

固体物理学

杨兵初 钟心刚 主编

中南大学出版社

固体物理学

杨兵初 钟心刚 主编

中南大学出版社

湖南·长沙

固体物理学

杨兵初 钟心刚 主编

☐责任编辑 李昌佳 求 实

☐出版发行 中南大学出版社

社址:长沙市麓山南路 邮编:410083

发行科电话:0731-8876770 传真:0731-8710482

电子邮件:csucbs @ public. cs. hn. cn

☐经 销 湖南省新华书店

☐印 装 长沙市华中印刷厂

☐开 本 787×960 1/16 ☐印张 18.5 ☐字数 355 千字

☐版 次 2002 年 9 月第 1 版 ☐2002 年 9 月第 1 次印刷

☐书 号 ISBN 7-81061-560-2/O · 028

☐定 价 28.00 元

图书出现印装问题,请与经销商调换

前 言

本教材是为应用物理、材料物理专业高年级学生及材料类专业研究生而编写的，着重阐述固体物理学的基本理论和基本知识。

固体物理学是研究组成粒子（原子、电子）的结构、运动规律及其对固体性质影响的科学。随着科学技术的突飞猛进，材料科学与技术已经成为现代高新技术中优先发展的领域。人们对材料的研究已经从宏观层次深入到微观层次，如原子团簇、纳米材料等；随着固体理论和实验技术的发展，人们可以根据理论指导，有意识地设计和制备具有特殊微观结构和特殊性质的人造固体材料（如超晶格和各种复合材料），即人类已经从“炒菜式”的材料研究模式走入了材料设计研究模式。进行材料设计的理论基础就是固体物理学。

自20世纪50年代以来，固体物理学得到迅速发展。当前，固体物理学研究仍不断向广度和深度发展，实际上已形成内容极丰富的固体科学体系。就广度而言，固体物理学领域包括金属物理、半导体物理、磁学、电介质物理等研究某类固体或固体的某类问题的分属学科（子学科）；就深度而言，固体物理学不断深入探讨固体粒子之间相互作用与运动形态以及缺陷的形成与运动规律等，引入了许多元激发（准粒子）的概念，通过许多现代实验技术研究极端条件下（如超高压、强磁场、极低温、强辐射等）固体性质以及固体表面、界面、非晶态固体的特殊性质。新的实验现象、理论层出不穷，交相辉映。

固体物理学作为基础理论与众多高科技应用学科之间的桥梁，其作用是显而易见的。但是，固体物理学作为一门课程不可能将固体科学领域的内容全部纳入，这是因为学时少，且缺乏必要的理论物理基础，所以，只能包含固体物理中最基本、最普遍、最重要的一些内容。

哪些内容是固体物理学的最基本、最普遍、最重要的内容？作者结合多年讲授固体物理课程的体会和经验，认为固体物理学的主要内容是晶体物理学。与一般材料科学方面的课程的主要区别体现在微观层次上，所以，本书第1章简略地介绍晶体的结构特征及其对称性。第2章在原子（或分子）层次上研究晶体的结合及其本质。根据晶体中的微观粒子主要是离子和电子，且由于离子的质量比电子的大得多，所以，在第1、2章中都是假设离子固定不动。但实际上离子是在不停地运动的，所以，在第3章中研究离子的运动规律——晶格振动，简单介绍经典理论之后，着重介绍量子理论，特别是声子的概念。在第4章和第5章中讲述电子问题，重点介绍了周期场中电子的运动规律和固体能带理论。第1~5

章是固体物理学的最基本内容。除了这些基本理论之外,还应包括某些固体材料及应用、固体学科新进展等方面的内容,所以在第6~9章分别介绍半导体、固体磁性、超导电性和非晶态固体。这些内容是固体物理学的重要组成部分,因为在这些固体中电子的表现又是各不相同的。这些内容基本上构建了固体物理学的学科体系。

