



GH

高等学校工科电子类教材

近代电子技术中的 新材料及其应用

陈昌龄 莫怀德 编



西安电子科技大学出版社

55
25

高等学校教材

近代电子技术中的 新材料及其应用

陈昌龄 莫怀德

西安电子科技大学出版社

1993

(陕)新登字 010 号

内 容 简 介

本书主要讲述了近代电子技术中声、光、电、磁、热等新型功能材料及其应用。全书共分六章，内容为：晶体学基础；固体材料中的电子输运；超导材料、光学材料、声学材料和电子技术中其他功能材料，以及这些材料的性能和应用。

本书可供物理电子技术、光电子技术专业的本科学生作为教材或教学参考书；也可供有关科技人员及教师参考。

近代电子技术中的新材料及其应用

陈昌龄 袁怀德

责任编辑：李惠萍

西安电子科技大学出版社出版发行

西安电子科技大学印刷厂印刷

陕西省新华书店发行 各地新华书店经售

开本 787×1092 1/16 印张 10 字数 233 千字

1993 年 12 月第 1 版 1993 年 12 月第 1 次印刷 印数 1—2 000

ISBN 7-5606-0284-3/TH·0074 (课)

定价：4.70 元

出版说明

根据国务院关于高等学校教材工作的规定,我部承担了全国高等学校和中等专业学校工科电子类专业教材的编审、出版的组织工作。由于各有关院校及参与编审工作的广大教师共同努力,有关出版社的紧密配合,从1978~1990,已编审、出版了三个轮次教材,及时供给高等学校和中等专业学校教学使用。

为了使工科电子类专业教材能更好地适应“三个面向”的需要,贯彻国家教委《高等教育“八五”期间教材建设规划纲要》的精神,“以全面提高教材质量水平为中心,保证重点教材,保持教材相对稳定,适当扩大教材品种,逐步完善教材配套”,作为“八五”期间工科电子类专业教材建设工作的指导思想,组织我部所属的九个高等学校教材编审委员会和四个中等专业学校专业教学指导委员会,在总结前三轮教材工作的基础上,根据教育形势的发展和教学改革的需要,制订了1991~1995年的“八五”(第四轮)教材编审出版规划。列入规划的,以主要专业主干课程教材及其辅助教材为主的教材约300多种。这批教材的评选推荐和编审工作,由各编委会或教学指导委员会组织进行。

这批教材的书稿,其一是从通过教学实践、师生反映较好的讲义中经院校推荐,由编审委员会(小组)评选择优产生出来的,其二是在认真遴选主编人的条件下进行约编的,其三是经过质量调查在前几轮组织编定出版的教材中修编的。广大编审者、各编审委员会(小组)、教学指导委员会和有关出版社,为保证教材的出版和提高教材的质量,作出了不懈的努力。

限于水平和经验,这批教材的编审、出版工作还可能有缺点和不足之外,希望使用教材的单位,广大教师和同学积极提出批评和建议,共同为不断提高工科电子类专业教材的质量而努力。

机械电子工业部电子类专业教材办公室

前 言

本教材系按电子工业部的工科电子类专业教材 1991~1995 年编审出版规划,由物理电子学与光电子学教材编审委员会电子物理与器件编审小组征稿、推荐出版,责任编委张兆镬。

本教材由电子科技大学陈昌龄、莫怀德编写,电子科技大学恽正中教授担任主审。

本教材系统地介绍了近代电子技术中声、光、电、磁、热等功能材料的特性及应用,是一本实用性较强并适用于物理电子技术(含光电子技术)专业及相近专业作教科书,也可供有关科研、生产人员参考。

本课程的参考学时数为 40 学时,全书共分六章。前两章介绍晶体学基础和固体材料中的电子输运,后四章系统地介绍了光学材料、声学材料以及电子技术中其他功能材料,重点介绍了常用材料的性能和应用。

本教材由陈昌龄编写第一、二、三和第六章,由莫怀德编写第四、第五章。电子科技大学张兆镬教授、东南大学杨祥林教授对编写工作给予了热情的鼓励和帮助,在此一并表示诚挚的感谢。

