

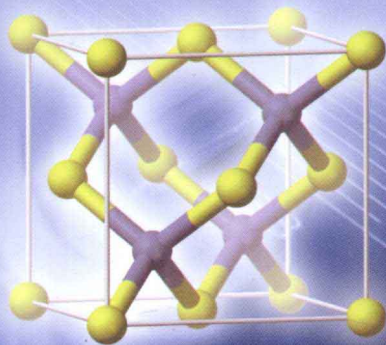


普通高等教育“十一五”国家级规划教材

固体物理学

第2版

胡安 章维益



高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS



普通高等教育“十一五”国家级规划教材

固体物理学

Guti Wulixue

第2版

胡安 章维益



高等教育出版社·北京
HIGHER EDUCATION PRESS BEIJING

内容简介

本书是普通高等教育“十一五”国家级规划教材,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。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。本次修订在保持第一版的结构框架和理论体系的基础上,增加了双交换、布洛赫电子平均速度的推导、铁磁体外场磁化过程等内容,统一了全书的数学符号和公式表达并更换了部分插图。

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, 章维益编. —2 版. —北京:
高等教育出版社, 2011.1

ISBN 978 - 7 - 04 - 030998 - 0

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

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2010)第 246114 号

策划编辑	马天魁	责任编辑	张海雁	封面设计	张 志
责任绘图	尹 莉	版式设计	王艳红	责任校对	杨凤玲
责任印制	毛斯璐				

出版发行 高等教育出版社
社 址 北京市西城区德外大街 4 号
邮政编码 100120

购书热线 010-58581118
咨询电话 400-810-0598
网 址 <http://www.hep.edu.cn>
<http://www.hep.com.cn>

经 销 蓝色畅想图书发行有限公司
印 刷 国防工业出版社印刷厂

网上订购 <http://www.landrac.com>
<http://www.landrac.com.cn>
畅想教育 <http://www.widedu.com>

开 本 787 × 960 1/16
印 张 24.25
字 数 450 000

版 次 2005 年 12 月第 1 版
2011 年 1 月第 2 版
印 次 2011 年 1 月第 1 次印刷
定 价 37.70 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 30998-00

第二版序言

本书自 2005 年初版问世以来,受到国内读者和同行的关注,先后被南京大学物理系、材料系、强化部和国内部分高校采用,对大学本科学生进行授课,谨此深表谢意!在教学过程中,我们发现,由于出版仓促,原书存在诸多印刷错误,一些数学公式的符号选择不统一,个别基本概念的阐述也值得进一步推敲。为此,我们一直深表不安,经与高等教育出版社商榷,利用这次再版机会,对本书进行全面修正。

我们一向认为,编写基础物理学的教科书,一项起码的要求是,内容必须精练,基本概念和理论阐述必须准确明了。但是,能做到这些绝不是件轻而易举的事情。在这次修订中,我们基本上保留了原书的结构框架和理论体系,只是增加了诸如双交换、布洛赫电子平均速度的推导、铁磁体外场磁化过程等少量内容;统一了全书的数学符号和公式表达;更换了部分插图;修正了已发现的印刷错误。希望本书能以新的面貌与读者见面。

中科院物理所曹则贤教授仔细阅读了原书,提出了不少中肯的修改意见,南京大学 2004 级王喆同学对原书进行了细致的勘误。在新版的文字处理和插图修改方面得到孙亮博士、丁海峰教授、游彪副教授、杜军教授和艾金虎同学的热情帮助。高等教育出版社的编辑们也付出了辛勤的劳动。在此一并表示深切的感谢。由于作者水平有限,本书虽几经校勘,不妥和错误之处仍恐难免,如蒙教正,幸甚,幸甚。

胡 安 章维益

2010 年 11 月

第一版序言

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”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。格波在周期结构中的传播导致晶格动力学,德布罗意波在周期结构中的传播导致能带论,这些情况也包括自旋波和电磁波等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,一直到费米能为止,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。

