

高等学校教材

晶体结构几何理论

(第二版)

肖序刚 编著

高等教育出版社

高等学校教材

晶体结构几何理论

(第二版)

肖序刚 编著

高等教育出版社

(京)112号

内 容 提 要

本书是1960年出版的《晶体结构几何理论》一书的修订第二版。除保留了原来的一部分基础知识外,在书中增加了三十年来晶体结构几何理论发展的新内容。全书内容包括:晶体的基本性质;晶体结构的周期性;晶体结构的对称性;晶体定向和等位对称图形的符号表示;倒易空间和倒易点阵;晶体投影;球堆形晶体结构,配位型晶体结构,分子晶体结构和一、二维周期结构等。

本书较全面、系统地反映了晶体结构几何理论的发展,同时也是作者40年来从事晶体学、X射线晶体学、电子衍射晶体学教学和科研经验的总结。

本书可供物理、化学、材料科学、金属学、地质矿物、生物等专业的教材,亦可供有关专业的科技人员阅读、参考。

本书是固体物理教学丛书的第17本。

高等学校教材

晶体结构几何理论

(第二版)

肖序刚 编著

*

高等教育出版社出版

新华书店总店北京科技发行所发行

民族印刷厂印装

*

开本 787×1092 1/16 印张 33 插页 1 字数 750 000

1993 年 4 月第 2 版 1993 年 4 月第 1 次印刷

印数 0001— 1 410

ISBN7-04-003224-4/O·984

定价 17.20 元

出版者前言

为适应高等学校固体物理学及其各分支学科课程教学的需要，高等学校理科物理学教材编审委员会固体物理编审小组和高等教育出版社组织编写了一套固体物理学科的教学参考书，其中包括固体物理学及其各分支学科的基础课程和实验课程用的教学参考书和一部《固体物理学大辞典》。这些书将由高等教育出版社陆续出版。

本书是这套书中的一本。

序

《晶体结构几何理论》一书(下面简称“第一版”),自1960年出版以来,国内一些大学和科研单位曾用它作为晶体几何课程的教材或参考书。这三十年期间晶体学及与它相关的理论学科和应用技术均有很大发展,第一版的内容已不能满足当前教学和科研的需要。1981年,应固体物理教材编审组及高等教育出版社之约,将第一版大加修改并增补新近本学科发展内容,历时五载撰成是书,考虑连贯性定名为《晶体结构几何理论》第二版(下简称“第二版”)。

除保留第一版中一部分基础知识外,第二版的内容绝大部分是重新撰写的,篇幅扩大为第一版的三倍多。现将新添的几个主要方面扼要介绍于下。

(一) 尼格里约化是晶体结构分析中消除布喇菲单胞不唯一性、获取准确单胞参数、确定晶体对称的可靠措施。在第二、三、五章中系统地阐述了44种尼格里约化型的理论及计算程序的原理。

(二) 衍生格子的理论既与尼格里约化有密切关系,也是处理X射线衍射和电子衍射实验数据所必需考虑的依据之一。§2-4和§5-6分别论述空间点阵及相关的倒易点阵中衍生格子间的相互关联,据此可用矩阵分析方法定出正确的布喇菲格子。衍生格子在重位点阵、界面结构等方面均有应用。

(三) 晶体学群的理论是晶体结构几何理论中的核心课题。在这方面,第二版增加了许多在第一版中未曾深入讨论的内容。一方面为了使初学者易于领会,我们按照对称要素组合定理对各种晶体学群从对称图象的几何关系上进行综合的阐述;另一方面,考虑到进一步钻研晶体结构化学和固体理论的需要,我们以抽象群论为基础,对32种点群、14种平移群、230种空间群和17种平面群的构成作出分析的论证。特别是对于可用来描述磁性晶体结构的58种黑白点群和1651种苏布尼可夫空间群以及在会聚束电子衍射上有实际应用的31二维二色点群和80种二色平面群,均作了较完整的介绍。

(四) 群-子群关系是描述各种物质体系相互连系的一个普遍原理。本书所讨论者限于单一成分的三维结构的群-子群关系。首先将非晶体学的极限群与32点群接合起来建立一个显示点阵对称缺失的群-子群关系的树图;其次论述空间群的各种子群和最大子群。这两方面的群-子群关系,有助于探讨在各种条件下发生相变的过程中母源结构与其各种衍生结构在对称性上的规律连系。

