

普通高等教育“十三五”系列教材

# 固体物理 学习指导及习题集

主 编 白一鸣

副主编 谭占鳌 吴 高 王 俊 陈诺夫



中国水利水电出版社  
www.waterpub.com.cn

普通高等教育“十三五”系列教材

# 固体物理 学习指导及习题集

主 编 白一鸣

副主编 谭占鳌 吴 高 王 俊 陈诺夫



中国水利水电出版社  
www.waterpub.com.cn

·北京·

## 内 容 提 要

本书依照陆栋、蒋平、徐至中编著的《固体物理学》的第1~7章知识体系编写而成,主要内容包括晶体结构、晶体中的衍射、晶体的结合、晶格振动和晶体的热学性质、晶体中的缺陷、金属电子论和周期场中的电子态等。在每章中,首先系统地阐述章节主要内容,并对基本概念、物理模型和简明处理方法进行细致地介绍;而后是各个章节的习题及其解答,包括思考题和计算证明题两大类,重点阐明了对类似问题的基本解决方法。每个章节的知识概述是对学科重点的整理和提炼,构建起完整的知识体系;在习题方面,本书选编并重新解答了一些经典固体物理学教材(如陆栋、蒋平、徐至中编著的《固体物理学》、黄昆编著、韩汝琦改编的《固体物理学》、王矜奉编著的《固体物理教程》、陈长乐编著的《固体物理学》等)中的经典习题;同时,也涵盖了作者长期实践教学和研究中遇到的问题,以及学生提出的问题等。总之,作为一本学习指导及习题集,本书对于学生把握教材,灵活运用理论知识解题,具有一定的指导意义。

本书可供理工院校材料、物理、电子等相关专业的本科生、研究生学习,也可作为教师及其他工程技术人员参考书。

### 图书在版编目(CIP)数据

固体物理学习指导及习题集 / 白一鸣主编. -- 北京:  
中国水利水电出版社, 2017. 8  
普通高等教育“十三五”系列教材  
ISBN 978-7-5170-5813-7

I. ①固… II. ①白… III. ①固体物理学—高等学校—习题集 IV. ①O48-44

中国版本图书馆CIP数据核字(2017)第209620号

书 名	普通高等教育“十三五”系列教材 <b>固体物理学习指导及习题集</b> GUTI WULI XUEXI ZHIDAO JI XITIJI
作 者	主 编 白一鸣 副主编 谭占鳌 吴 高 王 俊 陈诺夫
出版发行	中国水利水电出版社 (北京市海淀区玉渊潭南路1号D座 100038) 网址: www.waterpub.com.cn E-mail: sales@waterpub.com.cn
经 售	电话: (010) 68367658 (营销中心) 北京科水图书销售中心(零售) 电话: (010) 88383994、63202643、68545874 全国各地新华书店和相关出版物销售网点
排 版	中国水利水电出版社微机排版中心
印 刷	三河市鑫金马印装有限公司
规 格	184mm×260mm 16开本 11.25印张 267千字
版 次	2017年8月第1版 2017年8月第1次印刷
印 数	0001—1500册
定 价	<b>28.00元</b>

凡购买我社图书,如有缺页、倒页、脱页的,本社营销中心负责调换

版权所有·侵权必究

## 前言

目前,国内的固体物理教材领域呈现百花齐放的繁荣景象。其中陆栋、蒋平、徐至中编著的《固体物理学》曾获得国家教委优秀教材一等奖,并被列为普通高等教育“十一五”国家级规划教材;黄昆编著、韩汝琦改编的《固体物理学》也先后获得全国优秀教材特等奖及国家级科学技术进步二等奖;Charles Kittel 编著、吴代鸣译著的《固体物理导论》、Ashcroft 和 Mermin 编著的《Solid State Physics》也是广受好评的经典教材;王矜奉主编的《固体物理教程》颇受学生欢迎,许多高校也陆续出版了面向本校学生的固体物理教材。但传统的固体物理教材一般理论深奥,大多是为物理专业学生编写,对缺乏坚实的量子力学、统计物理学基础的工科学生而言难度较大。市面上更是缺乏面向非物理专业学生的重视固体物理思想脉络的学习指导书。基于此,编者带领的教学团队结合多年的教学实践成果,着手编写《固体物理学习指导及习题集》一书。

编者认为,固体物理学是一门理论性较强、体系庞大、较为抽象的学科,同时也是物理学中应用极广泛、内容极丰富的分支学科,更是固体材料和固体器件的基础学科,在发展尖端科学技术方面起着重大作用。尤其是对于材料、电子等工科专业大学生而言,是很重要的专业基础课。考虑到学生的学习难度,一本好的固体物理学习指导与习题集就显得尤为重要。

