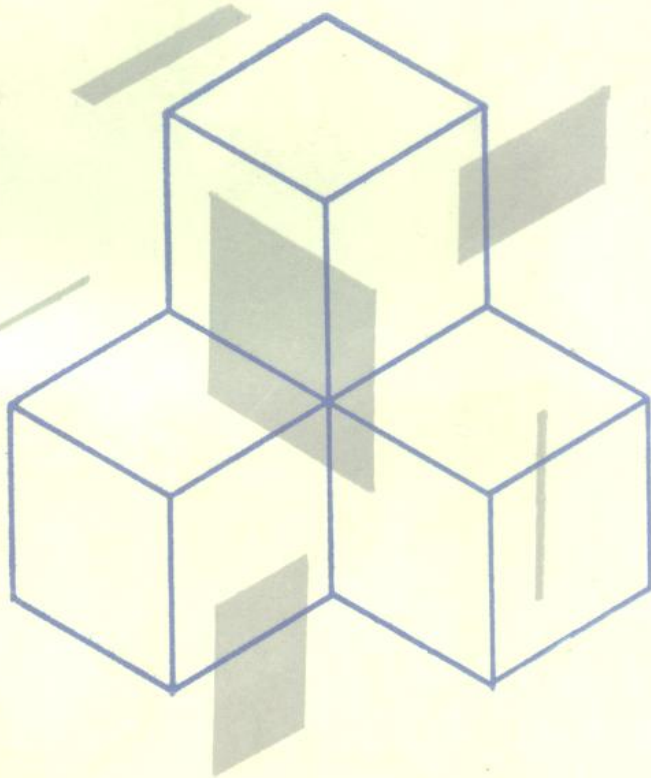


现代晶体学

第一卷

Б. К. 伐因斯坦 著 吴自勤 译



中国科学技术大学出版社

现代晶体学

(第一卷)

[苏] B.K. 伐因斯坦 著

吴自勤 译

中国科学技术大学出版社

1990·合肥

Б. К. Вайнштейн

Современная Кристаллография (Том Первый)

Издательство «Наука», Москва, 1979

Modern Crystallography I

Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1981

现代晶体学(第一卷)

[苏] Б. К. 伐因斯坦 著

吴自勤 译

责任编辑: 伍传平 封面设计: 王瑞荣

*

中国科学技术大学出版社出版

(安徽省合肥市金寨路96号)

中国科学院开封印刷厂印刷

安徽省新华书店发行

*

开本: 850 × 1168/32 印张: 12.75 字数: 341千

1990年6月第1版 1990年6月第1次印刷

印数: 1—2500册

ISBN7-312-00140-8/O·60 定价: 8.00元

54.9
4.1

译者序

Б.К.伐因斯坦是苏联科学院院士,苏联科学院晶体学研究所所长。他是一位国际上知名的晶体学学者。他的《电子衍射结构分析》(俄文版出版于1956年,英文版出版于1964年)早在50年代就在我国流传。他在60年代至80年代单独或和其他学者合作出版了不少专著和发表了许多综述论文。这些著作中最著名的是由他主编的《现代晶体学》这部四卷巨著。

《现代晶体学》第一卷(晶体对称性、结构晶体学方法)、第二卷(晶体结构)、第三卷(晶体生长)和第四卷(晶体的物理性质)的俄文版分别于70年代末至80年代初出版。英文版作为Springer固态科学丛书中的第15卷、第21卷、第36卷、第37卷出版于80年代初期和中期。

正如伐因斯坦院士在前言中说的那样,《现代晶体学》的作者们把晶体学看成一门统一的学科,它和不少其他苏联著作一样,内容系统而且丰富,理论和实验研究方法并重,很有参考价值。