因编者水平有限,缺点和错误难免,切望广大读者批评指正。

编 者

1992 年 11 月

目 录

第一章 晶体学基础.....	1
§ 1-1 晶体结构.....	1
§ 1-2 密勒指数.....	7
§ 1-3 晶体的分类	10
§ 1-4 晶体的缺陷	15
§ 1-5 固体中的扩散	20
第二章 固体材料中的电子输运	25
§ 2-1 概述	25
§ 2-2 固体的电导	28
§ 2-3 霍尔效应	30
§ 2-4 半导体	31
§ 2-5 绝缘体	40
§ 2-6 超导性及超导材料	42
第三章 光学材料	50
§ 3-1 概述	50
§ 3-2 激光材料	52
§ 3-3 光导纤维	60
第四章 材料的声学特性	75
§ 4-1 声学的基本概况	75
§ 4-2 虎克定律	77
§ 4-3 声学材料的几个重要参数	79
§ 4-4 压电本构关系	84
§ 4-5 声波在材料中传播的损耗机理	87
§ 4-6 压电材料的性能参数	90
附录 4.1 机械性质	95
附录 4.2 压电性质	105
附录 4.3 电学性质	109
第五章 声学材料及应用.....	113
§ 5-1 常用声学材料简介.....	113
§ 5-2 压电材料.....	117
§ 5-3 复合的声学材料.....	122
§ 5-4 声光材料.....	122
§ 5-5 用于声光器件的压电材料、电极层材料和键合层材料.....	126
第六章 其它功能材料.....	131
§ 6-1 光电转换材料.....	131

§ 6-2 热释电材料.....	137
§ 6-3 发光材料.....	141
参考文献.....	153

第一章 晶体学基础

在一定的外界条件下，材料的性质决定于其内部的组织结构。因此，研究、了解和控制材料的结构，对制造、使用和发展材料均具有重要的意义。

通常固态材料可以分成晶体与非晶体两大类。对晶体而言，又有多晶体和单晶体之分。多晶体是许多单晶体的聚合体，即由许多取向不同的晶粒组成。在多晶体中，两个晶粒相遇时所形成的界面称为晶界。晶粒和晶界是多晶体中一个非常重要的结构因素，而晶粒的大小又随材料的不同相差十分悬殊，大的可为厘米级，小的可为亚微米级。晶体也可以由一块结构均匀的大单晶组成。单晶则是各向异性的均匀物质，它具有一定的熔点。由于现代技术的发展，需要越来越多的具有特殊的声、光、电、磁、热等特性的单晶和多晶，因此，人们现在已投入更多的物力和人力来从事特殊晶体材料的研究。目前硅、锗、水晶及蓝宝石等材料的生产都已具有一定的规模。

§ 1-1 晶体结构

从原子排列的特征来看，晶体结构的基本特征是，原子和原子集团总是在三维空间中呈有规律的周期性重复排列，即存在长程的几何有序排列。如果我们将每一个可重复的单元用一个点（结点或格点）来描述，就能形成一个有规则的三维点阵，这就是空间点阵。空间点阵中的任何一结点都与其他点有同样的环境。而前面所讲的原子集团，在实际晶体中可以是一个原子（例如 Cu），也可以是由很多原子组成的（像某些有机分子晶体那样），又可以是由单个分子组成的（NaCl），还可以是由一个分子群组成的（如金刚石），也就是说，固体的这种周期性的三维阵列与晶体的化学结构有关。

为了形象地描述晶体结构，可用有些墙纸图案来比喻二维晶体的原子排列，只不过在这里处于结点位置上的是原子或原子团（图 1-1）。为便于分析各种晶体原子排列的规律及

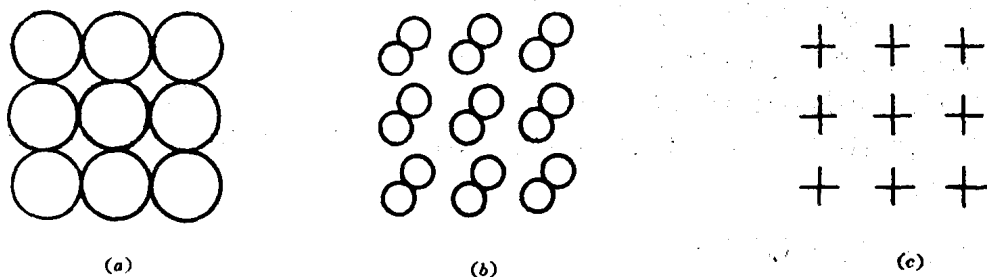


图 1-1 二维晶体的原子排列

(a) 每个格点上有一个原子；(b) 每个格点上有两个原子；(c) 上述原子排列的空间点阵。

形式，空间点阵又常用空间格子（晶格）来表示（图 1-2(a)）。由于晶格有周期重复性，故可取一体积元作为重复单元（称为原胞）来概括整个晶格的特征（图 1-2(b) 所示）。通常

