

焦作工学院内部教材

固体物理

崔燕岭 编著



前 言

固体物理是各种材料科学的基础学科，随着科技的发展，固体物理的应用范围越来越广，许多专业需要开设固体物理这门课程，然而目前的固体物理教材大多为物理系高年级学生或研究生编写，起点高，难度大，学时多，相关的基础知识如群论、分析力学、量子力学等是必备的，而对于工科的大多数专业来说并不具备这些知识，另外，现行固体物理教材中，既包括固体物理的基础部分，又包括半导体、磁学、电介质、超导等专业化内容，而这些内容已有专门的教材。作为专业基础课的固体物理，这些内容并无充分的学时讲解。因此有必要编写一本适用于一般工科专业、只是需要一些基本固体物理知识的教材，考虑到此，我们编写了这本固体物理讲义，其出发点是尽量以普通物理和基础数学的知识讲述固体物理的基本原理、概念、结论及应用，使非物理类的学生在较少的学时中了解固体物理的研究内容、研究方法及其研究方向。本讲义的主要内容需要 50 学时左右。

编 者
2004 年 2 月

目 录

绪言.....	1
第一章 晶体结构.....	3
1.1 晶体的宏观特征.....	3
1.2 晶体的微观结构.....	5
1.3 晶列 晶面.....	10
1.4 晶格的对称性.....	14
1.5 晶系 布喇菲格子.....	16
1.6 倒易空间.....	17
1.7 简单空间点阵的晶面间距公式.....	20
第二章 晶体的结.....	22
2.1 晶体的结合类型.....	22
2.2 晶体结合的普遍特征.....	26
2.3 非极性分子晶体的结合能.....	28
2.4 离子晶体的的结合力.....	33
第三章 晶格振动.....	36
3.1 一维布喇菲格子.....	36
3.2 一维复式格子.....	39
3.3 晶格振动的能量 声子.....	43
3.4 晶体的热学性质.....	45
3.5 晶体的非线性振动与热膨胀.....	49
第四章 晶体中的缺陷和扩散.....	51
4.1 晶体缺陷的类型.....	46
4.2 位错的滑移.....	55
4.3 热缺陷数目的统计计算.....	56
4.4 晶体中的扩散定律.....	57
4.5 扩散的微观机构.....	60
第五章 固体电子理论.....	63
5.1 金属自由电子论.....	63
5.2 电子比热.....	68
5.3 电子气的电导和热导.....	70
5.4 电子热发射和接触电势差.....	72
5.5 霍耳效应和自由电子气模型的局限性.....	75
5.6 电子能带.....	77
5.7 超导电性.....	83
第六章 晶体 X 射线分析原理.....	87
6.1 X 射线的物理基础.....	87
6.2 X 射线的衍射.....	89
6.3 X 射线衍射实验方法.....	92

6.4 简单点阵的衍射分析.....	95
6.5 原子散射因子.....	98
6.6 几何结构因子.....	100
附录.....	103

绪 言

固体物理学是研究固体的性质、微观结构及其各种内部运动,以及这种微观结构和内部运动同固体的宏观性质(如力学性质、热学性质、光学性质、电磁性质等等)的关系的学科。固体的内部结构和运动形式很复杂,这方面的研究是从晶体开始的,因为晶体的内部结构简单,而且具有明显的规律性,较易研究。以后进一步研究一切处于凝聚状态的物体的内部结构、内部运动以及它们和宏观物理性质的关系。这类研究统称为凝聚态物理学。

晶体内部的原子可以形成不同形式的点阵。处于不同形式点阵的晶体,虽然化学成分相同,物理性质却可能不同。不同的点阵形式具有不同的能量:在低温时,点阵处于能量最低的形式;当晶体的内部能量增高,温度升高到一定数值,点阵就会转变到能量较高的形式。这种转变称为相变。相变会导致晶体物理性质的改变。温度不断升高,晶体可以经历几次相变。温度升高了,晶体就会熔化为液体;温度更高时,液体就会沸腾而转化为气体;温度再升高,气体中分子就分解为原子;温度再升高,原子就分解为离子和电子,气体就转化为等离子体。这些变化都称为相变。相变是重要的物理现象也是重要的研究课题。

点阵结构完好无缺的晶体是一种理想的物理状态。实际晶体内部的点阵结构总会有缺陷,化学成分也不会绝对纯,内部会有杂质。这些缺陷和杂质对固体的物理性质(包括力学、电学、热学、光学等)以及功能材料的技术性能,常常会产生重要的影响。大规模集成电路的制造工艺中,控制和利用杂质和缺陷是很重要的。晶体的表面性质和界面性质,会对许多物理过程和化学过程产生重要影响。所有这些都已成为固体物理研究中的重要领域。

在晶体中,原子的外层电子可能具有的能量形成一段一段的能带。电子不可能具有能带以外的能量值。按电子在能带中不同的填充方式,可以把晶体区别为金属、绝缘体和半导体。能带理论结合半导体锗和硅的基础研究,高质量的半导体单晶生长和掺杂技术,为晶体管的产生准备了理论基础。

固体中电子的运动状态服从量子力学和量子电动力学的规律。在晶体中,原子(离子、分子)有规则地排列,形成点阵。20世纪初劳厄和法国科学家布拉格父子发展了X射线衍射法,用以研究晶体点阵结构。第二次世界大战以后,又发展了中子衍射法,使晶体点阵结构的实验研究得到了进一步发展。

电子具有自旋和磁矩,它们和电子在晶体中的轨道运动一起,决定了晶体的磁学性质,晶体的许多性质(如力学性质、光学性质、电磁性质等)常常不是各向同性的。作为一个整体的点阵,有大量内部自由度,因此具有大量的集体运动方式,具有各式各样的元激发。晶体的许多性质都和点阵的结构及其各种运动模式密切相关,晶体内部电子的运动和点阵的运动之间相耦合,也对固体的性质有重要的影响。例如1911年发现的低温超导现象;1960年发现的超导体的单电子隧道效应。这些效应都和这种不同运动模式之间的耦合相关。

