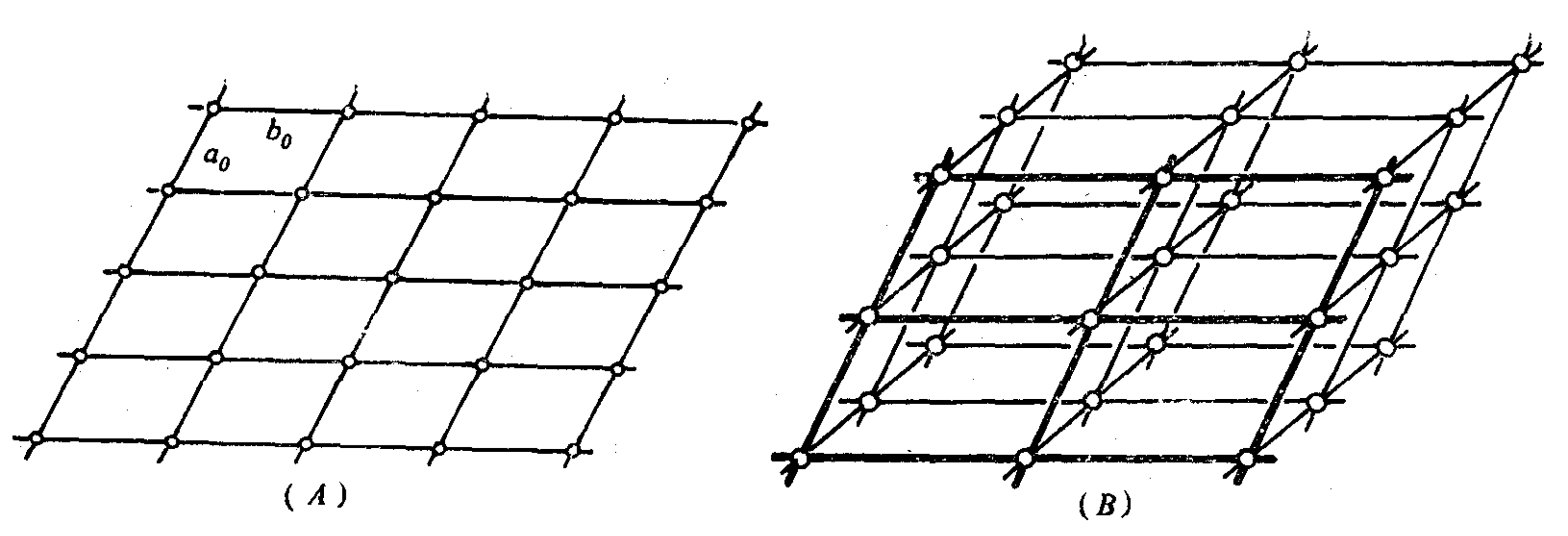
2.1.2 晶格、晶胞、
晶格参数、晶系

三维空间点阵是由一些按照一定规律排列的几何点（结点）所构成的一个**阵列**。

在空间点阵中，分布在同一直线上的结点构成一个**行列**。任意两个结点就可以决定一个行列。行列中两个相邻的结点间的距离称为**结点间距**。

连接分布在同一平面内的结点即构成一个**面网**，而连接分布在三维空间内的结点就构成了**空间点阵**。



空间点阵也可以看成是由一个只在八个顶点上含有结点的平行六面体单元沿三维方向重复堆积而构成的。这样的平行六面体单元称为原始格子。注意到在空间点阵中，每个结点都由 8 个原始格子所共有，因此，每个原始格子中只含有一个结点。

- 通过以上讨论可知，凡是能够抽取出点阵的结构可称为点阵结构；点阵结构可以被与它相对应的平移群所复原。同时，我们有必要给点阵下一个严格的定义：

把按连接任意两点所得向量进行平移后能够复原的一组点称为点阵。

为构成点阵，必须满足两个条件：点数无限多；各点所处的环境完全相同。

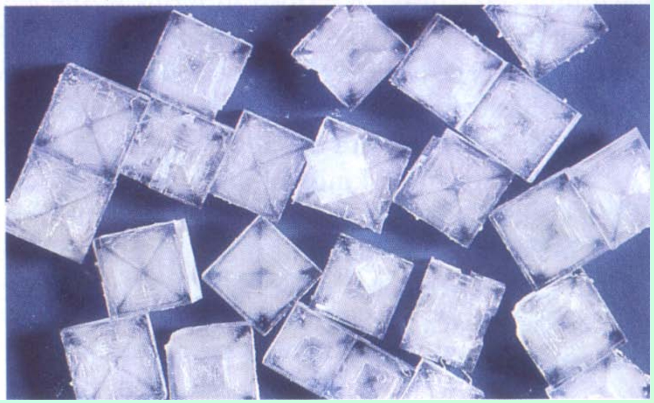


Figure 11.29 Crystals of NaCl, showing well-defined crystal planes based on the underlying cubic structure. (Dr. E. R. Degginger)

一小颗食盐晶体的边长为564pm的面心立方型式，

则不难算出此晶棱共排有 $\dfrac{1mm}{564\,pm} = 1.8\times10^{6}$ **个晶胞。**

空间点阵是一个三维无限大的图形，直接用空间点阵来描述晶体中原子的堆积方式显然是很不方便的，而构成空间点阵的基本单元体——原始格子又因边棱取向的随意性而不可能完整地反映出空间点阵的几何特征。因此，法国科学家布拉维于1848年提出了一套简便而准确描述空间点阵几何特征的方法——**布拉维格子**。

布拉维认为，对于任何一种晶体的结构抽象出来的空间点阵，都可以看成是由一个能够全面准确体现该点阵几何特征的平行六面体沿三维方向重复堆积而构成；这个能够全面准确体现空间点阵几何特征的平行六面体的选取必须遵循 4 个基本原则:

平行六面体的选取原则

(1) 所选取的平行六面体的对称性应该符合整个空间点阵的对称性;

(2) 在不违反对称的条件下，应选择棱与棱之间的直角关系最多的平行六面体;

(3) 在遵循上述两条的前提下，所选的平行六面体体积应该最小;

(4) 在对称性规定棱间交角不为直角时，在遵循前三条的前提下，应选择结点间距小的行列作为平行六面体的棱，且棱间交角接近于直角。

晶胞的选取

- 晶胞的选取可以有多种方式，但在实际确定晶胞时，要尽可能选取对称性高的初基单胞，还要兼顾尽可能反映晶体内部结构的对称性，所以有时使用对称性较高的非初基胞-惯用晶胞。简单地说：

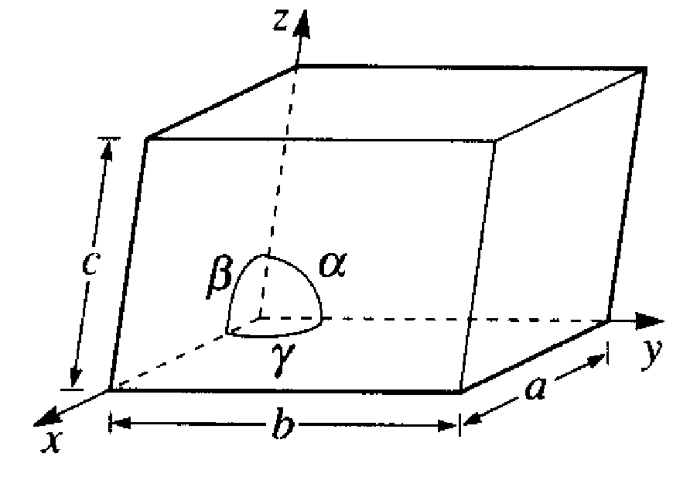
（1）符合整个空间点阵的对称性。

（2）晶轴之间相交成的直角最多。

（3）体积最小。

（4）晶轴交角不为直角时，选最短的晶轴，且交角接近直角。

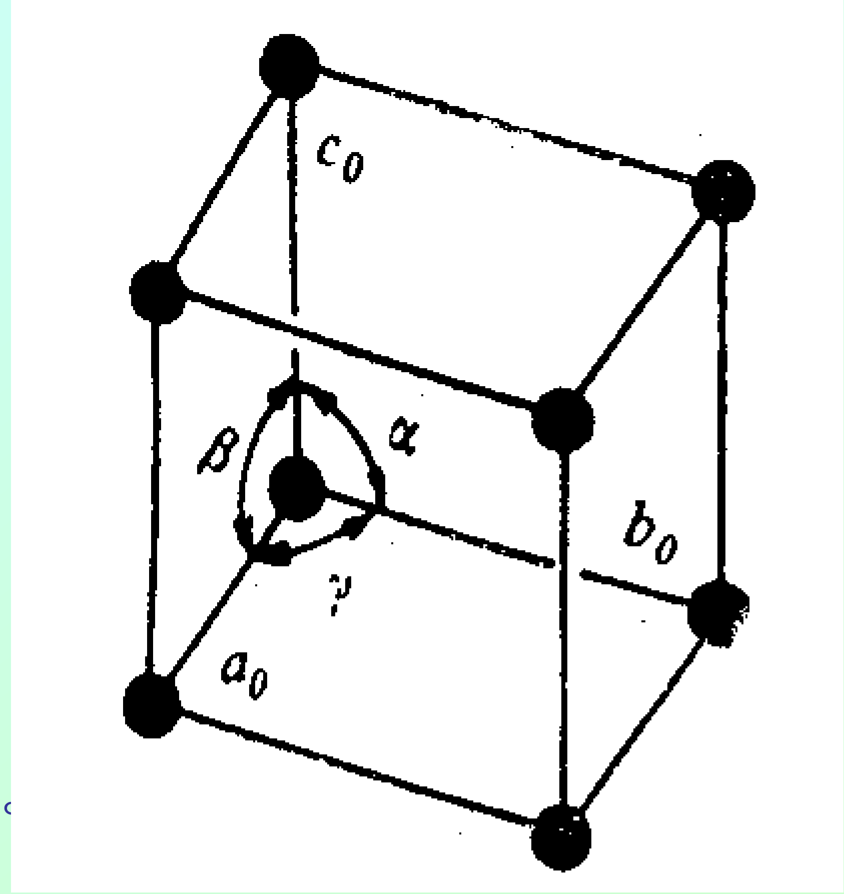
据此确定了平行六面体，也就相当于确定了空间点阵的坐标系三维空间点阵是在三维空间中点的无限阵列，其中所有的点都有相同的环境。选任意一个阵点作为原点，三个不共面的矢量a， b和c作为坐标轴的基矢，这三个矢量得以确定一个平行六面体。此平行六面体称为**晶胞。**晶体可看做由无数个晶胞有规则地堆积而成。晶胞的大小和形状可由晶轴a、b、c和轴间夹角α、β、γ来确定，这6个量合称**晶格参数**。



单位平行六面体的三根棱是三个坐标轴的方向

棱之间的交角是坐标轴之间的交角

棱长就是坐标系统的轴单位。



- 布拉维通过数学推导发现，尽管存在有各种各样的晶体，但是按照四条基本原则，从各种晶体中抽象出来的空间点阵只有 14 种形式，称为 **14 种布拉维格子**，分别可以用一个根据上述四条基本原则划分出来的平行六面体来表示。根据相应的平行六面体的几个特征，14种布拉维格子可以分为7类，称为**7大晶系**。按照晶胞的特征对称元素可以分成7个不同类型，称为**晶系**。

7 大晶系的几何特征

(1) 立方晶系： $a = b = c;\ \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

(2) 四方晶系： $a = b \neq c;\ \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

(3) 正交晶系： $a \neq b \neq c;\ \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

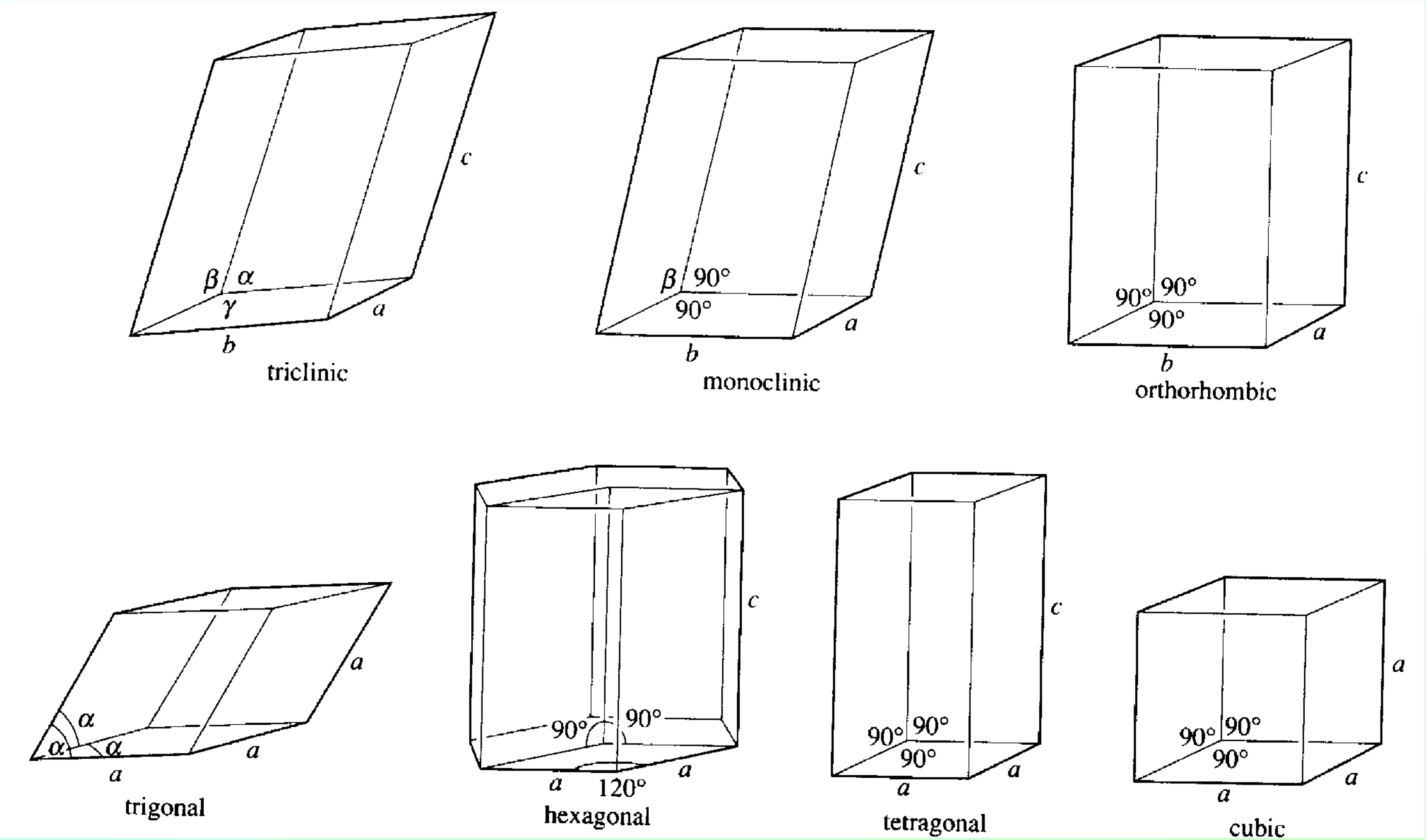
(4) 单斜晶系： $a \neq b \neq c;\ \alpha = \gamma = 90^\circ;\ \ \beta \neq 90^\circ$

