第七章 晶体结构简介

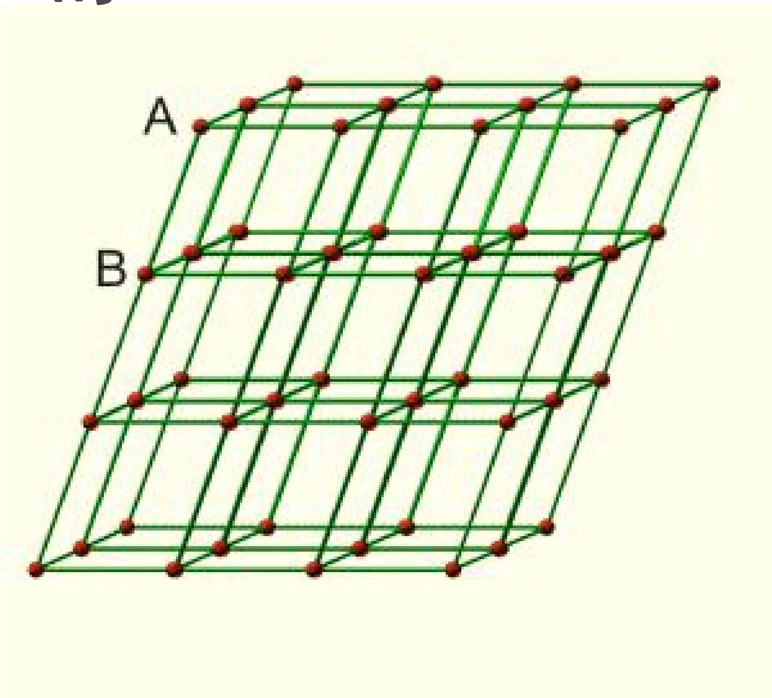
晶体是具有格子构造固体，其内部质点在三维空间都是呈周期重复的规则排列。

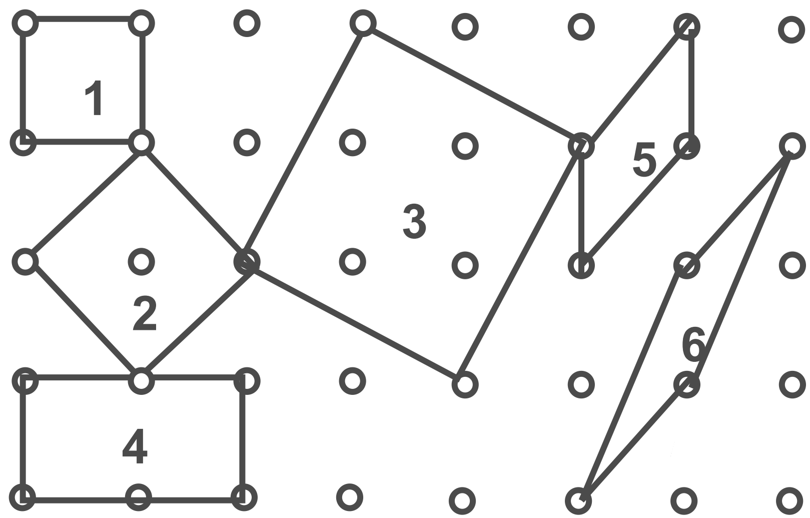
每一种晶体都具一定的内部结构，晶体结构及其化学组成是决定晶体一切性质和现象的根本因素。