非晶态固体内部结构的无序性使得对于它们的研究变得更加复杂。非晶态固体有一些特殊的物理性质，使得它有多方面的应用。这是一个正在发展中的新的研究领域。

新的实验条件和技术日新月异，为固体物理不断开拓出新的研究领域。极低温、超高压、强磁场等极端条件、超高真空技术、表面能谱术、材料制备的新技术、同步辐射技术、核物理技术、激光技术、光散射效应、各种粒子束技术、电子显微术、穆斯堡尔效应、正电子湮没技术、磁共振技术等现代化实验手段，使固体物理性质的研究不断向深度和广度发展。

固体物理本身是微电子技术、光电子学技术、能源技术、材料科学等技术学科的基础，同时，固体物理学的成就和实验手段对化学物理、催化学科、生命科学、地学等的影响日益增长，正在形成新的交叉领域。固体物理对于技术的发展有很多重要的应用，晶体管发明以后，集成电路技术迅速发展，电子学技术、计算技术以至整个信息产业也随之迅速发展。其经济影响和社会影响是革命性的。由此可见，它是物理学中内容极丰富、应用极广泛的分支学科。

第一章 晶体结构

在自然界的固态物质中，具有规则几何外形的晶体很早就引起了人们的关注。尽管目前对非晶态物质的研究日趋活跃，但迄今为止，人们对于固体的了解大部分还是来自对晶体的研究。本章将主要讨论晶体中原子排列的几何特征。

如果将大量的原子聚集到一起构成固体，那么显然原子会有无限多种不同的排列方式。而在相应于平衡状态下的最低能量状态，则要求原子在固体中有规则地排列。若把原子看作刚性小球，按物理学定律，原子小球应整齐地排列成行，由各行一起构成平面，又由各平面重叠成规则的三维形状的固体。人们很早就注意到一些具有规则几何外形的固体，如岩盐、石英等，并将其称为晶体。显然这是不严格的，它不能反映出晶体内部结构本质。事实上，晶体在形成过程中，由于受到外界条件的限制和干扰，往往并不是所有晶体都能表现出规则外形；一些非晶体，在某些情况下也能呈现出规则的多面体外形。因此，晶体和非晶体的本质区别主要并不在于外形，而在于内部结构的规律性。

图 1-1 为石英晶体与石英玻璃的内部结构示意图。由图可见，组成石英晶体中的离子是有规则地按周期性排列的，而石英玻璃中的离子排列是无规则的。迄今为止，已经对五千多种晶体进行了详细的 X 射线研究。实验表明，组成晶体的粒子（原子、离子、或分子）在空间的排列都是周期性的有规则的，我们称之为长程有序；而非晶体固体内部则是长程无序的。在讲解晶体的结构之前，先介绍一下晶体的宏观性质。

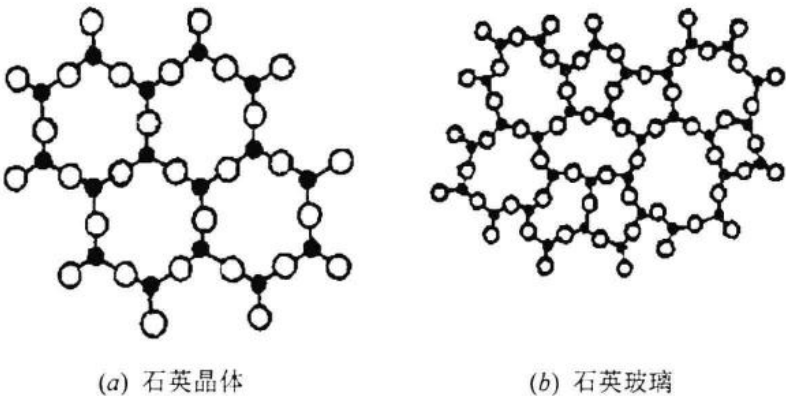


图 1-1 晶体与非晶体的结构示意图

1. 1 晶体的宏观特征

各种晶体由于其组分和结构不同，因而不仅在外形上各不相同，而且在性质上也有很大的差异，然而一切晶体又都具有一些仅决定于其内部结构规律性的宏观特征。这些宏观特征可以归纳为以下几点：

1. 自范性

晶体物质在适当的结晶条件下都能自发地成长为单晶体，发

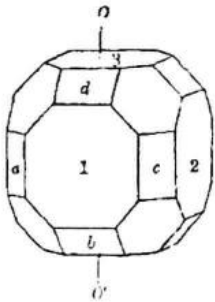


图 1-2 晶体外形图

育良好的单晶体均以平面作为它与周围物质的界面，形成封闭几何凸多面体，如图 1-2，这一特征称之为晶体的自范性或自限性。这一特性是晶体内部原子的规则排列在晶体宏观形态上的反映。

2. 晶面角守恒定律

由于外界条件和偶然情况的不同，同一类型的晶体，其外形不尽相同。图 1-3 给出几种不同外形的石英晶体，这表明由于外界条件的差异，晶体中某组晶面可以相对地变小、甚至消失。所以，晶体中晶面的大小和形状并不是表征晶体类型的固有特征。

那么，由内在结构所决定的晶体外形的固有特征是什么呢？实验表明，对于一定类型的晶体来说，不论其外形如何，总存在一组特定的夹角，如图 1-3 所示的几种石英晶体， a 、 b 面之间的夹角总是 $141^{\circ}47'$ ， b 、 c 面之间的夹角总是 $120^{\circ}00'$ ， a 、 c 面之间的夹角则总是 $113^{\circ}08'$ 。对于其它品种的晶体，晶面间则有另一组特征夹角，这一普遍规律称之为晶面角守恒定律，即同一种晶体在相同的温度和压力下，其对应晶面之间的夹角恒定不变。