本书依照陆栋、蒋平、徐至中编著的《固体物理学》教材的第1~7章知识体系编写而成,而不包含8~15章专题部分。这是因为,陆栋、蒋平、徐至中编著的《固体物理学》共15章,分两部分:一部分是基础内容部分,包含晶体结构、晶体中的衍射、晶体的结合、晶格振动和晶体的热学性质、晶体中的缺陷、金属电子论和周期场中的电子态共7章内容,适合普通高等院校本科生的专业基础知识学习;另一部分为专题化研究,介绍了近几十年来固体物理学的重要发展,更加适合研究生学习。因此,本书只阐述固体物理的基础内容部分,不包含第8~15章的专题研究。

本书内容包含两个模块:一是每章节的内容概述部分,对基本概念、物

理模型和简明处理方法进行细致地介绍；二是各章节汇总整理的经典固体物理习题，阐明不同题型的解题方法和技巧。书中选取的部分题目，是教学团队在长期的实践教学和研究基础上编写而成的，有些接近实际的研究课题，在本书中也一并体现。

本书的很多内容是基于编者在长期的教学和科研工作的实践体会和积累，书中的内容也参考了大量国内外相关领域的图书和文献。引用了参考文献中的部分内容和数据，在此特向书刊作者由衷地致以谢意。在本书的撰写过程中，我们也有幸得到了很多人的帮助和支持。首先感谢华北电力大学可再生能源学院太阳能中心各位老师的帮助和指导；此外，本书是在中国水利水电出版社的大力支持下出版的，编者对于出版社各位老师的辛勤付出表示衷心地感谢。

由于编写时间仓促、水平有限，书中难免会存在不妥和不足之处，殷切希望各位专家学者和广大读者批评指正，您的指正是本书日臻完善的动力！

**编 者**

2017年4月15日

# 目录

<b>前言</b>	
<b>第一章 晶体结构</b> .....	1
➤ 学习目标 .....	1
➤ 学习内容概述 .....	1
➤ 思考题 .....	6
➤ 计算题 .....	11
<b>第二章 晶体中的衍射</b> .....	25
➤ 学习目标 .....	25
➤ 学习内容概述 .....	25
➤ 思考题 .....	30
➤ 计算题 .....	32
<b>第三章 晶体的结合</b> .....	44
➤ 学习目标 .....	44
➤ 学习内容概述 .....	44
➤ 思考题 .....	50
➤ 计算题 .....	54
<b>第四章 晶格振动和晶体的热学性质</b> .....	60
➤ 学习目标 .....	60
➤ 学习内容概述 .....	60
➤ 思考题 .....	72
➤ 计算题 .....	75
<b>第五章 晶体中的缺陷</b> .....	91
➤ 学习目标 .....	91
➤ 学习内容概述 .....	91
➤ 思考题 .....	98
➤ 计算题 .....	101
<b>第六章 金属电子论</b> .....	107
➤ 学习目标 .....	107

➤ 学习内容概述 .....	107
➤ 思考题 .....	116
➤ 计算题 .....	119
第七章 周期场中的电子态 .....	125
➤ 学习目标 .....	125
➤ 学习内容概述 .....	125
➤ 思考题 .....	134
➤ 计算题 .....	139
附录 A 常用物理常数表 .....	169
附录 B 参考符号表 .....	170
参考文献 .....	173

# 第一章 晶体结构

## ➤ 学习目标

通过本章学习，了解固体材料的分类，晶体的特性、分类及其周期性表示方法，掌握一些典型的晶体结构的周期性特征及其描述方法；了解7大晶系、14种布拉菲格子及其特征；理解和掌握晶向和晶面的表示方法及面间距的计算、晶体结构的对称性特征及其描述方法，熟悉有关晶体结构的基本分析与计算。

**本章重点难点：**晶体结构的周期性特征及其描述方法、晶体结构的对称性特征及其描述方法。

## ➤ 学习内容概述

### 一、晶体的特征

#### 1. 微观特征

固体材料按原子排列结构可以分为晶体、非晶体和准晶体。晶体是指原子按照一定的周期排列规则的固体，具有长程有序及平移对称性的特点；非晶体不具备长程有序的特点，但具有一定的短程有序特点；准晶体具有长程的取向性与准周期平移序，而无长程的平移对称性。

#### 2. 宏观特征

自限性、解理性、晶面角守恒、均匀性、各向异性、对称性、固定的熔点。

### 二、晶体结构及其描述

一个理想的晶体是由完全相同的结构单元在空间作周期性重复排列而形成的。所有晶体结构都可以用晶格来描述，这种晶格的每个格点上附有一群原子，这样的原子群称为基元，基元在空间周期性重复排列就形成晶体结构。