固体作为一类客观物质,既是力学系统,又是热学系统、电磁系统,同时其构成粒子的运动又服从量子力学,所以量子力学和统计物理学等为学习固体物理学的先修课程,没有这方面的知识,固体物理学的教学是无法进行的。物理专业的学生学习过理论力学、热力学与统计物理、电动力学和量子力学等基础理论学科,为学好固体物理打好了基础。然而,工科研究生可能没有学过量子力学、统计物理等方面的知识,为此,在教材编写过程中采取了以下2项措施:

(1) 紧扣物理思想和物理模型。尽量应用简单的理论模型去解释固体的性质,不进行繁琐的数学推导,以揭示微观粒子运动的基本规律;在与实验的对比中判断理论模型的正确与否及改进方向。

(2) 增加了《量子力学基础》和《统计物理学基本知识》2个附录,以补充必备的量子力学和统计物理的基本知识,便于在学习固体物理学时选用。总之,突出物理模型和物理思想、不追求数学的详细推导、深入浅出是本教材的最大特点。

邓宏贵讲师编写了附录A和部分习题,郭光华教授审阅了全部书稿,并提出了许多宝贵意见;此外,徐慧教授对本书的编写和出版给予了大力支持。在此一并表示衷心的感谢。

由于编者水平有限,且时间仓促,书中难免存在一些缺点和错误,敬请广大读者批评指正。

编 者

2002年8月

目 录

第1章 晶体结构	(1)
1.1 固体、晶体和非晶体	(1)
1.2 晶体结构的描述	(2)
1.3 晶体的对称性	(10)
1.4 晶列、晶面及其表示	(13)
1.5 倒易点阵	(16)
1.6 晶体结构的实验测定	(19)
小 结	(29)
思考题和习题	(31)
第2章 晶体的结合	(34)
2.1 晶体的结合类型和原子的电负性	(34)
2.2 结合力的一般性质	(39)
2.3 离子晶体的结合能	(42)
2.4 非极性分子晶体的结合能	(47)
小 结	(51)
思考题和习题	(53)
第3章 晶格振动与晶体的热学性质	(55)
3.1 连续媒质中的弹性波	(55)
3.2 晶格振动的经典理论	(59)
3.3 晶格中振动的量子化和声子	(66)
3.4 离子晶体中的长光学波	(69)
3.5 晶格比热容的量子理论	(74)
3.6 晶体热膨胀	(80)
3.7 晶体热传导	(81)
3.8 确定晶格振动谱的实验方法	(84)
小 结	(87)
思考题和习题	(88)

第4章 金属自由电子理论	(91)
4.1 电子气状态的描述	(91)
4.2 自由电子的能量和比热容	(93)
4.3 电子气的电导和热导	(98)
4.4 电子热发射和接触电势差	(102)
4.5 霍耳效应和自由电子气模型的局限性	(105)
小 结	(107)
思考题和习题	(109)
第5章 固体的能带理论	(111)
5.1 布洛赫定理及能带	(111)
5.2 平面波方法	(115)
5.3 晶体的布里渊区	(121)
5.4 紧束缚近似	(125)
5.5 准经典近似	(129)
5.6 导体、绝缘体、半导体及空穴	(135)
5.7 费米面的构造与测量	(139)
5.8 用光电子能谱研究能带结构	(144)
5.9 能带论的局限性	(148)
小 结	(149)
思考题和习题	(151)
第6章 半导体	(153)
6.1 半导体的特性和类型	(153)
6.2 平衡载流子浓度	(156)
6.3 非平衡载流子浓度	(160)
6.4 P-N 结	(164)
小 结	(169)
思考题和习题	(170)
第7章 固体的磁性	(172)
7.1 原子磁性	(172)
7.2 固体磁性概述、逆磁性	(178)
7.3 顺磁性	(181)
7.4 铁磁性的唯象理论	(188)