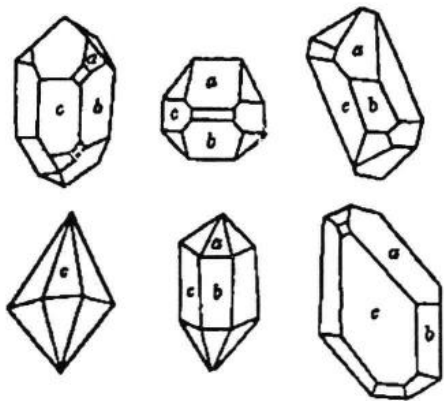


图 1-3 几种不同外形的石英晶体

3. 解理性

当晶体受到敲打、剪切、撞击等外界作用时，可有沿某一个或几个具有确定方位的晶面劈裂开来的性质。如固体云母（一种硅酸盐矿物）很容易沿自然层状结构平行的方向劈为薄片，劈裂的过程称为解理（或理解），晶体的这一性质称为解理性，这些劈裂的晶面则称为解理面。自然界的晶体显露于外表的往往就是一些解理面。

4. 各向异性

如果我们测量石墨的电导率，将得到一个令人惊奇的结果：当石墨放在某一个方向时，电导率是某一数值，而将石墨转动一下后，电导率的数值便改变了。晶体的物理性质随观测方向而变的现象称为各向异性。晶体的很多性质，如压电性质、光学性质、磁学性质、热学性质等都表现出各向异性。

5. 均匀性

由于晶体内部不同部位质点，其排列方式和周围情况完全一样，如果不考虑外界条件的影响，从宏观上看，晶体的物理性质不随晶体部位的改变而改变，这就是晶体所具有的均匀性。

此外，在晶体内部，凡是沿相互平行的方向，由于质点的性质和排列方式是一致的，其物理性质必相同，所以，晶体的各向异性和均匀性是相互补充的。

6. 对称性

晶体的宏观性质一般说来是各向异性的，但并不排斥晶体在某几个特定方向可以异

向同性。晶体宏观性质在不同方向上有规律重复出现的现象称为晶体的对称性。

晶体的对称性反映在几何外形和物理性质两个方面。实验表明，晶体的许多物理性质都和晶体几何外形的对称性有关。

7. 最低内能与固定熔点

实验表明，从气态、液态或非晶态过渡到晶体时都要放热。反之，从晶态物质转变为非晶态、液态或气态时都要吸热，这表明在相同的热力学条件下，与同种化学成分的气体、液体或非晶体相比，晶体的内能最小。我们知道，物体的内能包括质点热运动的动能和质点间相互作用势能两个部分，其中动能部分随所处的温度、压力条件而变化，可供直接比较的是质点间的势能部分。由此可见，在相同的热力学条件下，以具有相同化学成分晶体与非晶体相比，晶体是稳定的，非晶体则是不稳定的，后者有自发转变为晶体的趋势。

当我们加热某种晶体时，我们会发现当加热到某一特定温度时，晶体开始熔化，且在熔化过程中保持温度不变，直到晶体全部熔化，温度才又开始上升（如图 1-4 曲线 A）。换句话说，晶体的熔点是一定的，如石英晶体的熔点为 1470°C 。另一方面，玻璃等非晶体在加热过程中则先出现整个固体变软，然后逐渐熔化成液体（图 1-4 曲线 B）。它们没有确定的熔点，而只是在某一温度范围内发生软化，非晶体软化的温度范围称软化区。晶体具有固定熔点这一特性不难由其具有最低热能给予解释。

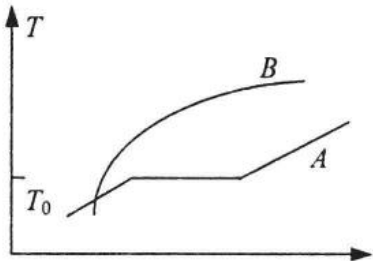


图 1-4 晶体和非晶体加热曲线

晶体为什么会具有非晶体所没有的这样一些宏观特征呢？众所周知，物体的宏观特性乃是其微观结构的反映。为了更深刻地理解和利用晶体的这些宏观特性，还是让我们从晶体的微观结构来研究吧！

1. 2 晶体的微观结构

1. 2. 1 空间点阵与晶格

晶体的微观结构包括两个因素：第一，晶体是由什么粒子组成的；第二，粒子是以怎样的方式在空间排列的。固体物理着重研究第二个问题。理论和实验都已证明，晶态固体内部的粒子（原子、离子或分子）在空间是周期性地规则排列的，或称作长程有序。为了描述晶体内部结构的长程有序，人们引入了空间点阵概念。

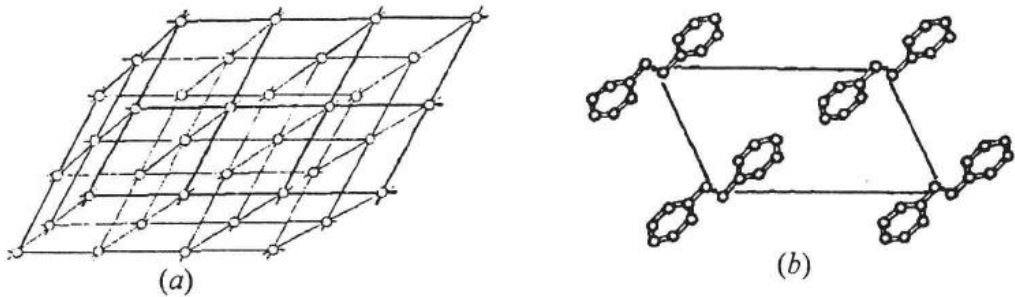


图 1-5 晶体的周期性结构

空间点阵学说认为：晶体的内部结构，可看成是由一些相同的原子或原子集团在空间作有规则的、周期性的无限分布；而代表这些原子、离子、分子或其集团的相同点在空间排列所组成的总体，称为空间点阵。

一般情况下，空间点阵学说中的点，并不代表原子、离子或分子的本身，而是其集团的代表点，如重心。常把这些点称为结点或格点。当晶体包含着数种原子时，则这数种原子构成基本的结构单元，简称基元，结点则代表这些相同的基元的重心。在晶体的内部结构明确以前，空间点阵学说是纯数学理论，只有当其中的格点代表具体的基元后才形成晶体结构，即：点阵+基元=晶体结构，如图 1-5 所示。