**点阵 + 基元 = 晶体结构**

#### 1. 晶格

晶体的内部结构可以抽象为由一些相同的几何点在空间有规则地做周期性无限排列所形成的点阵列。简而言之，晶格是晶体结构周期性的数学抽象。

在三维空间内用矢量表示格矢  $\mathbf{R}_n$  为

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

式中： $n_1$ 、 $n_2$ 、 $n_3$  为任意整数； $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$  为晶体对应原胞的基矢； $\mathbf{R}_n$  可以描述晶格中





某点的空间位置，也是晶体周期性的数学表达。

### 2. 基元

在晶体中适当选取重复排列的最小原子群作为一个**基本结构单元**，这个基本结构单元称为基元。基元在空间点阵内作周期性重复排列就形成晶体结构。

### 3. 格点

晶格中的点子代表着晶体结构中**环境相同的位置**，称为格点。格点是一种数学抽象，一个格点代表一个基元，它可以代表基元重心的位置，也可以代表基元中任意的点子。

## 三、原胞的分类

以下阐述均基于较为普遍的三维晶格，一维、二维的情况也适用。

### 1. 固体物理学原胞（简称原胞）

晶体中最小的周期性单元称为原胞。

(1) **构造方法**：选取某一格点为原点，由此点向近邻的三个格点作三个不共面的基本矢量（也称基矢） $a_1$ 、 $a_2$ 、 $a_3$ ，再以这三个矢量为边作平行六面体，即为固体物理学原胞。

(2) **特点**：格点只在平行六面体的顶角上，面上和内部均无格点，每个固体物理学原胞只包含一个基元。它是反映晶体结构周期性的最小重复单元。

注意以下两点：①原胞的选取不是唯一的，但要保证原胞体积是相等且**最小的**，并保证原胞只包含一个基元；②原胞只能**包含一个格点**，但其内部可以有原子分布（如金刚石结构）。

### (3) 原胞体积：

$$\Omega = a_1 \cdot (a_2 \times a_3)$$

### 2. 结晶学原胞（亦称单胞、晶胞、惯用晶胞）

为了反映晶体的对称性而取得的具有**较大周期**的结构单元。

(1) **构造方法**：使三个基矢的主轴尽可能地沿空间对称轴的方向。它具有明显的对称性和较大的周期性。

(2) **特点**：结晶学原胞不仅在平行六面体顶角上有格点，面上及内部亦可有格点。其体积是固体物理学原胞体积的**整数倍**。

(3) **基矢**：结晶学原胞的基矢一般用  $a$ 、 $b$ 、 $c$  表示。

### (4) 晶胞体积：

$$V = a \cdot (b \times c)$$

### 3. 维格纳-塞茨 (W-S) 原胞

(1) **构造方法**：以一个格点为原点，作原点与其他格点连线的**中垂面（或中垂线）**，由这些中垂面（或中垂线）所围成的最小体积（或面积）单元，即为 W-S 原胞。

(2) **特点**：W-S 原胞是**晶体体积的最小重复单元**，每个 W-S 原胞只包含一个格点。

(3) **体积**：与固体物理学原胞体积相同。



#### 四、晶面和密勒指数

##### 1. 晶列及晶列指数

通过晶格中任意两个格点连一条直线称为晶列，晶列的取向称为晶向，表示晶向的一组数称为晶向指数（或晶列指数），指的是相互平行的直线族。对于指数为负数的情况，则在该数上方加一横线。

##### 2. 晶面及晶面指数

在晶格中，通过任意三个不在同一直线上的格点作一平面，称为晶面，描写晶面方位的一组数称为晶面指数，指的是相互平行的晶面族。

以晶胞基矢为坐标轴来表示的晶面指数称为密勒指数，用  $(hkl)$  表示。

#### 五、配位数、密堆积、致密度

##### 1. 配位数

一个粒子周围最近邻的粒子数称为配位数。它可以描述晶体中粒子排列的紧密程度，粒子排列越紧密，配位数越大。可能的配位数有 12、8、6、4、3、2。

##### 2. 密堆积

如果晶体由完全相同的一种粒子组成，而粒子被看作小圆球，则这些全同的小圆球最紧密的堆积称为密堆积。密堆积的配位数最大为 12。密堆积有六角密积和立方密积。六角密积排列方式为  $ABAB\cdots$ ；立方密积  $ABCABC\cdots$ 。

##### 3. 致密度 $\rho$

如果把直径均为  $d$  的硬球放置在晶体结构中原子所在的位置上，球的体积取得尽可能大，以使最近邻的球相切。我们一个体积为  $V$  的晶胞中被  $n$  个硬球占据的体积和晶胞体积之比称为致密度（堆积比率或最大空间利用率）：

$$\rho = \frac{n \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{d}{2}\right)^3}{V} = \frac{\pi}{6} \cdot \frac{nd^3}{V}$$