(5) 三斜晶系： $a \neq b \neq c;\ \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

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

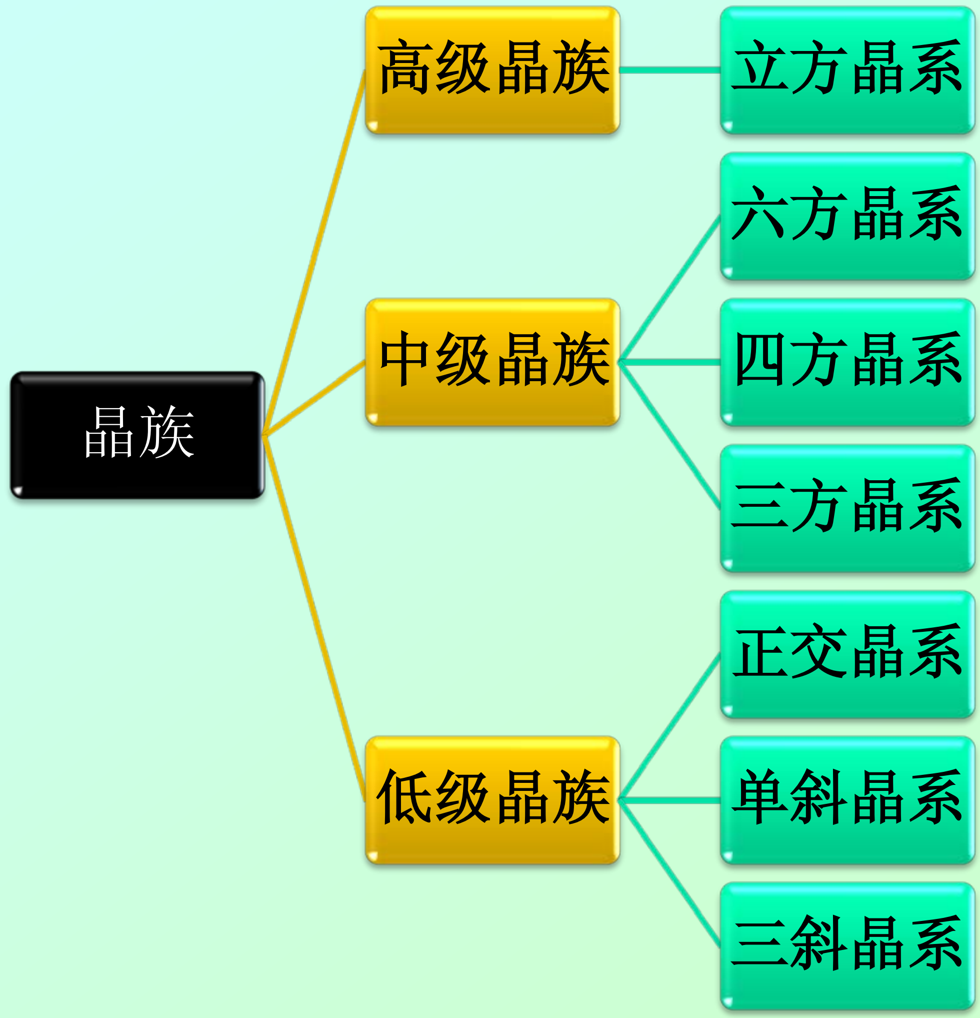
(7) 三方晶系： $a = b = c;\ \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

7 大晶系的单胞

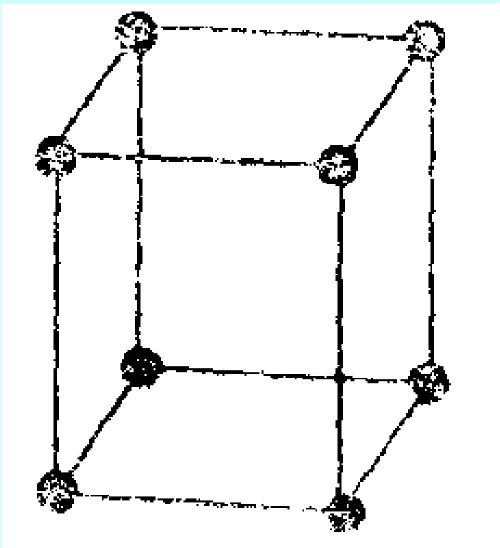
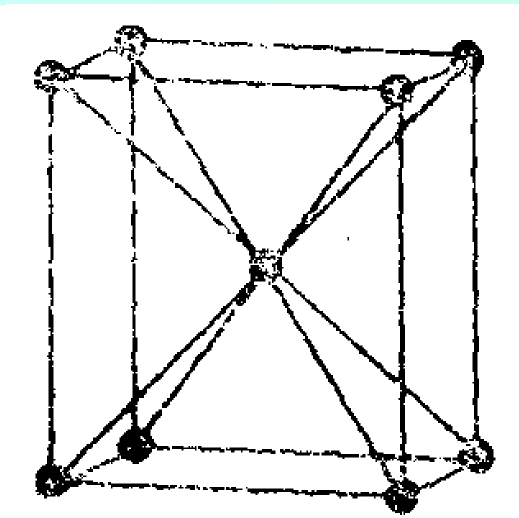
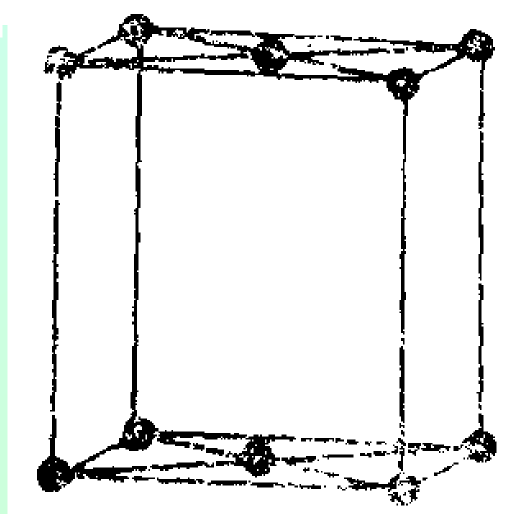
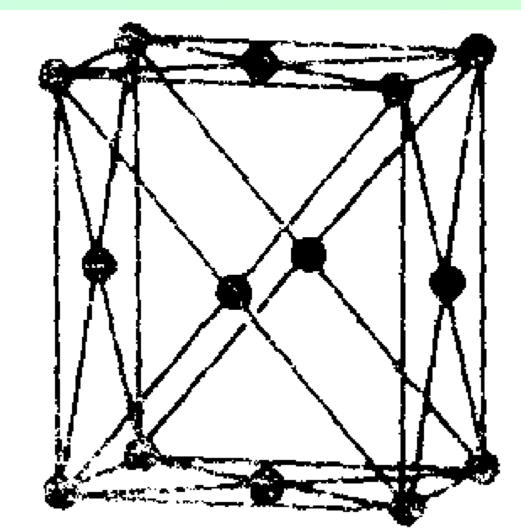


β
α
γ
c
a
b
triclinic
β
90°
90°
c
a
b
monoclinic
90°
90°
90°
c
a
b
orthorhombic
α
α
α
a
a
a
trigonal
90°
90°
c
a
a
120°
hexagonal
90°
90°
90°
c
a
a
tetragonal
90°
90°
90°
a
a
a
cubic

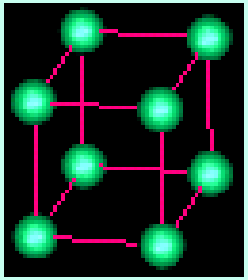
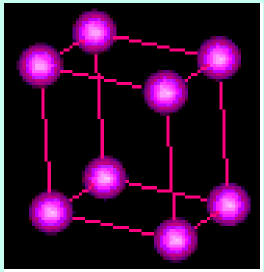
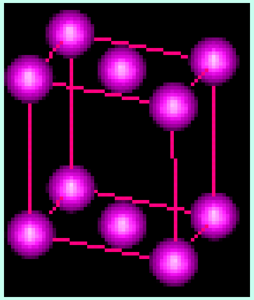
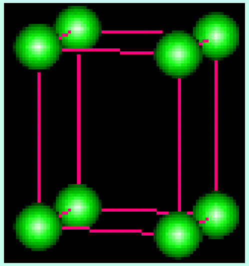
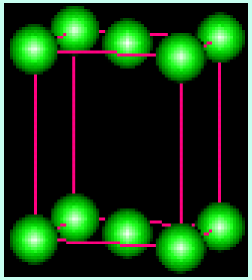
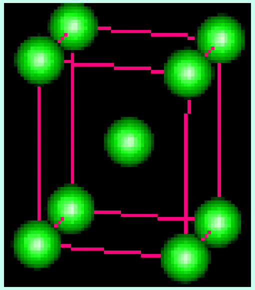
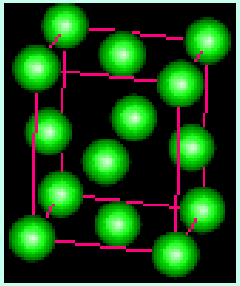
❖根据相应的平行六面体的几个特征，14 种布拉维格子可以分为 7 类，称为 7 大晶系。 7大晶系按照对称性不同，分为3大晶族。

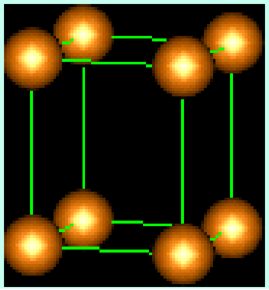
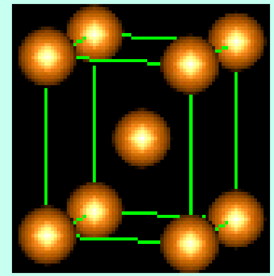
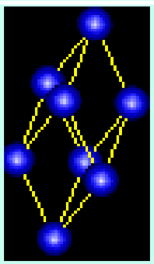
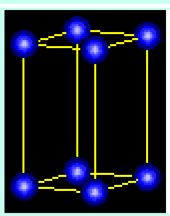
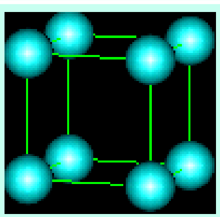
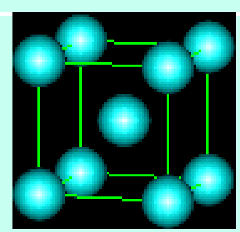
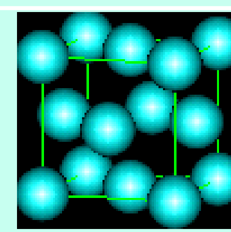