空间点阵学说概括了晶体结构的周期性。整个晶体结构，可看作是由这些相同的基本结构单元，沿空间三个不同的方向，各按一定的距离，周期性地平移所组成。每一平移的距离称为周期，在三个不同的方向上，一般具有不同的周期，分别用 a_1, a_2, a_3 表示。这里 a_1, a_2, a_3 是不共面的三个基本矢量，称为基矢。在空间点阵中，每个结点周围的情况是完全一样的。而且，在任何两个结构单元中，相应原子周围的情况，也是相同的。当然，在每个结构单元中，各个原子周围的情况，则是各不相同的。

1. 2. 2 布喇菲格子与复式格子

如果晶格只由一种原子构成，基元就是一个原子，原子中心与阵点重合，这种晶格便称之为布喇菲格子。布喇菲格子的特点是每个原子周围的情况都完全一样（图 1-5a）。我们也可以给布喇菲格子一个严格的数学定义，即

$$R_l = l_1 a_1 + l_2 a_2 + l_3 a_3 \quad (1-1)$$

代表的所有点的集合称为布喇菲格子或简单格子。然而更为普遍的情况是晶体的基元包括两种或两种以上的原子，这种晶格称为复式格子（图 1-5b）。在复式格子中基元的原子集团中心与阵点重合。不难看出，各基元中相应的同种原子构成布喇菲格子，且基元中不同原子构成的布喇菲格子是相同的，只是相对地有一定位移。所以复式格子是由若干相同的布喇菲格子相互位移套构而成的。

1. 2. 3 原胞与晶胞

至此，我们已经用点阵或晶格的概念描述了晶体微观结构的周期性，然而从理论上说无论是点阵或晶格都是一个空间的无限图形，这对于我们的叙述来说多少会带来某些不便。实际上不难看出，如果取任一格点为顶点，以基矢 a_1, a_2, a_3 为边构成平行六面体，则整个晶体便是由这样的最小单元在空间以 a_1, a_2, a_3 为周期无限重复排列构成的，我们称这样选取的最小重复单元为固体物理学原胞，又称初基原胞，简称原胞，原胞中格点只存在于顶点上，一个原胞中只含一个格点。对于给定的晶体，原胞的选取具有任意性。显然原胞的体积为：

$$\Omega = (a_1 \times a_2) \cdot a_3 \quad (1-2)$$

晶体除了微观结构的周期性外，每种晶体还有其特殊的宏观对称性。在结晶学中为能既反映晶体的周期性，又能反映其对称性特征，通常并不一定取最小单元作为重复单元。因而，格点不仅在顶点上，亦可在体心、

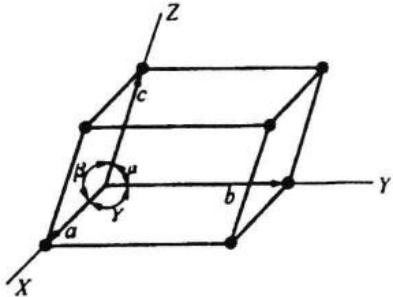


图 1-6 晶胞的选取

面心或其它位置上，换句话说，结晶学中原胞是按对称性特点选取的，通常取最小单元的几倍作为原胞，这种原胞称结晶学原胞或简称晶胞。晶胞的基矢方向以 a, b, c 表示，也是晶体的晶轴方向，如图 1-6 所示。图 1-7 为立方晶系的三种布喇菲格子的原胞和晶胞示意图，它们分别称为简立方、体心立方和面心立方。

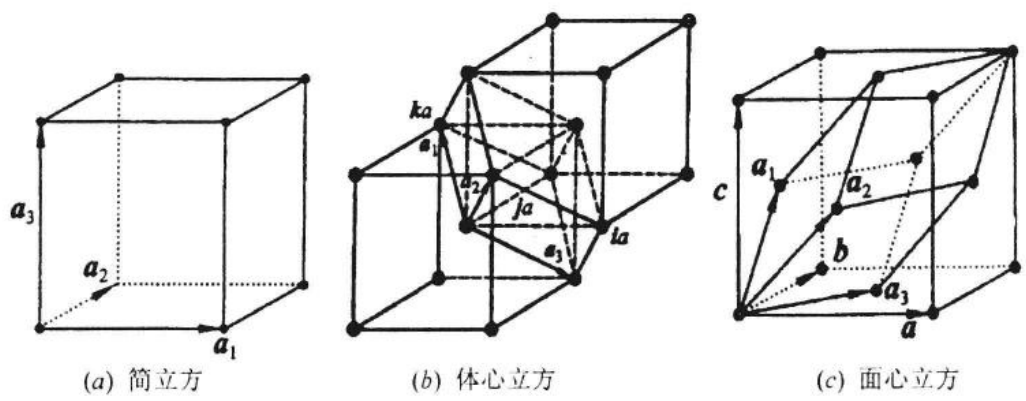


图 1-7 立方晶系布喇菲原胞和晶胞

1. 2. 4 典型的晶体结构

现在我们以一些晶格的实例来了解原胞和晶胞的选取及其基本特征。

1. 简立方(SC)

对简立方的晶胞而言，仅在立方体的 8 个顶角上配置有原子。从整个晶格来看，每个原子为 8 个晶胞所共有，平均说来每个晶胞只包含一个原子。晶胞的体积也就是一个原子所“占”有的体积，这样的晶胞显然是最小的重复单元。所以，对简立方晶格而言，其原胞与晶胞相同，即 $a_1=a=ai, a_2=b=aj, a_3=c=ak$ (图 1-7(a))。

2. 体心立方 (BCC)

在体心立方晶格的晶胞中，除顶角上配置有原子外，在立方体的体心上还有一个原子。对于整个晶格而言，不难看出，顶角上的原子核和体心上的原子是等同的，故属布喇菲格子。但体心立方的一个晶胞包含有两个原子，而原胞要求只包含一个基元。因而通常选取具有下列循环对称性的原胞基矢

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{a}{2}(-i + j + k) \\ a_2 &= \frac{a}{2}(i - j + k) \\ a_3 &= \frac{a}{2}(i + j - k) \end{aligned} \tag{1-3}$$

这样选取的原胞体积为 $a^3/2$ 。由于仅在原胞的顶角上配置有原子，所以每个原胞只包含一个原子 (图 1-7 (b))。

3. 面心立方 (FCC)