(五) 倒易点阵,在固体理论和晶体的X射线衍射和电子衍射理论上,无疑是很重要的数学工具,而且也是晶体结构空间中物质和能量分布的信息的几何图象表示。晶体结构在倒易空间的倒易象是分析X射线衍射图和电子衍射图的基础。在一般情况下,从倒易点阵上的任意初基

胞变换为与之对应的正点阵上的初基胞,再以此正点阵上的初基胞进行尼格里约化,最后才可能获得正确的布喇菲胞.这是晶体结构分析的最重要的第一步.倒格点的消失规律和倒格点平面的绘制皆是分析晶体衍射图(特别是电子衍射图)必要的依据.倒易点阵的数学表述还有助于各项晶体学计算.我们将正点阵中的晶面族表示成倒易空间的晶面基矢便于与晶向基矢配合起来简化晶体学计算公式的推导;特别是,我们根据倒易点阵上的 δ 函数和三角级数函数的数学表述,可以在倒易点阵上引入各级谐波的同位相平面族,并用来阐明倒易点阵与正点阵在周期性上的不同步,这有助于理解X射线晶体学中 n 级衍射的几何概念.第二版对于上述倒易点阵各方面的理论均结合实例作了较详细的论述.

(六) 晶体学坐标系即所谓晶体定向,是晶体学中为适应晶体的对称而采用来描述晶体结构中各种几何图象位置关系的坐标系,向来视晶体对称的不同而有多种坐标系.有时所用的坐标系对某些问题的探讨显得过于繁杂不便于计算.例如晶体空间的六方四轴坐标系转换到倒易空间后就会在晶体学计算上造成混乱.在第二版中,首先阐明由晶体的对称建立坐标系的原理并论述各种坐标系之间的转换关系;其次提出建立六方四轴坐标系的理论,根据这个理论我们理清了在四轴坐标系下正空间和倒易空间中各项指数的计算和转换关系,我们还在晶体学中建立不受晶体对称限制的笛卡儿直角坐标系,这是一种正空间和倒易空间共用、不随晶体单胞参数而变的坐标系;我们论述了这种坐标系与晶体学标准坐标系间的转换以及在晶体学计算和晶体投影作图上的应用.

(七) 球密堆与配位多面体构型是考虑晶体结构中局域的度量性与对称性而建立的晶体原子结构的几何构型.它们与空间点阵模型相配合有助于探讨复杂的晶体结构.在第二版中论述了有关这两种几何构型的基础理论;根据这些较简略的理论扼要地介绍某些复杂合金和分子晶体结构以及更复杂的高聚物和蛋白质等的晶体结构的几何构型.

(八) 一、二维周期结构是三维晶体结构向低维方向扩展的原子层次的结构,也可以认为是广义晶体结构的一种.在第二版中讨论了几种描述一、二维周期结构对称性的对称群——柱群、带群和层群.

与第一版对照,第二版删去了易于从各种手册或参考书查阅到的“晶体结构的一些主要的类型”这一章.

第二版的内容从1980年起曾作为教材给研究生讲授过九次.适于研究生用作教材或参考的章节均用“*”号标记出来,未标记“*”号的章节可供大学本科生选用.

本书编撰体制以及各项理论阐述和论证的方式是著者40年来从事晶体学、X射线晶体学、电子衍射晶体学的教学和科研两方面经验总结而成.个人经验可能囿于偏狭,甚至有不易察觉的错误,尚望不吝指正.

肖序刚

1987年9月于沈阳

主要符号分类表

一、格子(点阵)

Γ, A	空间格子(点阵), 平移格子(晶格)
P	初基格子(P 格子)
C, Γ^b	底心格子(C 心格子)
A, B	侧面心格子(A 心, B 心格子)
I, Γ^v	体心格子(I 心格子)
F, Γ^f	面心格子(F 心格子)
$R \quad \Gamma_{rh}$	菱面体格子
$\Gamma_{l(m, n, p, q, r, s)}$	三斜(单斜、正交、四方、六方、立方)格子
p	平面初基格子
c	平面中心格子
$P_s, F_s, P_a, P_b, P_c, P_A, P_C, P_I, A_a, A_c, C_a, C_c, A_C, C_A, I_C, R_I$ 均为三维二色布喇菲格子的符号, 右下角的字母 s, a, b, c, A, C, I 的意义, 参看图 3-8-11	
p_b, p_c, C' 为二维二色布喇菲格子的符号, 参看图 3-8-10	
Γ_δ	以无穷小矢量 $\delta_x, \delta_y, \delta_z$ 为基矢的空间格子
L_R, L_t	格点列(基矢为 R 或 t)
π_a, b	格点网(基矢为 a, b)
t	格子基矢
R	格矢
Γ^*	Γ 格子的倒易格子(点阵)