7.5 反铁磁性和亚铁磁性	(192)
7.6 顺磁共振	(197)
小 结	(200)
思考题和习题	(201)
第8章 超导电性	(203)
8.1 超导电性的基本现象和性质	(203)
8.2 伦敦的电磁学理论	(210)
8.3 金兹堡-朗道理论与磁通量子化	(212)
8.4 BCS 理论	(215)
8.5 单粒子隧道效应	(220)
8.6 约瑟夫森效应	(224)
8.7 高 T_c 氧化物超导体	(229)
小 结	(231)
思考题和习题	(233)
第9章 非晶态固体	(234)
9.1 非晶态固体的结构及描述方法	(234)
9.2 大角散射法测定径向分布函数	(237)
9.3 结构模型	(241)
9.4 非晶态固体电子结构	(244)
9.5 金属玻璃的电子态和导电性	(247)
9.6 非晶半导体的电子态和导电性	(251)
9.7 非晶半导体的光学性质	(257)
小 结	(261)
附录 A 量子力学基础	(262)
A.1 薛定谔方程	(262)
A.2 力学量算符	(265)
A.3 薛定谔方程的应用	(269)
A.4 对应原理	(276)
附录 B 统计物理学基本知识	(278)
B.1 统计物理学基本概念	(278)
B.2 3 种统计方法	(280)
参考文献	(285)

第1章 晶体结构

固体材料因具有许多独特的性能,用途广泛,在很早以前就成为人们研究的对象。为了研究晶体材料的各种物理化学性质,开发性能更加优异的材料,首先必须了解固体内原子排列的方式,即研究固体的结构。

1.1 固体、晶体和非晶体

根据原子排列方式的不同,人们通常把固体分为两大类:晶体和非晶体。晶体中的原子有规律地周期性排列,或称为长程有序。在实际晶体中,原子排列不可能完全按照理想完整的长程有序地排列,晶体中总会或多或少地存在不同的结构缺陷。如晶体中常常有空位、间隙原子、位错、晶界等缺陷,当然,长程有序也是晶体的基本特征。而非晶体中的原子不是长程有序地排列,但在几个原子的范围内保持着有序性,或称为短程有序,如玻璃、石蜡、沥青等。由于晶体有缺陷,因而使其长程有序受到一定的破坏。另外,超细晶材料、纳米材料的长程有序范围受到了限制,因此,有时很难在长程有序和短程有序之间划分一个明确的界限。1984年,Shechtman等人在急冷合金中发现了一类介于晶体和非晶体之间的固体材料,它的特点是原子有序排列,但不具有平移周期性。人们把这类新发现的材料称为准晶体。

晶体又分单晶体和多晶体:整块晶体内原子排列的规律完全一致的晶体称为单晶体;而多晶体则是由许多取向不同的单晶体颗粒无规则堆积构成的。岩盐(NaCl)、石英(SiO_2)和金刚石都是自然单晶体,人们现在所用的单晶体大多是人工生长出来的;常用的金属材料一般都是多晶体。按照晶体的概念来鉴别物质时可以发现,地球上的大部分固态物质都属于晶体。不仅地球上到处都是有机晶体和无机晶体,而且在其他天体上也不断进行着晶体形成和破坏的演变过程。因此,在整个宇宙中广泛地存在着晶体物质,如飞落在地球上的陨石基本上也是晶体物质。本书所讨论的晶体,如未特别指明,都指单晶体。

晶体中原子的周期性排列使晶体具有一些共同的性质,如均匀性(即晶体不同部位的宏观性质相同(平移特性))、不均匀性(即在晶体的不同方向上具有不同的物理性质(旋转特性))、自限性(即晶体具有自发地形成规则几何外形的特征)、对称性(即晶体在某几个特定的方向上表现出来的物理化学性质完全相同的特

性)、解理性(即晶体常具有某些确定方位的沿晶面劈裂的性质,这种性质称为晶体的解理性,这样的晶面为解理面)。显露在晶体外表的往往是一些解理面。同时,晶体还具有固定的熔点和最小内能性。同一种物质的几种不同形态(气态、液态、非晶态、晶态)中,以晶体的内能为最小,这种性质称为晶体的最小内能性。晶态是一种稳定的物质,非晶态则是一种亚稳态物质。

