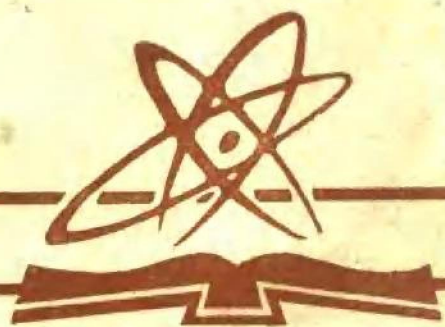


固体物理导论

成都电讯工程学院

陈星弼 鄢俊明 方 政 编

国防工业出版社



固体物理导论

成都电讯工程学院

陈星弼、鄢俊明、方政编

国防工业出版社

内 容 简 介

本书主要介绍固体物理学的基础知识和基本理论，书中举例多结合半导体专业。

全书共分七章：晶体结构、晶体的结合、晶格振动、晶体中的缺陷、合金与相图、晶体中的电子状态和导电理论。书中尽量采用简明、生动的插图，以利于读者对所讨论的问题的理解。

本书可作为高等工科院校半导体器件专业的教材，也可作为其它有关专业的参考书，以及对固体物理有兴趣的读者的自学用书。

固 体 物 理 导 论

成都电讯工程学院

陈星弼、鄢俊明、方政 编

*

国防工业出版社 出版

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

国防工业出版社印刷厂印装

*

787×1092¹/₁₆ 印张13 插页1 295千字

1979年12月第一版 1979年12月第一次印刷 印数：0,001—7,000册

统一书号：15034·1969 定价：1.45元

前 言

固体物理学，是一门研究固体的各种物理性质（力学、热学、电学、光学的性质等等），并从固体的原子、电子结构来阐明这些性质的微观本质的学科。

固体物理学，是在近代物质结构理论的基础上发展起来的；它是近代物理学的一个重要分支。

《固体物理导论》这门课程，将主要介绍固体物理的基础知识和基本理论。有关半导体、超导、介电性、磁性和光学性质等问题，将不在本书讨论。

本书是为高等工科院校的半导体器件专业和无线电元件专业所编写的一门专业基础理论教材，也可作为其它有关专业的教学参考书。要求学生在学完高等数学、普通物理、热力学与统计物理学、量子力学之后，再进行本课程的学习。

本书是按四机部教材会议所规定的学时数（70学时）来选取内容的，可能略有超出。因此，凡采用本教材的教师，对内容可酌情取舍。书中标有“*”号的内容，作为自学参考，可略去不讲。

本书编写的分工是：第三章、第六章和第七章，由陈星弼同志编写。第一章、第二章和第四章，由鄢俊明同志编写。第五章由方政同志编写。西安交通大学半导体专业的罗晋生、刘恩科、朱秉升、陈光遂同志，对本书原稿作了认真审阅，提出了宝贵意见。

由于编写时间仓促，编者水平有限，因此，谬误之处在所难免。希使用本教材的教师和读者提出批评、指正。

编 者

1979年6月

目 录

第一章 晶体结构	
§ 1-1 晶体的宏观特征	1
§ 1-2 原子的周期性排列	3
一、一维格子的情况	4
二、三维格子的情况	5
* § 1-3 晶体的对称性	7
一、 n 重旋转对称轴	8
二、 n 重象转轴	8
三、滑移反映面	9
四、 n 重螺旋轴	10
§ 1-4 晶系和布喇菲原胞	12
一、三斜晶系	12
二、单斜晶系	12
三、正交晶系	13
四、正方(四角)晶系	13
五、立方晶系	13
六、三角晶系	13
七、六角晶系	13
§ 1-5 晶列指数和晶面指数	15
一、晶列指数	15
二、晶面指数(密勒指数)	16
三、面间距	17
§ 1-6 倒格子	18
一、倒格点阵	18
二、倒格子基矢和正格子基矢的关系	18
三、倒格子的特征	19
§ 1-7 简单的晶体结构	21
一、氯化钠结构	21
二、氯化铯结构	21
三、六角密积结构	22
四、金刚石结构	24
五、闪锌矿结构(立方硫化锌结构)	24
§ 1-8 晶体衍射	25
一、劳厄衍射方程和布拉格定律	26
二、原子散射因子	28
三、几何结构因子	29
四、X射线衍射的实验方法	30
五、电子衍射	30
六、中子衍射	31
第二章 晶体的结合	
§ 2-1 晶体结合的类型	33
一、离子晶体	33
二、共价晶体(或原子晶体)	33
三、金属晶体	34
四、分子晶体	34
五、氢键晶体	34
§ 2-2 晶体的结合力和结合能	36
§ 2-3 离子晶体	37
一、离子晶体的相互作用势能	38
*二、马德隆常数的计算	40
三、晶体极化对结合能的影响	42
§ 2-4 分子晶体	43
一、范德瓦耳斯相互作用能	43
二、排斥能	44
三、结合能	45
§ 2-5 共价晶体	46
§ 2-6 原子半径	47
一、四面体共价原子半径	49
二、离子晶体半径	49
第三章 晶格振动与固体的热学性质	
§ 3-1 一维原子链的振动	50
一、一维原子链的振动	50
二、色散关系与布里渊区	52
三、群速	53
四、长波	54
五、纵波与横波	54
六、两种不同原子构成的链的振动	54
七、玻恩-卡门边界条件	56

§ 3-2 三维晶格的振动与声子的概念	57
一、三维晶格的振动	58
二、布里渊区的具体构成方法; 锗与硅的色散关系	58
三、声子的概念	61
四、声子的动量	62
§ 3-3 晶格比热	63
一、晶格的热运动	63
二、晶格的比热理论	64
三、频谱密度	64
四、爱因斯坦模型	65
五、德拜模型	66
§ 3-4 热膨胀与热传导	67
一、热膨胀	67
二、热传导	68
三、声子与声子的碰撞	70
四、其它碰撞过程及对热导率的影响	71