在面心立方的晶胞中，6 个面心上的原子和顶角上原子是等同的。由于从整个晶格来看，每个面心上的原子为相邻的两个晶胞所共有，因而只有 1/2 是属于某个晶胞的，故每个晶胞含有 4 个原子(图 1-7(c))。在固体物理学中，原胞的基矢为

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{a}{2}(j+k) \\ a_2 &= \frac{a}{2}(k+i) \\ a_3 &= \frac{a}{2}(i+j) \end{aligned} \tag{1-4}$$

同理可算得每个原胞的体积为 $a^3/4$ 。

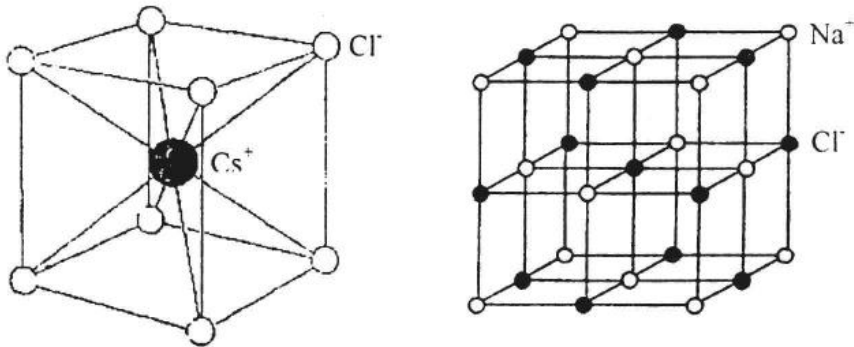
以上讨论的是布喇菲格子的例子，为一般起见，我们再举几个复式格子的实例。

4. 氯化铯型结构

图 1-8(a) 是一个氯化铯晶格的晶胞。乍看起来氯化铯晶格为体心立方结构，而实际上 Cl 和 Cs 各自组成简立方的布喇菲格子，因而氯化铯结构是复式简立方结构，而不是体心立方结构。在氯化铯结构的一个晶胞中只包含一个基元——一个 CsCl 分子，故其晶胞即为原胞。除 CsCl 外，属氯化铯型结构的晶格还有 TlBr、TlI、CuPd、AgMg、AlNi 等。

5. 氯化钠型结构

图 1-8(b) 是氯化钠晶格的一个晶胞。不难看出，在氯化钠晶格中 Na 和 Cl 各自组成面心立方的布喇菲格子，因而氯化钠结构是复式面心立方结构。对于这种结构，原胞的基矢选取和立方晶系的面心立方相同，在每个原胞中只含一个 NaCl 分子。属于氯化钠型结构的晶格还有 KCl、LiH、PbS……等。



(a) 氯化铯结构 (b) 氯化钠结构
图 1-8 氯化铯结构和氯化钠结构

6. 金刚石结构和闪锌矿结构

金刚石结构是由一种原子组成的复式面心立方晶格，它是由两个面心立方的布喇菲格子沿体对角线平移 1/4 长度套构而成的，其晶胞如图 1-9(a) 所示。不难看出，晶胞中体对角线 1/4 处的原子与面心或顶角上的原子价键取向是不相同的。在固体物理学中原

胞基矢的选取也和面心立方晶格相同，显然每个原胞中只包含一个基元——两个不等价的碳原子。重要的半导体材料硅、锗等都具有金刚石型结构。

闪锌矿结构又称立方硫化锌结构，它具有和金刚石类似的结构，如图 1-9(b)。这种结构是由硫和锌原子的面心立方布喇菲格子沿空间对角线位移 $1/4$ 长度套构而成。许多重要的化合物半导体如砷化镓、磷化铟、锑化铟等都属于这种结构。

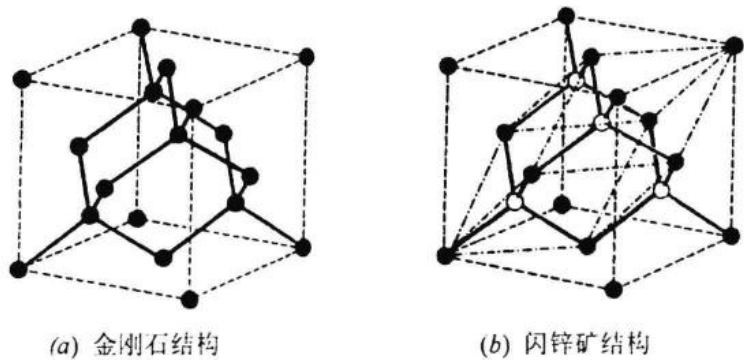


图 1-9 立方晶系的金刚石和闪锌矿结构

7. 六方密积结构

六方密积结构的晶胞如图 1-10 所示。它是由 2 个六方布喇菲格子套构而成的。它也可以看作是按如下方式构成的：将格点位置上的原子视为等半径的刚性小球，相邻的球相切。当以底面为第一层 (A)，在第一层的原子球间隙中心之上堆上第二层 (B)，第三层与第一层相同，堆积方式为 $ABAB\cdots$ ，如此不断重复便得到六方密积结构。Be、Mg、Ti、Zn 等约 30 种金属元素属六方密积结构。

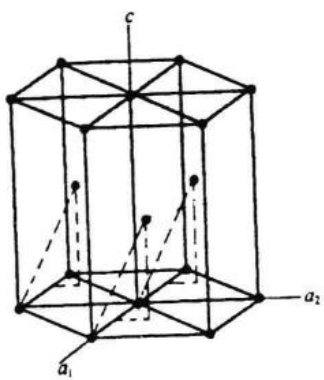


图 1-10 六方密积结构

1. 2. 5 密堆积 配位数和致密度

最初人们认为晶体是由实心的基石堆砌而成的。这一设想虽然粗浅，但它形象直观地描述了晶体内部的规则排列这一特点。直到现在人们仍沿用这种堆积方式来形象地描述晶体的简单晶格结构。

把原子视为刚性小球，在一个平面内最简单的规则堆积便是正方排列，如图 1-11 (a) 所示，任一个球与同一平面内的四个最近邻相切，如果把这样的排列层层重合堆积起来，就构成了简单立方结构。用黑点子代表球心，便是图 1-11(b)的简单立方结构。