晶体与非晶体在一定条件下可以相互转化,即固态物质的结构特征发生质的变化。如玻璃调整其内部结构可使其原子排列向晶体转化,这个过程称为“晶化”;晶体内部单元的周期性排列遭到破坏,也可以向非晶体转化,称为玻璃化或非晶化,如急冷可以造成金属固体出现非晶状态。

当晶体内部的结构单元长程有序地排列且处于平衡状态时,其内能最小。例如将许多乒乓球随便放满一个足够大的方盒子,若将这些乒乓球重新整齐地紧密排放在方盒子里,则会发现同样数量的乒乓球已不足以填满方盒子,即乒乓球的总势能降低了。因此,对于同一种物质的不同凝聚态,晶态是最稳定的。晶体玻璃化作用的发生,必然与能量的输入或物质成分的变化相关联;而晶化过程完全可以自发产生,从而转向更加稳定的晶态。由此可见,晶化是自发过程,而非晶化是非自发过程。

本书研究的对象为主要晶体,仅在最后一章对非晶体予以简单介绍。

1.2 晶体结构的描述

晶体规则对称的外形与其内部结构的关系,很早就引起人们注意,并对此进行了大量的研究。17世纪及18世纪,在研究方解石解理性的过程中,阿羽依等认为晶体由一些相同的“基石”重复规则地排列而成,并发现了晶体学基本定律,即有理指数定律。由于当时条件的限制,把重复单元看做是“实心”的基石,这种认为晶体内部结构毫无空隙的想法,显然同物质结构的微粒性相抵触。因此,后来的关于晶体结构的学说,就从“坚实的”基石堆砌而成的想法,逐渐演变成为“微粒在空间按一定方式排列成为晶体”的学说。19世纪,布喇菲(Bravais)指出晶体是由原子在空间周期性排列而构成的,即点阵学说。后来的晶体X射线衍射实验证明布喇菲学说是正确的。按此学说,晶体内原子的周期性排列可用基元、空间点阵和原胞等概念来描述。

1.2.1 基元、格点和空间点阵

理想的晶体可以看成是由完全相同的原子集团在空间周期性地排列而构成的。能够周期性排列而得出某种晶体的最小的原子集团叫做该晶体的基本结构单元,简称基元。对于无限大晶体,各个基元周围原子的排列情况是完全相同的。并

且在任何两个基元中,相应原子周围的情况也是相同的。在每个基元内部各个原子周围的情况则是不完全相同的。

我们可以用一个点代表基元的位置,这个点就称为格点(或结点)。格点可以是基元中某个原子的位置或基元质心的位置,也可以是基元中任意一个等价的点。格点在空间的周期性无限排列就构成空间点阵。点阵中的每个格点完全等价。格点间互相连接形成的网格称为晶格。点阵是一种数学抽象,只有当其中的格点代以具体的基元后才形成晶体结构。其关系可表示为

$$\text{点阵} + \text{基元} = \text{晶体结构}。$$

点阵学说概括了晶体结构的周期性。X射线在晶体中的衍射现象证实了晶体结构点阵理论的正确性。晶体中所有的基元都是等同的。整个晶体结构可以看做是这种基元沿空间3个不同的方向,各按一定的距离周期性地平移而构成。每一平移的距离称为周期。因此,在一定的方向上有一定的周期;不同的方向上周期一般不相同。

1.2.2 基矢、原胞和晶格常数

由于格点代表基元的位置,所以它们在空间的排列也具有周期性。格点的位置可用格点的位置矢量(简称格矢) R_l 来表示:

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

式中: l_1, l_2 和 l_3 为任意整数; a_1, a_2 和 a_3 代表不在同一平面内的3个矢量,称为基矢。其大小分别为3个方向上的周期。

因为晶格具有周期性,故可以把晶格看成是由一系列完全相同的重复单元平行堆砌而成。并且要求堆砌的结果充满整个空间,既无缝隙,又无重叠。这种重复单元称为原胞。对于给定晶体,原胞的选法也有任意性。如果只要求反映晶体的周期性特征,可以选取以