第四章 晶体中的缺陷

§ 4-1 点缺陷及其运动	73
一、点缺陷的种类和数目	73
二、点缺陷的运动	75
§ 4-2 原子扩散	77
一、扩散现象和扩散方程	77
二、扩散过程的微观机构	78
三、外来杂质原子在晶体中的扩散	80
§ 4-3 线缺陷——位错	81
一、晶体的范性形变和晶面的滑移	82
二、滑移的临界切应力	82
三、位错的基本类型	83
四、位错的特性	86
五、位错密度	86
§ 4-4 位错的产生与增殖机构	87
一、位错的延伸	87
二、空位团的崩塌	87
三、位错的增殖机构	88
§ 4-5 位错的运动	89
一、滑移面相互平行的正棱位错和负棱位错的相遇	90

二、滑移面相互正交的两个棱位错的相遇	90
三、一个棱位错和一个螺位错相交	90
§ 4-6 面缺陷——小角晶界和层错	91
一、小角晶界	91
二、层错	92
* § 4-7 硅晶体中的常见缺陷	95
一、点缺陷	95
二、线缺陷	95
三、面缺陷	97

第五章 合金与相图

§ 5-1 相图	98
§ 5-2 溶解度无限的固溶体的相图	100
§ 5-3 溶解度有限的固溶体的相图	104
§ 5-4 具有中间相的正常价化合物的二元相图	108
§ 5-5 合金的热力学	111
一、合金的自由能	111
二、复相平衡时的自由能曲线	114
* 三、用自由能曲线解释相图	116
四、用吉布斯相律解释相图	118
§ 5-6 合金的分类	119
一、固溶体	119
二、中间相化合物	125

第六章 晶体中的电子状态

§ 6-1 金属中自由电子的状态	130
一、固体中应用量子力学的必要性; 薛定谔方程	131
二、方势阱中的自由电子——周期性边界条件	131
§ 6-2 准自由电子近似	133
一、晶格的周期性势场	134
二、准自由电子近似——微扰法	135
三、禁带的形成	137
四、三维晶格的情形	139

五、简约波矢；面心立方晶格的能带	141
*六、锗、硅在准自由电子近似下的能带结构	142
§ 6-3 能带的各种计算方法	143
一、布洛赫函数及布洛赫定理	143
二、紧束缚近似	144
三、原胞法	148
*四、波函数的其它近似方法	150
*五、赝势法	150
六、简约布里渊区内 E 、 k 的一般性质	152
*七、半导体材料的能带	153
§ 6-4 能带电子的运动	156
一、电子的速度	156
二、速度和能量的关系	157
三、电子在外力下的运动	158
四、有效质量	159
五、满带不导电	161
六、空穴	161
§ 6-5 能带中电子的统计分布及能带论的一些应用	163
一、导电性质与构成晶体的原子之间的联系	163
二、费米-狄拉克统计；状态密度	165
三、电子气的比热	167
四、金属的结合能	168
*五、休谟-饶塞里规则的解释	169

第七章 导电理论

§ 7-1 电导的简单理论	171
一、金属电导现象的微观理论简述	171
二、外电场下的费米面、弛豫时间的意义	172
三、霍耳效应	174
四、准自由电子近似下费米面的构成；费米面上代表点在磁场下的运动	176
五、本征半导体	179
六、杂质半导体	181
§ 7-2 电子的散射	182
一、晶格散射中的能量守恒与准动量守恒	183
二、晶格振动势场的处理方法	186
三、杂质和缺陷引起的散射	188
§ 7-3 玻耳兹曼方程及解法	189
一、外场下的分布函数 $f(k)$	189
二、玻耳兹曼方程	190
三、弛豫时间的意义；玻耳兹曼方程的简化	191
四、弛豫时间公式的简化	193
*五、反复法及蒙特-卡洛法	196
主要参考书目	198
附录 一些常见的物理常数	199
化学元素周期表	

第一章 晶体结构

固体物理学的发展与结晶学的成就密切相关。人们对晶体结构规律性的研究，促进了对晶体的物理性质的深入了解。

本章主要讨论几何结晶学的基本内容，并对晶体衍射的原理作些初步介绍。

首先讨论晶体的宏观特征，然后再阐明晶体的宏观特征与其内部原子或离子的周期性排列的关系。其后，将讨论晶体中原子周期性排列的几何性质。最后介绍一些常见的重要的晶体结构。