固体物理学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、表面和界面等等)以及由于无序导致的局域化问题,并不作全面的论述,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作简单讨论。至于窄能带系统中电子关联导致的金属-绝缘体相变等问题,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费斟酌。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八章。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,目的是为了使学困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,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、晶面指数与密勒指数	14
§ 1.3 倒点阵	14
一、点阵傅里叶变换 倒点阵	15
二、倒点阵的性质	17
§ 1.4 晶体的宏观对称性	20
一、宏观对称性的描述	21
二、平移对称性对宏观对称性的限制	22
三、实例	25
四、晶体的宏观对称性与宏观物理性质	26
§ 1.5 晶体点阵和结构的分类	28
一、群的概念	28
二、7个晶系和14种点阵	29
三、晶体结构的32种点群和230种空间群	36
§ 1.6 晶体X射线衍射	39
一、布拉格反射公式	39
二、劳厄方程	40
三、原子散射因子与几何结构因子	43
四、埃瓦尔德构造图法与三种重要的X射线晶体学分析方法	48
§ 1.7 准晶体	50
一、一维准周期点阵	52
二、投影理论及其衍射谱	53

第二章 晶体的结合	58
§ 2.1 原子的负电性	59
一、原子的电离能	59
二、原子的亲和能	59
三、原子的负电性	59
§ 2.2 晶体结合的类型	60
一、金属键结合	60
二、共价键结合	61
三、离子键结合	64
四、范德瓦耳斯键结合	65
五、氢键结合	67
六、混合键结合	68
§ 2.3 结合能	71
一、内能函数与结合能	71
二、离子晶体的结合能	72
三、惰性气体晶体的结合能	75
第三章 晶格动力学和晶体的热学性质	78
§ 3.1 简正模和格波	79
一、微振动理论——简正模	79
二、格波	82
§ 3.2 一维单原子链振动	83
一、运动方程及其解	83
二、格波特性	84
三、玻恩-冯卡门边界条件	86
四、简正坐标	88
§ 3.3 一维双原子链振动	90
一、运动方程及其解	90
二、声学波和光学波	91
三、玻恩-冯卡门边界条件	93
§ 3.4 三维晶格振动 格波量子——声子	93
一、三维晶格振动	94
二、格波量子——声子	96
§ 3.5 离子晶体中的长光学波	99
一、离子晶体中长光学晶格振动产生的内场	99
二、长光学波的宏观运动方程	100

三、离子晶体长光学波的本征频率 ω_{TO} 和 ω_{LO}	102
四、极化激元	104
§ 3.6 非完整晶格的振动 局域模	108
一、一维完整单原子链的扩展模式	108
二、含单个缺陷的一维原子链的振动频率	110
三、局域模	112
§ 3.7 晶格比热容	115
一、声子态密度	115
二、爱因斯坦模型和爱因斯坦比热容	118
三、德拜模型和德拜比热容	119
§ 3.8 晶格状态方程和热膨胀	123
一、自由能和格林艾森状态方程	123
二、热膨胀及其格林艾森关系	125
三、热膨胀与非谐效应	126
第四章 能带论	129
§ 4.1 布洛赫定理和布洛赫波	130
一、平移算符 周期场中单电子状态的标志	130
二、布洛赫定理和布洛赫波	133
三、布洛赫波能谱特征	134
§ 4.2 平面波法	137
§ 4.3 近自由电子近似	140
一、零级近似	140
二、非简并微扰	141
三、简并微扰	142
四、布里渊区、能带、能隙和禁带	143
五、能隙的成因	146
六、简约波矢 $\vec{k}$ 和自由电子的波矢 k	148
七、能带的能区图式	149
§ 4.4 紧束缚近似	152
一、万尼尔函数	152
二、紧束缚近似	153
§ 4.5 正交平面波法	156
§ 4.6 赝势方法	159
§ 4.7 能带电子态密度	162
一、自由电子的能态密度	162