基矢 a_1, a_2 和 a_3 为棱边构成的平行六面体为重复单元。这种重复单元称为固体物理学原胞,又称初基原胞。格点只在原胞的顶角上,每个初基原胞只含一个格点,即只含一个基元。图1.1表示一个三维晶格及其固体物理学原胞。原胞的体积为

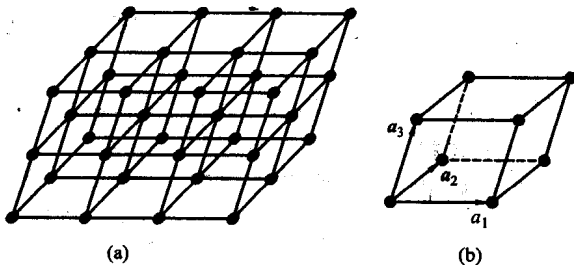


图 1.1 晶格和原胞

(a) 晶格; (b) 固体物理学原胞。

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

需指出的是,固体物理学原胞的选取不是惟一的。

在结晶学中,为了同时反映晶体的周期性和对称性,常选用体积不一定最小的平行六面体为原胞,这种原胞称为结晶学原胞(或布喇菲原胞),简称晶胞。格点不仅在顶角上,也可以在体心和面心上,它的三边也叫基矢,常用 a, b, c 表示。晶胞体积为 $a \cdot (b \times c)$,它是固体物理学原胞体积 Ω 的整数倍。

人们还常选用维格纳-塞茨(Wigner-Seitz)原胞,简称 WS 原胞。以晶体中某一格点为中心,作其与邻近格点连线的垂直平分面,这些垂直平分面所围成的以该点为中心的最小体积是属于该点的 WS 原胞。显然属于某一格点的 WS 原胞由空间最接近于该点的区域构成,由于 WS 原胞的构造中不涉及基矢的任何特殊选择,因此,它与相应的布喇菲格子有完全相同的对称性。图 1.2 给出了一个二维格点的 WS 原胞。

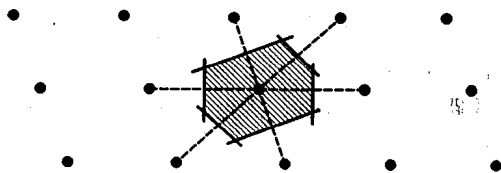


图 1.2 一个二维格点的 WS 原胞

基元的周期性排列,使用于描述晶体性质的很多物理量也具有周期性。在各个原胞的相应点(以位矢 r 表示)上,同一物理量的取值是相同的。若以 $V(r)$ 表示物理量 V 在 r 处的取值, $V(r)$ 具有的晶格周期性可表述为

$$V(r) = V(r + R_l). \quad (1-3)$$

式中 R_l 为(1-1)式定义的任意格点的位置矢量。

1.2.3 布喇菲格子和复式格子

当基元只含一个原子时,每个原子的周围情况完全相同,格点就代表该原子。这种晶体结构就称为简单格子或布喇菲格子。当基元包含 2 个或 2 个以上的原子时,各基元中相应的原子组成与格点相同的网格,这些格子相互错开一定距离套构在一起,这类晶体结构叫复式格子。

也可认为复式格子是多个布喇菲格子套构而成的。

图 1.3 中的原胞都是以基矢 a_1, a_2 为边的平行四边形,它们的空间点阵相同。

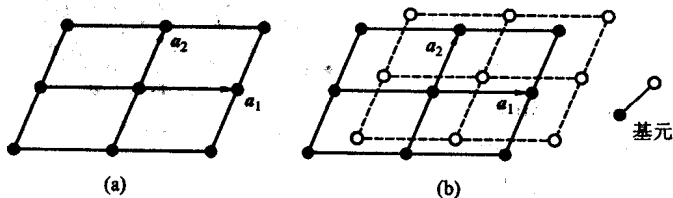


图 1.3 布喇菲格子和复式格子

(a) 布喇菲格子; (b) 复式格子

1.2.4 典型的晶体结构

在本节中,我们将在介绍常见晶体结构的同时,讨论固体物理学原胞的选取方法。

1. 简立方(sc)结构

原子只在边长为 a 的立方体的顶角上,原胞的其他部分没有原子,如图 1.4 所示。这样的原胞自然也是最小的重复单元。每个原胞有 8 个顶角原子,每个原子为 8 个原胞所共有,所以每个原胞只拥有一个顶角原子的 $1/8$,每个原胞实际上只包含一个原子。每个原子所占有的体积为 a^3 ,初基原胞的基矢为