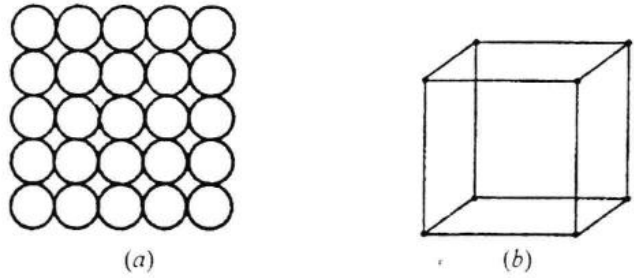


图 1-11 简单立方密堆积

设想上述简立方堆积的原子球均匀地散开一些，而恰好在原子球空隙内能放入一个全同的原子球，使空隙内的原子球与最近邻的八个原子球相切，便构成了如图 1-12 所示的体心立方堆积方式，图 1-7(b)便是由几何点来表示的体心立方结构单元。

以上两种堆积并不是最紧密的堆积方式。若要构成最紧密的堆积方式，原子球必须与同一平面内相邻的 6 个原子球相切，如此排列的一层原子面称为密排面。层中每个原子周围有六个间隙位置，要达到最紧密堆积，相邻原子层也必须是密排面，而且原子球心必须与相邻原子层的空隙相重合。若将第一

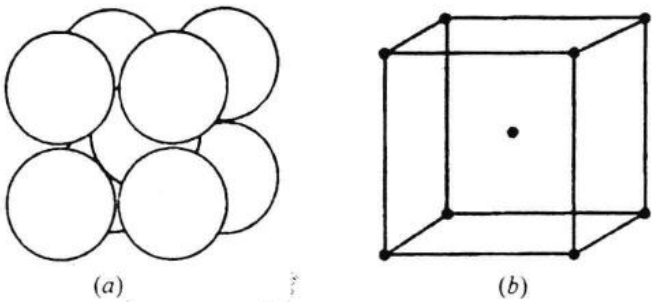
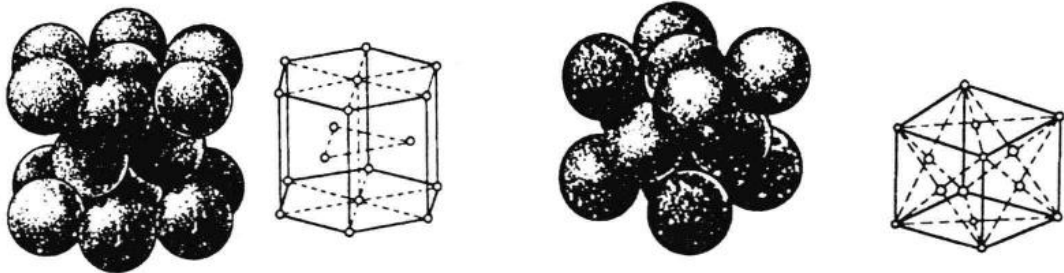


图 1-12 体心立方密堆结构

层排列方式用 A 表示，第二层排列方式用 B 表示，若第三层的原子球心落在第二层的空隙上，且在第一层正上方，便形成 $\cdots ABABAB \cdots$ 形式的堆积，即为如图 1-13(a) 所示的六角密排方式。若第三层的球心落在第二层的空隙上，且该空隙也与第一层原子空隙重合，用 C 表示，而第四层又恢复成第一层的排列，便形成 $\cdots ABCABCABC \cdots$ 形式的堆积，这便构成了立方密排方式，图 1-13(b) 示出了立方密积结构。这实际上就是面心立方结构。



(a) 六角密堆结构 (b) 立方密堆结构

图 1-13 密堆积结构

粒子在晶体中的平衡位置，相应于结合能最低的位置。因而，可以想象粒子在晶体中的排列应该采取尽可能紧密的方式。按这样的想法，一个粒子的周围最近邻的粒子数，可以用来描写晶体中的粒子排列的紧密程度，这个数称为配位数。粒子排列越紧密，配位数越大，晶体的结合能越低。表 1.1 列出了 7 种典型晶体结构的配位数。

表 1.1 几种晶体结构的配位数

晶体结构	配位数	晶体结构	配位数
面心立方 六角密积	12	氯化钠	6
体心立方	8	氯化铯	8
简立方	6	金刚石	4

对于由同一种原子构成的晶体，若把原子看成半径为 r 的小球，允许这些小球采取紧密排列，则定义小球的体积与其空间占有的体积之比为晶体的致密度。致密度和配位数一样，都可反映晶体排列的紧密程度。可以证明，体心立方密堆结构的致密度为 0.68，面心立方和六角密积结构的致密度同为 0.74，这也是晶体的最大致密度。

1.3 晶列 晶面

由于晶体具有各向异性的特征，当我们研究晶体的物理性质时，通常必须标明是沿晶体的什么方向或位于什么方位的面上。为此，我们引入晶向和晶面的概念。

1. 3. 1 晶向与晶向指数

通过晶格中任意两个格点连一条直线，则这一直线将包含无限多个格点，这样的一条直线便称作晶列。整个晶格中的格点可以看作是分布在一族平行的晶格上。图 1-14 示意地画出几族不同的晶列。由图可见，一族晶列不但具有相同的方向，而且格点的分布也具有一定的周期。不同族晶列不仅方向不同，格点的周期也不相同。我们把一族晶列的共同方向称为晶向。那么如何标志不同的晶向呢？设想在晶格中任取一格点 O 作为原点并以结晶学原胞的基矢 a, b, c 为轴（晶轴）建立坐标系，于是在此通过原点的晶列上，沿晶向方向任一格点 A 的位矢为

$$u'a + v'b + w'c$$

式中 u', v', w' 是有理数。若为互质整数，则可用 $[u'v'w']$ 表示晶列 OA 所在晶列族的晶向；若 u', v', w' 不是互质整数，则可取三个互质整数 u, v, w 并使 $u:v:w = u':v':w'$ ，于是便以 $[uvw]$ 标志该族晶列的晶向，称为晶向指数。显然 u', v', w' 或 u, v, w 的数值与晶列上原子的排列周期有一定关系。图 1-15 给出了几个重要方向的晶向指数。