相邻两结点间的距离约为 $3 \times 10^{-10} \text{m}$ ，与每个结点相关的体积约等于 $3 \times 10^{-29} \text{m}^3$ 。由于晶格的结点是按一定的晶格形式周期重复排列的，所以晶格的结点可以完全表征任何晶态物质的结晶结构特征。

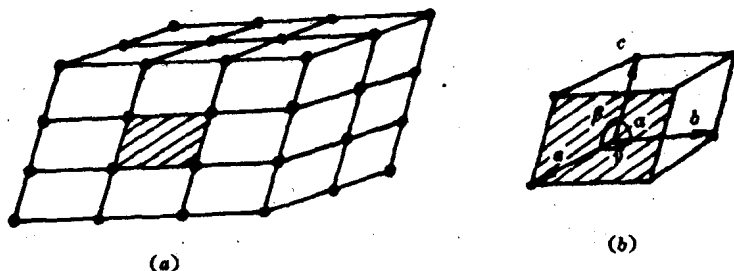


图 1-2 晶格与原胞

(a) 晶格; (b) 原胞

在研究晶体的时候，空间点阵和晶体结构与晶体的性质有很大关系，特别是对后面要谈到的一系列功能材料就更为重要。一般说来，晶体结构就是指与每个结点有关的原子排列，而空间点阵则显示了原子排列的规律性，对许多晶体的性质起着决定性的作用。例如，晶体的 X 射线衍射特性就完全依赖空间点阵的型式。因为空间点阵决定了 X 射线衍射的方向，而与点阵结点相联系的原子集团，则决定了 X 射线衍射的强度，这就是用 X 射线能分析出不同材料的原因。

晶体中一个重要的特性是对称性。通常晶体的外形是一个有限的对称图形，它是由若干个等同部分按一定规律排列组成的。当对有限对称图形进行对称操作时，至少要保持一点不动，这样所组成的对称群称为点群。晶体外形的对称性决定于它的点群。晶体结构本身是个三维点阵的对称图像，三维点阵图像在进行对称操作时，所组成的对称群为空间群。晶体结构的对称性决定于它的对称群。

在研究晶体对称性时，通常把描述晶体外部形状的对称要素叫做宏观对称要素，而把那些只涉及原子结构，而又不影响晶体外形的对称要素称为微观对称要素。宏观对称要素与晶体的宏观特性有关，例如晶体的电导率、晶体内某一方向的磁化率等。同时，宏观对称要素也完全可以用来描述晶体材料的特性，例如材料的压电性。也就是说，宏观对称要素是由晶体的结晶特征所决定的，是由晶格的每个结点来决定的。所以，我们在本书后面研究材料的压电现象之前，就必须明确材料晶格上任一点的宏观对称性。而晶体的类型（对称的点群），则是晶格结点处所有对称元的集合，即所有对称要素的组合。

按照晶体对称的程度，晶体又可以分成七大晶系，每种晶系又可以分成一些对称的类型，它们是：

- 三斜晶系(2 种对称类型);
- 单斜晶系(3 种对称类型);
- 正交晶系(3 种对称类型);
- 三角晶系(5 种对称类型);
- 正方晶系(7 种对称类型);
- 六角晶系(7 种对称类型);

立方晶系(5种对称类型)。

在七大晶系中,每一种晶系可有一个以上的单位晶胞,而单位晶胞又有4种基本形式。基本的单位晶胞又称素胞,在该晶胞中只含一个结点,由 P 表示。例如简单晶胞,其结点分布在立方体8个顶点位置上,而每个顶点占 $1/8$ 空间,如图1-3(a)所示。非基本的晶胞(底心晶胞、体心晶胞、面心晶胞),则都包含了两个以上的结点,如图1-3(b)、(c)、(d)所示。一个底心晶胞,在晶胞的每个角上各有一个结点,而在两个相对面的中心,还各有一个结点。因此,对底心晶胞就具有3种形式,分别由 A 、 B 、 C 来表示。一个底心立方晶胞含有两个结点。对体心立方晶胞常用字母 I 表示,在晶胞的每个角上各有1个结点,同时在立方体的中心处,还有1个附加的结点。而对面心立方晶胞常用 F 表示,面心立方中,除了在每个角上各有1个结点外,而在6个面的中心还有6个附加的结点。以上4种晶胞包括: P 型晶胞的一个结点; A 、 B 、 C 型晶胞的两个结点; F 型晶胞的4个结点; I 型晶胞的两个结点。