$$\begin{cases} a_1 = ai, \\ a_2 = aj, \\ a_3 = ak. \end{cases} \quad (1-4)$$

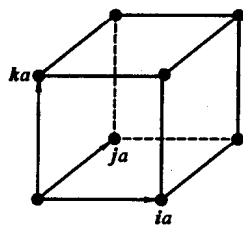


图 1.4 简立方

简立方是一种简单格子,其空间点阵叫简立方。

2. 体心立方(bcc)结构

体心立方结构除了分布在立方体顶角上的 8 个原子外,还有一个原子位于体心处。体心和顶角上的原子完全等价,因此每个晶胞含 2 个格点。2 个基元也即 2 个原子(体心和顶角各一个)。由于固体物理学原胞只能含有一个基元(或一个原子),所以,常采用图 1.5 所示的原胞其基矢为 a_1, a_2, a_3 ,它们是体心原子引向邻近 3 个顶角原子的矢量,可表示为

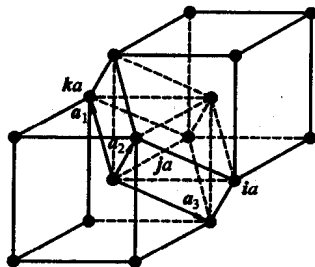


图 1.5 体心立方的固体物理学原胞和基矢

$$\begin{cases} a_1 = \frac{a}{2}(-i+j+k), \\ a_2 = \frac{a}{2}(i-j+k), \\ a_3 = \frac{a}{2}(i+j-k). \end{cases} \quad (1-5)$$

初基原胞的体积为

$$a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = \frac{a^3}{2}.$$

因为晶胞的体积为 a^3 , 含有 2 个原子。新取的初基原胞的体积恰为原来晶胞体积的一半, 所以只包含一个原子, 即只有顶角上才有原子。体心立方结构是简单格子, 其空间点阵也是体心立方。人们熟知的 α -Fe, Mo, W, Li, Na, K, Cr 等晶体结构为体心立方。

3. 面心立方(fcc)结构

在面心立方结构中, 除顶角上有原子外, 在立方体 6 个面的中心处各有一个原子。顶角原子和面心原子完全等价。每个面心原子为 2 个相邻的晶胞所共有。因此, 每个晶胞实际上占有 3 个面心原子和一个顶角原子共 4 个原子。面心立方的初基原胞如图 1.6 所示。原来晶胞的 6 个面心原子和 2 个顶角原子成为初基原胞的 8 个顶角原子。初基原胞的基矢为

$$\begin{cases} a_1 = \frac{a}{2}(j+k), \\ a_2 = \frac{a}{2}(k+i), \\ a_3 = \frac{a}{2}(i+j). \end{cases} \quad (1-6)$$

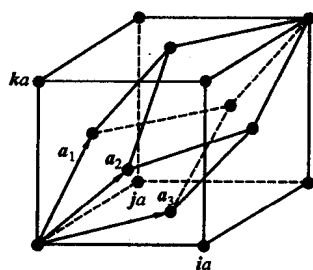


图 1.6 面心立方结构的初基原胞和基矢

晶胞的体积为 a^3 , 包含 4 个原子。固体物理学原胞的体积为 $a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = \frac{a^3}{4}$, 它只包含一个原子。面心立方为简单格子。其空间点阵也是面心立方。 γ -Fe, Al, Cu, Ag, Au 等的晶体结构都是面心立方结构。