为了简明地处理固体物理中的某些问题，在本章引入了倒格子的概念。

对于晶体衍射，将着重介绍X射线的衍射原理。有关电子衍射和中子衍射的问题，只作些初步的介绍。

本章所讨论的晶体，均指完美晶体。有关缺陷晶体的内容，将在第四章讨论。

§ 1-1 晶体的宏观特征

在自然界，各种元素及其化合物，通常以三种状态出现：固态、液态及气态。具有这三种状态的物质，分别称为固体、液体和气体。

固体分为晶体和非晶体两大类。晶体可以是天然形成的，也可以由人工培养生长。固体物理学既研究晶体，也研究非晶体。本书所研究的对象主要是晶体。

人们很早就发现，自然界存在着种类繁多的、瑰丽的晶体，如岩盐晶体、石英晶体、明矾晶体、云母晶体等（见图 1-1）。

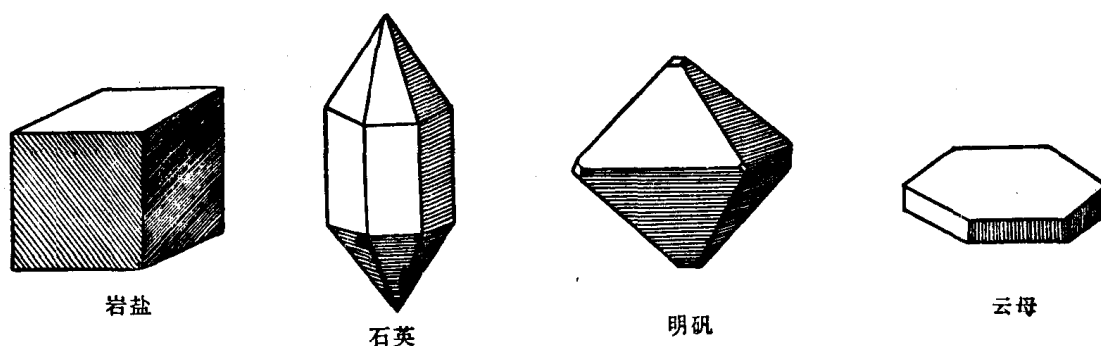


图1-1 几种晶体的外形

从这些晶体的外观可见，它们具有规则而对称的外形。这些围成晶体多面体的面，称为晶面；晶面的交线，称为晶棱；晶棱的会集点，称为顶点。

在一定条件下，结晶物质能自发地长成为一个凸多面体形的单晶体。由于生长条件不同，同一品种的晶体，所生长的外形并不一样。如岩盐（氯化钠）晶体，其外形可以是立方体，也可以是八面体，或者是立方体和八面体的混合形状，如图 1-2 所示。

从图 1-2 可看出，不同的生长条件，可使某一个或某一组晶面相对地变小，甚至完全消

失。这就是说，晶面的形状和大小，是直接受晶体生长条件影响的，而不是晶体品种的特征因素。

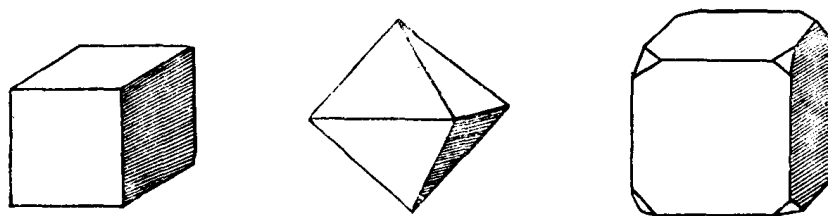


图1-2 岩盐晶体的一些外形

晶体品种的特征因素，就是不受外界条件影响的、由内部结构所决定的晶面间的夹角。对于每一品种的晶体，无论具有何种外形，总具有一套特征性的夹角。这个普遍的规律，称为晶面角守恒定律：属于同一品种的晶体，两个对应晶面（或晶棱）间的夹角，恒定不变。这是因为，同一品种的晶体，有其相同的内部结构（晶体结构），所以反映出晶面夹角的守恒。一般用晶面法线的取向，来表示晶面的方位，法线间的夹角就是晶面间的夹角。

当晶体受到外力作用时，常能沿某一个或某些具有一定方位的晶面断裂，这种性质称为晶体的解理性。这些裂开的晶面称为解理面。通常显露在晶体外表的晶面，就是解理面。

晶体还具有各向异性的特点。晶体的物理性质，如热膨胀系数、体电阻率、弹性模量、光的折射率等，随所取观察方向不同而异。对于非晶体，则表现出各向相同的性质。

每一品种的晶体，具有一固定的熔点。当晶体被加热到一定温度时，就开始熔化，在晶体熔化的过程中，温度保持不变，直到晶体全部熔化，温度才开始上升。晶体开始熔化的温度称为熔点。如石英晶体的熔点为 1470°C ，硅晶体的熔点为 1420°C 。对于非晶体，则没有固定的熔点。当其被加热时，开始出现软化，然后随温度的升高，逐渐熔化。

晶体和非晶体具有不同的宏观特征，这是由于晶体与非晶体不同的内部结构所决定的。

X射线结构分析表明：在晶体中，原子（或离子）是有规则的、周期性排列的；而在非晶体中，原子（或离子）则是无规则排列的。图1-3是石英晶体（水晶）和石英玻璃（非晶体）中原子排列的示意图。从图中可见，虽然都是由二氧化硅组成，但当硅和氧原子有规则地周期性排列时，就形成石英晶体；而当硅和氧原子无规则排列时，则形成非晶态的石英玻璃。

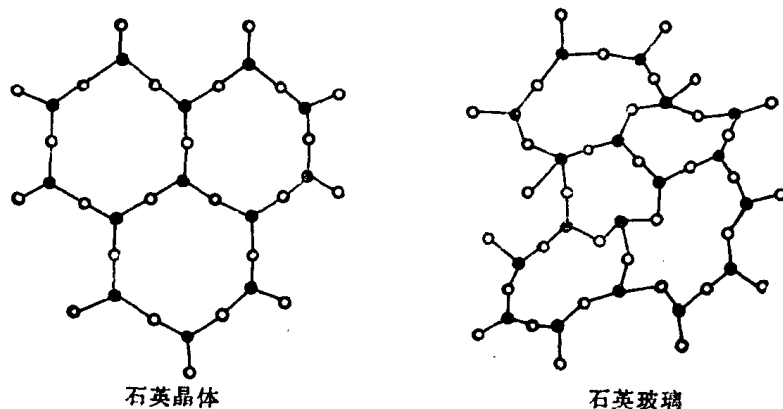


图1-3 石英晶体和石英玻璃中原子排列的示意图

当固体是由许多取向不同的微小晶体（微晶）组成时，称此为多晶体。因此，晶体又可分为单晶体和多晶体两类。例如，许多金属材料、自然界存在的一些固体等都是多晶体。

在科研和工业技术中应用的单晶材料，一般都是通过人工培养形成的。例如，在半导体器件中应用的硅单晶和砷化镓单晶，可以用直拉、区熔、外延等方法制备。

必须指出，在固体物理学中，一般所讨论的晶体的各种物理性质，均指单晶体而言。

§ 1-2 原子的周期性排列

关于晶体的规则而对称的外形与其内部结构的关系，很早就吸引着人们的注意，并对此进行了大量的研究。十九世纪时，布喇菲(Bravais)提出了空间点阵学说。这一学说后来被X射线衍射实验所证实。