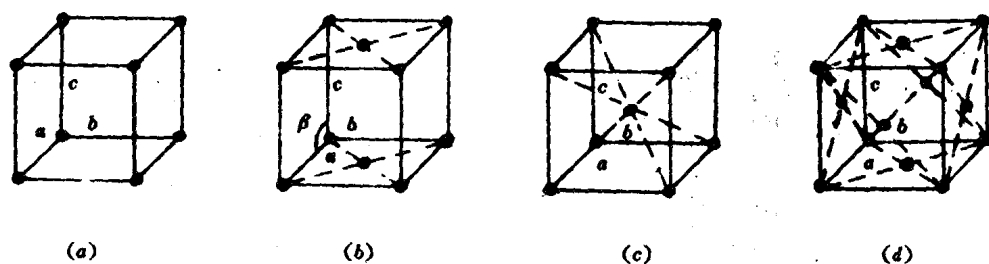


图1-3 单位晶胞的4种基本形式

(a) 简单晶胞; (b) 底心晶胞; (c) 体心晶胞; (d) 面心晶胞

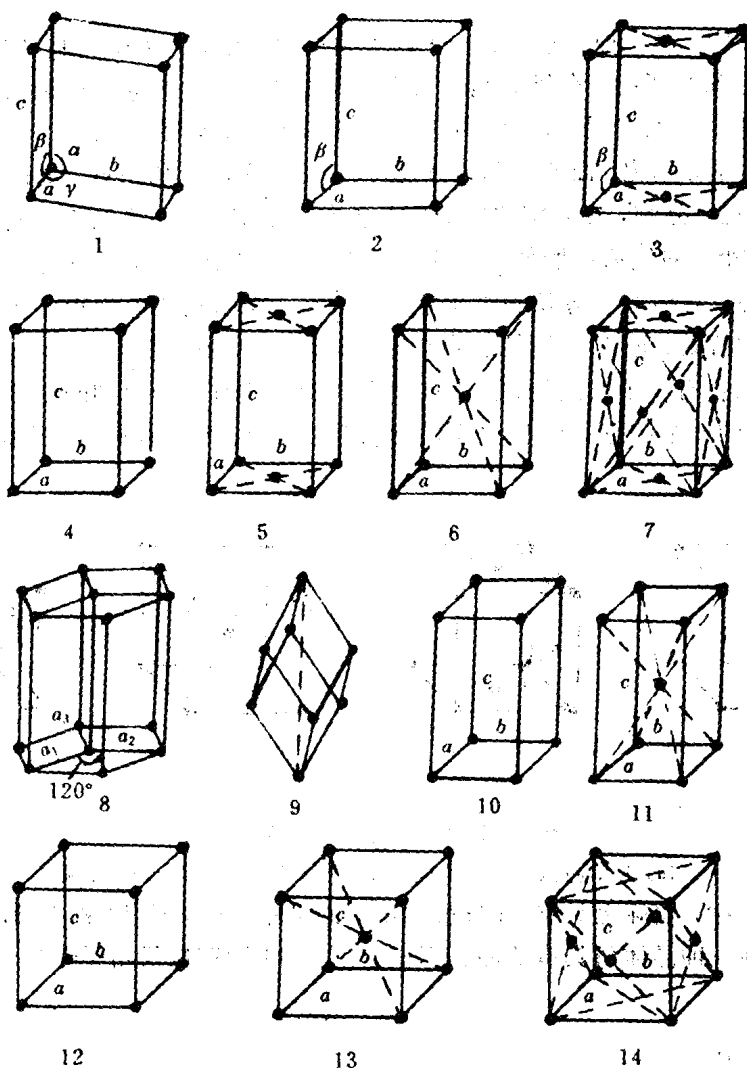
在七大晶系中,实际上只有14种彼此不同的晶格形式,这14种不同的晶格就称为布拉伐格子。而每一种晶体所具有的晶格形式必须是14种布拉伐格子中的一种。这14种布拉伐格子是:

- 三斜晶系 P
- 单斜晶系 P 和 C
- 正交晶系 P 、 C 、 I 和 F
- 三角晶系 P
- 六方晶系 P
- 正方晶系 P 和 I
- 立方晶系 P 、 I 和 F

如图1-4所示。

由图1-4可知,七大晶系中最简单的晶胞是素胞。其中,三斜晶系全无对称性;正交晶系的3个轴成直角,但3个轴不相等;立方晶系3个轴相等,且轴相交的三个角成直角,而形成了晶系中最高的对称性。同时,在六方晶系中,平行六面体晶胞已无法表达六方对称性,因此,这里最方便的办法是采用六方棱柱晶胞。

我们也注意到,虽然空间点阵的类型不过只有14种,但晶格结构的种类却可以多得多。因为与每个结点相联系的原子或原子集团,其组成和结构可以千变万化,因此,晶体



1—简单三斜；2—简单单斜；3—底心单斜；4—简单正交；5—底心正交；
6—体心正交；7—面心正交；8—简单六方；9—简单菱形；10—简单正方；
11—体心正方；12—简单立方；13—体心立方；14—面心立方

图 1-4 14 种布拉伐格子

结构一般也是比较复杂的。

每一晶系的公共对称分量将赋予单胞参量 a, b, c 和 α, β, γ 具有某些特定的限制条件。所以每种晶系也就可以用单胞的参量来表征。例如在立方晶系中， $a=b=c$ 和 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 。

轴 a, b, c 和其相关的角度 α, β, γ 统称为晶体的自然坐标系。单位矢量 a, b, c 规定为单位位移的方向，单位位移的值分别为 a, b 和 c 。表 1-1 列出了空间点阵的类型与 7 个晶系的对应关系。

表 1-1 空间点阵的类型与 7 个晶系的对应关系

晶 系	点 阵 类 型 (单位平行六面体的形状)	点 阵 常 数
立 方 (等 轴)	轴单位: $ a = b = c $ 轴角: $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 坐标原点: $O(0\ 0\ 0)$	$ a $
正 方	轴单位: $ a = b \neq c $ 轴角: $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 坐标原点: $O(0\ 0\ 0)$	$ a , c $
六 方	$ a = b \neq c $ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ, O(0\ 0\ 0)$	$ a , c $
三 方	(R) $ a = b = c $ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ, O(0\ 0\ 0)$	$ a $ α
斜 方	$ a \neq b \neq c $ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $O(0\ 0\ 0)$	$ a , b , c $
单 斜	$ a \neq b \neq c $ $\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta > 90^\circ$ $O(0\ 0\ 0)$	$ a , b , c $ β
三 斜	$ a \neq b \neq c ,$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ, O(0\ 0\ 0)$ (任意形式)	$ a , b , c $ α, β

对晶体结构特性的了解,有助于今后选用各种不同的方法从晶体原材料中切取有效的样品,这些知识对于今后使用功能材料以及切割人造晶体是很重要的。

表 1-2 表示了周期表中各元素的晶体结构类型。

§ 1-2 密勒指数

在晶体材料中,如果整块晶体是由一种晶格排列重复构成的,则称为单晶。如果一块晶体是由许许多多的小单晶颗粒杂乱地排列在一起的,则称为多晶。多晶体是各向同性的。而单晶体在各个方向上具有不同的物理、化学性质,称晶体是各向异性,它是由于晶体内部不同晶面(原子面)和晶向(原子列)上原子排列方式及分布密度存在差异引起的。在具体研究和选用晶体时,常常需要指明某一特定的晶面或晶向。为了研究和表达方便,通常用密勒指数(晶面指数和晶向指数)来表示晶面和晶向。一般密勒指数采用3个整数表示。在晶格中,所有平行的晶面(或平行的方向)都具有相同的密勒指数。