二、单胞及单胞参数

$\{t_1, t_2, t_3\}$	由三基矢 t_1, t_2, t_3 构成的三维单胞
$\{R_1, R_2, R_3\}$	由三格矢 R_1, R_2, R_3 构成的三维单胞
$\{a, b, c\}$	三维布喇菲单胞 惯用单胞
$\{a_0, b_0, c_0\}$	三维约化胞
$\{a, b\}$	二维布喇菲单胞
$\{\lambda_0, \mu_0\} \{a_0, b_0\}$	二维约化胞
L	初基胞
U	正则化胞
B	布尔格胞

N

P, A, B, C, I, F, R

hR

$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$

f

d

v_a

A_a

$\{a^*, b^*, c^*\}$

v_a^*, v_b

v_P, v_I, v_F, V_C

三、点、直线、平面的指数和符号

$[[xyz]], [[uvw]]$

$[L_t]$

$[uvw]$

(hkl)

$\langle uvw \rangle$

$\{hkl\}$

π_0

π_n 和 (π)

$[[x^*y^*z^*]], [[hkl]]^*$

$(uvw)^*$

$[hkl]^*$

$[LMN]$

$(L^*M^*N^*)$

$hkl; HKL$

$d_{(hkl)}$

$d_{(uvw)^*}^*$

π_0^*

$[UVTW]$

$(hkil)$

$a, b, c, \dots$

四、矢量

R 和 r

尼格里胞

P, A, B, C, I, F, R 格子的单胞

六方 R 单胞, 六方双心单胞

布喇菲单胞参数, 晶胞参数

单胞面对角线的长度

单胞体对角线的长度

正空间单胞体积

正空间二维单胞面积

由布喇菲单胞基矢 a, b, c 的倒格矢构成的倒易单胞

倒易单胞的体积

P, I, F, C 格子单胞的体积

正空间的点坐标, 格点坐标

基矢为 t 的格点直线束

格点直线束的指数, 晶向符号, 晶带轴符号

格点平面族指数, 密勒指数, 晶面指数晶面族符号

等位晶向组符号

等位晶面族符号, 单形符号

过原点的格点平面

第 n 层格点平面和格点平面族

倒易空间的点坐标, 倒格点坐标

倒格点平面族指数

倒格点直线束指数

笛卡儿直角坐标下晶向指数

笛卡儿直角坐标下晶面指数

同位相平面族指数

晶面族 (hkl) 的面间距离

倒格点平面族 $(uvw)^*$ 的面间距离

过原点的倒格点平面(相当于晶带)

六方晶系四轴坐标系下的晶向指数

六方晶系四轴坐标系下的晶面指数

表示具有点位对称的点集合之威柯夫字母

空间格子的格矢和位置矢

G 和 g	倒易空间格子(倒易点阵)的倒格矢和倒易矢
a, b, c	布喇菲单胞的三基矢
a_0, b_0, c_0	约化胞的三基矢
a^*, b^*, c^*	倒易单胞的三基矢
t	格点列的基矢, 平移矢量
τ	螺转和象移中的平移成分
$v = t + \tau$	对称操作中平行移动的矢量
$G_{(hkl)}$	晶面族 (hkl) 的矢量, 晶面矢
G_n, G_{HKL}	同位相平面族 HKL 的矢量
G_1	晶面基矢

五、矩阵

$\mathcal{Q}_0$	$\mathcal{Q}(uvw)$ 的矩阵
$\mathcal{Q}'_0$	尼格里矩阵, 度量矩阵
N	约化胞转换为惯用单胞的矩阵
M	由布尔格胞转换为尼格里胞的矩阵
H, K	$ H =1, K =1$ 正模方阵
S	$ S >1$ 的整数方阵
T	$ T <1$ 的整数方阵
I	单位矩阵
$\mathcal{C}$	位置对称的点操作矩阵
$\mathcal{C}'$	反对称的点操作矩阵
$\mathcal{A}$ 或 $[\alpha_{ij}]_{i,j=1,2,3}$	由 $\{a, b, c\}$ 转换到 $\{A, B, C\}$ 的矩阵
$\mathcal{B}$ 或 $[\beta_{ij}]$	由 $\{A, B, C\}$ 转换到 $\{a, b, c\}$ 的矩阵
$\mathcal{B}_0$	由尼格里胞转换为布喇菲胞的矩阵
$\mathcal{A}_0$	由布喇菲胞转换为尼格里胞的矩阵
$\mathcal{D}$	由 $\{i, j, k\}$ 转换到 $\{a, b, c\}$ 的矩阵
$\mathcal{G}$	由 $\{i, j, k\}$ 转换到 $\{a^*, b^*, c^*\}$ 的矩阵
$\mathcal{R}$	正空间基矢 a, b, c 的度量张量 (3×3 对称矩阵)
$\mathcal{P}$	倒易空间基矢 a^*, b^*, c^* 的度量张量 (3×3 对称矩阵)
	各晶系的 $\mathcal{R}$ 和 $\mathcal{P}$ 参看表 5-1-1