#### 六、典型的晶体结构

常见的晶体结构见表 1-1。

表 1-1 典型晶体结构及其特征

结构型	晶胞中的原子个数	原子在晶胞中的位置	最近邻距离	配位数
fcc	4	$(000) \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right)$ $\left(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}\right) \left(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$	$\frac{\sqrt{2}a}{2}$	12
bcc	2	$(000) \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	8
CsCl	$\text{Cs}^+ : 1$ $\text{Cl}^- : 1$	$(000) \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	8



结构型	晶胞中的原子个数	原子在晶胞中的位置	最近邻距离	配位数
金刚石	8	$(000) \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right) \left(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}\right) \left(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$ $\left(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}\right) \left(\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}\right) \left(\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}\right) \left(\frac{1}{3} \frac{3}{4} \frac{3}{4}\right)$	$\frac{\sqrt{3}a}{4}$	4
NaCl	Na <sup>+</sup> : 4 Cl <sup>-</sup> : 4	$(000) \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right) \left(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}\right) \left(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$ $\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} 0 0\right) \left(0 \frac{1}{2} 0\right) \left(0 0 \frac{1}{2}\right)$	$\frac{a}{2}$	6

## 七、晶体的对称性

### 1. 对称操作

一个晶体在经某一变换后，晶格中格点在空间的分布保持不变，这一变换称为对称操作。一个晶体的对称操作数目越多，其对称性越高。

对称操作分为两类：平移对称操作和点对称操作。

### 2. 点群对称操作的性质

(1) 必须具有不变操作。

(2) 如果具有两个对称操作 A 和 B，则这两个相继连续操作的组合仍为一个对称操作。

(3) 如果 A 为对称操作，其逆操作也是对称操作。

(4) 如果 A、B、C 为对称操作，则先操作 C 后 A 与 B 的组合与先操作 B 与 C 的组合再操作 A 的效果一致。

这些性质与数学中群的性质相符。因此，常用对称群来描述晶体的性质。由于晶体的所有宏观对称操作都不改变一个特殊点的位置，常称宏观对称性为晶体的点群，晶体点群有 32 种。

### 3. 独立的对称操作

独立的对称操作共有如下 8 种：

**5 种旋转对称操作：**1、2、3、4、6 度旋转对称操作，常用  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$ 、 $C_4$ 、 $C_6$  表示。

**中心反映 (1 种)：**用  $i$  表示。

**镜像反映 (1 种)：**用  $m$  表示。

**4 度旋转反演轴 (1 种)：**用  $\bar{4}$  或  $S_4$  表示。

用这 8 种独立的对称操作任意组合，构成 32 种不重复的组合操作。这是晶体可以分为 32 个点群的直接依据。

### 4. $n$ 度螺旋轴和滑移反映面

独立对称操作加上  $n$  度螺旋轴和滑移反映面组成 230 种空间群。

## 八、7 大晶系和 14 种布拉菲格子

**晶系：**在结晶学中把晶胞基矢  $a$ 、 $b$ 、 $c$  满足同一类要求的一种或数种布拉菲格子称为



一个晶系。4种基本布拉菲格子及其晶胞中的格点数见表1-2。

表 1-2 4种基本布拉菲格子及其晶胞中的格点数

名称	简式格子	底心格子	体心格子	面心格子
晶胞中的格点数	1	2	2	4

但由于晶体对称性的限制，并非每一晶系都含有这4种布拉菲格子。共有7大晶系，其中包含14种布拉菲格子。晶系的选取方法由晶胞基矢及其夹角确定，晶系与布拉菲晶胞见表1-3与图1-1。

注：需要强调的是，布拉菲格子种类的划分是基于对称性。因此可以说“在反映对称性的前提下，有且仅有14种布拉菲格子”。

表 1-3 晶系与布拉菲晶胞

晶系	晶胞特征	布拉菲晶胞
三斜晶系	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$	简单三斜
单斜晶系	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	简单单斜、底心单斜
三角晶系	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ < 120^\circ$	简单三角
正交晶系	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单正交、底心正交、体心正交、面心正交
四角晶系	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单四角、体心四角
六角晶系	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	简单六角
立方晶系	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单立方、体心立方、面心立方