这里出版的《现代晶体学(第一卷)》根据俄文版和英文版译出。在翻译过程中力求做到准确和通顺,但由于译者水平有限,错误和缺点难免,希望得到广大读者的指正。

译者1987年、1989年在莫斯科期间,承蒙伐因斯坦院士亲切接待,亲自带领参观晶体学研究所并赠送《现代晶体学》俄文版,1988年伐因斯坦院士和H.A.基谢列夫通讯院士又接受我校年轻学者前往晶体学研究所短期工作,值此《现代晶体学(第一卷)》中译本出版之际,谨向他们表示衷心地感谢。

吴自勤

1989年11月于中国科学技术大学

序

晶体科学——晶体学——的内容在它的发展过程中得到不断的丰富。虽然人类在古代就对晶体发生了兴趣,但晶体学作为独立的分支学科开始形成于17—18世纪,当时发现了晶体外形的基本规律和光的双折射现象。晶体学的发生和发展在相当长的时间内曾和矿物学密切相关,矿物学的最完整的研究对象正是晶体。后来晶体学和化学接近,因为晶体外形和它的组分密切相关,很明显的事情是:要说明这些外形只能以原子分子概念为基础。数学方法后来也渗透到晶体学中来,对称性理论在19世纪末发展成完整的经典理论,建立了空间群理论,这一渗透还表现在晶体物理的张量运算工具上。

20世纪初发现了晶体X射线衍射,这使得晶体学以至所有物质的原子结构科学发生革命性变化。固体物理也开始得到迅速发展。晶体学方法,首先是X射线学开始渗透到其他许多分支学科,如材料科学、无机和有机分子、聚合物的物理学和化学等等。随后发展起来的有电子衍射和中子衍射学,它们不仅补充了X射线结构分析方法,并且还提供了晶体的理想和实际结构的一系列新的知识。电子显微术和其他现代物质研究方法(光学、顺磁和核磁共振方法等)也给出许多重要结果。

晶体物理得到迅猛发展,在晶体中发现了许多独特的现象,并在技术上得到广泛的应用。

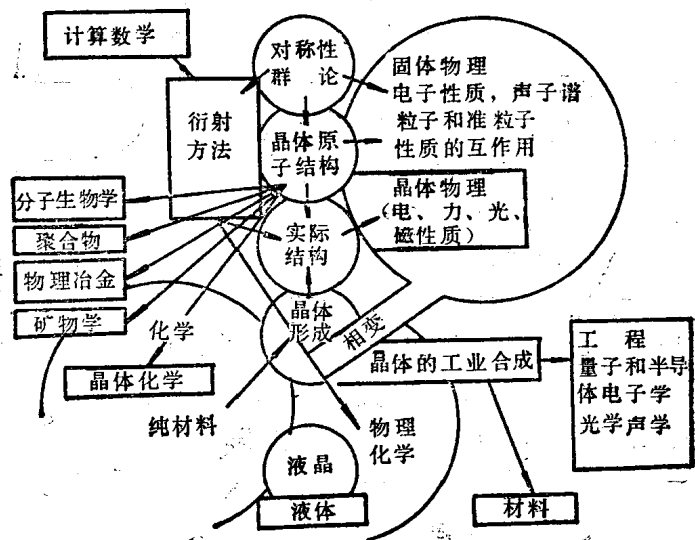
晶体生长理论的出现使晶体学和热力学、物理化学接近。实际的需要推动了人工晶体合成方法的发展。这两方面也是推动晶体学发展的重要因素。人工晶体日益成为物理研究的对象并且开始迅速渗透进技术领域。人工晶体的获得和生产对传统技术部门,如精密仪器、珠宝工业等有重要意义,后来又在很大程度上决定了许多重要部门,如无线电电子学、半导体和量子电子学、应用