目录

一. 平行六面体的选择

对于每一种晶体结构而言，其结点（**相当点**）的分布是客观存在的，但平行六面体的选择是人为的。





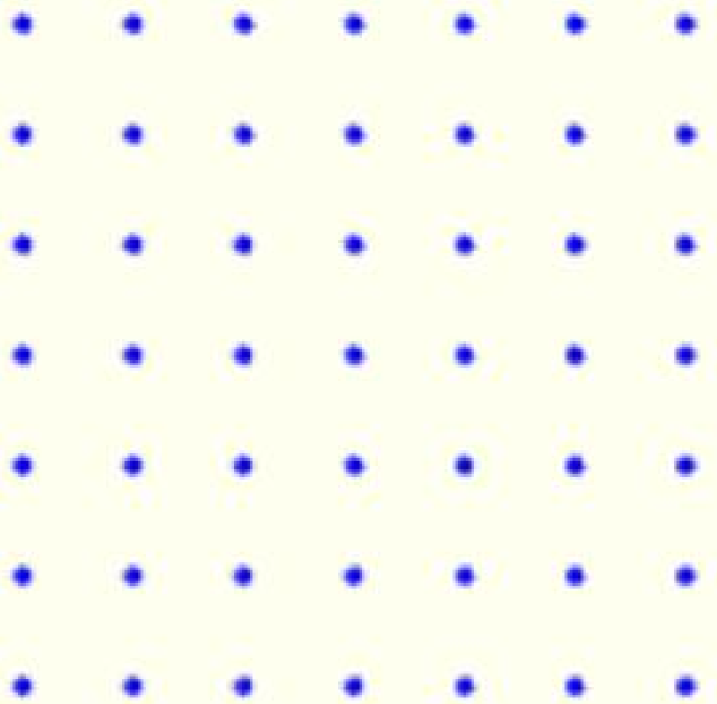
平行六面体的选择原则如下：

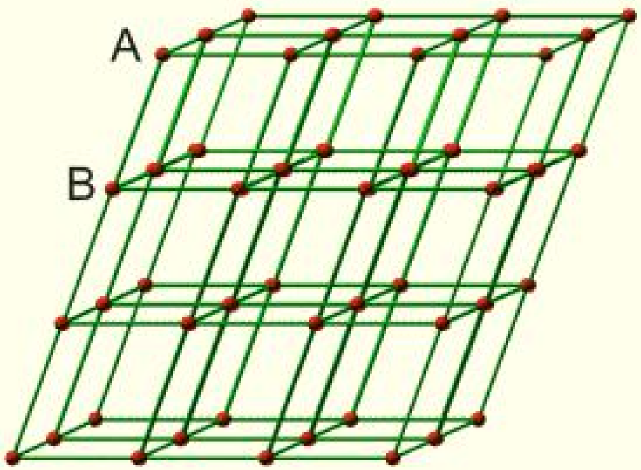
1）所选取的平行六面体应能反映结点分布整体所固有的对称性。

2）在上述前提下，所选取的平行六面体中棱与棱之间的直角关系力求最多。

3）在满足以上二条件的基础上，所选取的平行六面体的体积力求最小。

平行六面体的选择原则实际上和晶体定向时坐标轴的原则是一致的，即尽量使**a = b = c**； $\alpha = \beta = \gamma =$ **90°**