六、函数及函数变换

$\mathcal{L}(uvw)$	正定三元二次型
$\rho_\infty(x)$	物质分布函数

$\delta(x)$

$H(x)$

Φ

Φ^{-1}

*

七、对称要素和对称操作

C_n

n

$C_2', C_2^I, C_2^{II}, C_2^{III}$

α

σ

m

σ_h

σ_v

σ_d

i

I

$C_{in} (n=1, 2, 3, 4, 6)$

$\bar{n}$

S_n

$\bar{n}$

t

$n_p (p=1, 2, \dots, n-1)$

$a(b, c)$

n

d

g

C_n', n'

σ', m'

$C_{in}', \bar{n}'$

δ 函数

Heaviside 函数

傅里叶变换

逆傅里叶变换

两个函数卷积符号

n 次旋转轴的熊夫利符号

n 次旋转轴的国际符号

垂直于主轴 C_n 的二次旋转轴

旋转轴的基转角

反映面的熊夫利符号

反映面的国际符号

垂直主轴的水平反映面

过主轴及水平坐标轴的竖直反映面

过主轴平分水平坐标轴交角的竖直反映面

反演中心的符号

反演中心的国际符号

反演旋转轴(象转轴)的字母符号

n 次反演旋转轴(象转轴)的国际符号

n 次反映旋转轴(镜转轴)的字母符号

n 次反映旋转轴(镜转轴)的数字符号

平移矢量为 t 的平移轴

n 次螺转轴的國際符号

象移矢量为 $\frac{1}{2}a \left(\frac{1}{2}b, \frac{1}{2}c \right)$ 的象移面

象移矢量为 $\frac{1}{2}(a+b)$ 或 $\frac{1}{2}(b+c)$, $\frac{1}{2}(c+a)$ 的

象移面

象移矢量为 $\frac{1}{4}(a+b)$ 或 $\frac{1}{4}(b+c)$, $\frac{1}{4}(c+a)$ 的象移

面

平移成分为 τ 的象移面的通称; 平面结构中的象移线

反旋转轴

反反映面

反象转轴

$s'_n, \bar{n}'$	反镜转轴
t'	反平移轴
$n'_p (p=1, 2, \dots, n-1)$	反螺转轴
a', b', c', n', d', g'	与 a, b, c, n, d, g 相应的反象移面
s	对称要素通称符号
s'	反对称要素通称符号
R	点对称操作通称符号
R'	反点对称操作通称符号
S	位置对称操作通称符号
S'	反(状态)对称操作通称符号
$E, 1$ 或 e	单位操作, 恒同操作
$\Theta, 1'$	反恒同操作
$C, n, C_i, \bar{n}$	旋转; 象转 $n=2, 3, 4, 6$
$C', n'; C'_i, \bar{n}'$	反旋转; 反象转 $n=2, 3, 4, 6$
T, T'	平移, 反平移
M, M'	反映, 反反映
$M(\tau); C(\tau)$	象移; 螺转
$\langle R v \rangle$	对称操作的赛兹算符

八、对称要素的图形符号(参看表3-1-1)

九、晶体学群、非晶体学群、抽象群论

$\mathcal{C}_n (n=1, 2, 3, 4, 6)$ (单轴群)

$\mathcal{C}_{ni} (\mathcal{C}_i, \mathcal{C}_{2i}=\mathcal{C}_s, \mathcal{C}_{3i}=\mathcal{I}_6, \mathcal{C}_{4i}=\mathcal{I}_4, \mathcal{C}_{6i}=\mathcal{C}_{3i})$

$\mathcal{C}_{nh}$

$\mathcal{C}_{nv}$

$\mathcal{C}_{nd}$

$\mathcal{D}_n$ (双面群)