在晶体中,包含有不在同一直线上的3个格点的平面称为晶面。同一个布拉伐格子,可以有无穷多个不同的晶面族。一旦晶面族确定,则所有格点便全部包含其中。同时,任一平面的空间位向都可用其法线的方向余弦或在坐标轴上的截距来描述。假设有一晶面族,其晶面的间距为 d ,而法线方向的单位矢量为 n ,这样就能写出距离原点为 μd 的晶面法式方程,其向量形式为

$$R \cdot n = \mu d \quad (1-1)$$

式中, R 为原点到该晶面上任一点 $R(x, y, z)$ 的矢量; $\mu = \pm 1, \pm 2, \dots$,如图1-5所示。

在这晶面族中,离原点最近的一个晶面的方程为

$$R \cdot n = d \quad \mu = 1 \quad (1-2)$$

在实际晶体中,通过晶格结点可以作出许多间距相同且又互相平行的平面(晶面)。垂直于晶面的法线方向称为晶向。具有同一晶向的所有晶面都相似,并属于同一晶面族。一块晶体又可以划分出许多的晶面族,所有平行的晶面都具有相同的密勒指数。在实际应用中,我们常常需要选取一定的晶向和晶面。

获得晶面密勒指数与获得方向指数的方法大同小异。晶面密勒指数由下述方法确定,(图1-6):

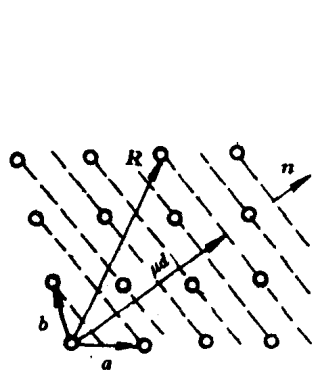


图 1-5 晶面法式方程

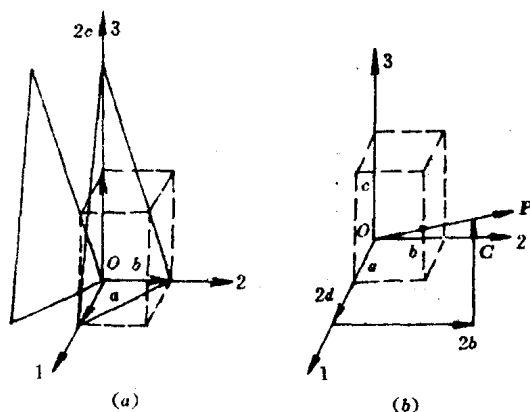


图 1-6 密勒指数的表达法
(a) 晶面 $(2,2,1)$; (b) 方向 $[2,2,1]$

(1) 在晶体点阵中, 先确定一参考坐标, 并选一结点作为坐标原点。为了防止出现零截距, 坐标原点应定在待测晶面之外。另外, 以晶胞的 3 个棱边作为坐标轴 X 、 Y 、 Z , 取晶胞的晶格常数 a , b , c 为 3 个轴的单位平移量。

(2) 找出待测晶面在 X 、 Y 、 Z 轴上的截距, 然后用每个轴的单位平移量分别去度量每个截距的长度, 求得 3 个截距值。如果在此轴上的截距为 ∞ , 则该晶面与此轴平行。若该晶面与某轴负方向相截, 则在此轴上的截距为一负值。

(3) 求出每个截距值的倒数。

(4) 进行有理化, 即利用乘以一个公因子, 使倒数值成为最小整数。

(5) 把所得整数用圆括号括起来成为 (h, k, l) 形式, 此符号即表示晶面密勒指数 (图 1-7)。

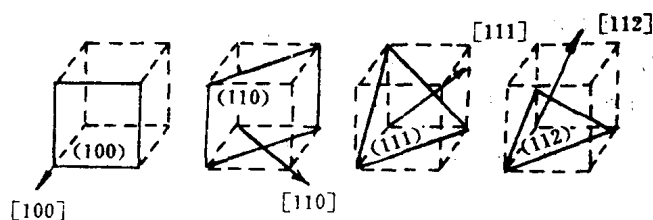


图 1-7 立方晶格中几个重要晶面的晶面指数和方向指数

图 1-6 表示出两个相邻平面与 3 个晶轴相交的情况, 第一个平面通过晶胞原点 (晶胞的 3 个轴与晶轴 X 、 Y 、 Z 重合), 第二个平面与晶轴相交的截距为 a 、 b 和 $2c$, 按上述求密勒指数的方法可求得晶面指数为 $(2, 2, 1)$ 。