空间点阵学说认为：晶体的内部结构，可看成是一些相同的点，在空间作有规则的、周期性的无限分布；而这些相同的点，可代表原子、离子、分子或其集团的重心。这些点在空间排列所组成的总体，称为空间点阵，见图 1-4(a)。

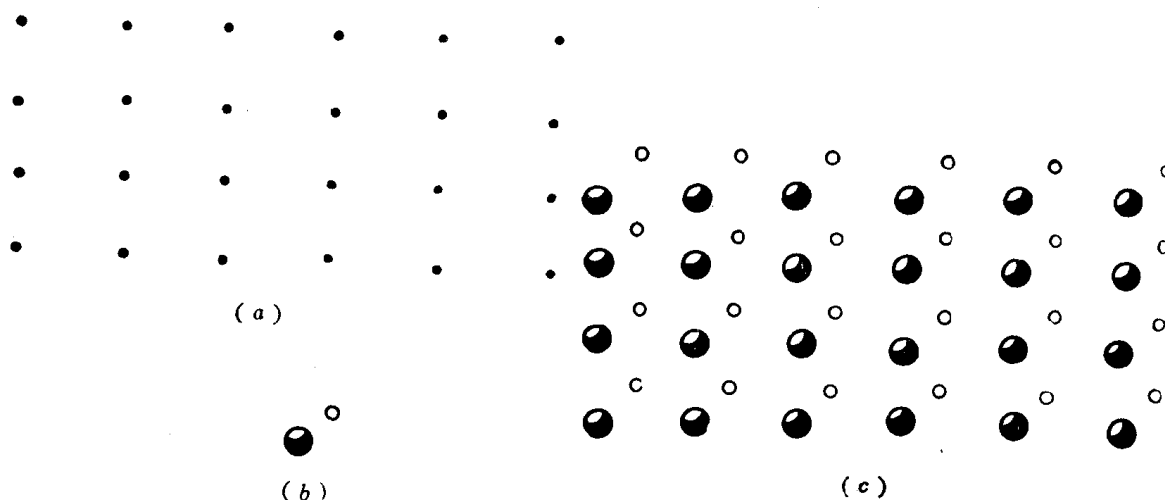


图1-4 二维的空间点阵和晶体结构示意图
(a) 空间点阵；(b) 包含两种不同离子的结构单元；(c) 晶体结构。

一般情况下，空间点阵学说中的点，并不代表原子、离子或分子本身，而是其集团的重心。因此，常把这些点称为结点（或格点）。当晶体包含着数种原子时，则这数种原子构成基本的结构单元，见图 1-4(b)。结点则代表这些相同的结构单元的重心。

空间点阵学说，概括了晶体结构的周期性。整个晶体结构，可看作是由这些相同的基本结构单元，沿空间三个不同的方向，各按一定的距离，周期性地平移所组成。每一平移的距离称为周期，在三个不同的方向上，一般具有不同的周期。在空间点阵中，每个结点周围的情况是完全一样的。而且，在任何两个结构单元中，相应原子周围的情况，也是相同的。当然，在每个结构单元中，各个原子周围的情况，则是各不相同的。

通过空间点阵的结点，可作许多平行的直线族，把点阵分成网格，称此为晶格（见图 1-5）。由于晶格具有周期性，因此，可取一个以结点为顶点、以三个方向上的周期为边长的平行六面体，作为重复单元，来概括整个晶格的特征。这样选取的重复单元，称为原胞，如图 1-5(b) 所示。

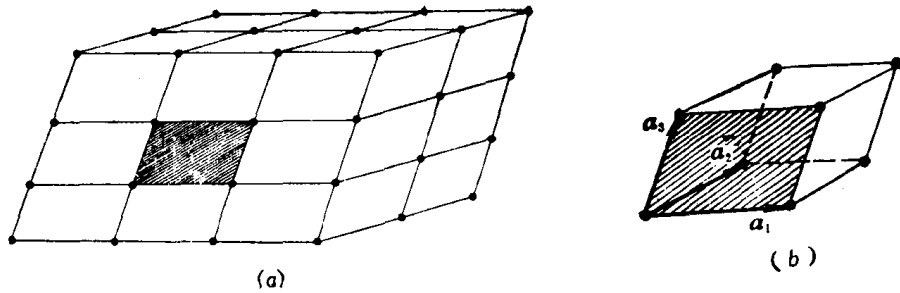


图1-5 晶格和原胞
(a) 晶格; (b) 原胞。

如果只要求反映晶格的周期性, 原胞可以选取最小的重复单元, 结点就在顶角上, 在内部和面上, 不包含其它的结点。在结晶学上, 为了同时反映晶体的对称性和周期性, 所选取的原胞, 不一定是最小的重复单元。结点不仅在顶角上, 也可在体心和面心上。原胞的边长, 沿三个晶轴的方向, 各为一个周期。

当晶体是由完全相同的原子组成时, 原子与结点重合, 结点所形成的网格就是原子的网络。对于这种格子, 当每个格点周围的情况完全一样时, 则称为布喇菲格子, 如图1-6(a)所示。如周围情况不一样时, 则是一种相同原子的复式格子了。

如果在晶体的结构单元中, 包含着两种或两种以上的原子, 则在各个结构单元中相应的同种原子, 各组成与结点相同的网格, 这些网格相对移动一定的距离, 形成复式格子。因此, 可以认为, 复式格子是由若干相同的布喇菲格子, 相互位移一定距离套构而成。如图1-6(b)所示。