二、能带电子的能态密度	164
§ 4.8 布洛赫电子的动力学性质	165
一、准经典近似	166
二、波包在外场中的运动 布洛赫电子的准动量	169
三、加速度和有效质量	171
四、准经典近似的物理含义	173
§ 4.9 布洛赫电子在恒定电场中的准经典运动	173
一、恒定电场下的动力学	173
二、碰撞、弛豫时间、金属电导率公式	175
三、满带电子不导电	176
四、近满带和空穴	177
五、导体、绝缘体和半导体的能带特征	178
§ 4.10 布洛赫电子在恒定磁场中的准经典运动	179
一、恒定磁场下的动力学	179
二、轨道量子化	183
§ 4.11 布洛赫电子在相互垂直的恒定电场和磁场中的运动	186
一、霍耳效应和磁致电阻	186
二、双能带模型下的霍耳效应和磁致电阻	189
§ 4.12 能带论的局限性	193
一、电子之间的关联效应	193
二、无序系统中波的局域化	195
第五章 金属电子论	198
§ 5.1 费米分布函数和自由电子气比热容	198
一、费米分布函数	198
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	198
三、激发态 ($T \neq 0\text{ K}$) 时, 自由电子气的化学势 $\mu(T)$	200
四、自由电子气的比热容	202
§ 5.2 金属的费米面	205
一、金属费米面的构造 哈里森构图法	205
二、实际金属的费米面	207
§ 5.3 费米面的实验测定	209
一、回旋共振	209
二、德哈斯-范阿尔芬效应	211
§ 5.4 输运现象	214
一、非平衡分布函数	214

二、玻耳兹曼方程	216
§ 5.5 金属的电导率	218
一、弛豫时间近似	218
二、电导率公式	219
§ 5.6 弛豫时间 $\tau(k)$ 与碰撞概率 $\theta(k, k')$ 的关系	221
§ 5.7 电子-声子相互作用与金属电阻率	223
一、随时间变化的微扰势	223
二、散射概率 $\theta(k, k')$	224
三、电阻率的温度关系	227
§ 5.8 等离激元与准电子	229
一、等离激元	229
二、电子气的个别激发	231
三、静电屏蔽 准电子	232
四、等离子体中的横振动	234
第六章 半导体电子论	236
§ 6.1 半导体的基本特征和分类	236
一、本征半导体	236
二、杂质半导体	237
三、半导体的带隙	238
四、激子	241
§ 6.2 半导体带边的能带结构和有效质量	244
一、能带计算的 $k \cdot p$ 方法	244
二、回旋共振实验	249
§ 6.3 半导体中载流子的浓度	251
一、半导体中载流子的统计分布	251
二、载流子浓度	251
三、化学势的确定	252
四、半导体中载流子的简并	255
§ 6.4 接触效应	256
一、pn 结	256
二、金属-半导体结	260
三、MOS 结和 MOS 晶体管	264
§ 6.5 半导体中载流子的输运问题	266
一、电导率	266
二、霍尔效应	269

三、量子霍尔效应	270
第七章 固体磁性	274
§ 7.1 原子磁性及外场响应	275
一、轨道磁矩、自旋磁矩和原子磁矩	275
二、洪德定则	277
三、原子在外磁场下的响应	279
§ 7.2 抗磁性	280
§ 7.3 顺磁性	282
一、居里定律	282
二、理论的局限性	286
§ 7.4 载流子的磁性	292
一、自由电子气的泡利顺磁性	292
二、自由电子气的朗道抗磁性	294
三、非简并载流子的顺磁性和抗磁性	296
§ 7.5 铁磁性	297
一、实验事实	297
二、分子场理论	298
三、自发磁化的局域电子模型	300
四、铁磁体在外场下的磁化过程	302
§ 7.6 铁磁自旋波	306
一、平均场近似的困难	306
二、铁磁自旋波	309
§ 7.7 铁磁金属自发磁化的巡游电子模型	313
§ 7.8 自旋相关输运	315
一、电子隧穿电导	315
二、自旋极化	316
三、电子的自旋相关隧穿电导	317
四、自旋阀结构	318
§ 7.9 反铁磁性	320
一、实验事实	320
二、反铁磁性的奈耳理论	322
§ 7.10 超交换作用和双交换作用	326
一、安德森的反铁磁超交换作用	326
二、齐纳的铁磁双交换作用	327
第八章 超导电性	330

§ 8.1 超导体的基本物理性质	331
一、超导体的输运性质	331
二、超导体的磁学性质	333
三、超导体的热力学性质	334
四、同位素效应	335
§ 8.2 超导电性的物理机制与理论	336
一、超导电性的物理起源	336
二、Gorter 和 Casimir 的二流体模型	339
三、London 唯象理论模型	341
四、Pippard 非局域理论扩展	343
五、Ginzburg - Landau 理论	345
§ 8.3 超导弱连接和宏观量子效应	349
一、约瑟夫森效应	349
二、超导量子干涉仪	353
§ 8.4 超导电性的展望	354
习题选编	356
主要参考书	370