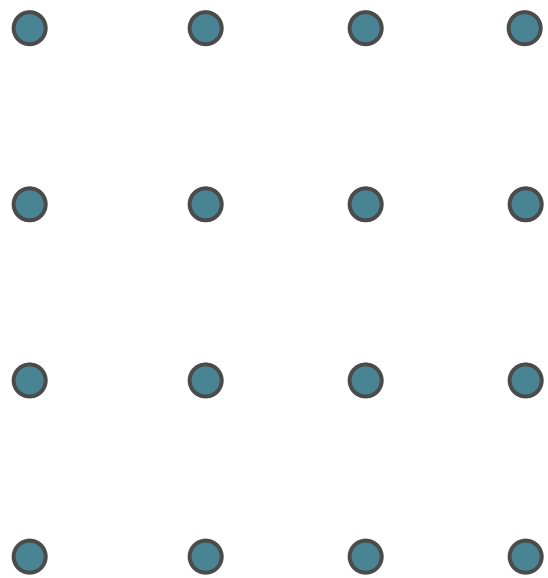




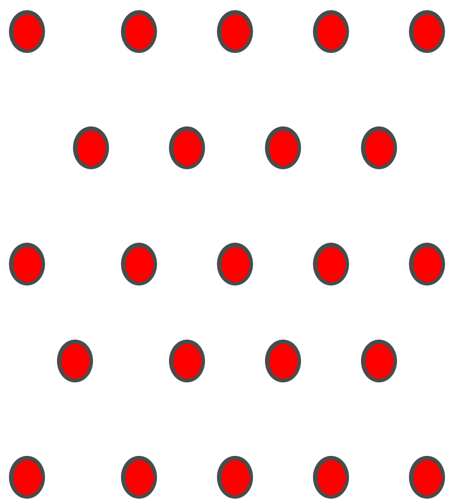
//（001）的截面

图中点的分布具四方对称的特点，显然按第A种方法来选取平行六面体才符合上述原则。第B种方法虽然也符合四方对称，但体积太大；第 C 种方法既不符合对称也无直角； 第D种方法虽然有直角但不符合四方对称。