光学和声学等的发展。寻找具有重要实用性质的晶体、研究它们的结构、发展新的合成方法是现代科学重大课题之一和科学技术进步的重要因素。

晶体研究中最富有成果的途径是：把它们的构造、生长和性质作为一个统一的综合问题来研究。这三个不可分割地联系在一起。现代晶体学方面是互相补充的。不仅研究晶体的理想结构，而且研究带有各种缺陷的实际结构很有好处，这样的研究指导我们寻找到具有珍贵性质的新晶体，使我们能利用各种控制组分和实际结构的方法以完善合成方法。

实际晶体的理论和晶体物理的基础是晶体的原子结构、晶体生长微观和宏观过程的理论和实验研究。这种处理晶体结构、生长和性质问题的方法具有广阔的前景，并决定现代晶体学的特点。

晶体学的分支以及它和相邻学科间的联系可以用下面示意图表示出来。各个分支间的严格界线是不存在的，它们互相渗透、互相影响。图中的箭头也是有条件的，它只表示占优势的作用方向。一般来说，相反的作用也存在，影响总是双向的。



晶体学的分支以及它和其他学科之间的联系

晶体学在图中占中心部位。属于它的有：对称性理论、用衍射和晶体化学方法进行的晶体结构研究、实际晶体研究、晶体生长和合成、晶体物理。

晶体学的理论基础是对称性学说，最近它得到了新的进展。

原子结构的研究目前已扩展到非常复杂的晶体，晶胞中包含几百至几千个原子。含有各种缺陷的实际晶体的研究愈来愈重要。由于物质原子结构研究方法的普遍性和各种衍射方法的相似性，晶体学已经发展成为不仅是晶体结构的分支学科，而且是一般凝聚态的分支学科。

晶体学理论和方法的具体应用使结构晶体学渗透进金属学、材料科学、矿物学、有机化学和高分子化学、分子生物学和非晶态固体、液体、气体的研究。

晶体的成核长大理论和实践得到化学和物理化学成果的支持，并反过来促进它们的发展。最近在晶体学的所有分支，特别是晶体结构分析中大量应用了电子计算机，这实际上是一般科学发展的特征。

晶体物理主要研究晶体电学、光学、力学性质以及和它们密切相关的结构和对称性。晶体物理与固体物理相近，只不过固体物理更多地强调晶体物理性质的一般规律和点阵能谱。

以上列举的现代晶体学的基本部分在四卷本中都得到了反映。

头二卷涉及晶体构造，后二卷涉及晶体生长和晶体物理性质。我们力图使读者能从本书得到所有晶体学重要问题的基本知识。由于篇幅有限，不少章节是浓缩的，如果不限篇幅，则不少章节可以展开成为专著。幸运的是，一系列这样的晶体学专著已经出版了。

本版的任务是在相互联系之中讲述晶体学的所有章节，也就是把晶体学看成一门统一的科学，阐明晶体结构统一性和多样性的物理涵义，用具体的晶体学方法描述晶体生长过程中和晶体中发生的物理化学过程，阐明晶体性质和结构、生长条件的关系。

四卷本的读者对象是在晶体学、物理、化学、矿物学等领域工作的科学工作者,研究各种材料的结构、性质和形成的专家,从事合成晶体和用晶体组装技术设备的工程师和生产工作者,以及晶体学、固体物理和相近专业的大学生和研究生。

《现代晶体学》是由较多的作者集体编写的。编写过程中得到苏联科学院晶体学研究所和其他单位的同事们的帮助。本书俄文版出版后不久就出了英文版。在英文版中增加了一些最新的成果,在若干处作了一些补充和改进。

Б.К. 伐因斯坦

前 言

本卷内容包括物质晶态的一般特征、晶体对称性和晶体结构研究方法等部分。

第一章带有绪论的性质,介绍了物质晶态特征和晶体学基本概念。晶态的宏观标志被归纳为:性质的均匀性、各向异性和对称性。在这一章中还讨论了晶体的多面体性,描述了晶体微观原子结构的基本规律以及它和其他凝聚态结构的差别。