对于每一类格子，考虑到平行六面体选取原则，可能会出现四种情况

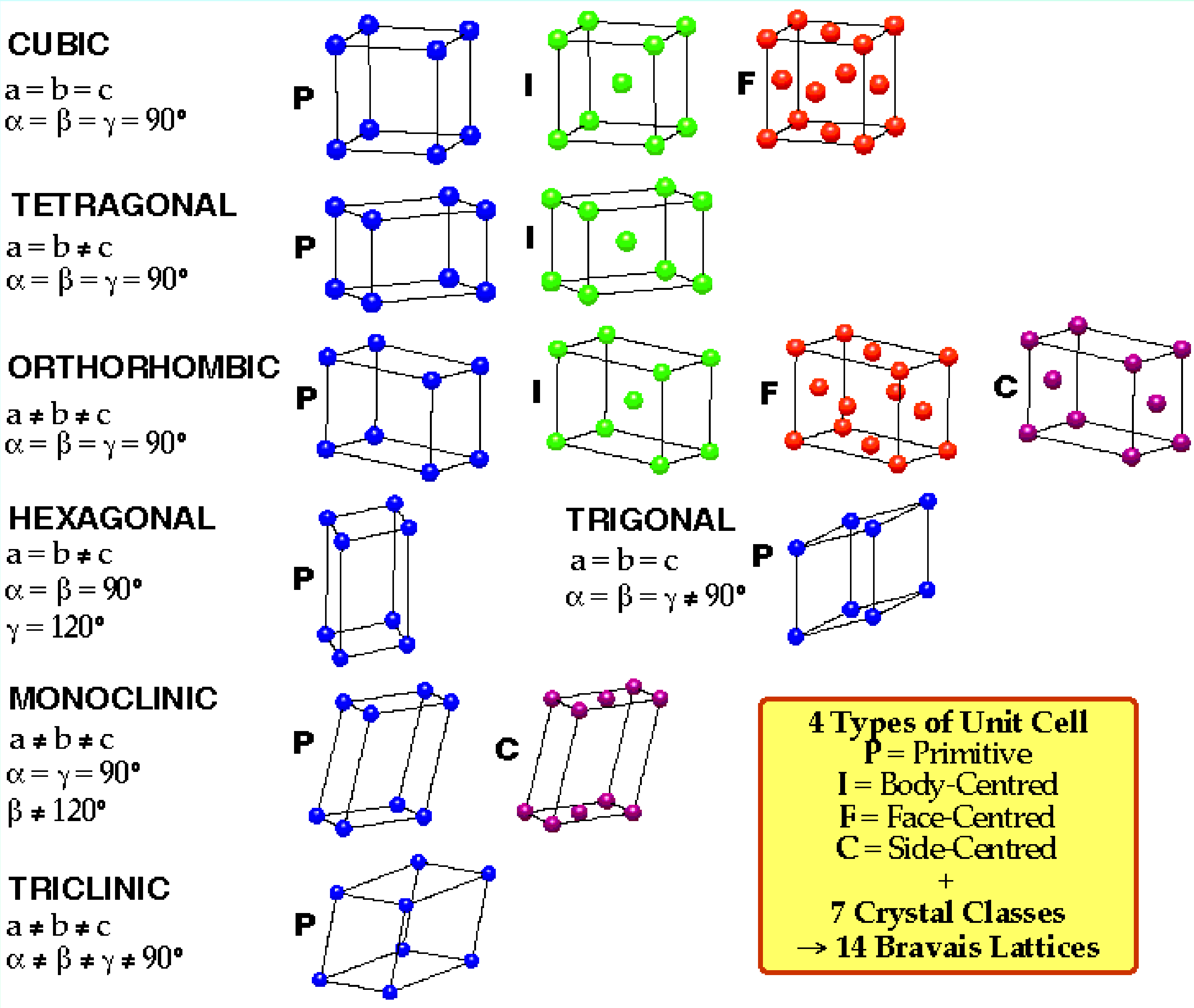





对应于 7 大晶系，考虑原始、体心、面心和底心的存在，应该有 28 种格子。但是，这 28 种格子中，有的可能不满足对称性要求，有的则不符合选择原则。去掉了这些不符合要求的格子后，共有 14 种不同形式的空间格子。这就是通常所说的 14 种布拉维格子。

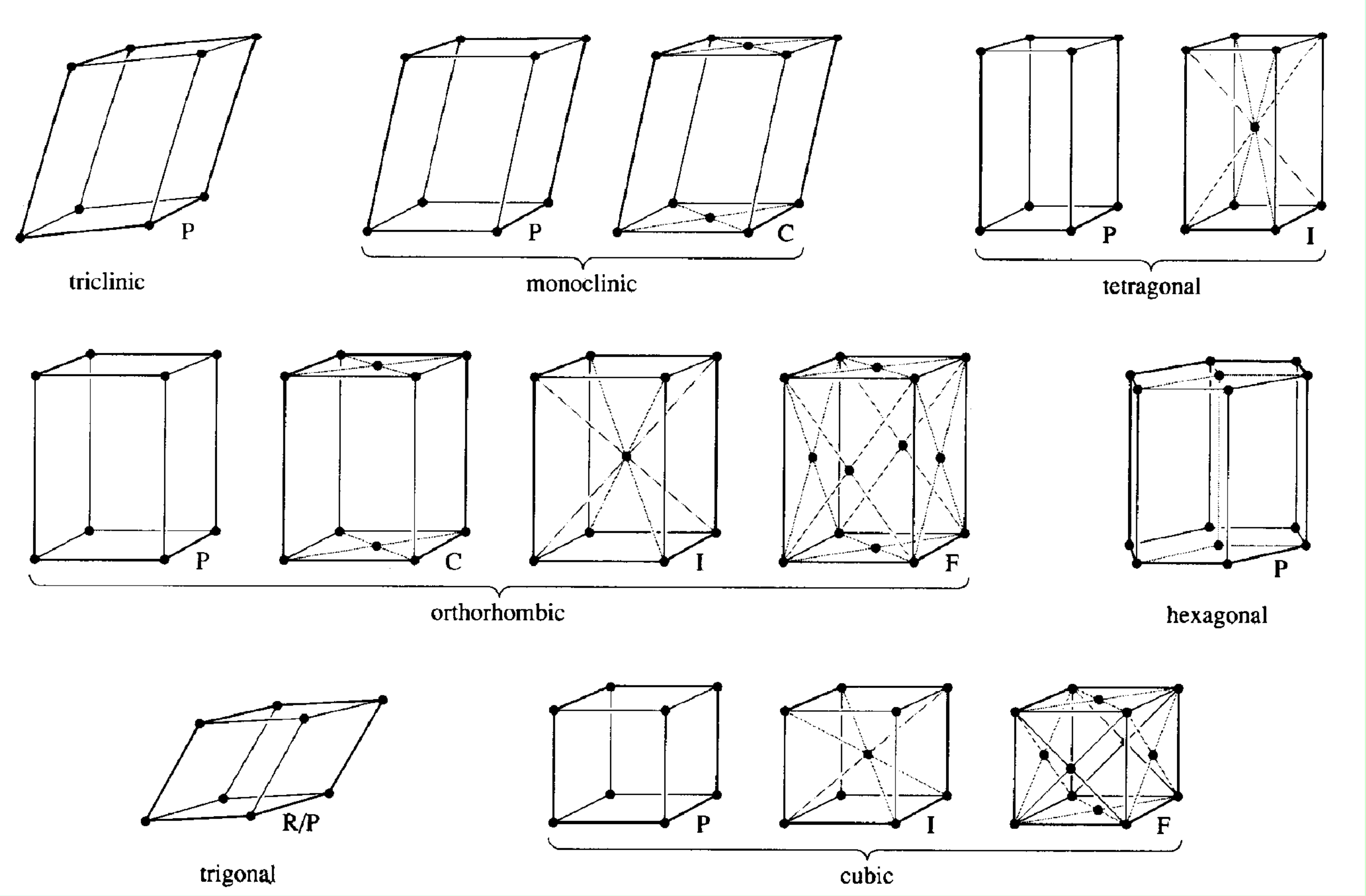
晶系	原始格子（P）	底心格子（C）	体心格子（I）	面心格子（F）
三斜		C=I	I=F	F=P
单斜			I=F	F=C
正交				

晶系	原始格子（P）	底心格子（C）	体心格子（I）	面心格子（F）
四方		C=P		F=I
斜方		与本晶系对称不符	I=F	F=P
六方		与本晶系对称不符	与空间格子的条件不符	与空间格子的条件不符
立方		与本晶系对称不符		

14种可能的Bravais点阵



14种空间点阵型式示意图(14个Bravais点阵)



素格子和复格子、原胞和晶胞

- 含有 1 个结点的格子有时也称为**素格子**；含有 1 个以上结点的格子相应地称为**复格子**
- 如果把空间点阵还原为晶体结构，也就是把每个结点位置上布置上晶体的基元，由原始格子所得到的描述晶体结构的平行六面体称为**原胞**，而由布拉维格子所得到的描述晶体结构的平行六面体则称为**晶胞**。
- 只含一个结构基元的晶胞称为**素晶胞**；含有 1 个以上结构基元的晶胞则称为**复晶胞**。

2.1.3 结点位置、晶向、晶面及其表示方法

（1）结点位置的表示方法

- 以布拉维格子的任意一个顶点为原点，以三条棱作为坐标轴建立空间坐标系。用结点在这一空间坐标系中的坐标即可表示结点的位置。

简单格子：只有八个顶点处有结点。坐标值分别为：

000, 010, 001, 100， 101, 110, 011, 111

这 8 个结点对于布拉维格子而言只相当于 1 个结点，其位置可以统一写成：**000**

体心格子：除了八个顶点外，体心处还有 1 个结点。 8个顶点位置处的结点可以统一写成：**000。**

体心的坐标值分别为：$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

底心格子：除了八个顶点外，底心处还有 2 个结点。8个顶点位置处的结点可以统一写成：**000。底心的**坐标值分别为：$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0,\frac{1}{2}\frac{1}{2}1$ 底心的的两个结点相当于 1 个。

面心格子：除了八个顶点外，面心处还有 6结点。顶点位置处的结点可以统一写成：**000**。面心的坐标值为

$$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0,\frac{1}{2}0\frac{1}{2},0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$$
$$\frac{1}{2}\frac{1}{2}1,\frac{1}{2}1\frac{1}{2},1\frac{1}{2}\frac{1}{2}$$

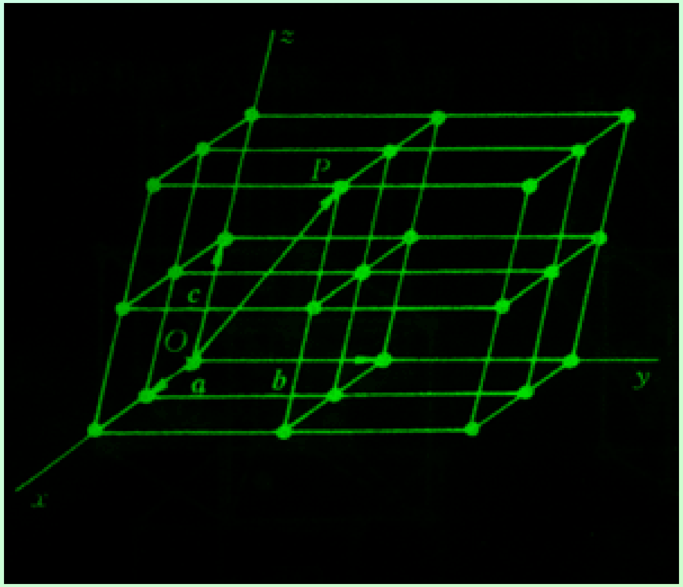
。面心的结点相当于3 个。

（2）晶向及其晶向指数

- 空间点阵的结点可以看成是分列在一系列相互平行的直线上，这些直线系称为晶列
- 同一个点阵可以形成方向不同的晶列
- 每一个晶列定义了一个方向称为晶向

任意阵点P的位置可以用矢量或者坐标来表示。

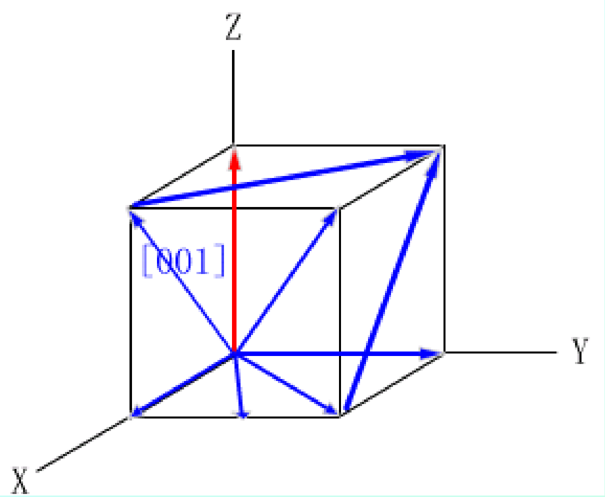
$$OP = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

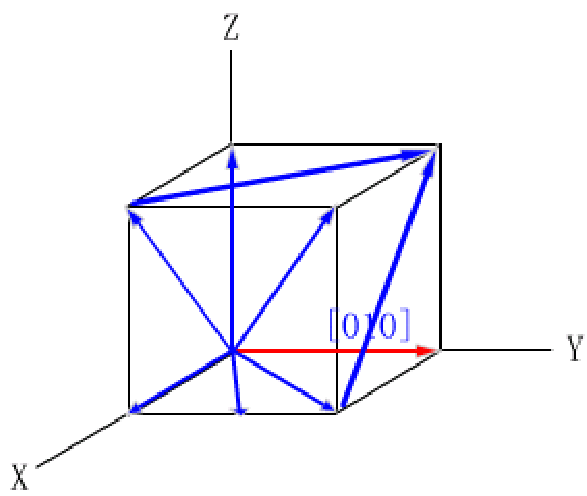


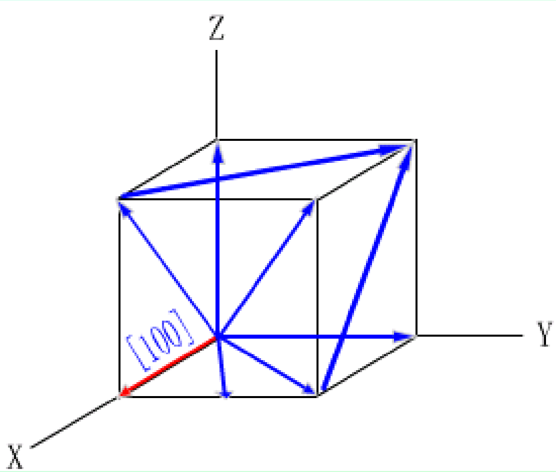
晶向指数的确定步骤

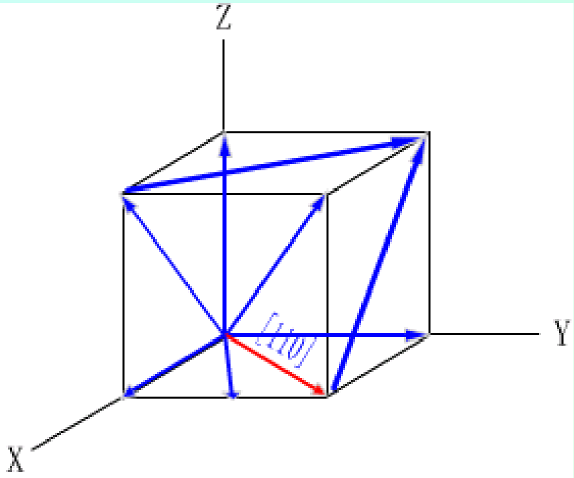
- 1)以晶胞的某一阵点O为原点，过原点O的晶轴为坐标轴x, y, z, 以晶胞点阵矢量的长度作为坐标轴的长度单位。
- 2)过原点O作一直线OP，使其平行于待定晶向。
- 3)在直线OP上选取距原点O最近的一个阵点P，确定P点的3个坐标值。
- 4)将这3个坐标值化为最小整数*u*, *v*, *w*，加以方括号，[*u v w*]即为待定晶向的晶向指数。