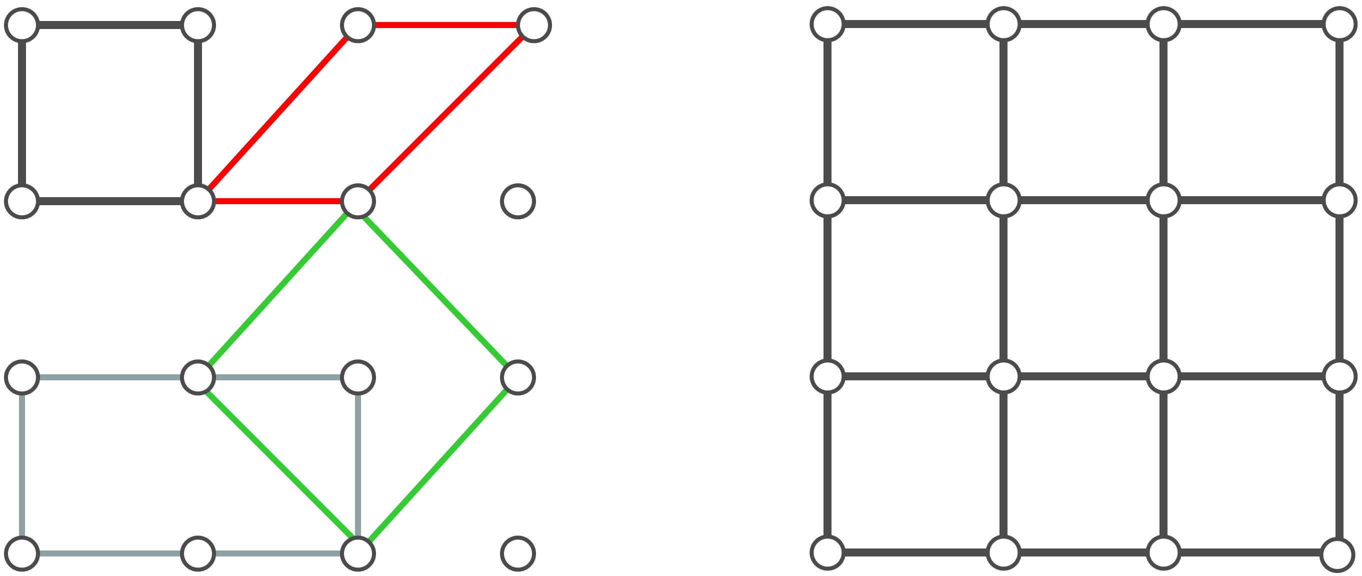
下面两个平面点阵图案中，请同学们画出其空间格子：



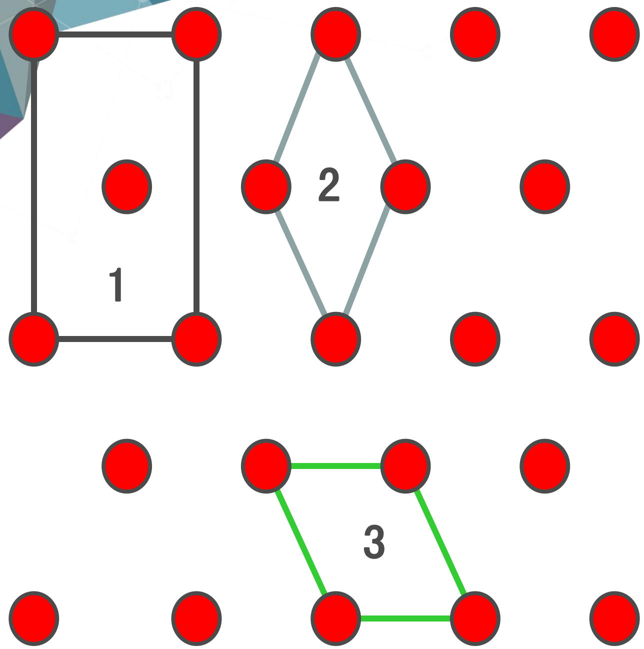
$L^4 4P$

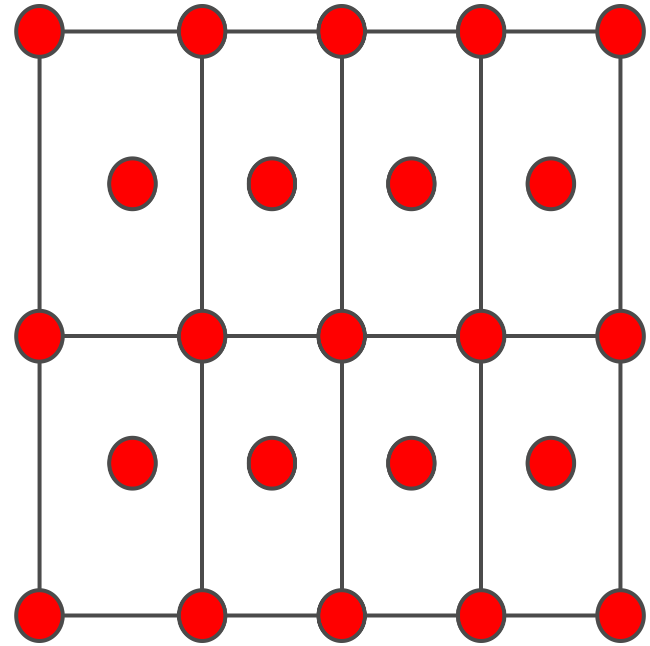


$L^2 2P$



$L^4$4P

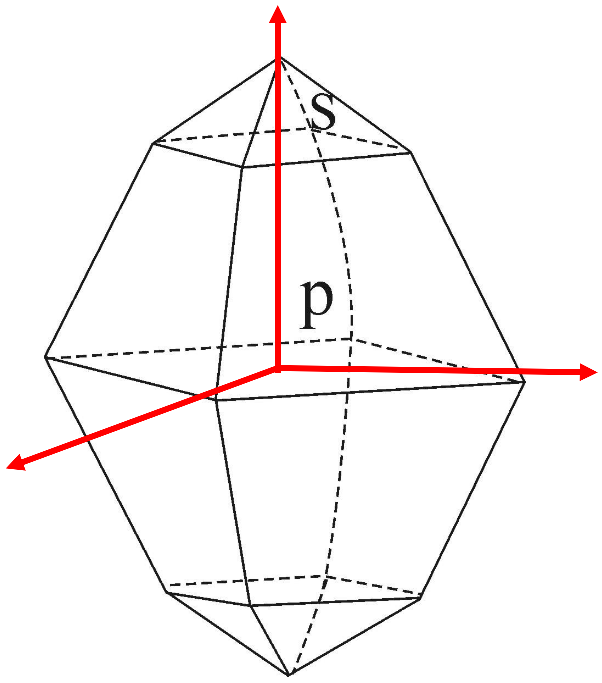


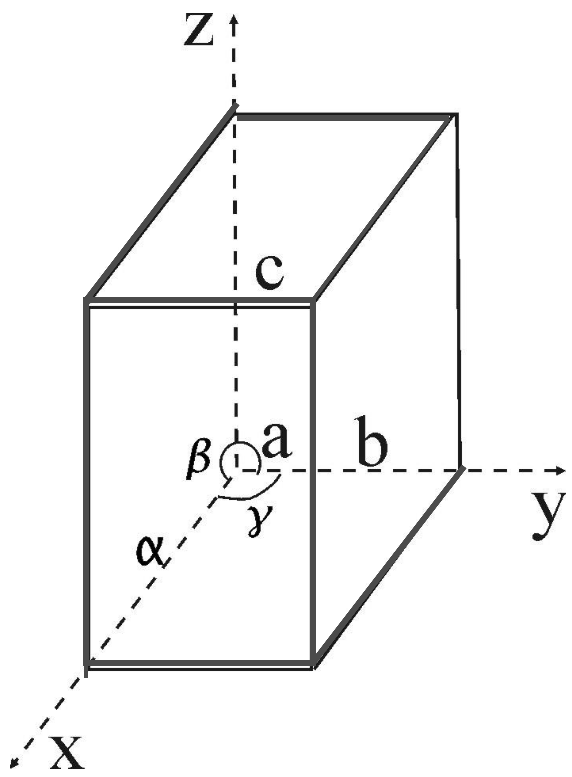


$L^{2}2P$

引出一个问题：空间格子可以有带心的格子。

