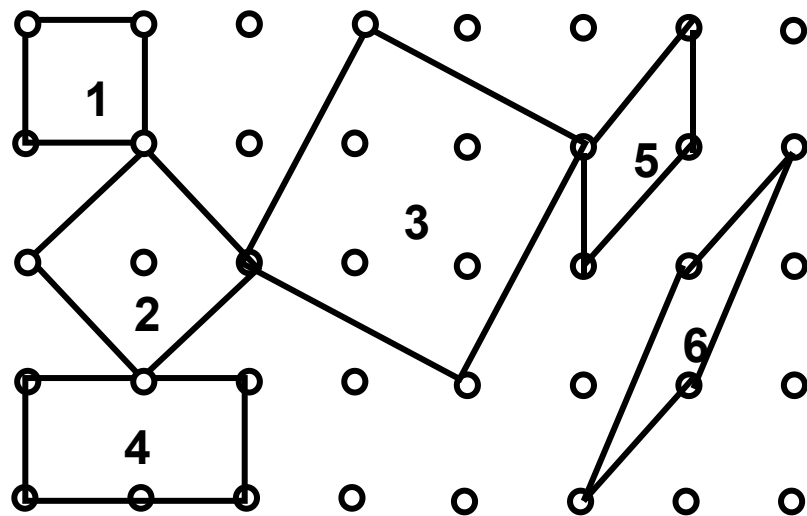
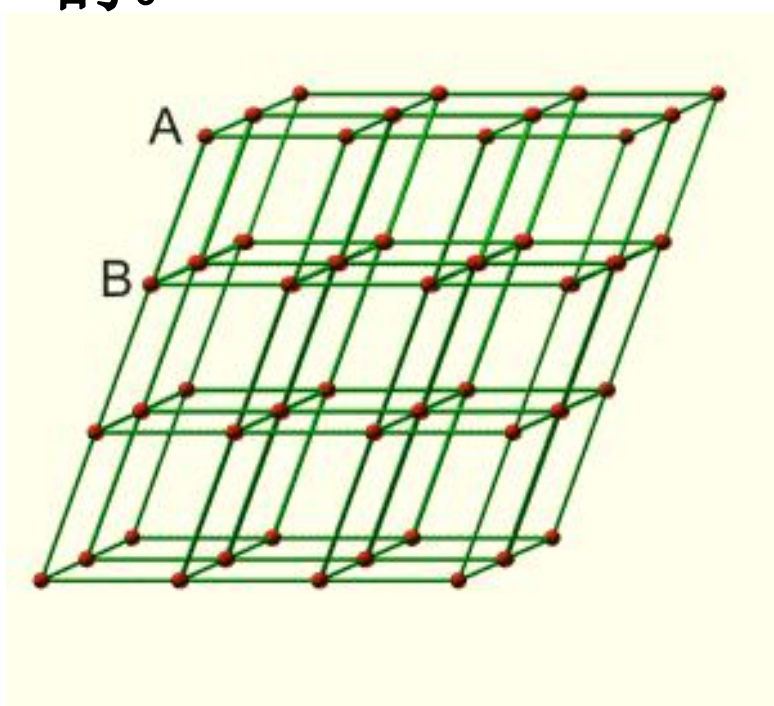