第二章几乎占了本卷内容的一半,系统地讨论了晶体对称性理论。对称性理论渗透在整个晶体学中,不掌握它就既不能研究、也不能理解晶体的结构和性质。这一章的内容包括对称性理论公理系统及其基础(群论)、对称性基本概念的几何诠释、点群、一维(螺旋)群、平面群、空间群以及广义对称性——反对称性和色对称性。

第三章介绍了晶体多面体外形的几何理论和晶体点阵的几何理论。

第四章介绍晶体原子结构实验研究方法。从实用出发重点放在X射线结构分析方法上,虽然它在10年代就已出现,但至今仍是研究结构的主要工具。这方面的内容有:一般衍射理论,晶体X射线学实验技术及衍射测定晶体原子结构的理论和方法。这一章中还叙述了另外两种方法——电子和中子衍射结构分析法的特点、优点和局限性。物质结构分析新方法——穆斯堡尔衍射和粒子在晶体中的沟道效应也得到简短的介绍。最后一部分是电子显微术。

这一卷的全部基本内容由伐因斯坦编写,克里雅参加了第三章的编写,平斯克参加了4.3的编写,赫依克尔写了4.5和4.6。科波契克在讨论第二章内容时提出过许多重要的建议并参加编写

了2.6.6和2.9。伽里乌林提出过不少有价值的修改意见。在此作者向他们以及其他许多帮助整理手稿、搜集资料、绘制图表的费依琴、乌达洛娃、玛思等同志表示衷心的感谢。

晶体学文献丰富。在这一卷和后几卷中文献分为二类。一类是基本著作、综述和重要的原始论文。另一类是和个别问题有关的著作以及引用了插图的著作。这二类著作在书末文献清单中写得很全，以便于读者去查阅它们。我们还列出了晶体学方面的主要期刊的名称。若干原始著作还特别指明了哪一版。有些原始照片是专为本版准备的，在此作者向这些图注中标明的作者和其他允许引用的作者表示衷心的感谢。

Б.К. 伐因斯坦

1980年12月于莫斯科

目 录

译者序.....	(i)
序.....	(iii)
前言.....	(vii)
第一章 结晶状态.....	(1)
1.1 晶体的宏观特性.....	(1)
1.1.1 晶体和晶态物质.....	(1)
1.1.2 晶态物质的均匀性.....	(4)
1.1.3 晶态物质的各向异性.....	(6)
1.1.4 对称性.....	(8)
1.1.5 晶体的棱角.....	(9)
1.2 晶态物质的微结构.....	(10)
1.2.1 空间点阵.....	(10)
1.2.2 存在晶体点阵的实验证明.....	(14)
1.2.3 微观周期性原理的根据.....	(16)
1.3 凝聚相的结构特征.....	(20)
第二章 对称性理论基础.....	(24)
2.1 对称性概念.....	(24)
2.1.1 对称性定义.....	(24)
2.1.2 对称操作.....	(25)
2.2 空间变换.....	(27)
2.2.1 空间, 其中的物体, 空间的点.....	(27)
2.2.2 空间的基本的等体积变换.....	(28)
2.2.3 对称变换的分析式.....	(35)
2.2.4 第一类和第二类操作的联系和差别.....	(36)
2.3 群论基础.....	(39)