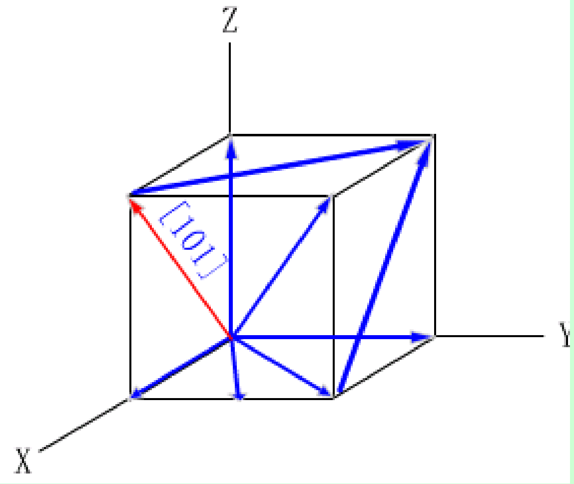
晶向指数的例子:正交晶系一些重要晶向的晶向指数

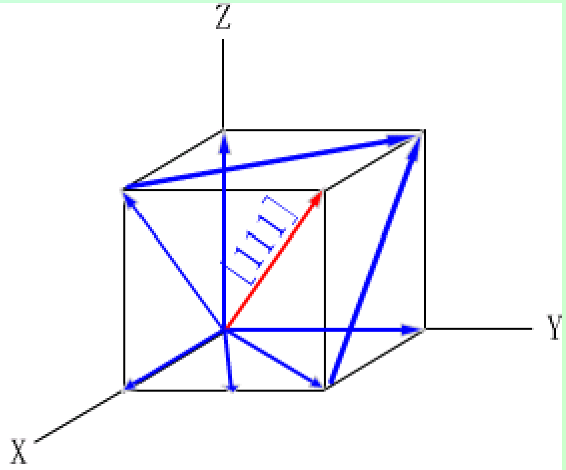


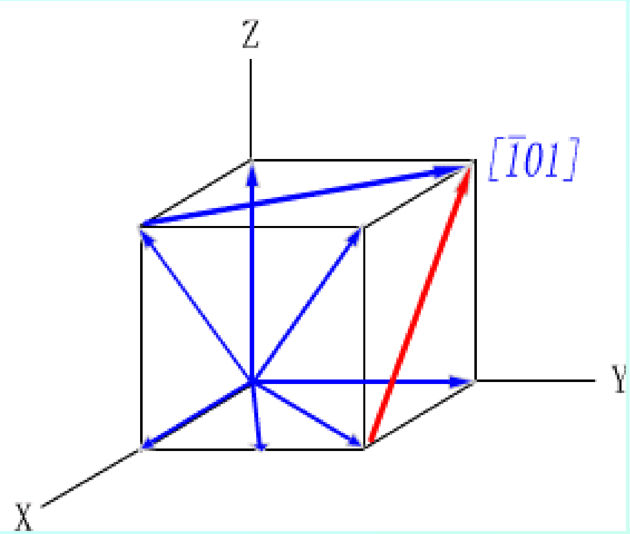


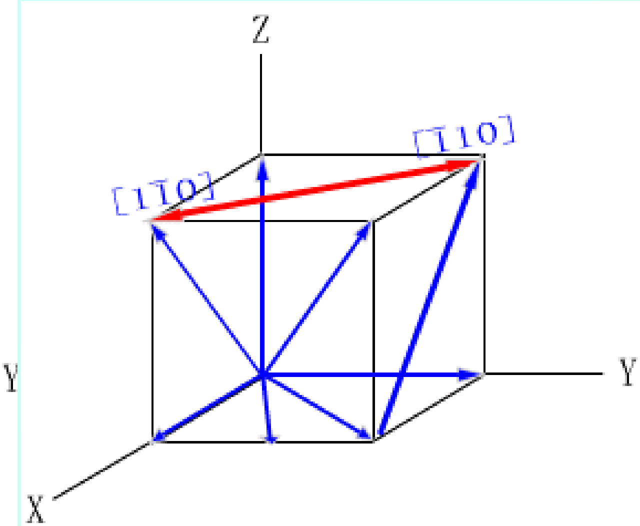


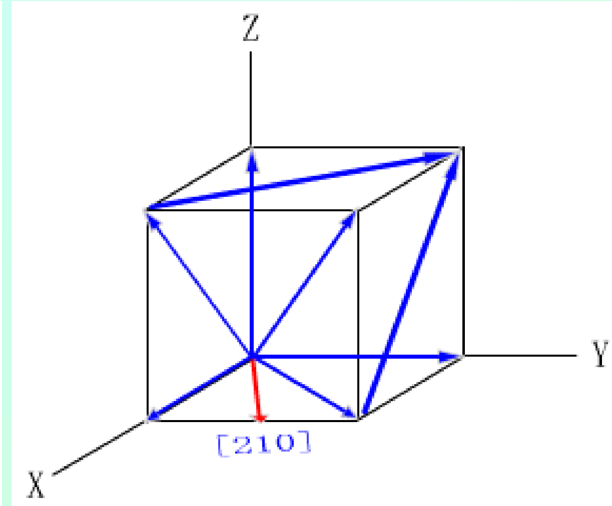








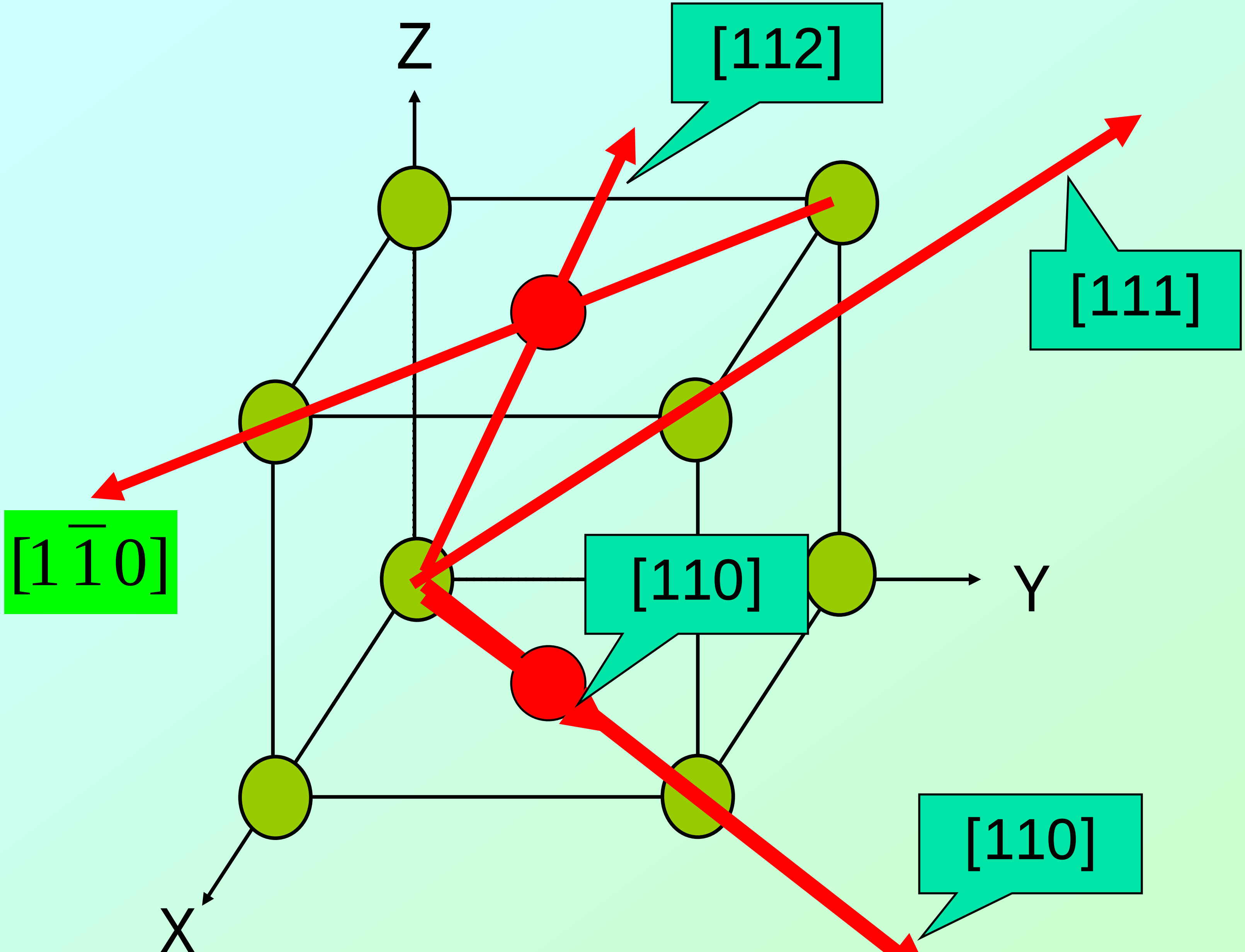




- 考虑到空间点阵的平移对称性，晶向指数表示相互平行、方向一致的所有晶向；所指方向相反，则晶向指数中的数字相同但符号相反，如

$$[\bar{1}21] \qquad [1\bar{2}\bar{1}]$$

晶体中因对称关系而等同的各组晶向可归并为一个晶向族，用<u v w>表示。



Z
[112]
[111]
$[1\bar{1}0]$
[110]
Y
[110]
X

（3）晶面和晶面指数

- 空间点阵的结点可以从各个方向被划分为许多组平行且等距的平面点阵。这些平面点阵所处的平面称为晶面
- 晶面具有两个特点
- 晶面可以采用一组米勒指数 $(h\ k\ l)$ 来表示

晶面米勒指数 $(h\ k\ l)$ 的确定

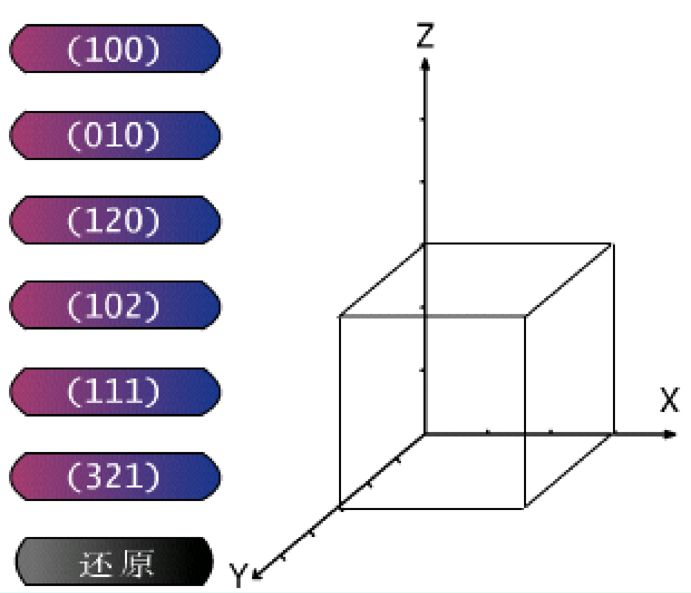
晶体的空间点阵可划分为一组组互相平行且间距相等的平面点阵。而实际晶体外形中每一个晶面都与一组平面点阵平行，可根据晶面和晶轴之间的取向关系用晶面指标标记同一晶体中不同方向的平面点阵组或晶体外形的晶面，这就是晶体学中常用的晶面指标。