上述画格子的条件实质上与前面所讲的晶体定向的原则是一致的，也就是说，我们在宏观晶体上选出的晶轴就是内部晶体结构中空间格子三个方向的行列。



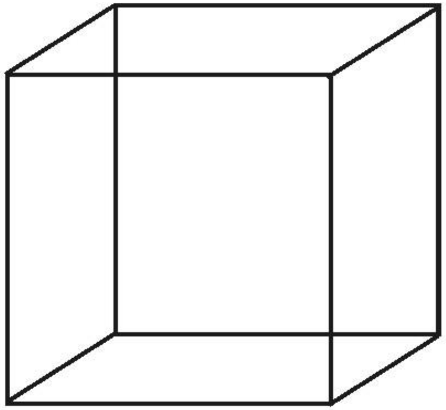


二．各晶系平行六面体的形状和大小

平行六面体的形状和大小是用它的三根棱长（轴长）a、b、c 及棱间的夹角（轴角）α、β、γ 表征。这组参数（a、b、c；α、β、γ）即为晶胞参数。

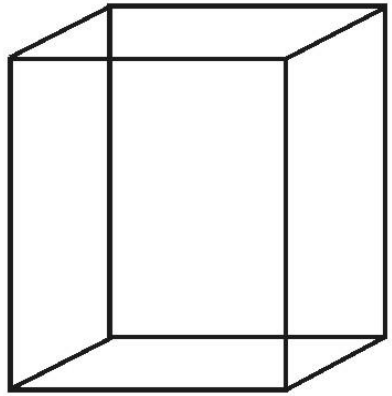
在晶体宏观形态我们可以得到各晶系的晶体常数特点，是根据晶轴对称特点得出的。宏观上的晶体常数与微观的晶胞参数是对应的，但微观的晶体结构中我们可以得到晶胞参数的具体数值。