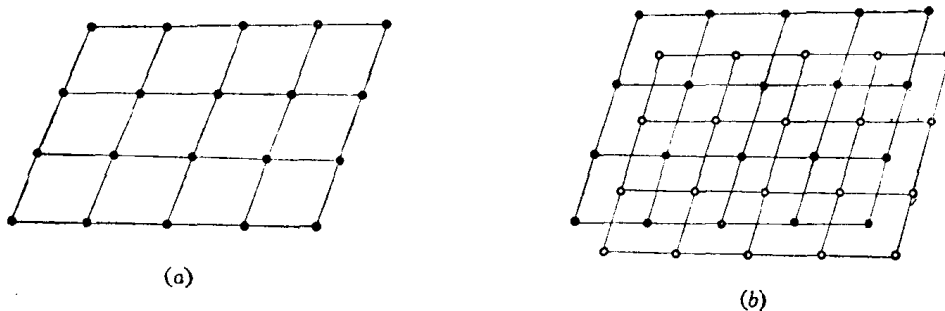


图1-6 布喇菲格子和复式格子
(a) 布喇菲格子; (b) 复式格子。

以下分别讨论在一维和三维情况下, 布喇菲格子和复式格子的周期性, 以及固体物理学原胞的选取方法。

一、一维格子的情况

图1-7(a)是由同一种原子所组成的周期性点列。相邻原子间的距离为 a , 此即为点列的周期。为了反映一维格子的周期性, 可选取一个原子, 以及这个原子周围长度为 a

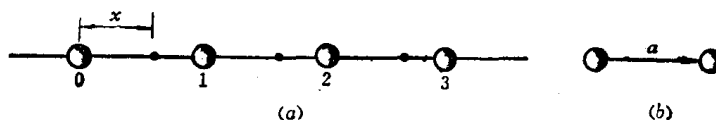


图1-7 一维的布喇菲格子
(a) 晶格; (b) 原胞。

的区域, 作为重复单元, 这就是一维的布喇菲原胞。如图 1-7 (b) 所示。 a 称为原胞的基矢, 在基矢两端的原子, 为相邻的原胞所共有, 所以, 每个原子胞平均只占有一个原子。由于晶格的周期性, 在原胞中任一处 x 的物理性质, 与另一原胞相应处的物理性质完全相同, 因此可表示为

$$\Phi(x+na) = \Phi(x) \quad (1-1)$$

式中, Φ 表示晶格的任一种物理性质; a 为晶格的周期; n 取整数。

图 1-8 是由 A 、 B 两种原子组成的一维复式格子。这个复式格子可认为是由 A 原子和 B 原子分别组成的两个相同的布喇菲格子, 二者相对平移 d 的距离套构而成。在这个一维复式格子中, 原胞的选取, 可以是 BAB , 如图 1-8 (b); 也可以是 ABA , 如图 1-8 (c)。在这两种选法的原胞中, 基矢同为 a , 每个原胞都包含两个原子 (一个 A 原子和一个 B 原子)。因此, 由 n 种原子组成一维的复式格子时, 每个原胞包含着 n 个原子。

在一维的复式格子中, 每个原胞相应处的物理性质相同, 因此, 这种周期性的特征, 仍可用式 (1-1) 来描写。必须指出, 晶体有时虽然是由一种原子组成, 但由于原子周围的情况并不相同, 因而也形成复式格子。如图 1-9 所示。原胞的选取, 如上所述。

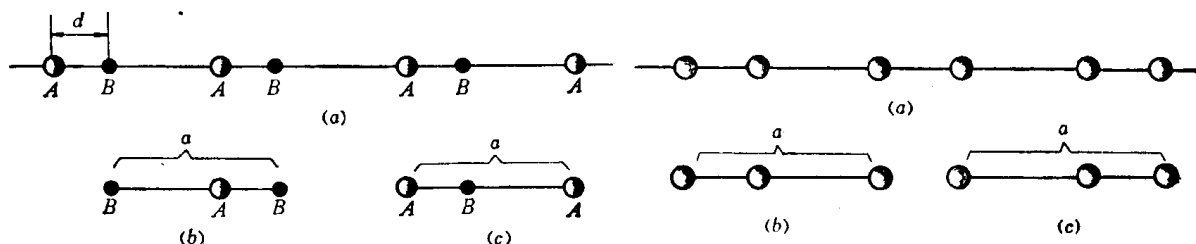


图1-8 一维的复式格子

(a) 晶格; (b) 原胞; (c) 原胞。

图1-9 同种原子组成的复式格子

(a) 晶格; (b) 原胞; (c) 原胞。

二、三维格子的情况

通过上述的讨论, 已知布喇菲格子和复式格子的基本特征, 以及反映晶格周期性的原胞的选取方法。现在来讨论三维格子的情况。在结晶学中, 为了同时反映晶体的对称性和周期性的特征, 常选取最小重复单元几倍的体积作为原胞, 称此为结晶学原胞。在结晶学原胞中, 结点不仅在顶角上, 也可在体心或面心上。结晶学原胞的边长, 等于三条晶轴上的周期的的大小 (a , b , c)。这三个边的矢量, 就是结晶学原胞的基矢 (\mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c})[●]。

在固体物理学中, 原胞的选取, 只要求反映晶格的周期性, 因此, 可选取最小的重复单元。对于布喇菲格子, 固体物理学原胞只包含一个原子; 对于复式格子, 固体物理学原胞所包含的原子数, 等于每个结构单元中的原子数。固体物理学原胞的选取, 并不是任意最小的重复单元。固体物理学原胞的基矢, 必须和晶轴方向保持一定的相对取向。如果所选取的固体物理学原胞 (平行六面体) 的三个边长为 a_1 , a_2 , a_3 , 则原胞的基矢可表为 \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 。