4. 氯化钠(NaCl)结构

氯化钠由钠离子(Na^+)和氯离子(Cl^-)结合而成, 是一种典型的离子晶体, 其晶胞如图 1.7 所示。每个基元包含一个 Na^+ 和一个 Cl^- 。晶胞共有 4 个基元 8 个离子。钠离子分布在立方体的顶角和面心上构成一面心立方格子。氯离子也构成一面心立方格子, 且沿棱边平移边长的一半。因此, 氯化钠结构的点阵是面心立方。氯化钠结构的初基原胞的取法与面心立方结构的相同。若以 Na^+ 的面心立方选基矢, 则初基原胞的顶角上为 Na^+ , 而中心为 Cl^- 。每个初基原胞包含一个基元。同理, 也可以按 Cl^- 的面心立方格子选基矢, 其结果也如式(1-6)所示。具有氯化钠结构的晶体还有 KCl, AgBr, PbS 等。

经测定, 常用的氯化钠结构的晶格常数见表 1.1。

表 1.1 常见氯化钠结构的晶格常数

晶体	$a/10^{-10} \text{ m}$	晶体	$a/10^{-10} \text{ m}$	晶体	$a/10^{-10} \text{ m}$
LiF	4.02	RbF	5.64	CaS	5.69
LiCl	5.13	RbCl	6.58	CaSe	5.91
LiBr	5.50	RbBr	6.85	CaTe	6.84
LiI	6.00	RbI	7.34	SrO	6.16
NaF	4.62	CsF	6.01	SrS	6.12
NaCl	5.64	AgF	4.92	SrSe	6.00
NaBr	5.97	AgCl	5.55	SrTe	6.00
NaI	6.47	AgBr	5.77	BaO	6.62
KF	5.35	MgO	4.21	BaS	6.39
KCl	6.29	MgS	5.20	BaSe	6.60
KBr	6.60	MgSe	5.45	BaTe	6.99
KI	7.07	CaO	4.81		

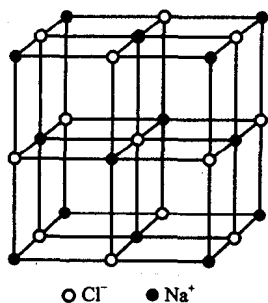


图 1.7 氯化钠结构

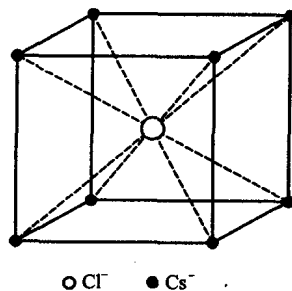


图 1.8 氯化铯结构

5. 氯化铯(CsCl)结构

氯化铯也是一种典型的离子晶体,晶胞如图 1.8 所示。 Cl^- 和 Cs^+ 分别位于立方体的顶角和体心。每个晶胞包含一个基元,即一个 Cl^- 和一个 Cs^+ 。氯化铯结构是由 Cl^- 和 Cs^+ 分别形成的简立方,沿立方体空间对角线平移 $1/2$ 的长度套构而成的。因此,氯化铯结构的点阵是简立方。 TiBr , AlTi , BeCu 也是氯化铯型结构。表 1.2 所示为某些氯化铯结构的晶格常数。

表 1.2 某些氯化铯结构的晶格常数

晶体	$a/10^{-10} \text{ m}$	晶体	$a/10^{-10} \text{ m}$
CsCl	4.12	TiCl	3.84
CsBr	4.29	TiBr	3.97
CsI	4.57	TiI	4.20

6. 闪锌矿结构

闪锌矿结构的空点阵是面心立方, 如图 1.9 所示。它的基元中有一个锌 (Zn) 原子和一个硫 (S) 原子, 所有 Zn 原子组成一个面心立方的简单晶格, 所有硫原子也组成一个面心立方的简单晶格, 整个闪锌矿晶格可以看成是这两个面心立方的简单晶格沿晶胞的空间对角线平移 $1/4$ 的距离套构而成。闪锌矿结构的晶胞中有 4 个基元, 即 4 个 ZnS 分子。表 1.3 列出了常见闪锌矿结构的晶格常数。