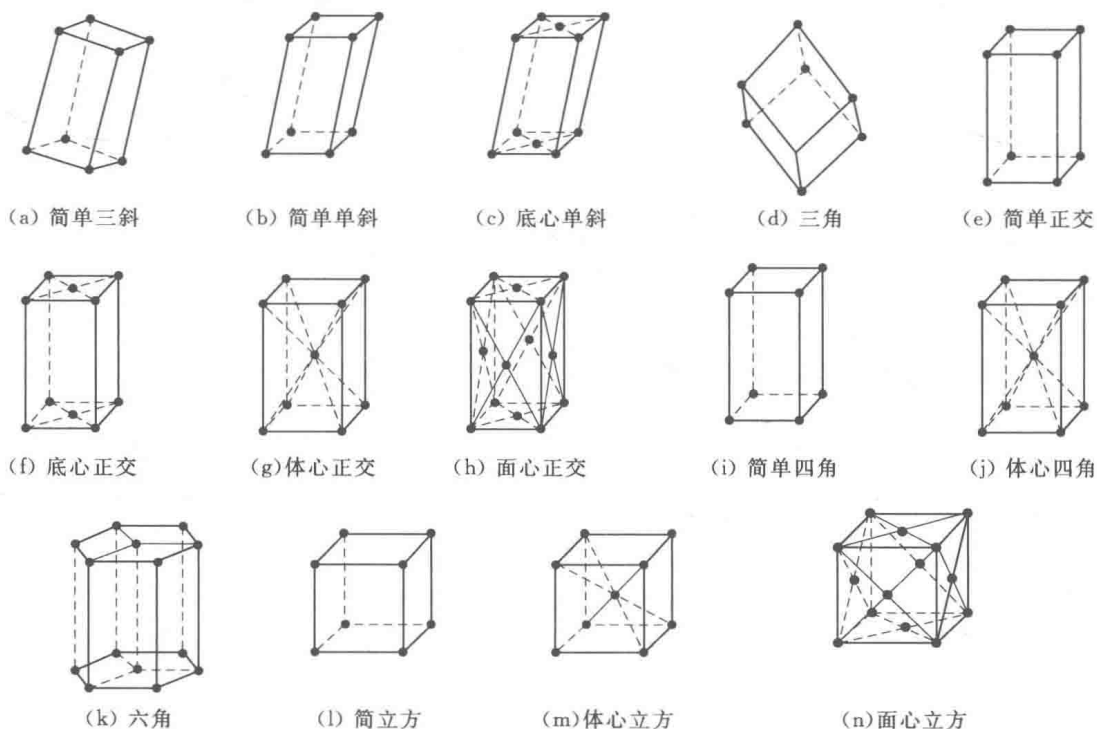


图 1-1 14种布拉菲格子的晶胞



本章内容涉及非常多的基本概念，常以名词解释的形式出现。因此，编者将很多概念以思考题的形式呈现出来，希望能启发读者思考并加深理解。

## ► 思考题

### 1-1 试述晶体、非晶体、准晶体、多晶体和单晶体的特征性质。

答：晶体材料中的原子有规律的周期性排列，或称为**长程有序**；非晶体材料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**。准晶体是介于晶体和非晶体之间的固体材料，其特点是具有**长程取向序**，但不具有平移周期性。

另外，晶体又分为单晶体和多晶体：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而成的。

### 1-2 什么是原胞与晶胞？各自按晶体的什么特性选取的？

答：原胞与晶胞：晶体中最小的周期性单元称为原胞（以平移周期性出发选取的最小单元）；为了反映晶体的对称性而取得具有较大周期性的单元，称为结晶学原胞，简称晶胞，亦称单胞。因此，**原胞**选取的原则是考虑晶体的**周期性**；而**晶胞**选取的原则是同时考虑晶体的**周期性与对称性**。

### 1-3 分别阐述结点和基元的概念，并分析二者间的关系与区别。

答：晶体学上常用一些相同的点子代表晶体结构中周围环境和附近原子相同的位置。这样的几何点称为**结点**。这是一种针对晶体结构的数学抽象。在晶格中结点也被称为**格点**。

晶体的基本结构单元被称为**基元**。一般基元内含有一种或一种以上的原子，因此，基元反映了晶体实际的基本结构，而非数学抽象。

**二者的区别**：结点是一种数学抽象，而基元是反映了晶体实际的基本结构。

**二者的联系**：

(1) 结点与基元是一一对应的。

(2) 结点可以取基元的重心，也可以取在基元的其他点上，只要保持结点在各基元中的位置都相同即可。因此，每个结点周围的情况都相同。

(3) 结点的周期性，代表了基元的周期性。

### 1-4 分别阐述布拉菲格子、简单格子、复式格子的概念，并分析三者间的区别。

答：晶体的内部结构可以视为由一些相同的点在空间有规则地作周期性的无限分布，这些点的总体称为**布拉菲点阵**。布拉菲点阵是对实际晶体结构的**数学抽象**。

**晶格**：沿三个不同方向通过布拉菲点阵中的阵点作平行的直线系将所有阵点包括无遗，点阵便构成一个三维网格。这种三维网格就是**布拉菲格子**，也称**晶格**。

在格点处安置基元，即考虑了晶体的**真实结构**。可以依据基元所包含的原子，划分出简单格子和复式格子。晶格点阵与实际晶体结构的关系可总结为：**晶格点阵+基元=实际晶体结构**。