$\mathcal{D}_{nh}$

$\mathcal{T}$ (四面体群), $\mathcal{T}_h, \mathcal{T}_d$

$\mathcal{O}$ (八面体群), $\mathcal{O}_h$

$\mathcal{C}_\infty, \mathcal{C}_{\infty v}, \mathcal{C}_{\infty h}, \mathcal{D}_\infty, \mathcal{D}_{\infty h}, \mathcal{K}_\infty, \mathcal{K}_{\infty h}$

$\mathcal{C}_5, \mathcal{I}_{10}, \mathcal{C}_{5h}, \mathcal{C}_{5v}, \mathcal{D}_{5d}, \mathcal{D}_5, \mathcal{D}_{5h}$

$\mathcal{I}, \mathcal{I}_h$ (二十面体群)

$\mathcal{D}$

$\mathcal{D}^+$

具有五次对称轴的非晶学点群的熊夫

利符号

点群, 空间群的点群

正常点群

$\frac{1}{2}\mathcal{D}^+$	半阶正常点群
$\mathcal{D}^-$	非正常点群
$\mathcal{D}'$	空间群的与商群 $\mathcal{L}$ 同构的点群
Φ	费多洛夫群
$\mathcal{T}$	平移群
$\mathcal{P}$	空间群
$\mathcal{M}$	苏布尼可夫点群(二色点群, 黑白点群)
$\mathcal{M}$	苏布尼可夫空间群(二色空间群, 黑白空间群)
$\mathcal{P}_m^n$	n 维空间群的 m 维子群
$t_{[n]}$	空间群的指标 i 为 $[n]$ 的最大等平移子群(t 子群)
$k_{[n]}$	空间群的指标 i 为 $[n]$ 的最大等晶类子群(k 子群)
$S(X^{(q)})$	单位晶胞中 X 位置上阶为 q 的点位对称群
$\mathcal{G}, \mathcal{H}, \mathcal{K}$	群的一般符号
$\mathcal{H} \subset \mathcal{G}$	$\mathcal{H}$ 为 $\mathcal{G}$ 的子群
$[S]$	共轭类, S 为代表元素
$g \in \mathcal{G}$	g 是群 $\mathcal{G}$ 的元素
$h \notin \mathcal{G}$	h 是不属于群 $\mathcal{G}$ 的元素
$\mathcal{G} \cong \mathcal{H}$	群 $\mathcal{G}$ 与群 $\mathcal{H}$ 同构
$\mathcal{G} \sim \mathcal{H}$	群 $\mathcal{G}$ 与群 $\mathcal{H}$ 同态
$\ker \phi$	同态核
G	商群
$\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$	直积
$\mathcal{H} \odot \mathcal{K}$	半直积
$\mathcal{H} \circ \mathcal{K}$	弱直积
$[i]$	子群的指标

230 种空间群的符号参看表 3-6-1.

17 种平面群的符号参看表 3-6-2.

122 种苏布尼可夫三维点群, 1651 种苏布尼可夫空间群, 31 种苏布尼可夫二维点群, 80 种苏布尼可夫平面群, 分别参看表 3-8-1, 3-8-4, 3-8-2, 3-8-3.

十、球密堆、配位型结构、分子晶体结构

$ AB AB $	六方型球密堆结构
$ ABC ABC $	立方型球密堆结构
$ hk hk \dots$	球密堆 h, k 字母符号(详见 §7-2)
$ ++ -- $	球密堆海格(Hägg)符号(详见 §7-2)

$(23)_3$	球密堆日丹诺夫符号(详见§7-2)
nH, nR	球密堆拉姆斯德尔符号, 多型结构符号
CN 或 cn	配位数
$R_{阳}, R_{阴}$	离子半径
$R-$	分子链的侧基
d, l	碳原子四个键中主链外二个键的记号
θ	分子链构象的扭角
t, g, c, s	分子链构象异构体的记号
p, q	螺旋构象螺旋规律的记号, p 为重复单位内结构单元数, q 每个等同周期旋转圈数
α, φ, ψ	确定分子链中前后各键相互取向的角度
Gly, Ala, ...	α -氨基酸的符号参看表 7-4-2
ϕ, ψ	多肽链中的构象角, 构象参数
α_k	右手 α 螺旋构象
n_m	多肽链螺旋结构符号
C (胞嘧啶), T (胸腺嘧啶), A (腺嘌呤), G (鸟嘌呤)	
U (尿嘧啶)	DNA 和 RNA 多核苷酸链上含氮碱基符号