七个晶系平行六面体的形状不同，对称性质不同，晶胞参数各异，平行六面体形状和晶格常数特点(见下图)。



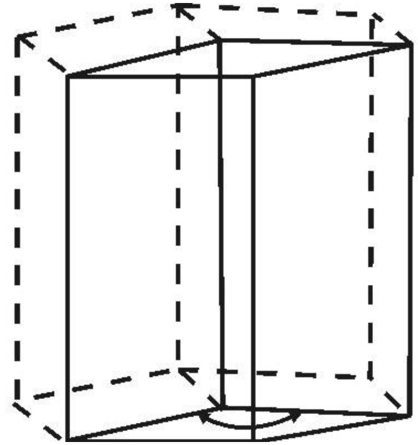
等轴晶系a＝b＝c

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$



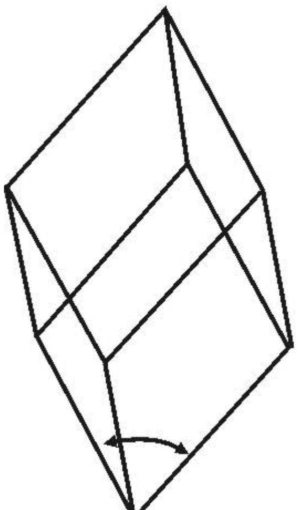
四方晶系a＝b≠c

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$



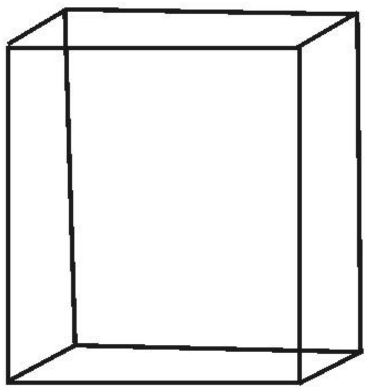
六方晶系a＝b≠c；

$\alpha = \beta = 90°$ $\gamma = 120°$



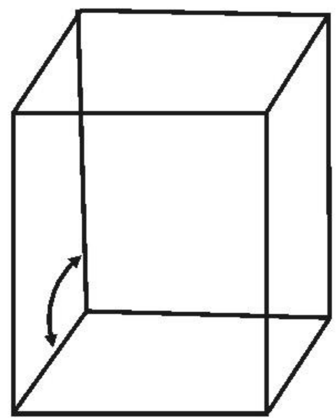
三方晶系a＝b≠c

$\alpha = \beta = 90°$, $\gamma \neq 90°$



斜方晶系a≠b≠c

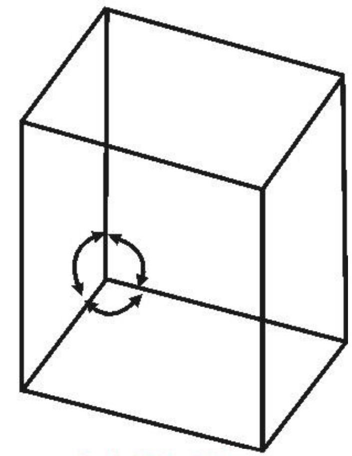
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$