第七章 晶体结构简介

1. 平行六面体的选择

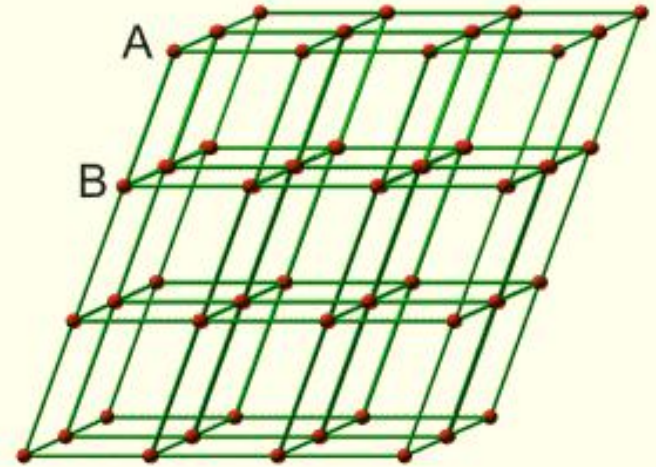
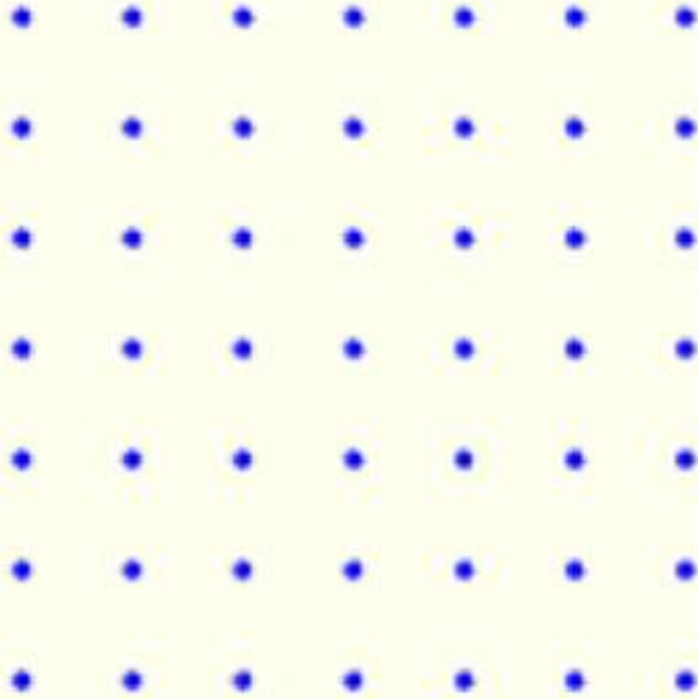
对于每一种晶体结构而言，其结点（相当点）的分布是客观存在的，但平行六面体的选择是人为的。



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 $a = b = c$ ； $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



// (001) 的截面

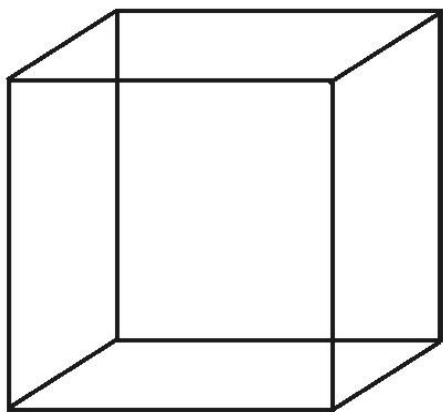
图中点的分布具四方对称的特点，显然按第**A**种方法来选取平行六面体才符合上述原则。第**B**种方法虽然也符合四方对称，但体积太大；第**C**种方法既不符合对称也无直角；第**D**种方法虽然有直角但不符合四方对称。

2. 各晶系平行六面体的形状和大小

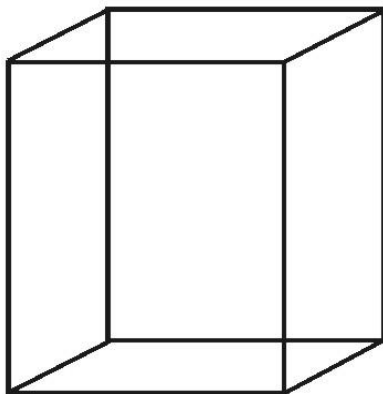
平行六面体的**形状和大小**是用它的三根棱长（轴长） a 、 b 、 c 及棱间的夹角（轴角） α 、 β 、 γ 表征。这组参数（ a 、 b 、 c ； α 、 β 、 γ ）即为**晶胞参数**。

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。

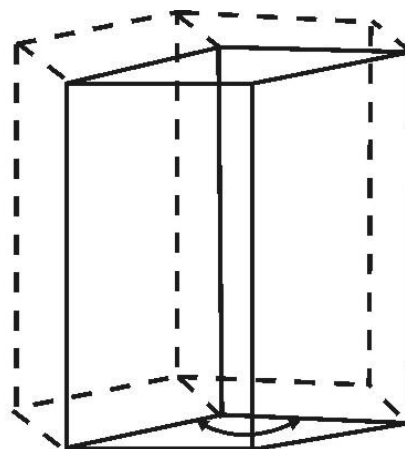
七个晶系平行六面体的形状不同，对称性质不同，晶胞参数各异，**平行六面体形状和晶格常数特点(见下图)**。