目 录

主要符号分类表	4
---------	---

第一章 绪论	1
--------	---

§ 1-1 晶体的基本性质	2
---------------	---

(一) 晶体与非晶体在宏观性质上的区别	2
---------------------	---

(二) 晶体与非晶体在微观结构上的差异	4
---------------------	---

(三) 晶体结构与晶体缺陷的相互关系	5
--------------------	---

§ 1-2 晶体结构几何理论的历史发展简况	7
-----------------------	---

(一) 晶体多面体几何研究中的几个经验定律	7
-----------------------	---

(二) 最早提出的晶体结构几何理论	9
-------------------	---

(三) 晶体结构几何理论新发展的几个方面	10
----------------------	----

第二章 晶体结构的周期性	16
--------------	----

§ 2-1 空间点阵及其数学描述	16
------------------	----

(一) 空间点阵的概念	16
-------------	----

(二) 空间点阵的矩阵表示	21
---------------	----

* (三) 描述晶体结构周期性的物质分布函数	24
------------------------	----

* (四) 实际晶体结构周期性的欠完整及其平均	32
-------------------------	----

§ 2-2 晶体空间的划分	35
---------------	----

(一) 晶体空间的划分和填满	35
----------------	----

(二) 空间点阵的划分与 14 种布喇菲格子	37
------------------------	----

(三) 空间点阵划分的唯一性问题	39
------------------	----

* § 2-3 尼格里胞	41
--------------	----

(一) 约化胞的基本几何特征	41
----------------	----

(二) 尼格里胞的描述	46
-------------	----

* (三) 关于尼格里胞的计算法	51
------------------	----

(四) 尼格里胞、布尔格胞与布喇菲胞之间的相互关系	56
---------------------------	----

* § 2-4 衍生格子	59
--------------	----

(一) 衍生格子的概念	59
-------------	----

(二) 衍生格子的转换矩阵	61
---------------	----

(三) 衍生格子的尼格里胞和布喇菲胞	65
--------------------	----

* 附录 2-I δ 函数表示成三角级数形式的证明	69
----------------------------------	----

* 附录 2-II 尼格里胞的计算程序	72
---------------------	----

第三章 晶体结构的对称性	78
--------------	----

§ 3-1 晶体结构中的对称操作和对称要素	78
-----------------------	----

(一) 图形的相等	78
-----------	----

(二) 对称图形和对称操作	81
---------------	----

(三) 位置对称和反对称的对称操作和对称要素	83
------------------------	----

§ 3-2 对称操作的运算, 对称要素的组合及对称群的基本概念	96
---------------------------------	----

(一) 对称操作运算的基本性质及共轭变换	96
----------------------	----

(二) 点对称操作的矩阵表示及对称操作的运算符号	99
--------------------------	----

(三) 对称要素的组合	103
-------------	-----

(四) 晶体对称群的基本概念和规则点系	113
---------------------	-----

§ 3-3 点群	115
----------	-----

(一) 晶体结构中的点群	115
--------------	-----

(二) 等位点系、单形和晶向组	125
-----------------	-----

(三) 非晶体学点群和晶体宏观物理性质的对称群	131
-------------------------	-----

* § 3-4 点群的群论基础知识	135
-------------------	-----

(一) 群的定义及乘法表	135
--------------	-----

(二) 共轭类	137
---------	-----

(三) 子群和陪集	140
-----------	-----

(四) 正规子群和 32 种点群的子群隶属	
-----------------------	--

关系	142
(五) 群的同构和同态	145
(六) 商群和直积	147
(七) 32 种点群的直积表示	151
§ 3-5 布喇菲群和平移群	154
(一) 布喇菲格子	154
(二) 14 种布喇菲群与 7 种晶系	159
(三) 单胞与晶胞	162
* (四) 度量对称	166
§ 3-6 空间群 (费多洛夫群)	173
(一) 230 种三维空间群	173
(二) 晶体结构中的等效点系	187
(三) 17 平面群及 230 种空间群在平面上的投影	193
* (四) 表示空间群对称要素及对称操作的点坐标	197
* § 3-7 空间群 (费多洛夫群) 的群论表述	199
(一) 空间群的几个基本特征性质	199
(二) 点式空间群与非点式空间群	202
(三) 用群论原理推导 230 种空间群概述	206
* § 3-8 苏布尼可夫群 (二色群)	212
(一) 苏布尼可夫群的基本概念	212
(二) 苏布尼可夫点群 (二色点群)	215
(三) 苏布尼可夫空间群 (二色空间群)	230
* § 3-9 对称群的群与子群关系	247
(一) 关于对称群的子群的几个基本概念	247
(二) 二维和三维晶体学点群的群与子群关系	248
(三) 极限群的对称缺失及其群与子群关系	251
(四) 空间群和平面群的最大子群和最小超群	254
(五) 衍生结构的群与子群关系	257
* 附录 3-I 集合、映射、代数运算和代数系统	260
第四章 晶体定向和等位对称图形的符号表示	265
§ 4-1 晶体结构中的标准定向及晶体定向转换的基本关系式	265