在三维格子的情况下, 晶格的周期性, 仍可用式 (1-1) 来描述。设 \mathbf{r} 为原胞中任一处的位矢, 则一个原胞中 \mathbf{r} 处的物理性质, 与另一个原胞中相应处的物理性质相同。这可表示为

● 本书中黑斜体及带箭头的符号同表矢量。——编者

$$\Phi(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r} + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3) \quad (1-1a)$$

式中, n_1, n_2, n_3 为整数。

在下面, 以立方晶系为例, 讨论结晶学原胞和固体物理学原胞的选取。在结晶学中, 考虑到对称性和周期性, 属于立方晶系的布喇菲原胞有三种: 简立方、体心立方和面心立方。根据立方晶系的特征, 三个基矢的长度相等 ($a = b = c$); 且它们互相垂直 ($\mathbf{a} \perp \mathbf{b}$, $\mathbf{b} \perp \mathbf{c}$, $\mathbf{c} \perp \mathbf{a}$)。如图 1-10 所示。这些布喇菲原胞的基矢在三个晶轴方向, 取晶轴作为坐标轴, 设坐标系的单位矢量分别为 \mathbf{i} 、 \mathbf{j} 、 \mathbf{k} 。以下分别对这三种情况进行讨论。

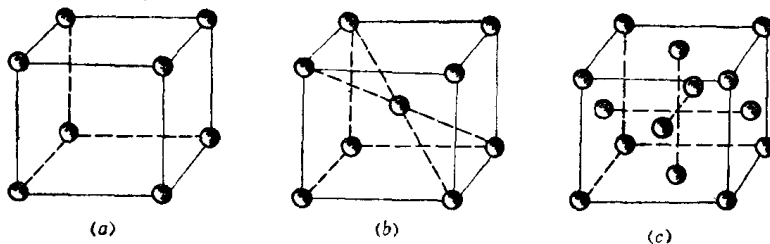


图1-10 立方晶系的布喇菲原胞
(a) 简立方; (b) 体心立方; (c) 面心立方。

1. 简立方

在简立方的布喇菲原胞 (即结晶学原胞) 中, 原子只在立方体的顶角上, 在原胞的其它部分没有原子。每个原胞有 8 个顶角原子, 每个原子被 8 个周围的原胞所共有, 所以每个原胞只占有一个顶角原子的 $1/8$ 。因此, 每个原胞实际上只包含着一个原子 ($8 \times 1/8$)。这说明, 在简立方的情况下, 结晶学原胞和固体物理学原胞相同, 两者的体积同为 a^3 , 固体物理学原胞的基矢为

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= a\mathbf{i} \\ \mathbf{a}_2 &= a\mathbf{j} \\ \mathbf{a}_3 &= a\mathbf{k} \end{aligned} \right\} \quad (1-2)$$

2. 体心立方

在体心立方的布喇菲原胞中, 除在顶角上有原子外, 在立方体的中心还有原子。顶角上原子被占有的情况与简立方相同; 在体心上的原子, 仅被一个原胞所占有。因此, 每个体心立方原胞占有两个原子。从整个晶格来看, 每个体心原子的周围有 8 个最近邻的顶角原子; 每个顶角原子的周围, 有 8 个最近邻的体心原子, 二者可以互换。因此, 在顶角和体心上的原子, 其周围情况是完全一样的。

按固体物理学原胞的要求, 每个原胞中只包含一个原子, 因此, 常采用另一种方法来选取原胞, 见图 1-11。所取的原胞的基矢可表示为

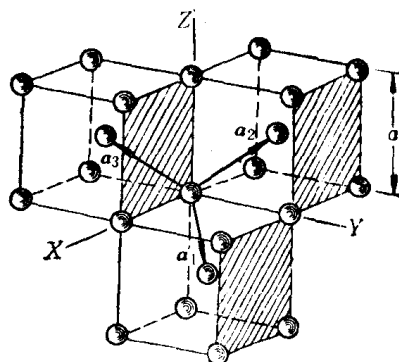


图1-11 体心立方中的固体物理学原胞

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}) \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2}(-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}) \\ \mathbf{a}_3 &= \frac{a}{2}(\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}) \end{aligned} \right\} \quad (1-3)$$

这个原胞（平行六面体）的体积为

$$\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = \frac{1}{2} a^3$$

从上述的讨论可看出：体心立方的结晶学原胞包含两个原子，体积为 a^3 。而只反映周期性的固体物理学原胞，包含一个原子，体积为 $\frac{1}{2} a^3$ 。

3. 面心立方

在面心立方的布喇菲原胞中，除顶角上的原子外，在立方体六个面的中心上，还有 6 个原子。每个面心上的原子，为两个相邻的原胞所共有，即每个原胞只占有一个面心原子的 $1/2$ 。因此，每个原胞实际上占有 3 个面心原子 ($6 \times 1/2$)。考虑到顶角原子，每个原胞共包含 4 个原子，见图 1-10 (c)。

在面心立方晶格中，按固体物理学原胞选取的要求，可通过 6 个面心原子和 2 个顶角原子，作一平行六面体，见图 1-12。这个新取的固体物理学原胞的基矢为

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j}) \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2}(\mathbf{j} + \mathbf{k}) \\ \mathbf{a}_3 &= \frac{a}{2}(\mathbf{k} + \mathbf{i}) \end{aligned} \right\} \quad (1-4)$$

这个原胞的体积为 $\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = \frac{1}{4} a^3$ ，每个原胞只包含一个原子。很显然，面心立方的布喇菲原胞的体积，是这个原胞体积的 4 倍，并包含有 4 个原子。