2.3.1	操作的相互作用	(39)
2.3.2	群的公理	(39)
2.3.3	群的基本性质	(40)
2.3.4	循环群, 发生元	(42)
2.3.5	子群	(42)
2.3.6	陪集, 共轭类, 按子群分解	(43)
2.3.7	群的乘积	(44)
2.3.8	群的表示	(46)
2.4	对称群的类型和它们的一些性质	(48)
2.4.1	空间的均匀性、不均匀性和间断性	(48)
2.4.2	对称群的类型及其周期性	(50)
2.4.3	一维群 G^1	(52)
2.4.4	二维群 G^2	(53)
2.4.5	晶体学群	(55)
2.4.6	三维群 G^3	(57)
2.5	对称群的几何性质	(59)
2.5.1	对称素	(59)
2.5.2	对称素的小结和命名法	(61)
2.5.3	极性	(66)
2.5.4	正规点系	(66)
2.5.5	独立域	(68)
2.5.6	对称物体的置换群描述	(71)
2.5.7	对形性	(74)
2.6	点对称群	(77)
2.6.1	点群的描述和图示	(77)
2.6.2	三维点群 G_0^3 的推导	(78)
2.6.3	点群族	(80)
2.6.4	点群的类别	(88)
2.6.5	K 群的同形性	(95)
2.6.6	点群 K 的表示	(96)

2.6.7	群表示和本征函数.....	(102)
2.7	对称群 $G_1^2, G_2^2, G_1^3, G_2^3$	(103)
2.7.1	花边的对称群 G_1^2	(103)
2.7.2	二维周期性平面群 G_2^2	(103)
2.7.3	圆柱(螺旋)群 G_1^3	(107)
2.7.4	层群 G_2^3	(111)
2.8	空间对称群.....	(115)
2.8.1	三维点阵.....	(115)
2.8.2	晶系.....	(117)
2.8.3	布喇菲群.....	(118)
2.8.4	空间群和点群的同态性.....	(123)
2.8.5	群 Φ 中操作相乘和对称素相互位向的 几何规则.....	(125)
2.8.6	空间群推导定理 协形群(Symmorphous Group).....	(126)
2.8.7	非协形群.....	(130)
2.8.8	费多洛夫群的数目.....	(133)
2.8.9	费多洛夫群的命名.....	(133)
2.8.10	费多洛夫群的子群.....	(142)
2.8.11	空间群的正规点系.....	(143)
2.8.12	晶体化学式和空间对称性的关系.....	(144)
2.8.13	空间对称性的局域条件.....	(145)
2.8.14	空间的划分.....	(147)
2.8.15	Φ 群的不可约表示.....	(153)
2.9	广义对称性.....	(155)
2.9.1	对称性概念的扩展.....	(155)
2.9.2	反对称性和色对称性.....	(156)
2.9.3	反对称点群.....	(161)
2.9.4	色对称点群.....	(166)
2.9.5	空间反对称、色对称群和其他.....	(168)

2.9.6	相似对称性.....	(172)
2.9.7	局部对称性.....	(173)
2.9.8	统计对称性.....	(174)
第三章	晶态多面体和点阵的几何.....	(176)
3.1	几何晶体学基本规律.....	(176)
3.1.1	面角守恒定律.....	(176)
3.1.2	有理数定律及点阵.....	(177)
3.2	晶态多面体.....	(178)
3.2.1	理想多面体 面法线族和棱族.....	(178)
3.2.2	单形.....	(180)
3.2.3	晶类中单形的分布.....	(182)
3.2.4	全对称和半对称.....	(188)
3.2.5	单形的组合.....	(189)
3.2.6	晶带定律.....	(190)
3.3	测角术.....	(191)
3.3.1	晶体的放置.....	(191)
3.3.2	实验测角技术.....	(195)
3.3.3	测角计算.....	(196)
3.4	点阵几何.....	(199)
3.4.1	点阵的直线和平面.....	(199)
3.4.2	平面的性质.....	(203)
3.4.3	倒易点阵.....	(204)
3.5	点阵变换.....	(208)
3.5.1	原子点阵和倒易点阵坐标及指数变换.....	(208)
3.5.2	约化算法.....	(212)
3.5.3	晶体中角度和距离的计算.....	(215)
第四章	晶体结构分析.....	(219)
4.1	衍射理论基础.....	(219)
4.1.1	波的干涉.....	(219)
4.1.2	散射振幅.....	(221)