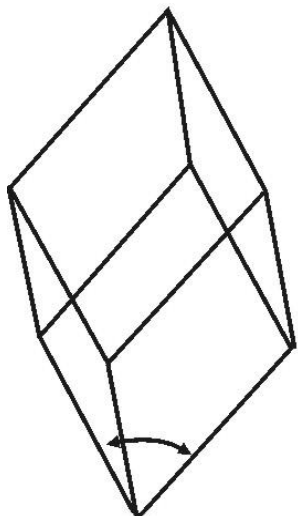
等轴晶系 $a=b=c$
 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



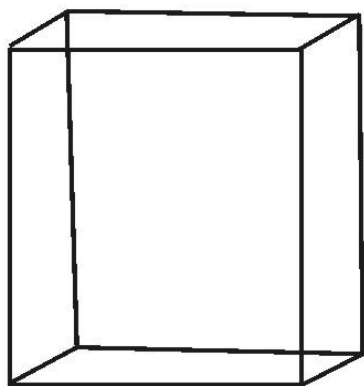
四方晶系 $a=b \neq c$
 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



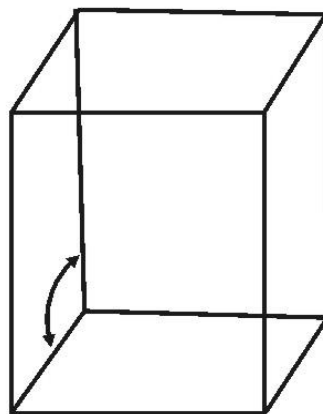
六方晶系 $a=b \neq c$;
 $\alpha=\beta=90^\circ \gamma=120^\circ$



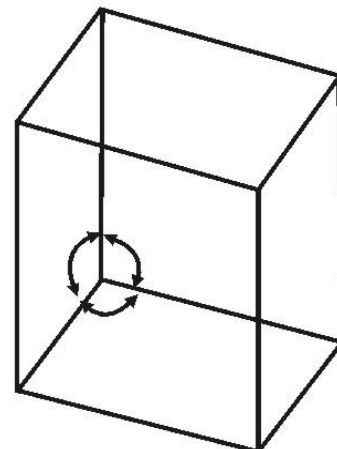
三方晶系 $a=b \neq c$
 $\alpha=\beta=\gamma$
 $\neq 90^\circ$ 、 60°
 $109^\circ 28' 16''$



斜方晶系 $a \neq b \neq c$
 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$

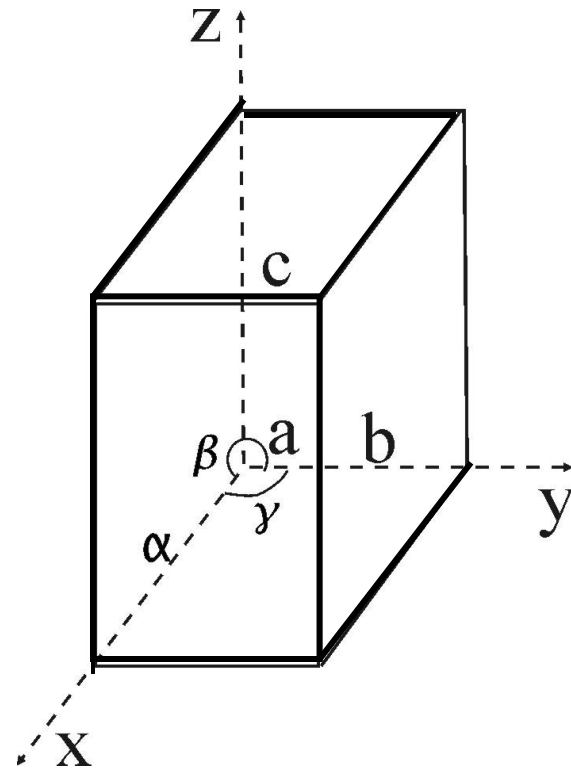
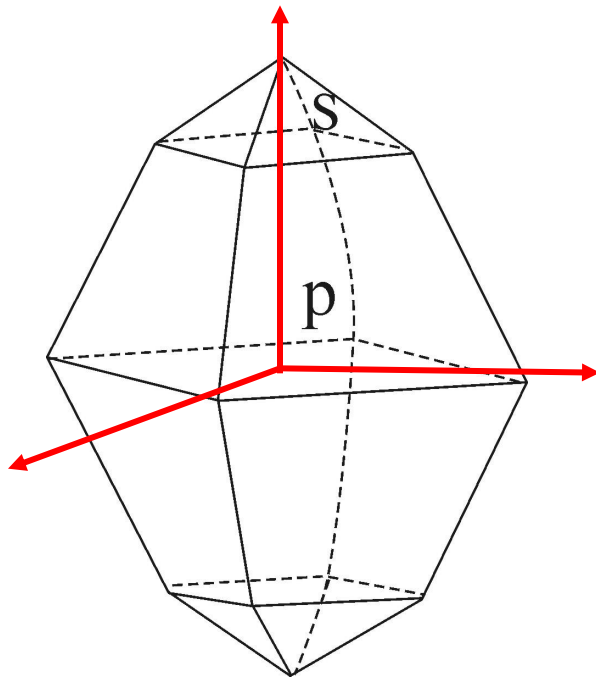