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,形状不变。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,无序固体中粒子的分布与气体和液体相似,具有高度的对称性,物理性质各向同性。

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,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罕见的结构,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。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。

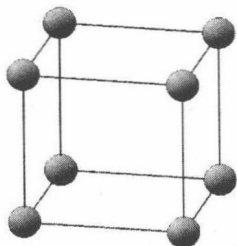


图 1-1-1 sc 晶体结构

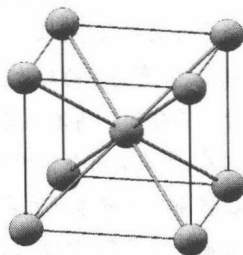


图 1-1-2 bcc 晶体结构

(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,可以定义堆积密度 f 为原子球的体积与其所占据的有效空间体积之比。简单立方结构和体心立方结构的堆积密度分别为 $f=\pi/6$ 、 $\sqrt{3}\pi/8$ 。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 $\cdots ABCABC \cdots$ 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

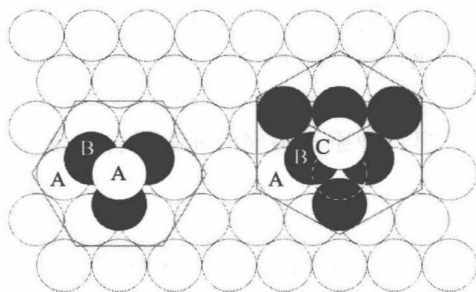


图 1-1-3 密堆面

了弄清密排面与堆积方向,图中用阴影表示密排面,堆积方向沿立方体体对角线方向。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, $f = \sqrt{2}\pi/6$ 。很多金属,例如 Cu、Ag、Au、Al、Ni 等晶体具有面心立方晶体结构。

如果按照 $\cdots ABABAB \cdots$ 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,配位数为 12, $f = \sqrt{2}\pi/6$ 。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 位原子构成的三角形取向相差 180° ,因此这种结构中 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。

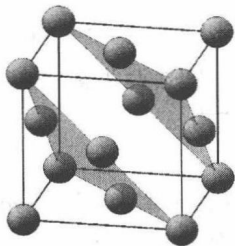


图 1-1-4 fcc 晶体结构,阴影表示密排面

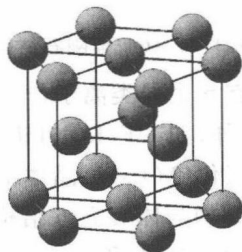


图 1-1-5 hcp 晶体结构

(4) 金刚石结构

金刚石晶体由碳原子组成。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,另两个处于剩下两条空间对角线 $3/4$ 处,这种原子的排列方式称为金刚石结构。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。虽然它们都是碳原子,但是每类原子都处于另一类原

子构成的正四面体的中心,两类四面体的取向相差 90° 。金刚石结构的配位数为 4, $f = \sqrt{3}\pi/16$ 。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。

(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

$$\text{Cl}^-: (0 \ 0 \ 0), \left(\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 0\right), \left(\frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{2}\right), \left(0 \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}\right);$$

$$\text{Na}^+: \left(\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}\right), \left(0 \ 0 \ \frac{1}{2}\right), \left(0 \ \frac{1}{2} \ 0\right), \left(\frac{1}{2} \ 0 \ 0\right).$$

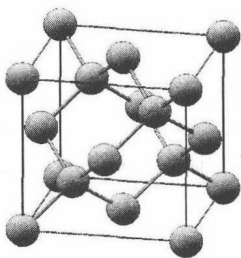


图 1-1-6 金刚石结构

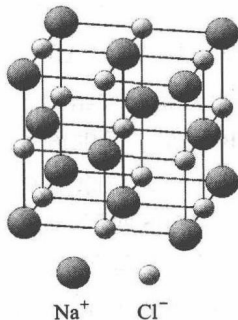


图 1-1-7 NaCl 结构

每个离子有 6 个异类离子作为最紧邻,配位数为 6。显然两类离子是不等价的。除了 NaCl 外,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。

(7) 闪锌矿结构

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,就得到闪锌矿结构。每种离子位于异类离子构成的正四面体中心,配位数为 4。其他具有闪锌矿结构的晶体例子有 ZnS、CuF、CuCl、AgI、ZnSe 等。