晶向指数可以如下求出: 例如有一点 $(3a, -2b, 0c)$ 与单胞原点作一连线, 然后用单位位移矢量去除得 $[3, \bar{2}, 0]$, 这就表示了该线的方向 (注意是用方括号)。但是对于经过点 $(-3a/2, 2b/2, c)$ 的直线, 用单位位移矢量去除以后, 再乘以 6 进行有理化, 这样可得到晶向指数为 $[9, 4, 6]$ 。

由上述可得出晶向指数的方法为:

(1) 从晶胞原点按规定作一条与晶向平行的直线。

(2) 在直线上任取一点 (一般是最邻近原点的结点), 记下这点的坐标 (即在 3 个晶轴上的投影), 然后用各自的平移分量去进行度量。

(3) 进行有理化, 得到 3 个最小的整数。

(4) 用方括号括起来, 如 $[h, k, l]$ 的形式。

在图 1-6(b) 中, 直线 OP 在 3 个轴上的投影分别为 $1a$, $1b$, $1/2c$ 。经过各自的单位位移度量以后, 得 $1, 1, 1/2$ 。乘以公因子得 $2, 2, 1$ 。则所得的方向指数为 $[2, 2, 1]$ 。说明一点, 在获得方向指数与获得晶面指数的方法中, 不同之处是在获取方向指数的过程中, 无取倒数的过程。

在立方晶系中, 各种晶面指数与方向指数在数值上是相同的, 并且在同一晶体中, 具有相同指数的晶面和晶向是相互垂直的。

通常在结晶学上, 等同的晶面或方向都具有相同的密勒指数, 因此人们就常用 $\{ \}$ 括号表示晶面族, 用 $\langle \rangle$ 括号表达方向族。在晶体中, 凡晶面间距和晶面上原子分布完全相同, 而空间位向不同的晶面, 可以归并为同一晶面族, 用符号 $\{hkl\}$ 表示。例如在立方晶

体中, $\{100\}$ 同时代表 (100) 、 (010) 和 (001) 等晶面。与晶面指数一样, 所有相互平行的方向 (晶向) 都具有相同的指数, 因此 $[hkl]$ 是代表晶体空间某种方位的一组平行晶向。同样, 从对称性角度考虑, 原子排列相同但空间位向不同的所有晶向, 可用 $\langle hkl \rangle$ 来表示, 称为晶向族。例如, 在立方晶系中, $\langle 100 \rangle$ 方向族包括的方向有 $[100]$ 、 $[\bar{1}00]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 和 $[00\bar{1}]$ 。由此看出, 方向族的表示法比列出所有等效方向的方法要简单得多。

密勒指数要求同类的平面具有相同的晶面间距和由同一原子阵列构成, 同时在类似的方向上要求有同样的单位位移。七大晶系中, 大多能满足这个要求。但是六角晶系则例外。这是因为表示六角晶系对称性的旋转六重轴, 要满足上述要求存在一定的困难。在这种情况下, 就只有采用密勒—布拉伐指数来表示 $[s p q r]$ 。而不能用一般的密勒指数 $(h k l)$ 表示。两者之间的关系如下:

$$\left. \begin{aligned} s &= \frac{1}{3}(2h - k) \\ p &= \frac{1}{3}(2k - h) \\ q &= -(s + p) \\ r &= l \end{aligned} \right\} \quad (1-3)$$

和

$$\left. \begin{aligned} h &= s - q \\ k &= p - q \\ l &= r \end{aligned} \right\} \quad (1-4)$$

由上可知, 方向 $[010]$ 相当于密勒—布拉伐表示法中的 $[\bar{1}210]$ 。其中, 指数 q 常省略掉或写成一个点, 如 $[\bar{1}2\cdot0]$ 。同样, 对于晶面 (110) 也即相当于 $(\bar{1}1\bar{2}0)$ 或 $(11\cdot0)$ 。注意: 在六角晶系中必须用密勒—布拉伐表示法。而其它的晶系中只用密勒指数表示就行了。

在六角晶系中, 表达晶胞常数是采用一种新的坐标系统。它有 4 个参考坐标轴。其中, X_1, X_2, X_3 三个轴在同一平面上, 并互成 120° ; a_1, a_2, a_3 分别为 3 个轴的平移矢量, 该单位矢量的模都是六角底平面的棱边长度, 又为晶格常数。另一个 Z 轴垂直于底平面, 其度量单位为六方晶胞的高, 即晶格常数 c 。 Z 轴实际上与三轴坐标系中的 Z 轴一致。其中

$$\left. \begin{aligned} a_1 + a_2 + a_3 &= 0 \\ x_1 + x_2 + x_3 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (1-5)$$