(一) 晶体定向的意义及标准定向	265
(二) 确定标准定向的几条惯用规则	268
(三) 晶体定向转换的基本公式	270
* (四) 中心型的布喇菲胞转换为初基胞	272
§ 4-2 晶体结构中的特殊定向	276
(一) 三方和六方晶系的几种三轴定向	276
(二) 三方和六方晶系的四轴定向	282
* (三) 单斜、正交和四方晶系的特殊定向和特殊单胞	286
* (四) 晶体结构中的笛卡儿直角坐标系	288
§ 4-3 晶向、晶面和晶带	291
(一) 晶向及晶向指数	291
(二) 晶面、晶面族及晶面指数	294
(三) 晶面指数的计算	296
(四) 晶面和晶面族的矢量表示	300
(五) 晶带的概念及晶带定律	301
§ 4-4 等位对称图形的符号表示	305
(一) 等位晶向组和单形的符号	305
(二) 晶体定向与单形符号的关系	309
* (三) 晶体结构中的点位对称图形及其符号表示	311
第五章 倒易空间和倒易点阵	315
§ 5-1 倒易空间与晶体空间之间的对偶关系	315
(一) 矢量空间的对偶空间	315
(二) 与晶体空间对偶的倒易空间	317
(三) 正空间与倒易空间互相对偶的计算公式	318
§ 5-2 倒易点阵及其基本性质	326
(一) 初基空间格子与初基倒易格子	326
(二) 晶向基矢和晶面基矢	327
(三) 倒格点平面与晶带的对应关系	330
(四) 倒易空间中的坐标系转换	333
(五) 倒易点阵在晶体计算上的几项应用	336
* § 5-3 布喇菲倒易格子及倒格点的出现和消失	340
(一) 与 14 种布喇菲格子相应的倒易格子	340
(二) 中心型布喇菲倒易格子中 $[[HKL]]$ 消	

失与出现的条件	344
(三) 非布喇菲倒易格子中倒格点出现和消失的条件	346
(四) 二维布喇菲倒易格子的类型	350
* § 5-4 倒易点阵中的特殊坐标系	353
(一) 倒易点阵中的笛卡儿直角坐标系	353
(二) 笛卡儿直角坐标系下的晶向矢和晶面矢	355
(三) 倒易点阵中六方四轴坐标系的建立	359
(四) 在四轴坐标系下矢量 r 和矢量 g 的线性表示	364
(五) 六方四轴坐标系与笛卡儿直角坐标系间的转换	367
* § 5-5 倒易点阵的周期性	370
(一) 初基正格子与初基倒易格子间的对应关系问题	370
(二) 正空间函数与倒易空间函数之间的傅里叶变换关系	372
(三) 同位相平面族和谐和余弦波	377
(四) 关于倒易点阵的周期性问题的说明	380
* § 5-6 晶体结构的倒易象	380
(一) 晶体结构的倒易象的基本图象	380
(二) 晶体结构的对称性在倒易象上的反映	382
(三) 倒易点阵上的衍生格子	387
(四) 绘制非初基正格子和晶带的倒易象	390
第六章 晶体投影	396
§ 6-1 球面投影和极射赤面投影	396
(一) 球面投影	396
(二) 极射赤面投影的基本概念	399
(三) 乌耳夫网	400
§ 6-2 极射赤面投影的作图题	402
(一) 基本作图题	402
(二) 特殊问题的极射赤面投影作图	405
* (三) 笛卡儿直角坐标系下晶向矢和晶面矢的极射赤面投影	408
§ 6-3 晶带的极射赤面投影	409
(一) 晶带的极射赤面投影的基本方法	409
(二) 发展晶带法和标准投影图	412
* (三) 零层倒格点平面的极射赤面投影及其绘制	417