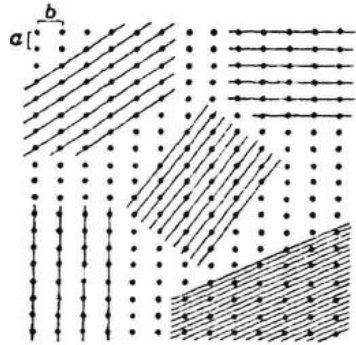


图 1-14 几族晶列示意图

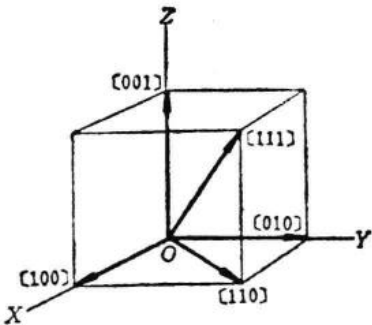


图 1-15 几个重要的晶向和晶向指数

对于晶向指数 $[uvw]$ 应注意以下几点：（1）晶向指数 $[uvw]$ 代表一族晶列而不是某一特定晶列；（2）负指数在数字上加一横来表示，如 $[u\bar{v}w]$ 。

由于晶体具有对称性，由对称性联系着的那些晶向可以只是方向不同，但它们的周期却是相同的，因而是等效的。这些等效晶向的全体可用尖括号 $\langle uvw \rangle$ 表示。例如立方晶系的 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 、 $[\bar{1}00]$ 、 $[0\bar{1}0]$ 、 $[00\bar{1}]$ 六个晶向可用符号 $\langle 100 \rangle$ 表示。

1. 3. 2 晶面与密勒指数

在晶格中同一平面上的格点构成一个晶面。由于晶格的周期性，整个晶格可以看作是由无数互相平行等距离分布的全同的晶面构成，而晶格的所有格点将都处于这族晶面上。通过晶格的任一格点可作无数取向不同的晶面，因而在晶格中存在无数取向不同的晶面族。图 1-16 的 (a) 和 (b) 就是同一晶格中两族取向不同的晶面族。为描述晶面族的全部特征，只需其中一个晶面相对于基矢的取向及该族晶面族的面间距，而不必确定其空间位置。在结晶学上采用一种简单的符号来标志这些特征，这套符号就称为密勒指数。密勒指数是这样确定的。如图 1-17 所示，在晶格中任选一个格点作为原点，并以结晶学晶胞三个基矢 a, b, c 为坐标轴建立坐标系。设该族晶面中任一晶面与三个坐标轴交点的位矢分别为 ra, sb, tc ，则它们的倒数连比可化为互质的整数，即：

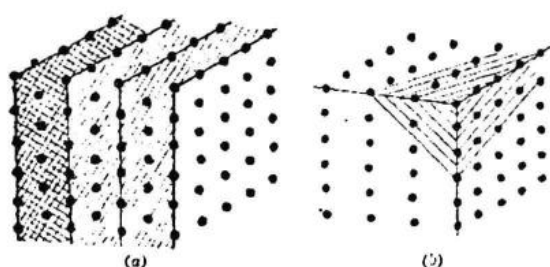


图 1-16 晶格的不同晶面

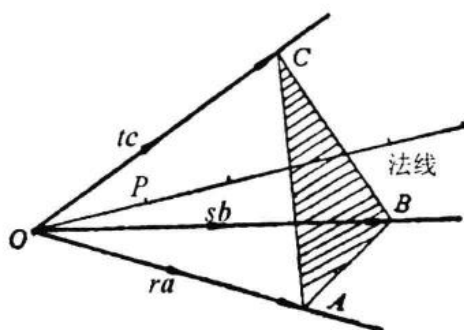


图 1-17 密勒指数的确定

$$\frac{1}{r} : \frac{1}{s} : \frac{1}{t} = h : k : l \quad (1-5)$$

式中 h, k, l 是互质的整数，用圆括号括起来成为 (hkl) ，晶体学中就以它们为该晶面族的指数，称为密勒指数。实际上，按照这种定义，距离原点最近的晶面与三个坐标轴的截距分别为 a/h 、 b/k 、 c/l ，如图 1-18 所示，而且可以证明，简单立方晶格中一个晶面的密勒指数是和晶面法线的晶向指数完全相同的。

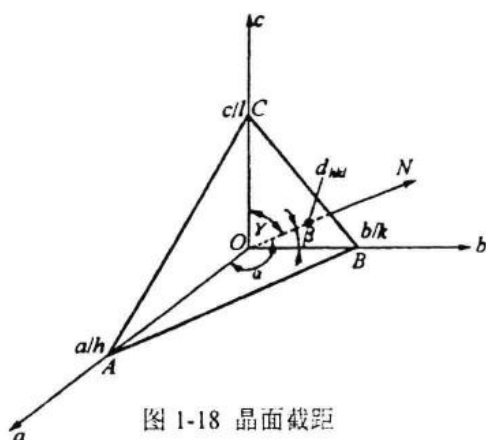


图 1-18 晶面截距

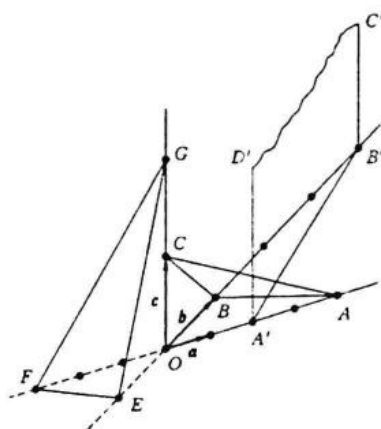


图 1-19 密勒指数

密勒指数 (hkl) 既可表示一族晶面，也可表示单个晶面。如果一个晶面与某坐标轴相截于原点的负侧，则相应的指数应为负数，这时便在该指数上加一横表示，即 $(h\bar{k}l)$ 。例如图 1-19 所示， ABC 面的截距为 $4a$ 、 b 、 c ，截距的倒数为 $1/4$ 、 1 、 1 ，它的密勒指数为 (144) ；同理， $A'B'C'D'$ 的密勒指数为 (210) ；而 EFG 面的密勒指数为 $(\bar{2}63)$ 。