单斜晶系 $a \neq b \neq c$
 $\alpha=\gamma=90^\circ$
 $\beta \neq 90^\circ$



三斜晶系 $a \neq b \neq c$
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

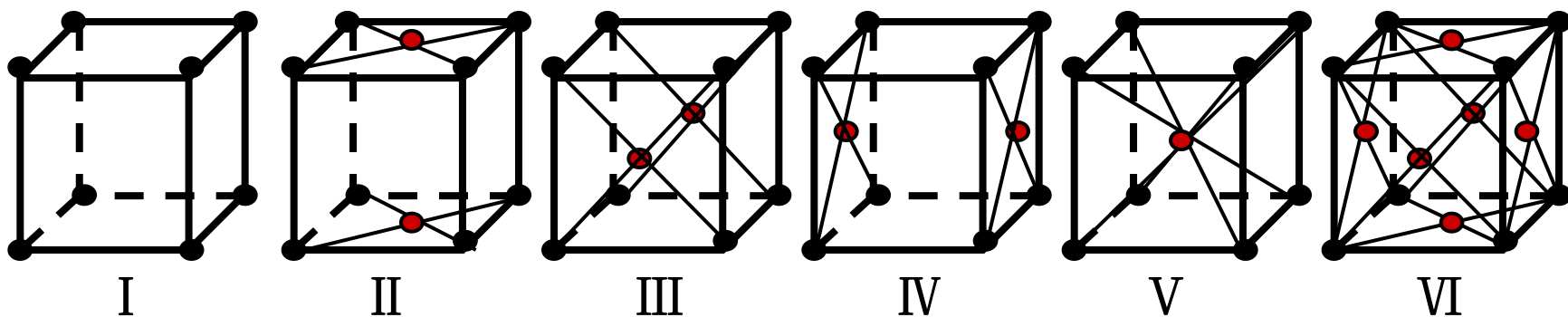
上述画格子的条件实质上与前面所讲的晶体定向的原则是一致的（回忆晶体定向原则？），也就是说，我们在宏观晶体上选出的晶轴就是内部晶体结构中空间格子三个方向的行列。



3. 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 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。