单斜晶系a≠b≠c

$\alpha = \gamma = 90°$

$\beta \neq 90°$



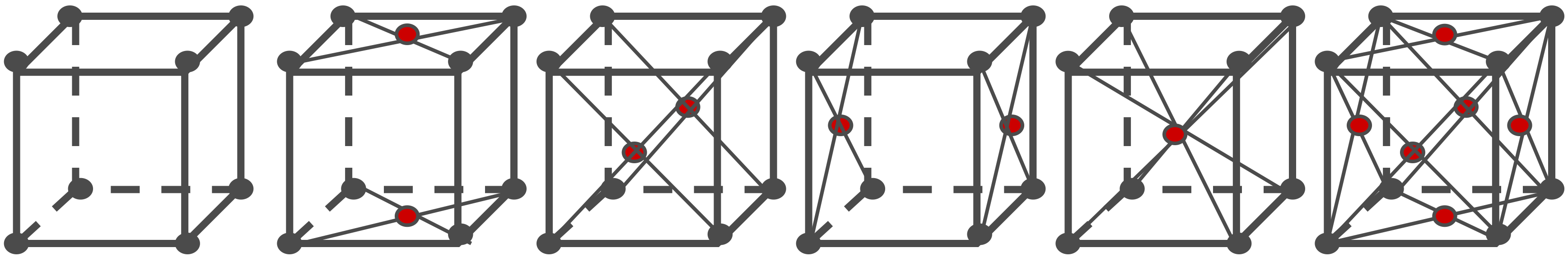
三斜晶系a≠b≠c

$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$

三. 平行六面体中结点的分布（即格子类型）

在按选择原则选择出的平行六面体中，结点（相当点）的分布只能有四种可能的情况，与其对应可分为四种格子类型。

不同类型格子结点在平行六面体中的分布特点。



Ⅰ　Ⅱ　Ⅲ　Ⅳ　Ⅴ　Ⅵ

Ⅰ为原始格子　Ⅱ、Ⅲ、Ⅳ为底心格子（C、A、B心）Ⅴ为体心格子　Ⅵ为面心格子

1）原始格子（*P*、*注：三方晶系菱面体原始格子用R表示*）：结点分布于平行六面体的八个角顶上。

2）底心格子（*C*、*A*、*B*）：结点分布于平行六面体的角顶及某一对面的中心。

3）体心格子（*I*）：结点分布于平行六面体的角顶和体中心。

4）面心格子（*F*）：结点分布于平行六面体的角顶和三对面的中心。

请同学们注意！！

把底心、体心、面心格子称为带心的格子，在前面画格子的例子中已经知道有带心格子的存在，这是因为有些晶体结构在符合其对称的前提下不能画出原始格子，只能画出带心的格子。

四. 十四种布拉维格子

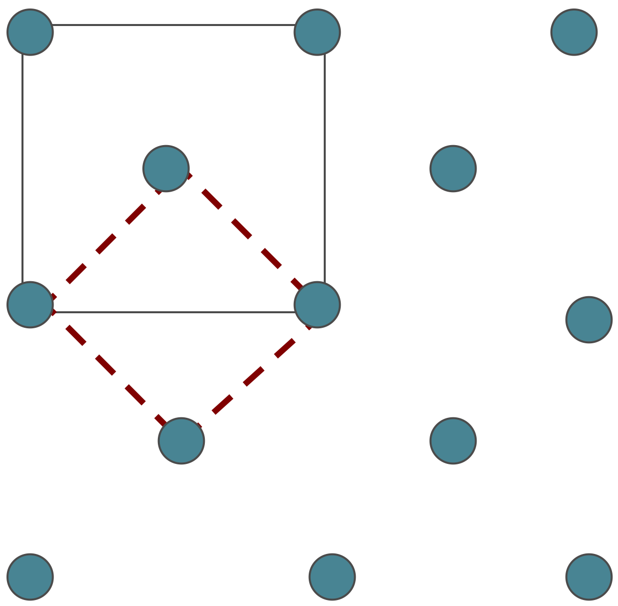
七个晶系→七套晶格常数→七种平行六面体种形状。每种形状有四种类型，那么就应该有7×4=28种空间格子？

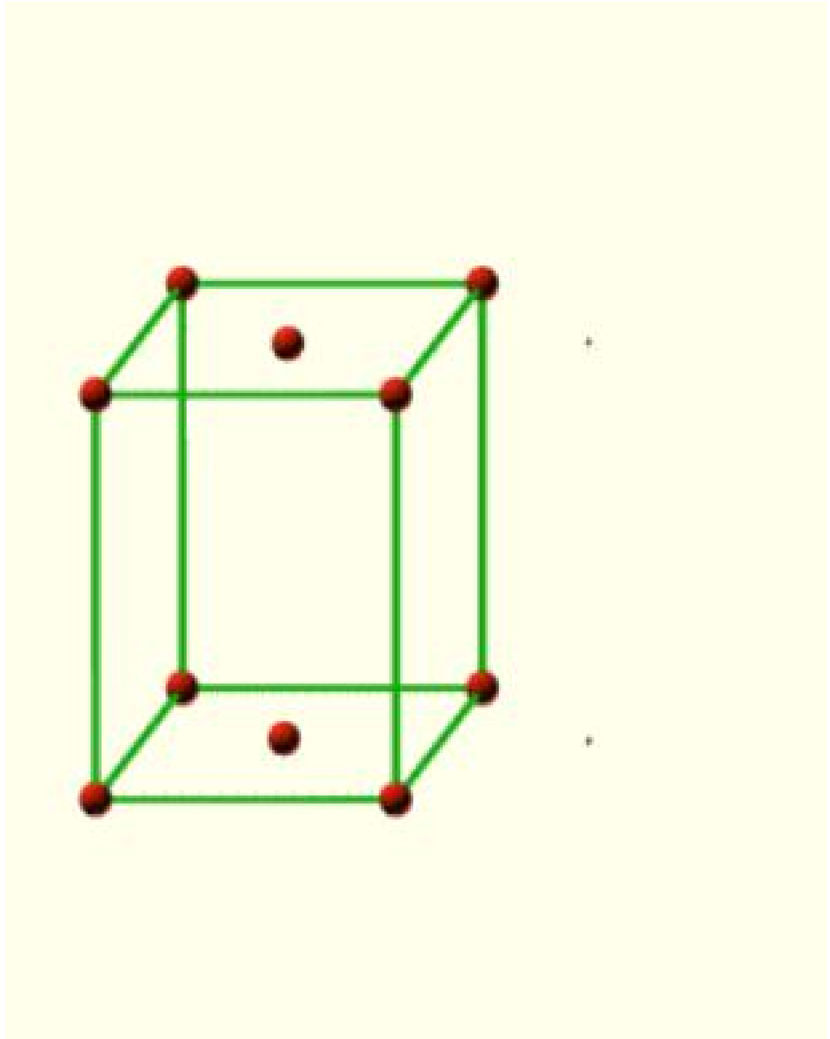
但在这28种中，某些类型的格子彼此重复并可转换，还有一些不符合某晶系的对称特点而不能在该晶系中存在，因此,只有14种空间格子，也叫14种布拉维格子。（A. Bravais于1848年最先推导出来的）