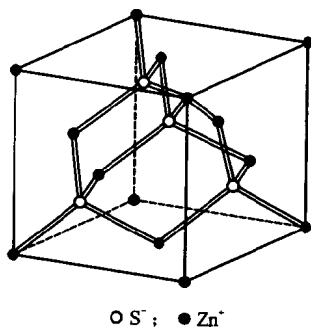


图 1.9 闪锌矿结构

表 1.3 常见闪锌矿结构的晶格常数

晶体	$a/10^{-10} \text{ m}$	晶体	$a/10^{-10} \text{ m}$
CuF	4.26	CdS	5.82
CuCl	5.41	Ins	6.04
AgI	6.47	InSb	6.46
ZnS	5.41	SiC	4.35
ZnSe	5.65	AlP	5.42

7. 金刚石结构

金刚石虽然只由碳原子组成, 但它的结构仍然是复式格子。其晶胞如图 1.10 所示。除了立方体的顶角和面心上有碳原子外, 在 4 个空间对角线的 $1/4$ 处还有 4 个碳原子, 整个晶胞共有 8 个碳原子。

金刚石是典型的共价晶体, 每个碳原子与周围的 4 个原子形成共价键, 一个碳原子在正四面体的中心, 另外 4 个同它共价的碳原子在正四面体的顶角上, 中心的碳原子和顶角上的每个碳原子共用 2 个价电子, 形成正四面体键, 如图 1.10 虚线部分所示。正四面体中心的碳原子价键的取向, 同顶角和面心上的碳原子价键的取向是不同的。若一个的价键指向上方, 则另一个的价键必指向右下方。因此, 立方体的顶角及面心上的碳原子的周围情况同对角线上的 4 个碳原子不同。可见金刚石结构是复式格子, 它由 2 个面心立方格子沿立方体对角线平移 $1/4$ 的长度套构而成。金刚石结构的空点阵是面心立方, 每个基元包含 2 个碳原子。表 1.4 列出了常见金刚石结构的晶格常数。

表 1.4 常见金刚石结构的晶格常数

晶体	$a/10^{-10} \text{ m}$	晶体	$a/10^{-10} \text{ m}$
C	3.56	Ge	5.65
Si	5.43	Sn	6.46

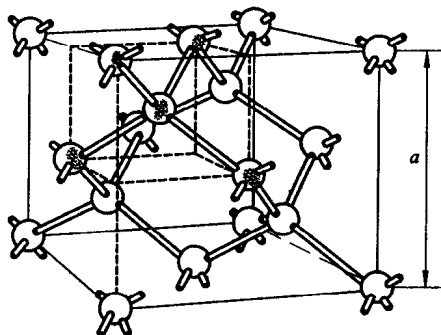


图 1.10 金刚石结构

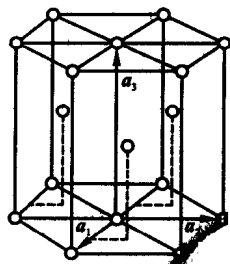


图 1.11 六角密积结构

8. 六角密积结构(hcp)

六角密积结构常以图 1.11 所示的六棱柱表示。原子占据底边长为 a 、高为 c 的正六棱柱顶角,以及上下底面中心处。另有 3 个原子位于中截面上,它们在底面上的投影刚好处于相隔三角形的重心位置。顶角、底心上的原子与中截面上的原子的周围情况不相同。因此,六角密积结构也是复式格子,基元由 2 个原子组成。初基原胞的选取与晶胞相同。基矢常表示为

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}a\mathbf{i} + \frac{a}{2}\mathbf{j}, \\ \mathbf{a}_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2}a\mathbf{i} + \frac{a}{2}\mathbf{j}, \\ \mathbf{a}_3 = c\mathbf{k}. \end{cases} \quad (1-7)$$

$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ 的夹角为 120° , 原胞体积为 $\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2c$ 。对于理想的六角密积结构, 晶格常数的比值应为 $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.633$ 。具有六角密积结构的有 Mg, Be, Zn 等晶体。

1.2.5 配位数和致密度

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