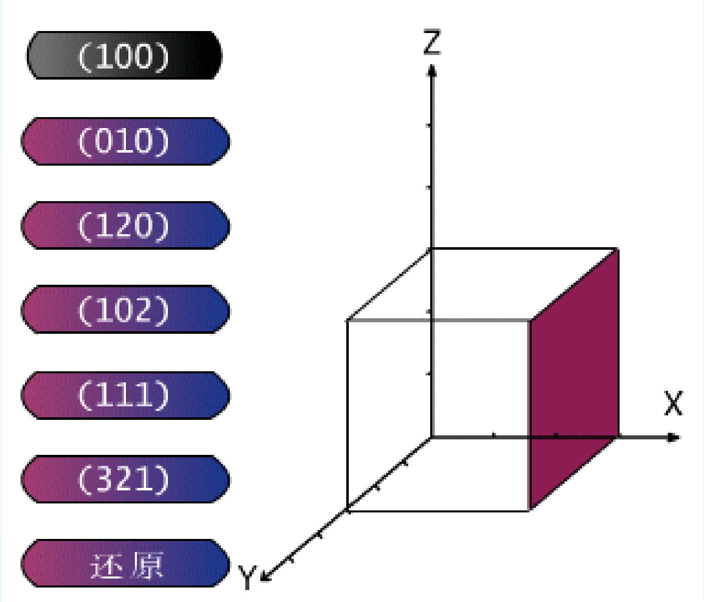
晶面指标的定义是“平面点阵面在三个晶轴上的倒易截数之比”。

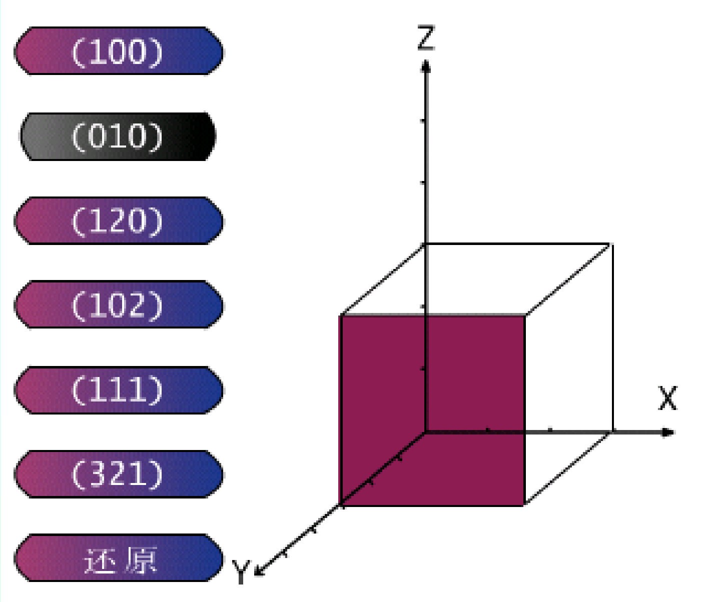
截长	2a	**b**	2c	4a	2**b**	4c	6a	3**b**	6c	*r***a**	*s***b**	*t***c**
截数	2	1	2	4	2	4	6	3	6	r	s	t
倒易截数	1/2	1	1/2	1/4	1/2	1/4	1/6	1/3	1/6	$1/r$	$1/s$	$1/t$
倒易截数之比	1/2:1:1/2			1/4:1/2:1/4			1/6:1/3:1/6			$1/r$: $1/s$: $1/t$		
互质整数	1:2:1			1:2:1			1:2:1			$h:k:l$		
晶面指标	(121)			(121)			(121)			(hkl)		

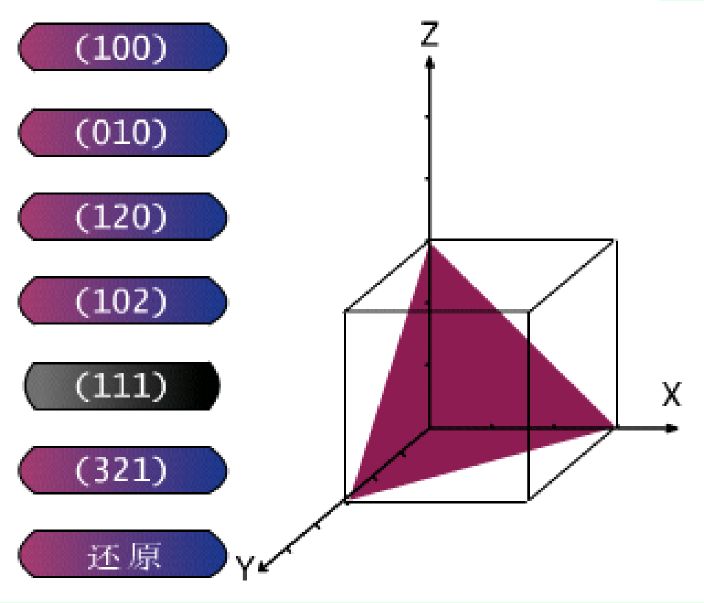
可以看出，三个晶面的指标相同，且三个平面互相平行。因此，我们说晶面指标是用来标记一组互相平行且间距相等的平面点阵面与晶轴的取向关系的参数。

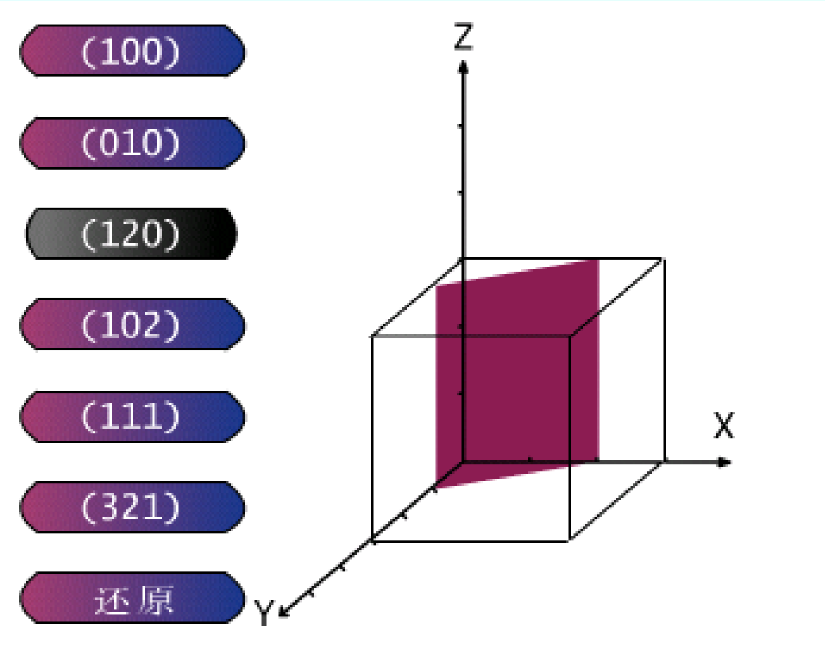
晶面指数的例子

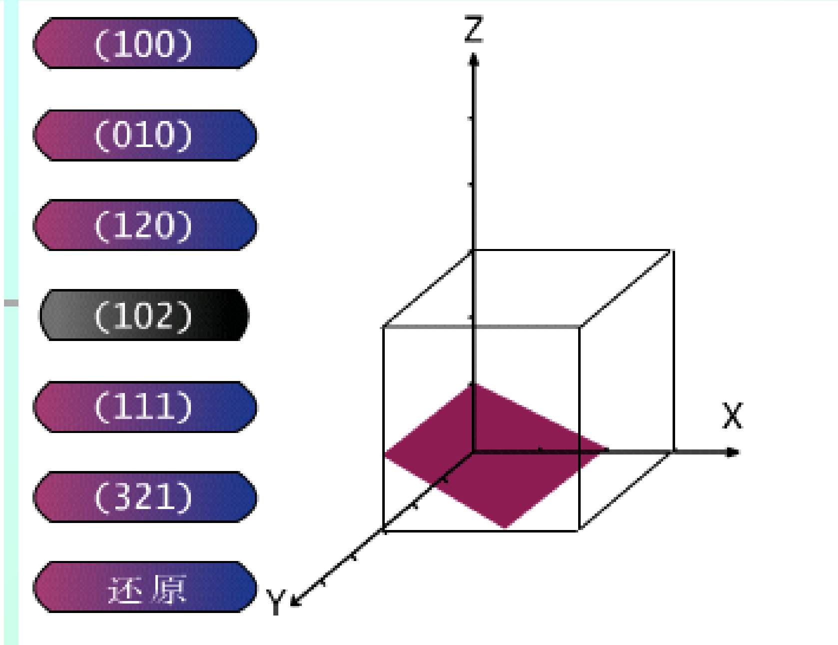

(100)
(010)
(120)
(102)
(111)
(321)
还原
Z
X
Y

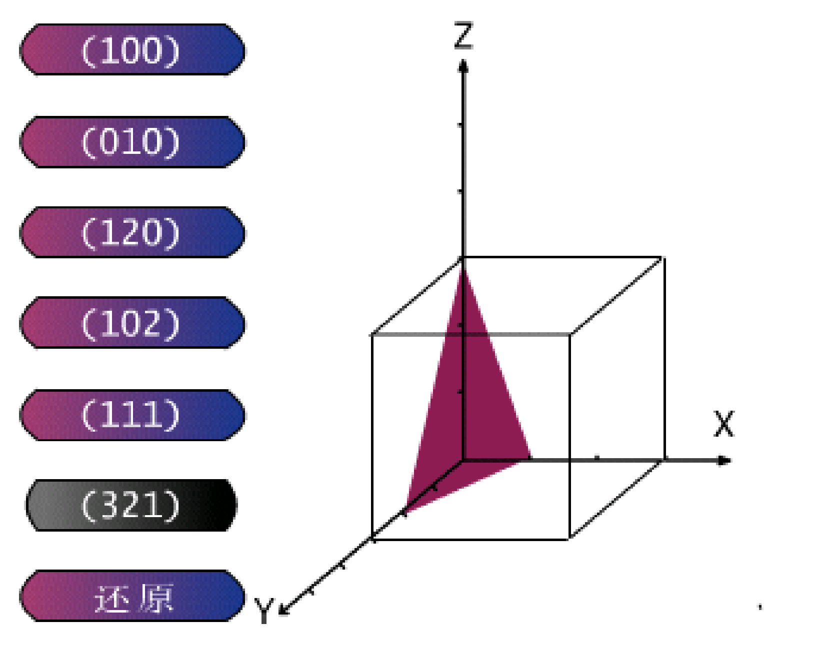

(100)
(010)
(120)
(102)
(111)
(321)
还原
Z
X
Y


(100)
(010)
(120)
(102)
(111)
(321)
还原
Z
X
Y

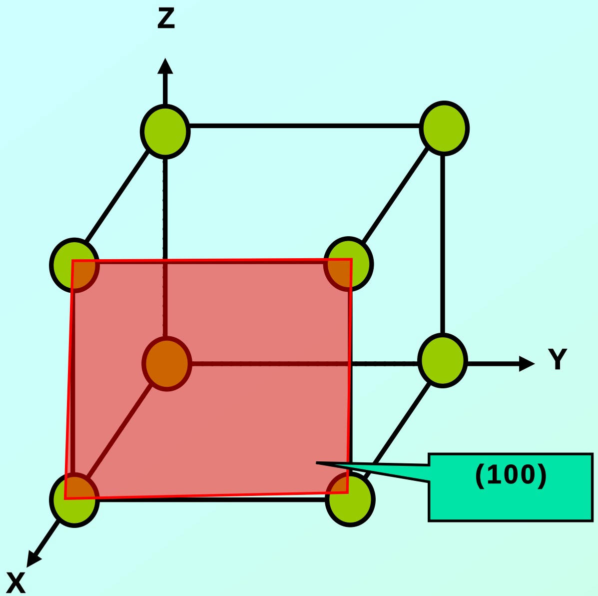

(100)
(010)
(120)
(102)
(111)
(321)
还原
Z
X
Y

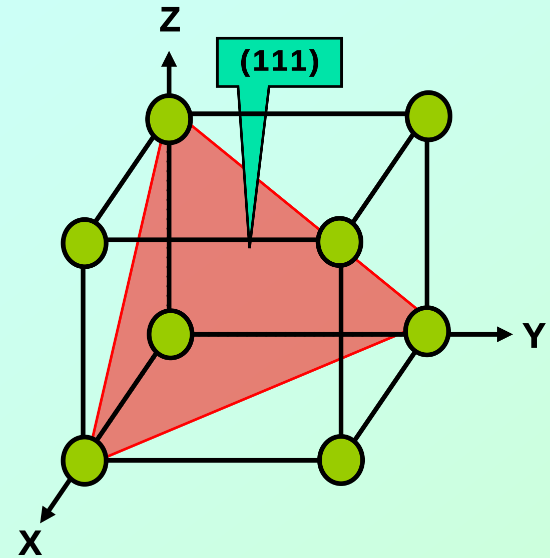


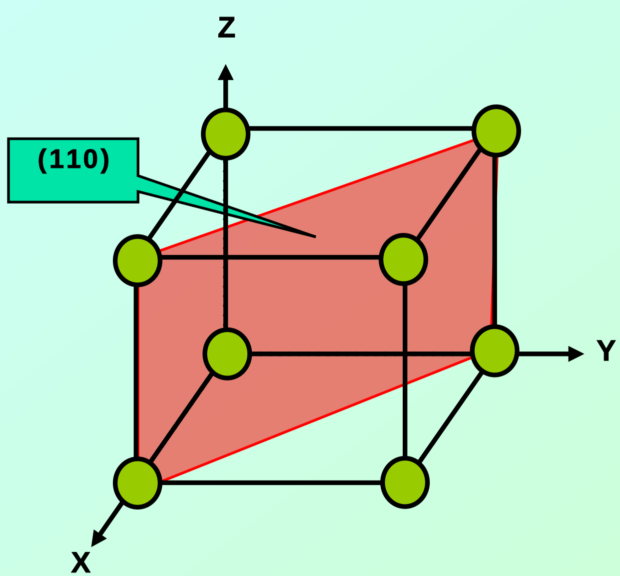


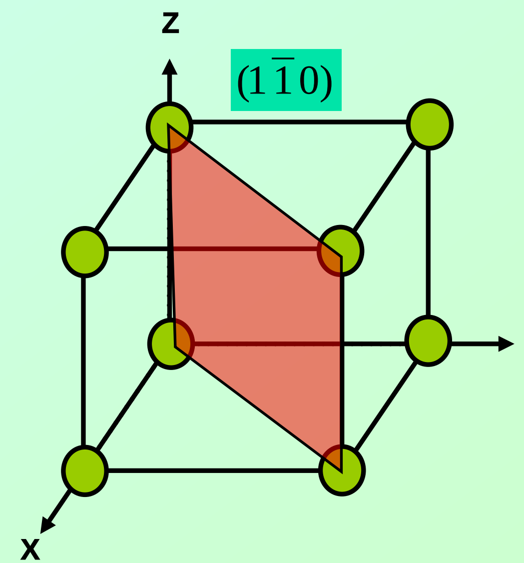


- 正交点阵中一些常见的晶面指数


Z
Y
X
(100)