* § 1-3 晶体的对称性

对称性是自然界的一种普遍现象。在自然界存在着种类繁多的晶体，它们表现出各种各样的对称外形。晶体的对称外形和内部结构有何规律性呢？这就是本节所要讨论的内容。

从图 1-1 中可看出，晶体转动一定角度后，其外形能自身重合。例如，把立方体的氯化钠晶体，绕其中心轴转 90° 后，晶体自身重合；把石英晶体和云母晶体绕其柱轴转 60° 后，它们也能自身重合。这种能使晶体复原的动作，称为对称操作。通过对称操作，能使晶体复原的这种特征，称为对称性。

人们很早就推测：晶体外形的对称性，是晶体内部结构规律性的反映。通过对大量晶体外形对称性的研究（用测角、投影等方法），逐渐揭示了晶体内部结构的规律性。十九世

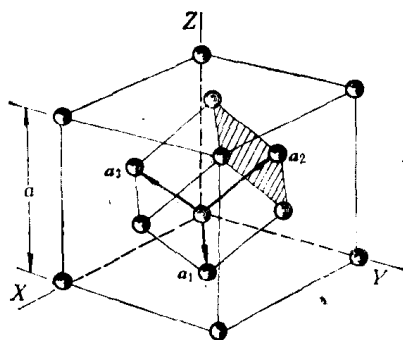


图1-12 面心立方中的固体物理学原胞

纪末，由巴罗 (Barlow) 等人，发表了空间群理论，从而充实了空间点阵学说。其后，X射线衍射实验证实了这种理论的正确性。

按空间群理论，晶体的对称类型，是由几个基本对称操作组合而成的。通过旋转和旋转反映的基本对称操作，可组成 32 种宏观的对称类型，称为点群。通过旋转、旋转反映、滑移反映和螺旋的基本对称操作，可构成 230 种微观的对称性，称为空间群。

以下分别讨论这几种基本的对称操作。





一、 n 重旋转对称轴

晶体绕某一固定轴 u ，旋转 $\theta = \frac{2\pi}{n}$ 角度后，能自身重合，则称 u 为 n 重旋转对称轴。

n 只能取 1, 2, 3, 4, 6，即旋转的角度为 2π , π , $\frac{2\pi}{3}$, $\frac{\pi}{2}$, $\frac{\pi}{3}$ 。晶体不能有 5 重及 6 重以上的转轴。

为了简化表示，旋转对称轴的重数，常用表 1-1 的符号来代表。

表 1-1 旋转轴重数的代表符号

旋转轴重数 n	旋转角度 θ	代表符号	旋转轴重数 n	旋转角度 θ	代表符号
2	π 180°		4	$\pi/2$ 90°	
3	$2\pi/3$ 120°		6	$\pi/3$ 60°	

例如，立方体的氯化钠晶体，具有 4 重、3 重和 2 重转轴，见图 1-13 (a)。石英晶体具有 6 重和 2 重转轴，见图 1-13 (b)。

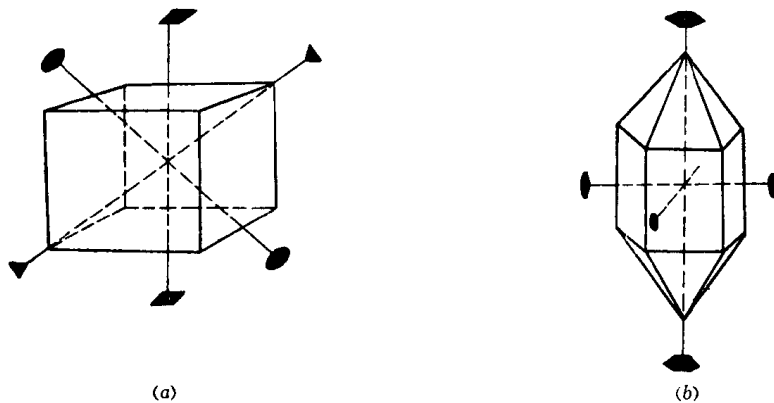


图 1-13 晶体的旋转对称操作

(a) 氯化钠晶体的 4 重、3 重和 2 重转轴；(b) 石英晶体的 6 重和 2 重转轴。

二、 n 重象转轴

晶体绕某一固定轴 u ，旋转 $\frac{2\pi}{n}$ 角度以后，再经过中心反映 (即由 x 反映到 $-x$ ；由 y 反映到 $-y$ ；由 z 反映到 $-z$)，能自身重合，则称 u 为 n 重象转轴。晶体的象转轴也只能有 1, 2, 3, 4, 6 重，而不可能有 5 重及 6 重以上的象转轴。通常用 $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$ 来表示象转轴。

1 重象转轴就是中心反映，称为对称心，用 i 表示，即 $\bar{1} = i$ 。

2 重象转轴就是镜象反映，称为对称面，此面垂直于转轴，用 m 表示，即 $\bar{2} = m$ 。

3 重象转轴，是与 3 重转轴加上对称心 i 等效的，即 $\bar{3} = 3 + i$ ，见图 1-14 (a)。1 转动 120° 后，到 $1'$ ，再经中心反映，得 2；2 转动 120° 后，到 $2'$ ，经中心反映得 3；由 3 转动 120° 到 1，反映得 4，可如此类推下去。这些点的分布说明：3 重象转轴具有 3 重转轴和对称心 i 的对称性。