4. 十四种布拉维格子

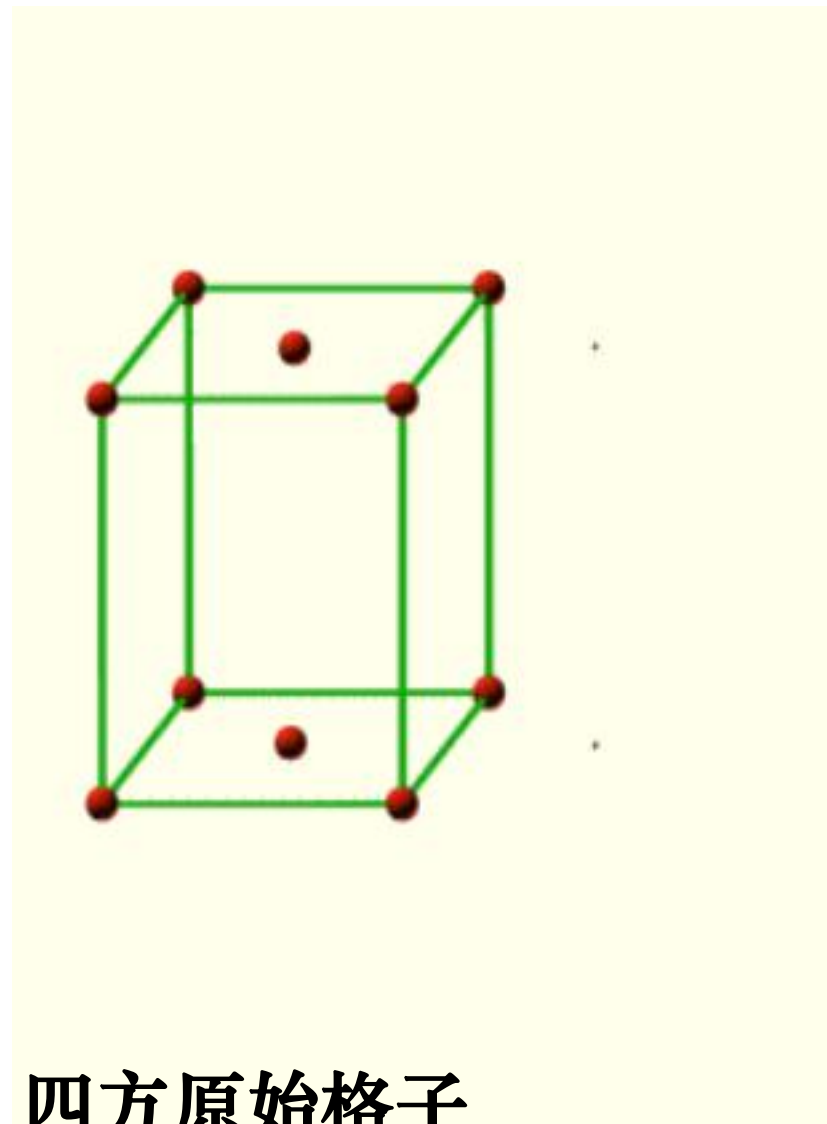
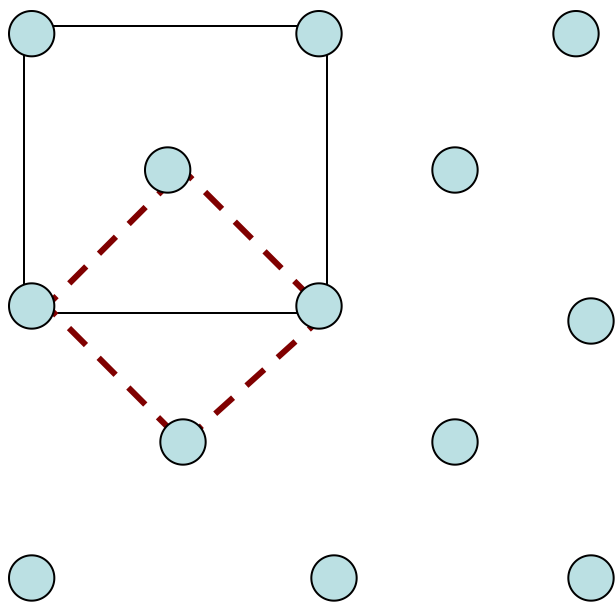
七个晶系→七套晶格常数→七种平行六面体种形状。每种形状有四种类型，那么就应该有 $7 \times 4 = 28$ 种空间格子？

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对的中心安置结点，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

而只有 14 种呢？这是因为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。现举几例略加说明。

如图 8-5、图 8-6、图 8-7、图 8-8 所示：三斜面心格子可转变成体积更小的三斜原始格子（图 8-5）；单斜 F 心格子可转变成体积更小的单斜 C 心格子（图 8-6）；四方底心格子可转变为体积更小的四方原始格子（图 8-7），三方菱面体体心格子可转变成体积更小的三方菱面体原始格子（图 8-8）。