Z
(111)
Y
X


Z
(110)
Y
X


Z
$(1\bar{1}0)$
Y
X

晶面指数的意义

晶面指数所代表的不仅是某一晶面，而是代表着 一组相互平行的晶面。

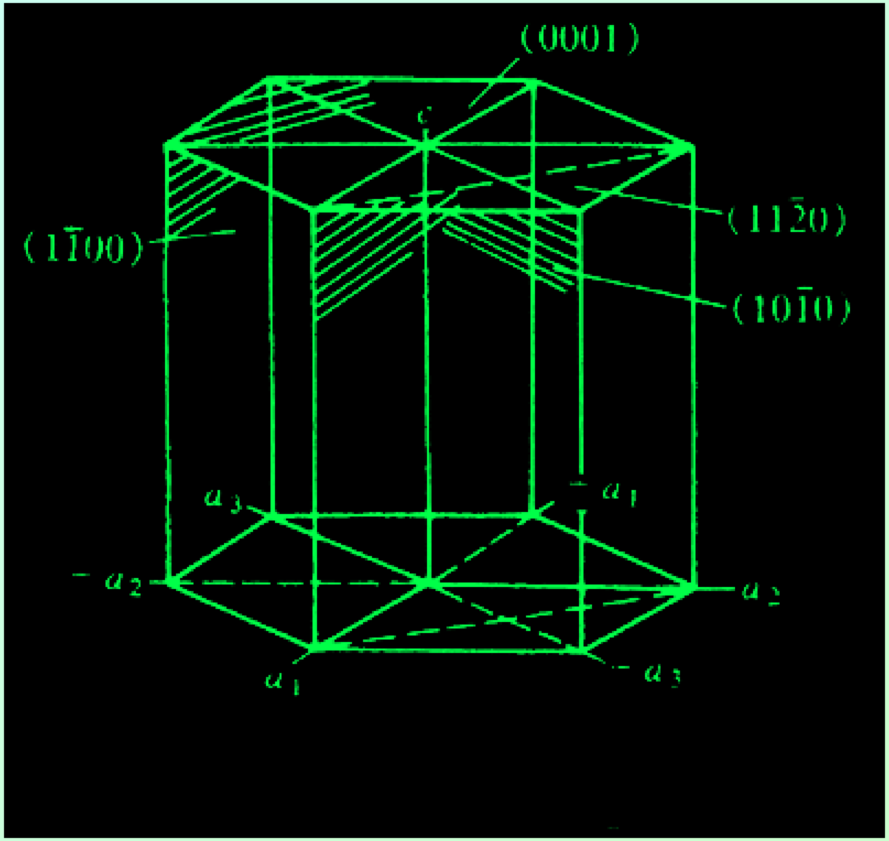
在晶体内凡晶面间距和晶面上原子的分布完全相同，只是空间位向不同的晶面可以归并为同一晶面族，以{h k l}表示，它代表由对称性相联系的若干组等效晶面的总和。

晶面族一经划定，所有结点都全部包含在晶面族中而无一遗漏。一族晶面平行且两两等距，这是空间点阵周期性的必然结果。

- 立方晶系中，相同指数的晶向和晶面垂直;
- 立方晶系中，晶面族{111}表示正八面体的面;
- 立方晶系中，晶面族{110}表示正十二面体的面。

六方晶系指数

六方晶系的晶向指数和晶面指数同样可以应用上述方法标定，这时取a1，a2，c为晶轴，而a1轴与a2轴的夹角为120度，c轴与a1，a2轴相垂直。但这种方法标定的晶面指数和晶向指数，不能显示六方晶系的对称性，同类型 晶面和晶向，其指数却不相雷同，往往看不出他们的等同关系。

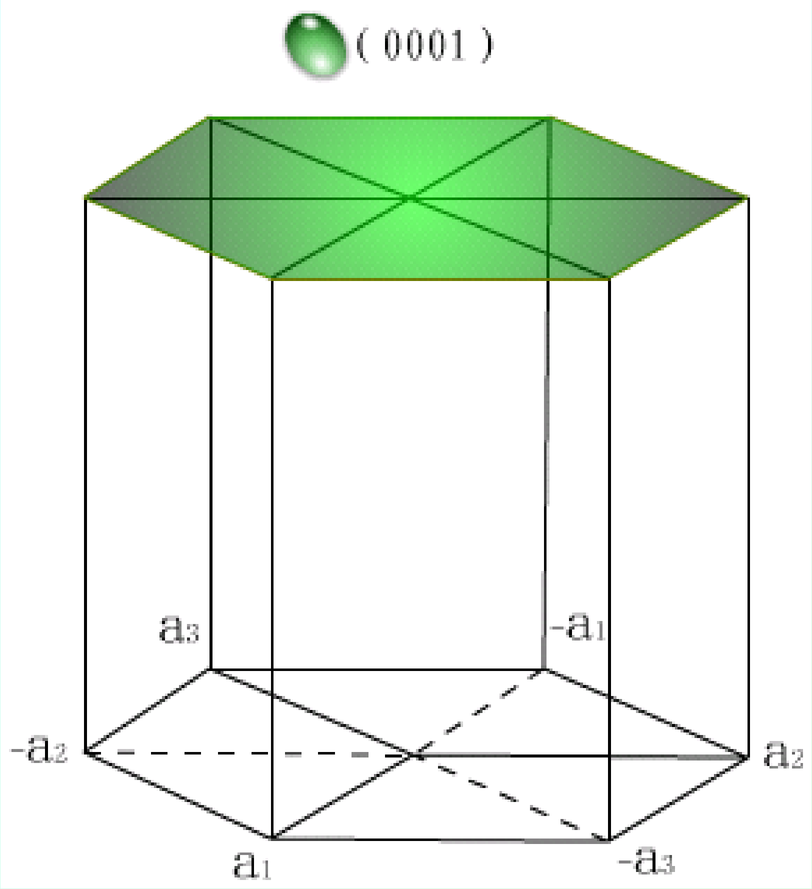


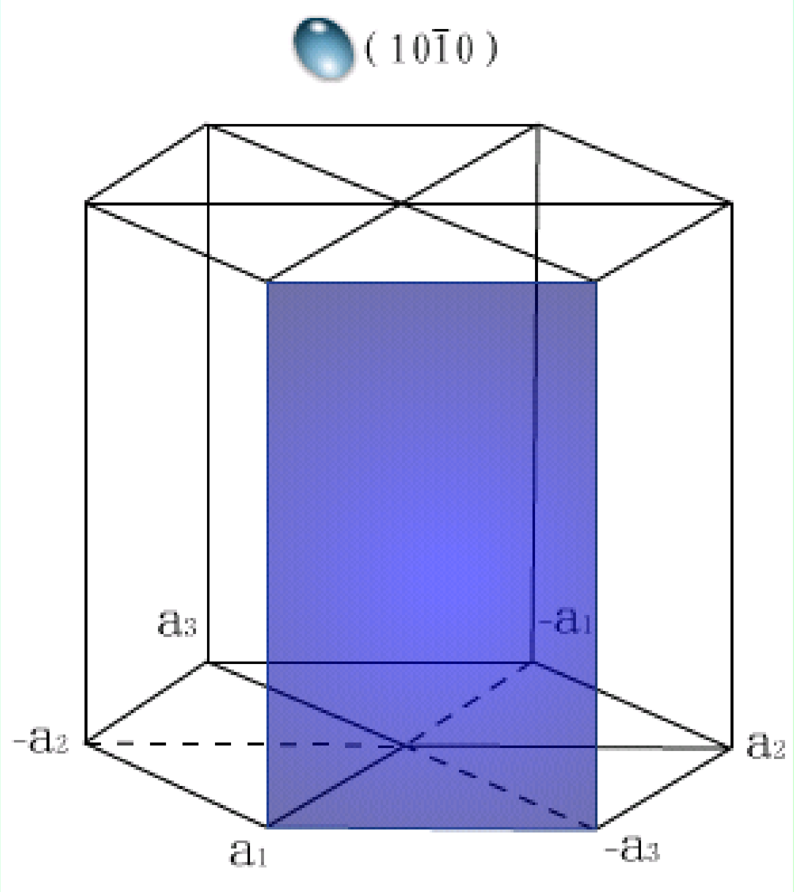
六方晶系晶面指数标定

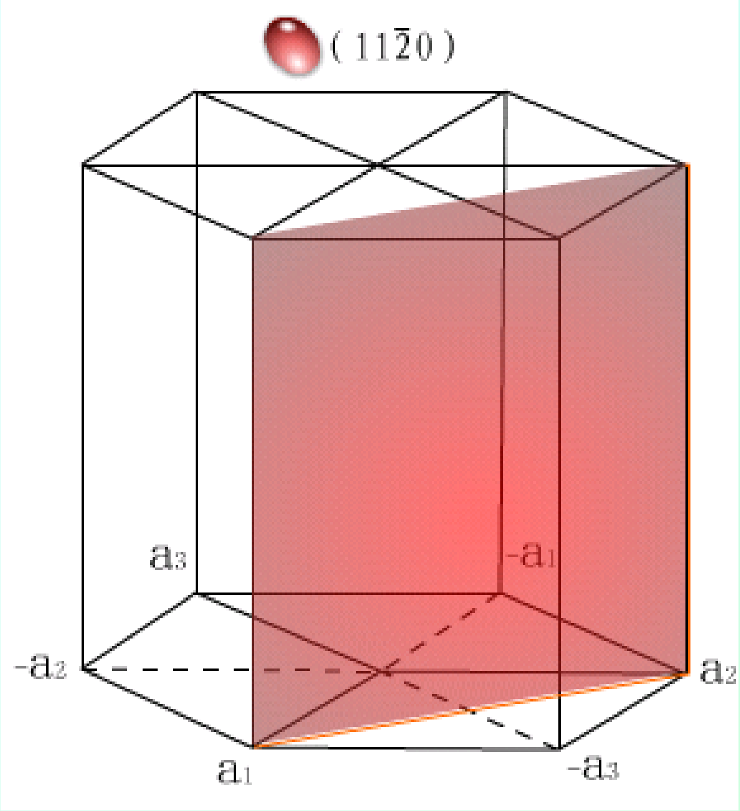
根据六方晶系的对称特点，对六方晶系采用a1，a2，a3及c四个晶轴，a1，a2，a3之间的夹角均为120度，这样，其晶面指数就以(h k i l）四个指数来表示。