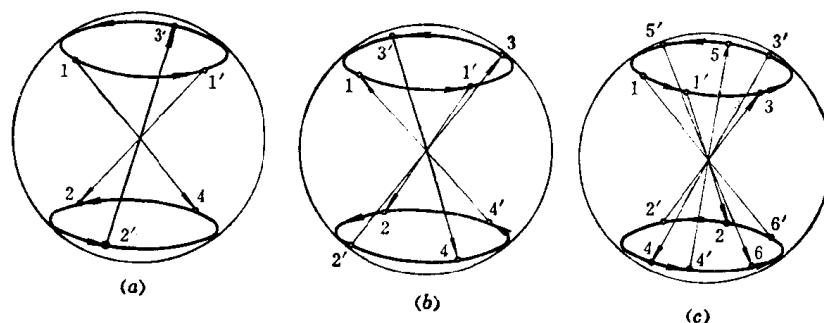


图1-14 晶体的象转轴示意图

(a) 3 重象转轴；(b) 4 重象转轴；(c) 6 重象转轴。

4 重象转轴，见图 1-14 (b)。1 转动 90° 后到 $1'$ ，经中心反映得 2；再转 90° 到 $2'$ ，经中心反映得 3；再转 90° 到 $3'$ ，经中心反映得 4，依此类推。1, 2, 4, 3 各点和 $1', 3', 2', 4'$ 各点分别组成两个相同的四面体，这两个四面体具有 4 重象转轴的对称性。4 重象转轴，还包含一个与它重合的 2 重转轴。必须指出，那些只有 4 重象转轴，而没有 4 重旋转轴的晶体，不具有对称心。例如，具有金刚石结构和闪锌矿结构的晶体，有 4 重象转轴。当把它们转动 90° 后，再经中心反映，即自身重合，而在这两种晶体结构中，不存在对称心。

6 重象转轴，它与 3 重转轴加垂直于该轴的对称面是等效的，即 $\bar{6} = 3 + m$ ，见图 1-14 (c)。

通过上述两类对称操作的讨论，可看出，在晶体的宏观对称性中，有 8 种独立的基本对称操作元素（或称素对称操作）。它们是 1、2、3、4、6 重转轴；对称心 i ；对称面 m 及 4 重象转轴 $\bar{4}$ 。这些基本对称操作元素组合起来，就可构成 32 种宏观对称类型。

当考虑晶体的微观对称性时，除上述的两类对称操作外，还必须包括另外两类对称操作，这就是滑移反映和螺旋。以下分别讨论这两类对称操作。

三、滑移反映面

滑移反映面是，先经过该面作镜象反映，然后再沿平行于该面的某一方向平移 T/n 的距离，这时，晶体中的原子和相同原子重合。其中， T 表示平移方向的周期； n 取 2 或 4。见图 1-15。 MM' 表示一滑移反映面； $AA_2 = T$ ； $n = 2$ 。当 A 经过镜象反映后到 A' ，再向上平移 $T/2$ ， A 原子就与另一个相同的 A_1 原子重合。 A_1 再经镜象反映到 A'_1 ，然后向上平移 $T/2$ ， A_1 原子就与另一相同的 A_2 原子重合。例如，氯化钠结构就具有这种滑移反映面。

四、 n 重螺旋轴

n 重螺旋轴 u 表示, 绕该轴旋转 l 倍的 θ 角 ($\theta = \frac{2\pi}{n}$) 后, 再沿轴向平移 l 倍的 T/n 距离, 这时, 晶体中一处的原子和另一处的相同原子重合。其中, T 为 u 轴上的周期; n 为整数; l 为小于 n 的整数。晶体只能有 1, 2, 3, 4, 6 重螺旋轴。 l 可取 1, 2, 3, 4, 5, 见图 1-16。图 (a) 是 2 重螺旋轴; 图 (b) 是 3 重螺旋轴; 图 (c) 是 4 重螺旋轴。各种螺旋轴的代表符号、图示符号及沿轴向的平移分别列在表 1-2 中。

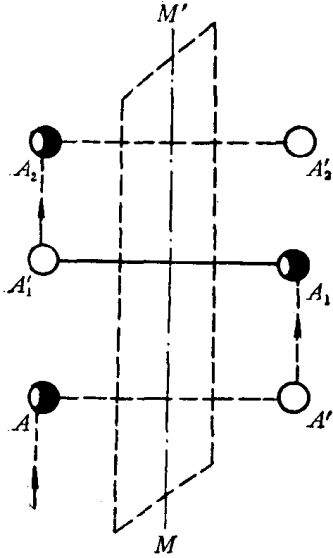


图1-15 滑移反映面

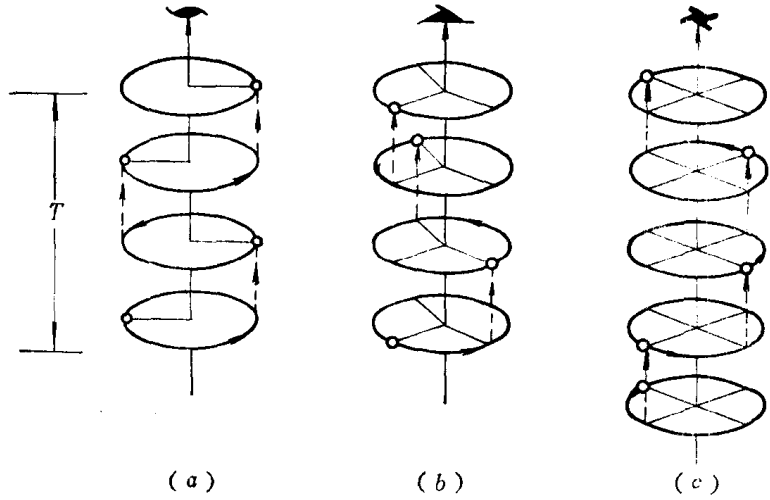


图1-16 螺旋轴示意图

(a) 2重螺旋轴; (b) 3重螺旋轴; (c) 4重螺旋轴。

表1-2 螺旋轴代表符号

螺旋轴	旋转角度	沿轴向平移	符号 n_l	国际符号
2重螺旋轴	180°	$T/2$	2_1	
3重螺旋轴	120°	$T/3$	3_1	
		$2T/3$	3_2	
4重螺旋轴	90°	$T/4$	4_1	
		$2T/4$	4_2	
		$3T/4$	4_3	
6重螺旋轴	60°	$T/6$	6_1	