如果晶体的基元仅含有一种原子，称这种格子为**简单格子**。由于基元中只有一种原子时，可以认为格点全同，因此也常常将简单格子称为**布拉菲格子**。



如果晶体的基元含有两种或两种以上原子（可以是不同元素的原子，也可以是同种元素但周围化学环境不同的原子，如金刚石的基元），每种原子组成一个简单格子，错开一定的距离套构在一起，由此组成的格子称为**复式格子**。

简单格子与复式格子的基本区别是：简单格子中每个原子或者离子都是等价的，复式格子在晶体结构中有不等价的原子或离子。

三者的联系是：简单格子与复式格子都有自己的布拉菲格子。

### 1-5 什么是结点和晶格？晶格和晶体有什么不同？

答：晶格中的点代表着晶体结构中相同的位置，称为**结点**，这是一种数学上的抽象。

**晶格**：点阵连成的网格，也是一种数学抽象。

**晶体与晶格**：晶体是原子、离子或分子按照一定的周期性在空间排列，在结晶过程中形成具有一定规则的几何外形的固体；晶体内部结构中的质点（原子、离子或分子）有规则地在三维空间呈周期性重复排列，组成一定形式的晶格。

### 1-6 怎样简单地表示晶列和晶面？什么是密勒指数？为什么六角密排用 $(hk\ell m)$ 表示？

答：通过晶格中任意两个格点连一条直线称为**晶列**，晶列的取向称为**晶向**，表示晶向的一组数称为**晶向指数**（或**晶列指数**），如  $[100]$ 、 $[110]$ 、 $[111]$  等。

在晶格中，通过任意三个不在同一直线上的格点作一平面，称为**晶面**，描写晶面方位的一组数称为**晶面指数**。以晶胞基矢  $a$ ， $b$ ， $c$  为坐标轴来表示的晶面指数，称为**密勒指数**。

对于六角晶体，由于其六角面上的特殊对称性，通常采用**四个晶胞基矢**，晶面指数也相应地相对于这四个基矢标定，于是六角密排面用  $(hk\ell m)$  表示。

### 1-7 金刚石是碳原子组成的，为什么是复式格子？

答：在金刚石晶胞中，由于位于四面体中心的 C 原子和顶角 C 原子价键的取向各不相同（即中心原子和顶角原子周围的情况不同），所以是复式格子，这种复式格子是两个面心立方布拉菲格子套构而成的。

### 1-8 什么是晶系？它有哪些种？各种晶系有几种布拉菲格子？根据对称性，共有多少种点群和空间群？

答：**晶系**：在结晶学中把晶胞基矢  $a$ ， $b$ ， $c$  满足同一类要求的一种或数种布拉菲格子称为一个晶系。按晶胞划分，共有 7 大晶系，分别为三斜晶系、单斜晶系，三角晶系、正交晶系、四角晶系（正方晶系）、六角晶系、立方晶系。

三斜晶系包含简单三斜一种布拉菲格子；单斜晶系包含简单单斜和底心单斜两种布拉菲格子；三角晶系包含三角一种布拉菲格子；正交晶系包含简单正交、底心正交、体心正交和面心正交四种布拉菲格子；四角晶系（正方晶系）包含简单四角和底心四角两种布拉菲格子；六角晶系包含六角一种布拉菲格子；立方晶系包含简单立方、面心立方、体心立方三种布拉菲格子。共计 14 种布拉菲格子。

结合对称性，晶体学中共划分出 32 点群和 230 种空间群。

### 1-9 什么是密堆积，配位数，致密度？六角密排和金刚石结构的配位数各是多少？

答：**密堆积**：如果晶体由完全相同的一种粒子组成，而粒子被看作小圆球，则这些全



同的小圆球最紧密的堆积称为密堆积。

**配位数**：一个粒子周围最近邻的粒子数称为配位数。它可以描述晶体中粒子排列的紧密程度，粒子排列越紧密，配位数越大。

**致密度**：把晶胞内的粒子看成全同且相切的硬球，晶胞内硬球所占体积与晶胞体积之比称为致密度（堆积比率或最大空间利用率）。

根据表 1-1 可知，六角密堆积的配位数是 12，金刚石结构的配位数是 4。

**1-10 什么是解理面？解理面是指晶面指数低的晶面还是晶面指数高的晶面？为什么？**

**答**：晶体均有按固定晶面劈裂的性质，该劈裂面称之为解理面。解理面一般是指晶面指数低的晶面，这是因为既然晶体容易沿解理面劈裂，说明平行于解理面的原子之间的结合力弱，即平行于解理面的原子间距大。以正交晶系的晶面间距公式为例，晶面指数为  $(hkl)$  的晶面间距为

$$d_{hkl} = \left[ \left( \frac{h}{a} \right)^2 + \left( \frac{k}{b} \right)^2 + \left( \frac{l}{c} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}$$

