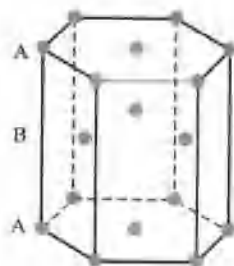


图 1.1.5 hcp 晶体结构

如果按照...ABABAB...序列堆积,便构成六角密堆(hcp)晶体结构.图 1.1.5 给出六角密堆结构示意图.显然,在这种结构中,每个原子周围也有 12 个相同原子最近邻,配位数为 12.但 A 位和 B 位原子周围原子的排布和取向是不相同的,尽管它们都是同一种原子.因为从一个 A 位原子来看,上、下两层 B 位原子构成的三角形与从一个 B 位原子来看,上、下两层 A 原子构成的三角形取向相差 180° .因此在这种结构中 A、B 两类原子是不等价的.许多元素的原子,例如 Be、Mg、Zn、Cd、Ti 等,构成的晶体具有六角密堆晶体结构.

(4) 金刚石结构

金刚石晶体由碳原子组成.其原子的排列方式称金刚石结构.如图 1.1.6 所示,碳原子除了占据立方体的顶角和面心位置外,在四条空间对角线上还有 4 个碳原子,其中两个处于两条空间对角线的 $1/4$ 处,另两个处于剩下的两条空间对角线的 $3/4$ 处.显然,处于立方体顶角及面心位置的原子与体内的原子是两类位置不等价的原子.因为,它们虽然都是碳原子,而且每类原子都处于另一类原子构成的正四面体的中心,配位数为 4,但两类四面体的取向相差 90° .除了金刚石

外,重要的元素半导体晶体如硅和锗,也具有这种晶体结构

以上介绍的都是由同一种原子构成的元素晶体.下面介绍几种常见的化合物晶体.

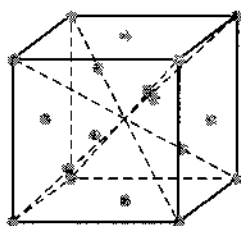


图 1.1.6 金刚石结构

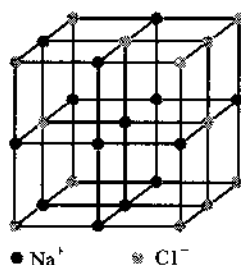


图 1.1.7 NaCl 结构

(5) NaCl 结构

将 Na^+ 离子和 Cl^- 离子交替排放在一个简单立方晶格上,构成 NaCl 结构,如图 1.1.7 所示.在这个立方体内有四个净 NaCl 单元,其离子位置为

$$\text{Cl}^- : 000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2};$$

$$\text{Na}^+ : \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 00, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 00.$$

每个离子有 6 个异类离子作为最近邻,配位数为 6.显然两类离子是不等价的.除了 NaCl 外,所有碱金属卤化物晶体,如 LiF、KCl、LiI 等都具有 NaCl 晶体结构.

(6) 氯化铯 (CsCl) 晶体结构

CsCl 结构与体心立方结构相仿,只是体心位置为一种离子,顶角为另一种离子,如图 1.1.8 所示.每个立方体内只有一个净 CsCl 单元.每一个离子位于异类离子构成的立方体中心,配位数为 8.具有 CsCl 结构的其他代表性晶体有 TlBr 、 TlI 、 NH_4Cl 等.

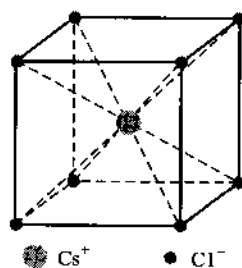


图 1.1.8 CsCl 结构

(7) 立方硫化锌 (ZnS) 结构

在金刚石结构中,如果面心立方位置放一种离子,而空间对角线位置放另一种离子,如图 1.1.9 所示,就得到硫化锌结构.每种离子位于异类离子构成的正四面体中心,配位数为 4.其他具有立方硫化锌结构的晶体例子有 CuF 、 CuCl 、 AgI 、 ZnSe 等.

(8) 钙钛矿 (ABO_3) 结构

理想的 ABO_3 结构如图 1.1.10 所示.如 A 原子位于立方体的顶角, B 原子位于体心位置,则氧原子位于面心位置.可以看到 B 原子位于氧原子形成的八

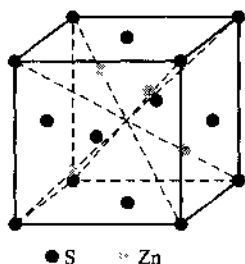
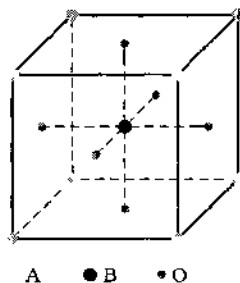


图 1 1 9 ZnS 结构

图 1 1 10 ABO_3 结构

面体中心. 钙钛矿结构氧化物是一个性能丰富而又成员数目庞大的家族. 例如典型的铁电晶体 $BaTiO_3$ 、 $LiNbO_3$ 、 $PbZrO_3$, 高温超导体的稀土铜氧化物, 和近年来发现的具有特大磁电阻的稀土锰氧化物, 都具有钙钛矿结构或畸变的钙钛矿结构.

2. 简单晶格和复式晶格

从上面的讨论中可以看到, 存在两类不同的晶体结构. 在一类结构形成的晶格中, 所有原子是完全等价的. 作从一个原子到另一任意原子的平移, 晶格完全复原, 例如 sc、bcc 和 fcc 结构形成的晶格, 称为简单晶格或布拉维格子. 另一类晶格中, 存在两个或两个以上不等价的原子或离子, 例如由 hcp 结构、金刚石结构、NaCl 结构、CsCl 结构、ZnS 结构和 ABO_3 结构形成的晶格, 称为复式晶格. 它们的原子或离子不构成单一的布拉维格子, 即从一个原子或离子到任意一个不等价的原子或离子作平移, 晶格不能复原. 一个复式晶格总可以看成由两个或两个以上的布拉维格子套构而成. 它决定于这种晶格中不等价的原子或离子的数目. 例如金刚石结构中, 存在两种不等价的原子, 每种原子分别构成面心立方布拉维格子, 因此金刚石晶格可以看成沿体对角线相互错开 $1/4$ 长度的两个面心立方布拉维格子套构而成. 同样可知, NaCl 晶格由两个面心立方布拉维格子套构而成, CsCl 晶格由两个简单立方布拉维格子套构而成, 而 ABO_3 晶格则由 5 个简单立方布拉维格子套构而成.

3. 基元

应当知道, 除了所有化合物晶体都是复式晶格外, 元素晶体虽然所有原子都是相同的, 也可能是复式晶格, 因为原子在格位上占据的几何位置可以是不等价的. 但是, 无论是简单晶格还是复式晶格, 都能找到一个最小的、完全等价的结构单元. 一个理想的晶体可以由这个全同的结构单元在空间无限周期重复而得到. 这个基本的结构单元称为基元, 它可以含有一个原子或者一个原子(或离子)群. 简单晶格的基元中只含一个原子. 而复式晶格的基元中含有两个以上的原子或离子. 例如金刚石结构的基元中含有两个碳原子, ABO_3 结构的基元中含有 5