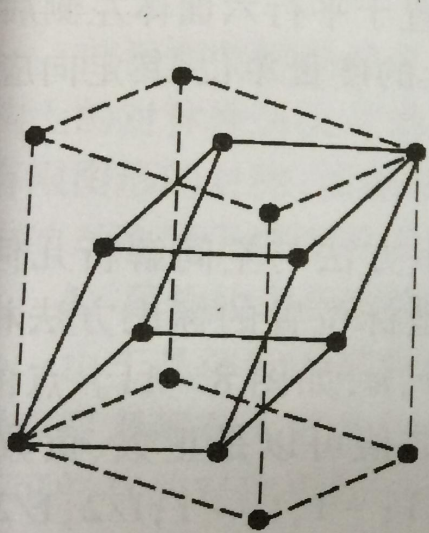


图 8-5 三斜面心格子转变成三斜原始格子

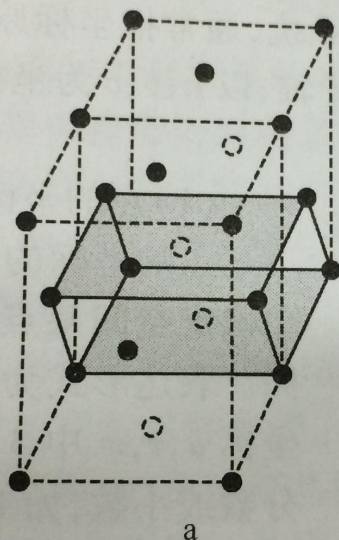


图 8-6 单斜 F 心格子转变成体积更小的单斜 C 心格子

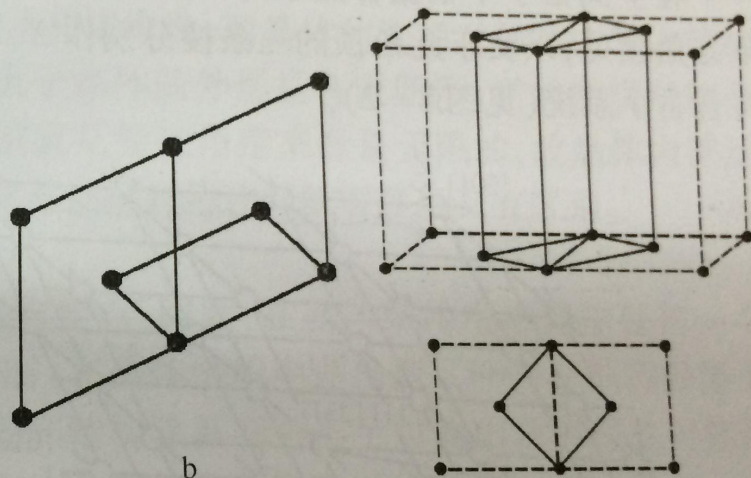


图 8-7 四方底心格子转变为四方原始格子

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 $4L^3$ 的对称特点，因此不可能存在立方底心格子。

以上表明，当去掉这些重复的、不可能存在的空间格子后，在晶体结构中只可能出现 14 种

以上表明:当去掉一些重复的、不可能存在的空间格子后,在晶体结构中只可能出现 14 种空间格子即 14 种布拉维格子。

值得注意的是:六方原始格子可转换为具有双重体心的菱面体格子(图 8-9)。它的体积相当于六方原始格子的 3 倍,即与包括 3 个六方原始格子的六方柱状的底心格子的体积相当。同样,三方菱面体格子也可转换为具有双重体心的六方格子(图 8-10),它的体积相当于菱面体格