很显然，晶面指数越低， $h, k, l$  的值越小，晶面间距越大，平行于解理面的原子之间的结合力越弱。所以解理面一般是晶面指数低的晶面。

**1-11 什么是晶体的对称性和对称操作？晶体有哪几种对称操作？怎样判断一个体系对称性的高低？**

**答**：**晶体对称性**：根据晶体的对称元素进行对称操作，能使其等同部分产生规律性的重合特性称之为晶体的对称性。

**对称操作**：使一个晶体在经某一变换后，晶格中格点在空间的分布保持不变，这一变换称为对称操作。晶体中允许的旋转对称轴只能是 1、2、3、4、6 度旋转对称轴。

对称性可用体系所有的对称操作的集合来描述，一个体系可具有的对称操作越多，其对称性就越高。

**1-12 为什么在对称元素中，只有  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$ 、 $C_4$ 、 $C_6$ 、 $i$ 、 $m$  及  $S_4$  是独立的，其他结构都不是独立的？晶体学点群共有多少个？**

**答**：在晶体的对称性操作中，独立的对称操作共有 8 种，分别为  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$ 、 $C_4$ 、 $C_6$ 、 $i$ 、 $m$  及  $S_4$ 。而其余的对称性操作，都可以由这 8 种操作中任意组合完成，在不考虑平移对称性时，晶体的对称性操作有 32 种，即晶体可分为 32 个点群。

**1-13 六角密积属何种晶系？一个晶胞包含几个结点？几个原子？一个原胞包含几个结点？几种原子？其配位数为多少？**

**答**：六角密积属于六角晶系，一个晶胞包含三个结点，六个原子；一个原胞包含两种原子，一个结点。配位数为 12。

**1-14 晶面指数为  $(123)$  的晶面  $ABC$  是离原点  $O$  最近的晶面， $OA$ 、 $OB$  和  $OC$  分别与基矢  $a_1$ 、 $a_2$ 、 $a_3$  重合，除  $O$  点外， $OA$ 、 $OB$  和  $OC$  上是否有格点？若  $ABC$  面的指数为  $(234)$ ，情况又如何？**

**答**：根据密勒指数的定义，晶面指数为  $(123)$  晶面族中离原点  $O$  最近的晶面  $ABC$  在原胞基矢  $a_1$ 、 $a_2$ 、 $a_3$  上的截距分别为  $a$ 、 $\frac{a}{2}$ 、 $\frac{a}{3}$ ，其中  $a$  为晶格常数。所以只有  $A$  点



是格点。

若  $ABC$  面的指数为  $(234)$  的晶面族，则  $A$ 、 $B$  和  $C$  都不是格点。

**1-15** 请问晶面  $(\bar{2}10)$ 、 $(\bar{1}11)$  和  $(012)$  是否属于同一晶带？若是同一晶带，其带轴方向的晶列指数是什么？

答：由晶带的性质“若晶面属于同一晶带，则由它们构成的行列式值为 0”可知，求出晶面  $(\bar{2}10)$ 、 $(\bar{1}11)$  和  $(012)$  所构成的行列式的值即可。

$$\begin{vmatrix} -2 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{vmatrix} = 0$$

因此晶面  $(\bar{2}10)$ 、 $(\bar{1}11)$  和  $(012)$  属于同一晶带。

晶带中任意两晶面的交线方向即是带轴的方向。设带轴方向的晶列指数为  $[l_1 l_2 l_3]$ ，则

$$l_1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = 1, \quad l_2 = \begin{vmatrix} 0 & \bar{2} \\ 1 & \bar{1} \end{vmatrix} = 2, \quad l_3 = \begin{vmatrix} \bar{2} & 1 \\ \bar{1} & 1 \end{vmatrix} = -1$$

故带轴方向的晶列指数为  $[12\bar{1}]$ 。

**1-16** 带轴为  $[001]$  的晶带各晶面，其晶面指数有何特点？

答：由带轴和晶带定义可知，带轴为  $[001]$  的晶带各晶面平行于  $[001]$  方向，即各晶面平行于原胞坐标系的  $a_3$  轴或晶胞坐标系的  $c$  轴，在该轴的截距为 0。根据密勒指数定义，各晶面的晶面指数形式为  $(hk0)$ ，即第三个数字一定为 0。

**1-17** 体心立方结构的晶体中， $[111]$  方向上的结晶学周期为多大？实际周期为多大？

答：在结晶学中，晶胞基矢为  $a$ 、 $b$ 、 $c$ ，只考虑由格矢  $R_1 = l_1 a_1 + l_2 a_2 + l_3 a_3$  构成的格点。因此，体心立方结构  $[111]$  方向上的结晶学周期为  $\sqrt{3}a$ 。但实际周期为  $\sqrt{3}a/2$ ，因为体心位置有原子。