图 1-20 给出立方晶体中一些重要晶面族的密勒指数，立方晶体中的立方体面的密勒指数分别为 (100) 、 (010) 、 (001) 、 $(\bar{1}00)$ 、 $(0\bar{1}0)$ 、 $(00\bar{1})$ ，显然由于对称性，这些晶面是等效的。在任何晶体中都有由对称性联系起来的等效晶面族，这些晶面族用花括号

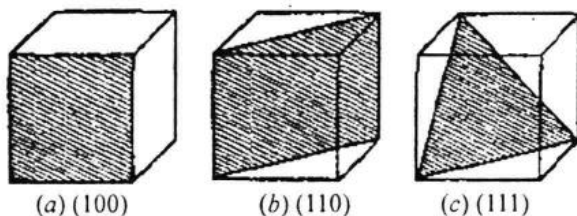


图 1-20 立方晶体中一些重要晶面的指数

内指数表示。因此，上述立方晶体的诸等效晶面的密勒指数应为 $\{100\}$ 。

在 X 射线衍射和结晶学中，密勒指数不一定取互质整数，例如面心立方中一平行于 (100) 面而截 a 轴于 $1/2$ 处的面，其指数就为 (200) ，其原因是晶胞并非最小的重复单元。

1. 3. 3 六方晶系指数

六方晶系的晶面指数和晶向指数同样可以应用上述方法标定。这时取 a_1 、 a_2 、 c 为晶轴，而 a_1 轴与 a_2 轴的夹角为 120° ， c 轴与 a_1 、 a_2 相垂直，如图 1-21 所示。但这样表示有缺点，同类型的晶面，其晶面指数不相类同，往往看不出它们之间的等同关系。例如晶胞的六个柱面是等同的，但按上述三轴坐标系，其指数却分别为 (100) 、 (010) 、 $(\bar{1}10)$ 、 $(\bar{1}00)$ 、 $(0\bar{1}0)$ 、 $(1\bar{1}0)$ 。用这样的方法标定晶向指数也有同样的缺点，例如 $[100]$ 和 $[110]$ 实际上是等同的晶向，但指数上反映不出来。为了克服这一缺点，通常采用另一种专用于六方晶系的指数。

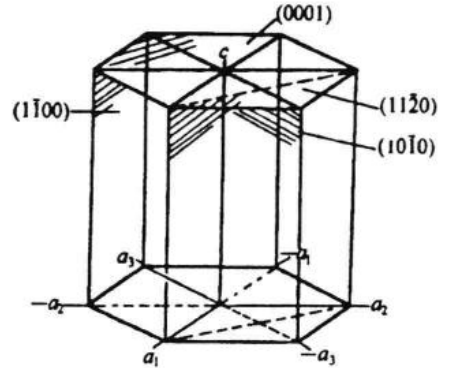


图 1-21 六方晶系一些晶面的指数

根据六方晶系的对称特点，对六方晶系采用 a_1 、 a_2 、 a_3 及 c 四个晶轴， a_1 、 a_2 、 a_3 之间的夹角均为 120° ，这样其晶面指数就心 $(hkil)$ 四个指数来表示。晶面指数的标定方法同前面一样，在图 1-21 中举出了六方晶系一些晶面的指数。采用这种标定方法，等同的晶面可以从指数上反映出来。例如，上述六个柱面的指数分别为： $(10\bar{1}0)$ 、 $(01\bar{1}0)$ 、 $(\bar{1}100)$ 、 $(\bar{1}010)$ 、 $(0\bar{1}10)$ 和 $(1\bar{1}00)$ ，这六个晶面可归并为 $\{10\bar{1}0\}$ 晶面族。

根据几何学可知，三维空间独立的坐标轴最多不超过三个。应用上述方法标定的晶面指数形式上是四个指数，但是不难看出，前三个指数中只有两个是独立的，它们之间有在以下关系：

$$h + k + i = 0 \quad (1-6)$$

因此可由前两个指数求得第三个指数，有时将第三个指数 i 略去，写成 $(hk \cdot l)$ 。采用四轴坐标时，晶向指数的确定原则仍同前述，即把晶向 r 沿四个晶轴分解成四个矢量

$$r = u a_1 + v a_2 + t a_3 + w c \quad (1-7)$$

则晶向指数就可用 $[uvw]$ 来表示。问题是 u 、 v 、 t 三个指数中只能有两个独立，不然将会有无限解，得不到确定的指数，因此必须附加一个条件，参照上述晶面指数间的关系，规定

$$u + v + t = 0 \quad (1-8)$$

这样就得到唯一解，每个晶向有确定的晶向指数。

晶向指数的具体标定方法如下：从原点出发，沿着平行于四个晶轴的方向依次移动，使之最后到达要标定方向上的某一结点。移动时必须选择适当的路线，使沿 a_3 轴移动的距离等于沿 a_1 、 a_2 两轴移动距离之和的负值（即 $u+v=-t$ ）。将各方向移动距离化为最小整数，加上方括号，即表示该方向的晶向指数（图 1-22）。此方法的优点是等同的晶向可以从晶向指数上反映出来，但其标定比较麻烦，故有时仍用前

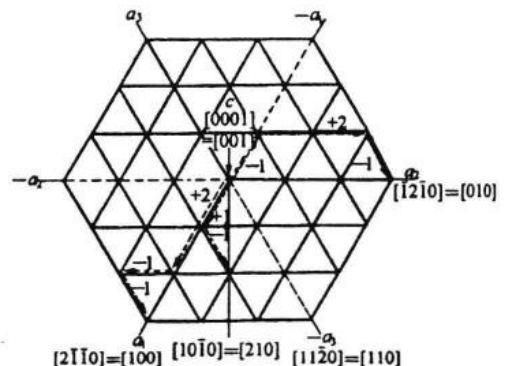


图 1-22 六方晶系晶向指数的表示方法