4.1.3	电子密度函数及傅里叶积分.....	(223)
4.1.4	原子振幅.....	(224)
4.1.5	温度因子.....	(228)
4.2	晶体的衍射.....	(231)
4.2.1	劳埃条件 倒易点阵.....	(231)
4.2.2	倒易点阵中阵点的尺寸.....	(234)
4.2.3	反射球.....	(237)
4.2.4	结构振幅.....	(238)
4.2.5	反射强度.....	(239)
4.2.6	热漫散射.....	(240)
4.2.7	衍射图样对称性和点对称性的关系.....	(241)
4.2.8	衍射图样显示的晶体空间群和消光.....	(242)
4.3	单晶散射强度及运动学和动力学理论.....	(249)
4.3.1	运动学理论.....	(249)
4.3.2	运动学散射时的积分反射强度.....	(250)
4.3.3	动力学理论基础.....	(253)
4.3.4	达尔文理论.....	(254)
4.3.5	劳埃-厄瓦耳理论.....	(255)
4.3.6	有吸收的晶体中的动力学散射及博曼 效应.....	(259)
4.3.7	动力学衍射实验研究和应用.....	(260)
4.4	非晶态的散射.....	(265)
4.4.1	无序系统的散射强度及原子间距离 函数.....	(265)
4.4.2	球对称系统: 气体、液体、非晶态.....	(267)
4.4.3	柱对称系统: 聚合物、液晶.....	(268)
4.4.4	小角散射.....	(270)
4.5	单晶X射线结构分析实验技术.....	(272)
4.5.1	X射线的获得和性质.....	(272)
4.5.2	X射线和物质的相互作用.....	(277)

4.5.3	X射线的记录	(278)
4.5.4	单晶X射线结构分析步骤	(279)
4.5.5	劳埃法	(280)
4.5.6	转动晶体和迴摆晶体法	(282)
4.5.7	运动晶体和底片法	(285)
4.5.8	单晶X射线衍射仪	(289)
4.5.9	晶体取向、晶胞和强度的衍射仪测定	(291)
4.6	多晶材料的X射线研究	(293)
4.6.1	用途	(293)
4.6.2	多晶样品相机	(294)
4.6.3	德拜相的指标化和衍射线强度	(297)
4.6.4	多晶样品的衍射	(298)
4.6.5	相分析	(299)
4.6.6	织构研究	(300)
4.6.7	晶粒尺寸和内应力的测定	(300)
4.7	晶体结构的测定	(302)
4.7.1	有关结构的原始数据	(302)
4.7.2	傅里叶合成及相位问题	(303)
4.7.3	尝试法及其可靠性因数	(307)
4.7.4	帕特孙原子间距函数	(308)
4.7.5	重原子法	(314)
4.7.6	直接法	(315)
4.7.7	非局域探索法	(321)
4.7.8	绝对构形的确定	(323)
4.7.9	结构分析的改进	(324)
4.7.10	差分傅里叶合成	(325)
4.7.11	结构分析自动化	(328)
4.8	电子衍射	(329)
4.8.1	方法的特点	(329)
4.8.2	实验技术	(330)

4.8.3	结构测定	(332)
4.8.4	电子的动力学散射	(337)
4.8.5	低能电子衍射(LEED)	(330)
4.9	中子衍射, 穆斯堡尔衍射, 离子散射	(341)
4.9.1	中子衍射的原理和技术	(341)
4.9.2	原子结构的研究	(343)
4.9.3	磁结构的研究	(346)
4.9.4	中子衍射方法的其他应用	(349)
4.9.5	穆斯堡尔辐射的衍射	(350)
4.9.6	粒子的沟道和阴影效应	(352)
4.10	电子显微术	(353)
4.10.1	方法的特点和分辨率	(353)
4.10.2	透射电子显微术	(354)
4.10.3	图像校正和处理及三维重构	(359)
4.10.4	扫描电子显微术(SEM)	(362)
参考文献		(364)
著作和期刊目录		(377)