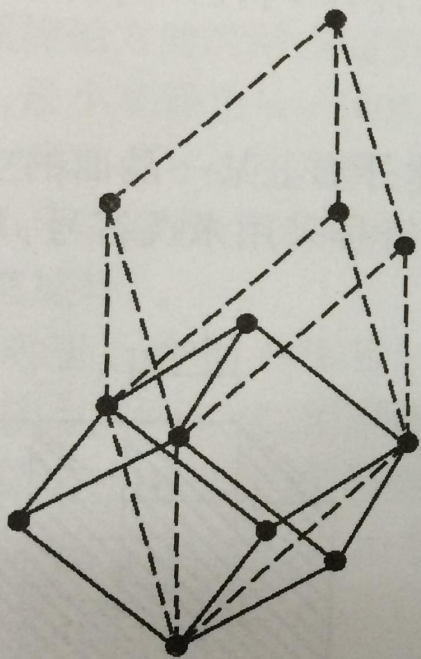


图 8-8 三方菱面体体心格子
转变成三方菱面体原始格子

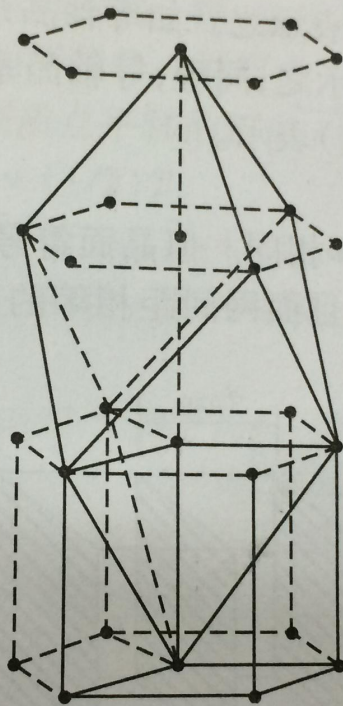


图 8-9 六方原始格子转换为
具双重体心的菱面体格子

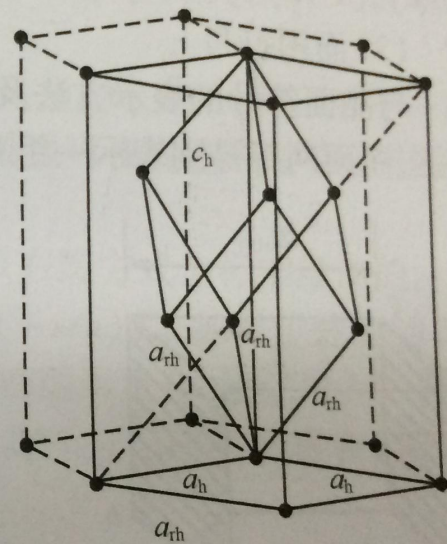
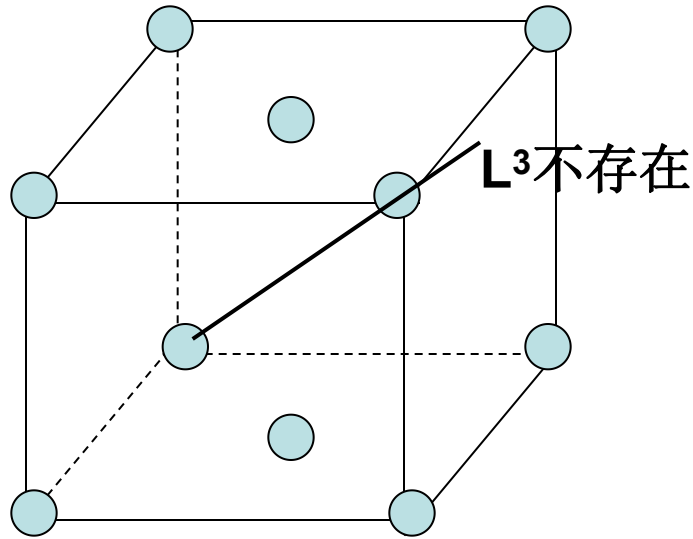


图 8-10 三方菱面体格子转
换为具双重体心的六方格子



例 2：立方底心格子不符合等轴晶系对称

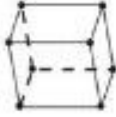
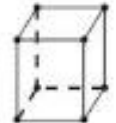

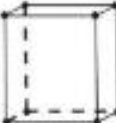
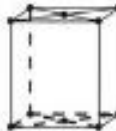


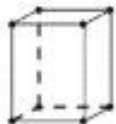

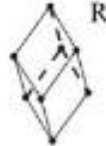

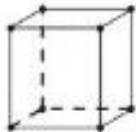
思考：立方底心格子符合什么晶系的对称？

还应指出的是：

对于三、六方晶系的四轴定向也可转换成三轴定向，变为菱面体格子。我们一般都用四轴定向。

另外，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。

十四种空间格子见下表。

	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	