采用这种标定法则晶面和晶向指数就由 4 个数字组成。其优点在于消除了 3 轴坐标系标定晶面与晶向指数的不规律性, 而相同的晶面或晶向就可以从指数上反映出来。例如在六方晶体中, 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 $(1\bar{1}00)$, 它们都是由 1、 $\bar{1}$ 、0、0 四个数字依不同顺序排列组成的, 而这 6 个面就可以归并为 $\{10\bar{1}0\}$ 晶面族 (见图 1-8)。

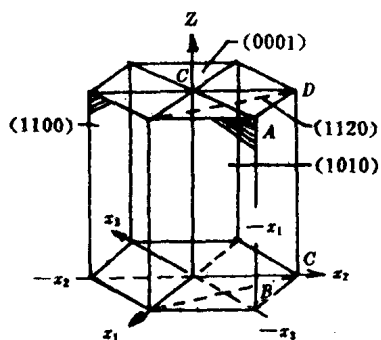


图 1-8 六角晶系的四轴定向

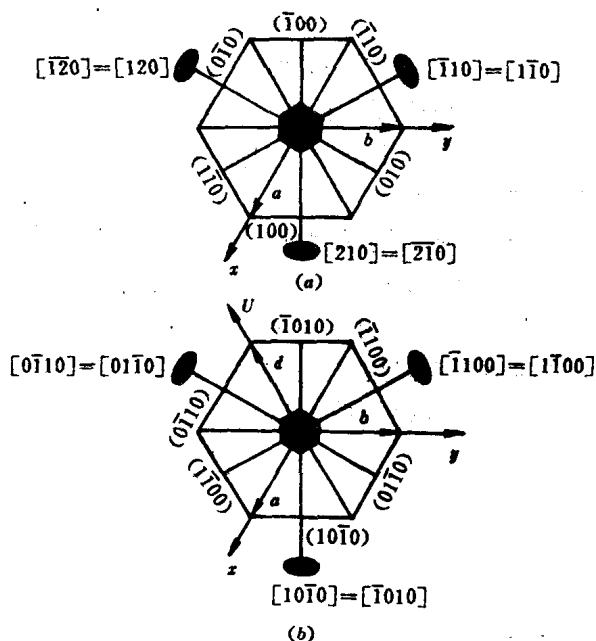


图 1-9 六角晶系的晶向与晶面指数
(a) 三轴坐标系；(b) 四轴坐标系

§ 1-3 晶体的分类

元素的晶体结构随元素在周期表中的位置不同而不同，通常可分为 3 类：周期表中左边的属第一类，其中以金属元素为主，而在周期表中右边的是第三类，并以非金属元素为主；介于其间的少量元素归为第二类。

晶体的结构和性能与组成晶体的原子或离子和分子的结构以及它们之间的相互作用密切相关。根据它们间的相互作用，通常可以把晶体分成以下主要 4 种类型。

一、离子晶体

离子键是化学键中最简单的一种形式，实质上它完全是靠两原子间的静电力吸引而形成的。靠这种静电力而结合的晶体称为离子晶体。最典型的离子晶体是周期表中 I A 族的碱金属元素 Li、Na、K、Rb、Cs 和 VII A 族的卤族元素 F、Cl、Br、I 之间所形成的化合物，其结合的基本特点是以离子（而不是原子）为结合单元（其中 A 为正离子，B 为负离子）。

离子化合物晶体结构在很大程度上决定于两类离子的相对大小。例如，在典型的离子晶体 NaCl 中，两种离子大小差别很大（图 1-10(a)）。其晶体结构中，每个钠离子周围有 6 个邻近的氯离子，而每个氯离子又有 6 个邻近的钠离子，即由于静电力的作用使离子结合起来。另一种情况是离子晶体的两种离子大小几乎相等。例如，在 CsCl 的结构（图 1-10(b)）中，8 个氯离子均聚集在每个铯离子的旁边。

在离子化合物中，通常负离子总是比正离子体积大，因此在考虑离子堆积时，首先要考虑负离子堆积。而这里负离子一般是按立方堆积、立方密堆积和六方密堆积等方式进行