举例说明：

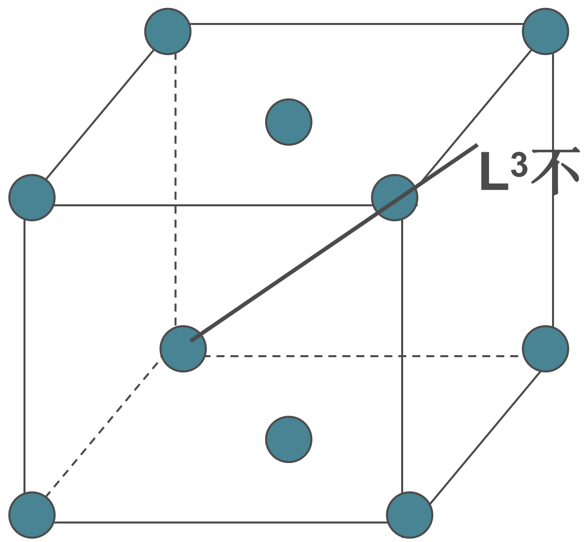
1、四方底心格子可转变为体积更小的四方原始格子 ；

2、在等轴晶系中，若在立方格子中的一对面的中心安置结点，则完全不符合等轴晶系具有$4L^3$的对称特点，故不可能存在立方底心格子。





例 1：四方底心格子 ＝ 四方原始格子



例 2：立方底心格子不符合等轴晶系对称

例如：

1、三斜面心格子（F）可以转变为三斜原始格子（P）

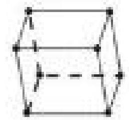
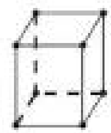
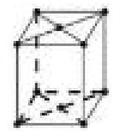
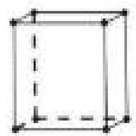
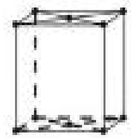
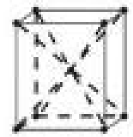
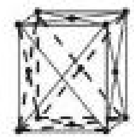
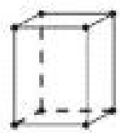
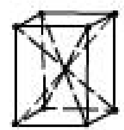
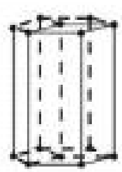
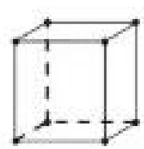
2、单斜 B 心格子可以转变为单斜原始格子（P）

3、三方体心（I）可以转变为三方原始格子（P）

还应指出的是：

六方原始格子为六方柱的顶底面加心，不要误认为六方底心格子。

十四种空间格子见表 2—1（P10）。

	原始格子	底心格子	体心格子	面心格子
三斜晶系		C=P	I=P	F=P
单斜晶系			I=C	F=C
斜方晶系				
四方晶系		C=P		F=I
三方晶系		不符合对称	I=R	F=R
六方晶系		不符合对称	不符合空间格子条件	不符合空间格子条件
等轴晶系		不符合对称