**1-18** 面心立方结构的晶体中最小的晶列周期为多大？该晶列在哪些晶面内？

答：周期最小的晶列一定在原子面密度最大的晶面内。根据密堆积模型，则原子面密度最大的晶面就是密排面。在面心立方结构晶体中， $\{111\}$  是一个密排晶面族，最小晶列周期为  $\frac{\sqrt{2}a}{2}$ 。根据晶面族的性质，周期最小的晶列处于  $\{111\}$  族的晶面内。

**1-19** 氯化钠与金刚石型结构是复式格子还是布拉菲格子，各自的基元是什么？写出这两种结构的原胞与晶胞基矢，设晶格常数为  $a$ 。金刚石是碳原子组成的，为什么是复式格子？画出氯化钠晶体的结点所构成的布拉菲格子。

答：氯化钠与金刚石型结构都是复式格子。氯化钠的基元是由一个  $\text{Na}^+$  和一个  $\text{Cl}^-$  组成的离子对；金刚石的基元是由面心立方顶点的一个 C 原子和体对角线  $\frac{1}{4}$  处的一个 C 原子组成的一个 C 原子对。

氯化钠与金刚石的布拉菲格子均为面心立方晶格，设沿立方边的单位矢量分别为：





$i, j, k$ 。所以其原胞基矢写为

$$a_1 = \frac{a}{2}(j+k), \quad a_2 = \frac{a}{2}(k+i), \quad a_3 = \frac{a}{2}(i+j)$$

其晶胞基矢为

$$a = ai, \quad b = aj, \quad c = ak$$

金刚石晶胞中由于位于四面体中心的原子和顶角原子价键的取向各不相同（即中心原子和顶角原子周围的情况不同），所以是复式格子，这种复式格子是两个面心立方格子套构而成的。

氯化钠结构：面心立方  $\text{Na}^+$  布拉菲格子和面心立方  $\text{Cl}^-$  的布拉菲格子套构而成的复式格子，其布拉菲格子如图 1-2 所示。

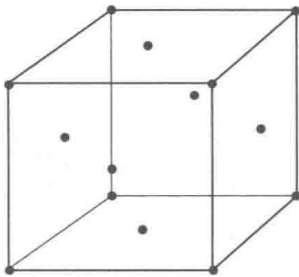


图 1-2 氯化钠的布拉菲格子

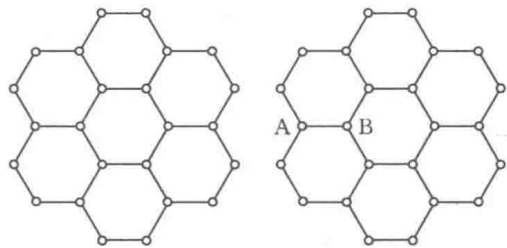


图 1-3 石墨层中碳原子的六角网状结构

**1-20** 石墨层中的碳原子排列成如图 1-3 所示的六角网状结构，试问它是简单格子还是复式格子？为什么？并说明这一结构所对应的二维布拉菲点阵。

答：石墨层中原子排成的六角网状结构是复式格子。因为上右图中相邻点 A 和点 B 的格点在晶格结构中所处的地位不同，并不完全等价，平移  $A \rightarrow B$  后，晶格结构不能完全复原（六边形中心没有原子）。

很显然，石墨结构对应的布拉菲格子是二维六角格子，并且是由两个六角格子套构而成的复式格子。一个原胞内包含两个碳原子。

**1-21** 在空间直角坐标系中，若其平移周期性满足矢量  $R_i = l_1 i + l_2 j + l_3 k$ ，其中  $i, j, k$  为单位矢量，且  $l_i (i=1, 2, 3)$  为整数。问下列情况属于什么点阵：

(1) 当  $l_i$  为全奇或全偶时。

(2) 当  $l_i$  之和为奇数或偶数时。

(3) 当  $l_i$  之和为奇数的位置上有负离子， $l_i$  之和为偶数的位置上有正离子时。

答：不妨取一晶格常数为 1 的简单立方原胞（图 1-4），即

$$|a_1| = |a_2| = |a_3| = 1$$

根据晶体的平移周期性，可知晶格中的格点都可用如下正格矢表示：

$$\begin{aligned} R_i &= l_1 a_1 + l_2 a_2 + l_3 a_3 \\ &= l_1 i + l_2 j + l_3 k \end{aligned}$$

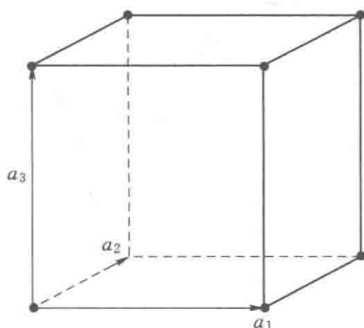


图 1-4 简立方的原胞结构