§ 6-4 心射切面投影、正投影和径向投影	119
(一) 心射切面投影	119
(二) 正投影	121
* (三) 径向投影及螺旋结构的投影表示	123

第七章 球堆形晶体结构、配位型晶体结构和分子晶体结构

§ 7-1 球体堆垛的基本几何规律	427
(一) 晶体结构中的键型	427
(二) 晶体结构的球体密堆及其基本类型	431
(三) 晶体结构中原子半径和离子半径的概念及其换算原理	436
* § 7-2 球体堆垛的符号与对称群	438
(一) 球体堆垛的符号	438
(二) 球体密堆的对称要素和空间群	440
(三) 等球密堆层的重复性及拉姆斯德尔符号	446
§ 7-3 配位多面体、配位构型和配位型晶体结构	448
(一) 晶体结构中的配位多面体	448
(二) 离子晶体结构中的配位多面体	450
(三) 金属晶体结构中的配位多面体	454
(四) 共价键晶体结构中的配位多面体	458
(五) 氢键晶体结构	461
(六) 配位构型和配位型晶体结构	462
* § 7-4 分子结构和分子晶体结构	465
(一) 分子构型与分子晶体结构的一般概念	465
(二) 非生物高聚物的分子结构和晶体结构	469
(三) 生物高聚物的分子结构和晶体结构	474
* § 7-5 低维周期结构的对称群	487
(一) 一维和二维周期结构及其对称群的标记	487
(二) 直线群、单边带群和双边带群	488
(三) 柱群和螺旋结构的对称	492
(四) 层群	494

索引 502

参考书目 496

注: 标上星号*的章、节、段供研究生及从事晶体微观结构科研工作者参考之用, 未标上*号的章、节、段可以作为大学本科生教材。

第一章 绪 论

晶体学是固体物理学甚至是凝聚态物理学科的一门基础课程。大部分固态物质都是晶体。最近几十年来,无论在现代科学技术领域内抑或是在工农业生产上,广泛应用各种晶体材料。因此,对晶体的研究越来越受到重视。研究晶体的科学“晶体学”随之得到长足的发展。作为晶体学主要组成部分的晶体结构几何理论在晶体结构分析实验的数据处理和晶体结构的理论研究方面,也就更显示出它的重要性。

本世纪 20 年代以来,用 X 射线衍射方法确定了成千上万种晶体的原子结构;从而使抽象的晶体原子结构模型的概括性由这些众多实验结果充分表明出来。晶体原子结构模型正是晶体结构几何理论的依据。70 年代开始由于电子衍射、X 射线能谱与高分辨透射电子显微镜的结合,晶体学家能在结构分析和元素分析的同时直接拍摄晶胞常数为数个埃的晶体结构象。人们对晶体微观结构的理解,已不限于抽象的晶体原子结构模型而且直接观察到实际晶体的结构和缺陷。这项晶体结构研究上的重大突破,丰富了晶体学的内容,也对晶体结构几何理论提出新的任务。

在晶体结构的分析和观察中所获得的有关晶体原子结构的各项数据,是固体物理学家运用量子力学理论和各种波谱实验手段对晶体结构中电子组态进行研究所必需的数据,也是他们用其它实验方法测定晶体的各项物理性能时要用到的数据。因此,晶体学是从事固体科学工作必须掌握的基础知识,而晶体结构几何理论是其中的一个重要环节。

在日常生活中见到的固态物体有晶体也有非晶体。晶体与非晶体在宏观性质上的区别和在微观结构上的差异,是探讨晶体结构几何规律必须首先弄清楚的事项。

在晶体的内部结构中必须具有三维空间的周期重复性。但这是一种理想的晶体结构。实际的晶体,其内部结构往往含有缺陷。晶体结构与晶体缺陷不可截然分离乃是一个客观事实。

晶体结构几何理论的发展过程,开始于对自然界的矿物晶体的多面体形态进行观察;继而将所观察得的感性知识概括为一些阐述晶体几何性质的经验定律;最后在 X 射线衍射实验结果的基础上建立了较完整的关于晶体结构中原子排列的几何理论。有了符合客观规律的理论的指导以及利用能够揭露晶体原子结构真实情况的先进实验手段,推动了近数十年来晶体结构几何理论许多方面的研究工作并取得丰硕的成果。

在自然科学领域内,晶体学是与许多基础学科密切关联的一门基础学科。晶体结构几何理论是晶体学的各个分支学科的基础,晶体结构几何理论在物质结构的研究上占极重要的地位。晶体结构几何理论的知识、研究方法和实验手段在材料工程、冶金工程、地质找矿勘察等方面有广泛的应用。