根据几何学可知，三维空间独立的坐标轴最多不超过三个。前三个指数中只有两个是独立的，它们之间存在以下关系：i=-（h+k）。

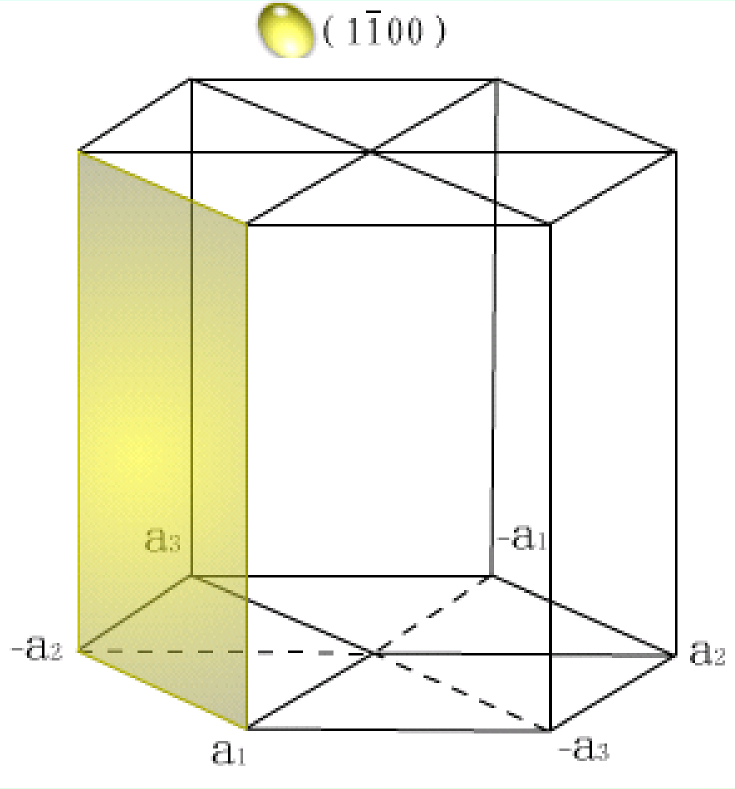
六方晶系一些晶面的指数





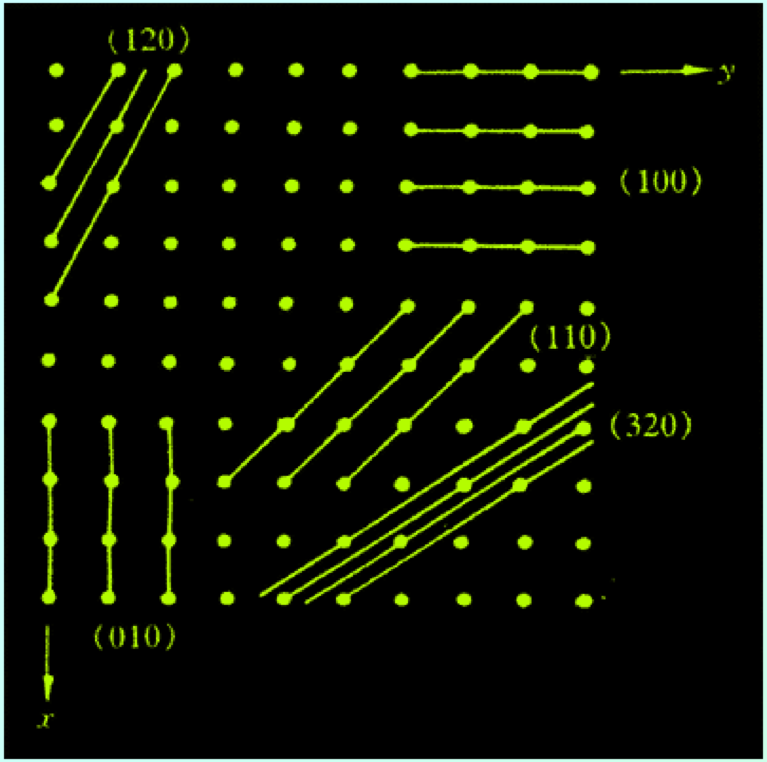


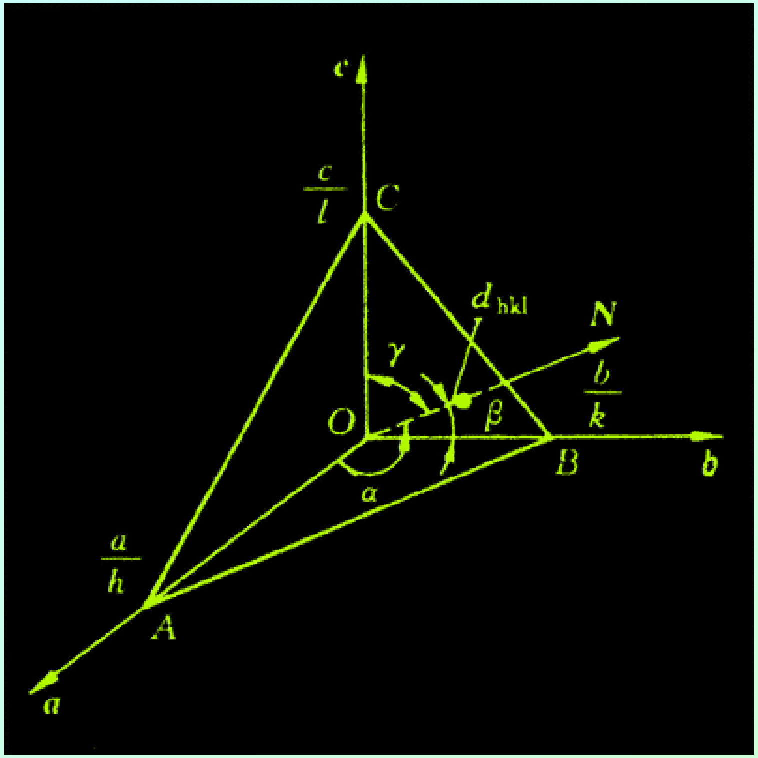
(11$\bar{2}$0)
a_3
$-a_1$
$-a_2$
a_2
a_1
$-a_3$



(1$\bar{1}$00)
a_3
$-a_1$
$-a_2$
a_2
a_1
$-a_3$

2.1.4晶面间距





晶面间距公式的推导

$$d_{hkl} = \frac{a}{h}\cos\alpha = \frac{b}{k}\cos\beta = \frac{c}{l}\cos\gamma$$

$$d_{hkl}^2\left[\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2\right] = \cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma$$

正交晶系
$$d_{hkl}=\frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2+\left(\frac{k}{b}\right)^2+\left(\frac{l}{c}\right)^2}}$$

立方晶系
$$d_{hkl}=\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

六方晶系
$$d_{hkl}=\frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3}\left(\frac{h^2+hk+k^2}{a^2}\right)^2+\left(\frac{l}{c}\right)^2}}$$

2.1.5 对称性

关于对称

- 我国西汉的《韩诗外传》中记载“凡草木花多五出，雪花独六出”，反映出**2000**多年前，善于形象思维的中国人朴素的对称性观念。同样是**2000**多年前，擅长抽象思维的古希腊数学家柏拉图**(Plato)**证明了用正多边形构成的多面体只有五种，即正四面体、正八面体、立方体、正十二面体和正二十面体，这五种正多面体也称为柏拉图体。

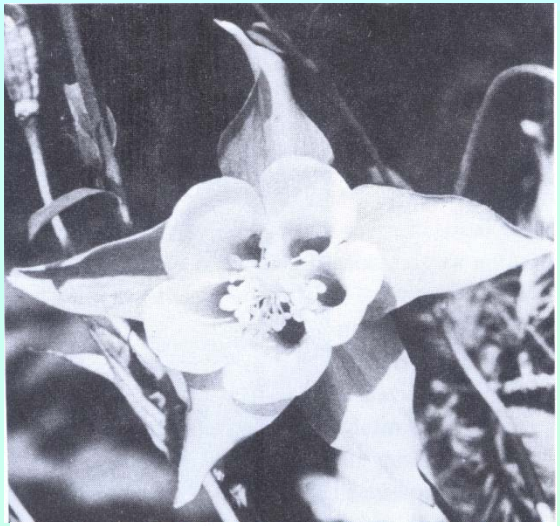


Figure 2-33.
Flower displaying 5 · *m* symmetry. Photograph by the

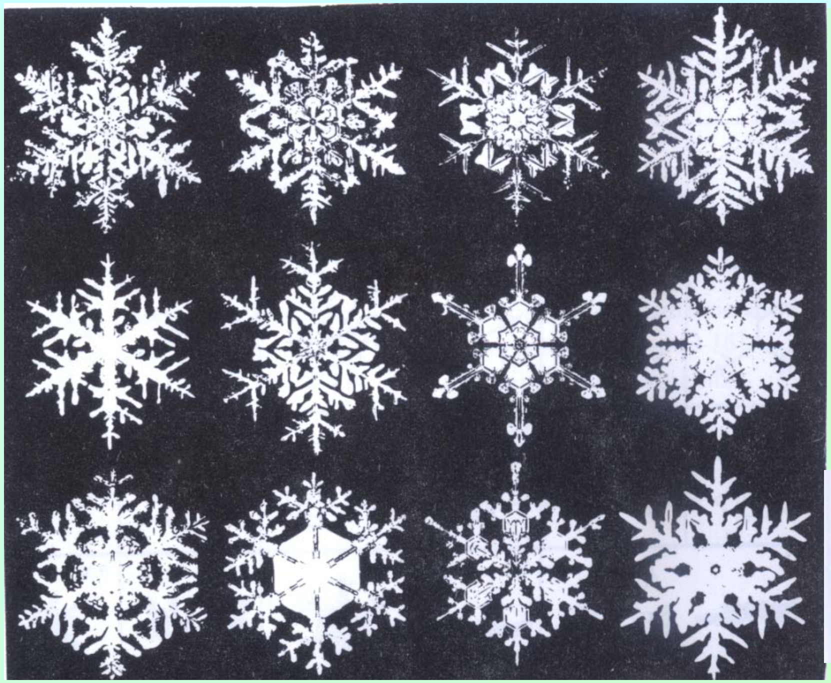
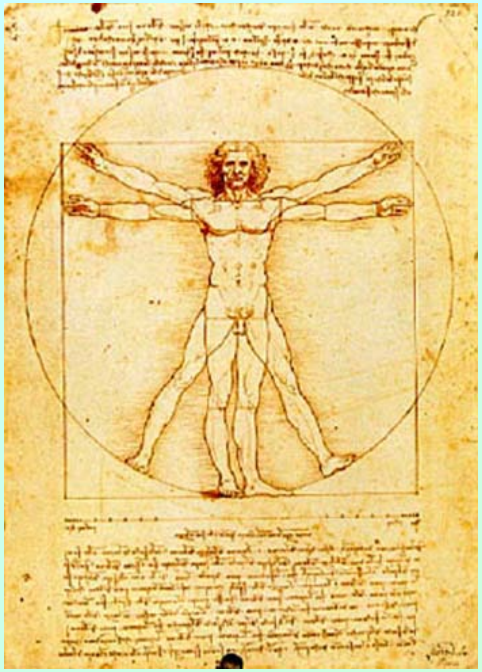


Figure 2-42.
Snowflake photomicrographs by Bentley, after Bentley and Humphreys [2-19].

对称性的不同含义

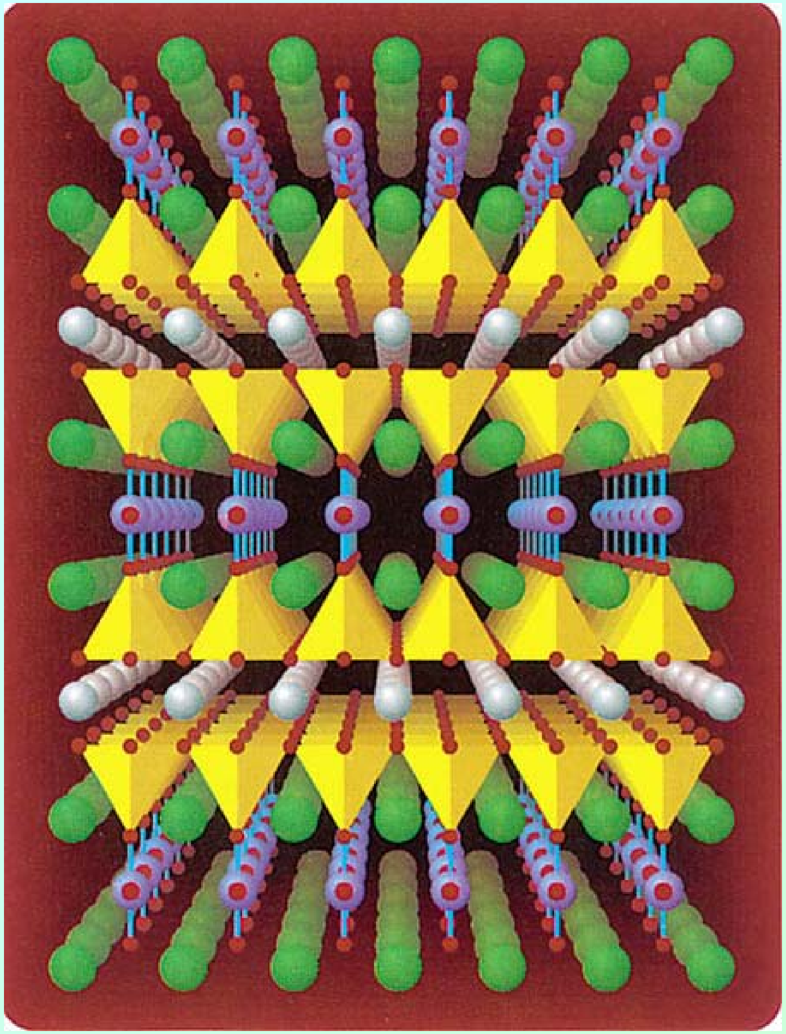
- 物体的组成部分之间或不同物体之间特征的对应、等价或相等的关系。（希腊字根=类似尺寸的。）
- 由于平衡或和谐的排列所显示的美。
- **形态和（在中分平面、中心或一个轴两侧的）组元的排列构型的精确对应。**

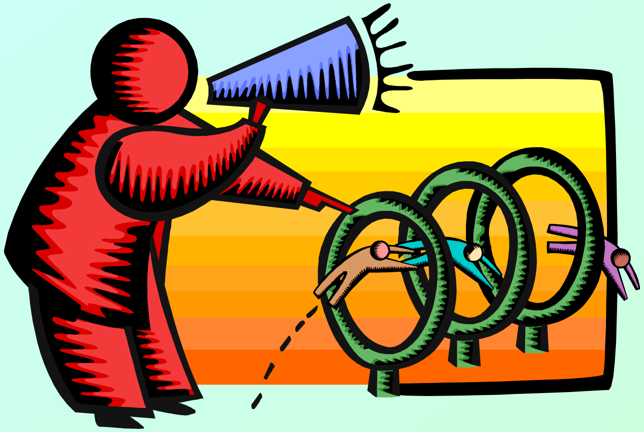


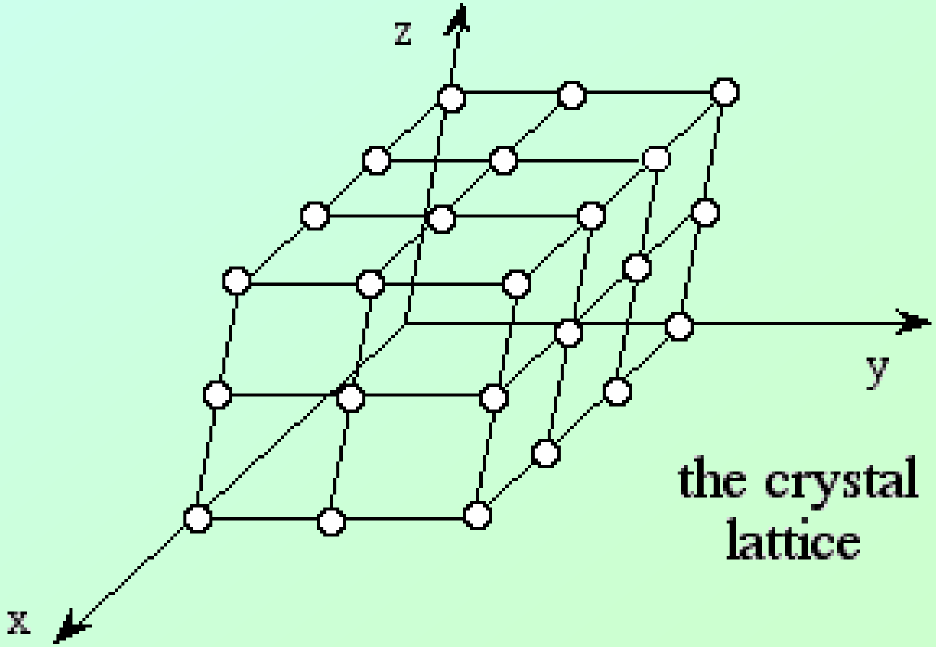
回文词

雾窗寒对遥天暮	暮天遥对寒窗雾
花落正啼鸦	鸦啼正落花
袖罗垂影瘦	瘦影垂罗袖
风剪一丝红	红丝一剪风

晶格

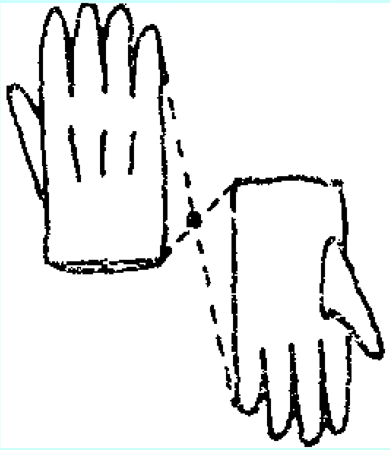






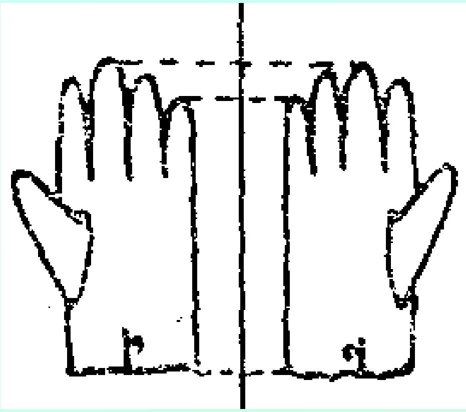
在晶体内部结构中（以及在相应抽象出来的空间点阵中）可能存在的对称要素以及相应可以进行的宏观对称操作主要有以下几类:

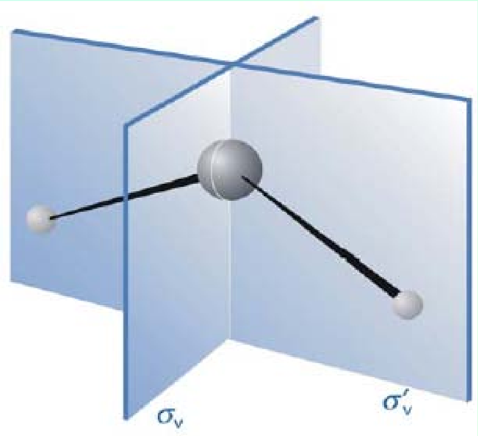
- 对称中心
- 对称面
- 旋转轴
- 倒转轴



❖ 对称中心是一个假想的几何点，其对应的对称操作是对于这个点的倒反 (反演)。

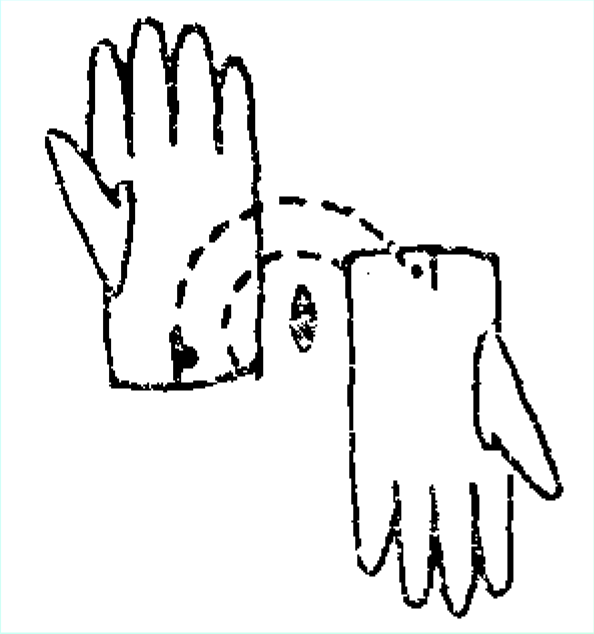
❖在结晶学中，对称中心一般用符号 “*i*” 表示。





❖ 对称面是一个假想的平面，相应的对称操作为对此平面的反映。对称面就像一面镜子，把物体的两个相同的部分以互成镜像反映的关系联系起来。

❖在结晶学中，对称面一般用符号 “*m*” 表示。



❖ 旋转轴是一条假想的直线，相应的对称操作是绕此直线的旋转。

❖物体在旋转一周的过程中重复的次数称为该旋转轴的轴次。

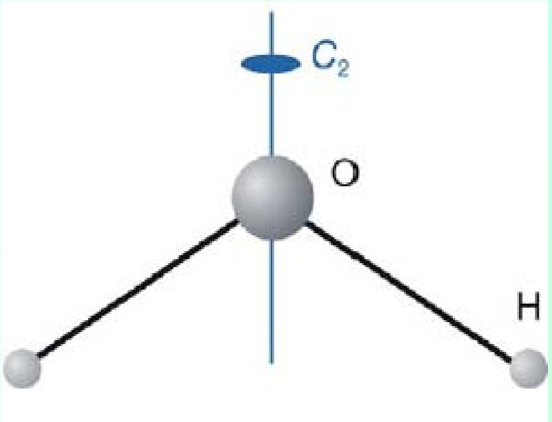
❖在结晶学中，一般直接采用轴次表示旋转轴，如 “1” 即代表 1 次旋转轴， “3” 即代表 3 次旋转轴等。

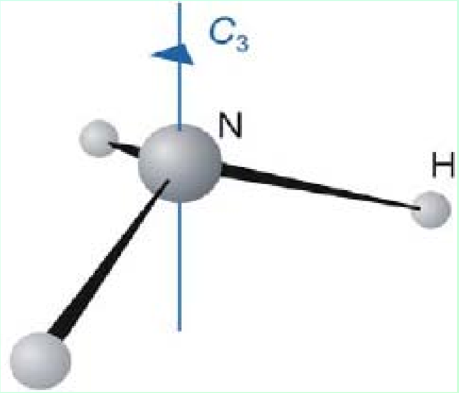
❖ 1 次旋转轴相当于没有对称性

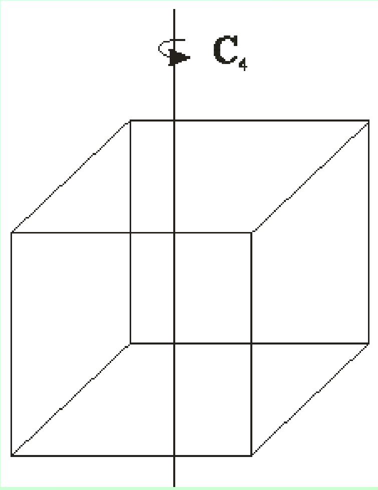
吊扇叶片每旋转一周就重复 3 次，相应的对称轴为三次对称轴

❖ 在旋转操作中，使物体复原所需的最小旋转角 α 称为基转角。轴次 n 可以写成 $n = \dfrac{360}{\alpha}$

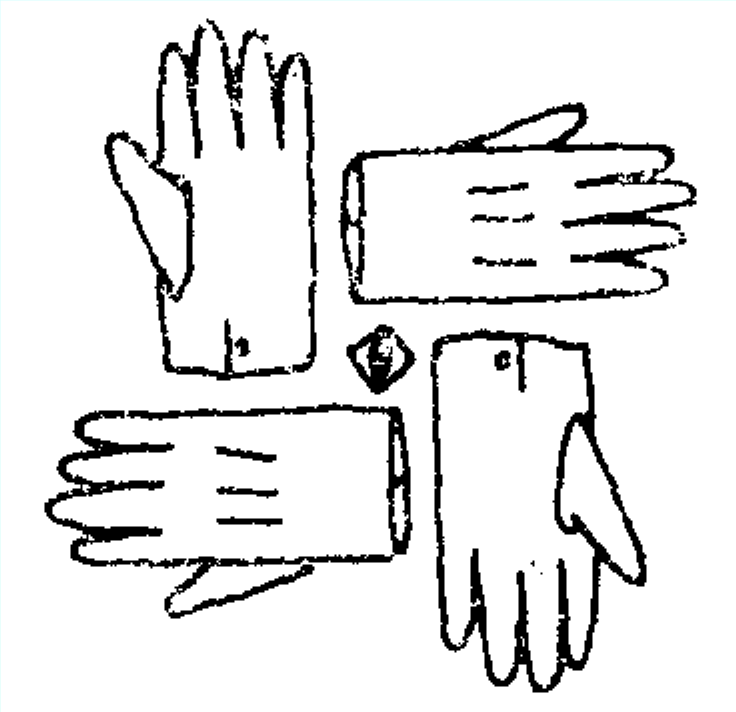
晶体对称定律证明：在晶体中只可能出现一次、二次、三次、四次和六次旋转轴。不可能出现五次以及高于六次的旋转轴。







❖ 晶体中如果存在旋转轴，则其必定通过晶体的几何中心。

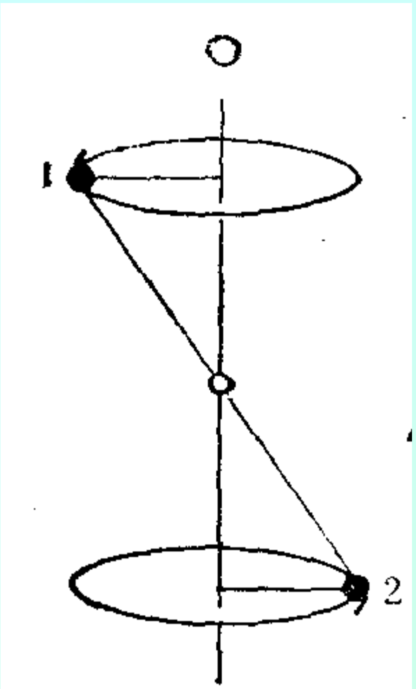


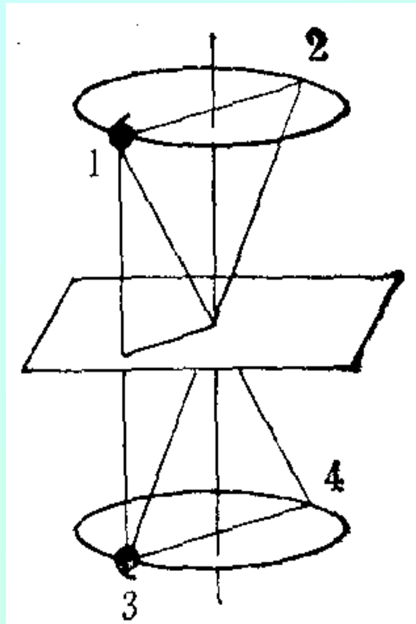
❖ 倒转轴是一种复合对称要素，由一根假想的直线和在此直线上的一个定点组成。相应的对称操作是绕此直线旋转一定角度以及对此定点的倒反。

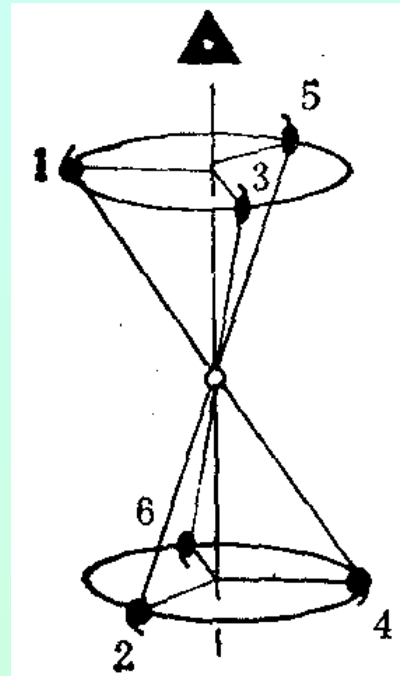
❖根据晶体对称轴定律，倒转轴也只有 1 次、2 次、3 次、4 次和 6 次等 5 种

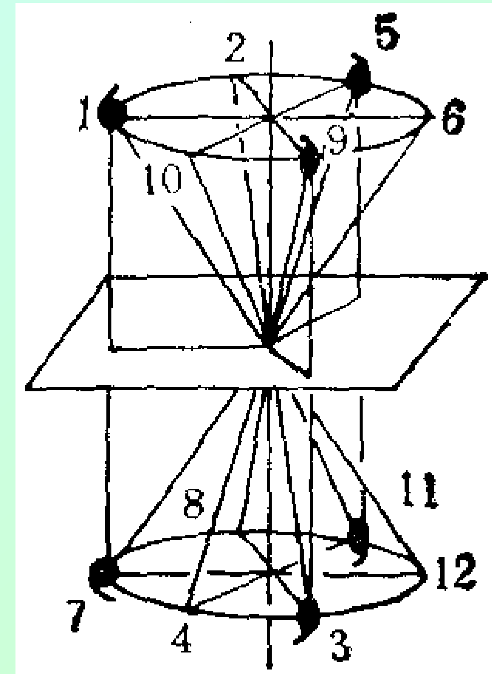
倒反轴的表示方法 $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$

倒转轴是一种复合对称要素。各类倒转轴中，只有 4 次倒转轴是一个独立的基本对称操作。









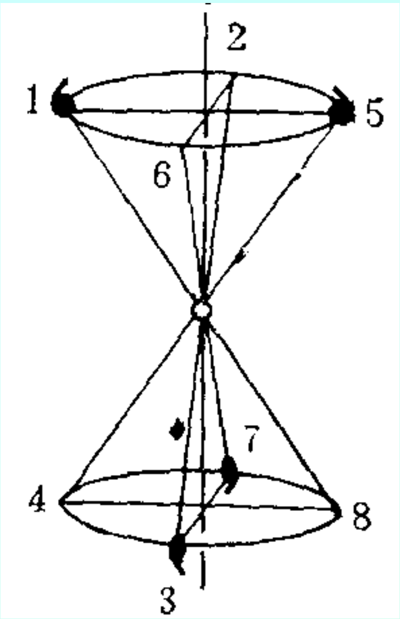
$\overline{1} = i$

$\overline{2} = m$

$\overline{3} = 3 + i$

$\overline{6} = 3 + m$

4 次倒转轴



- 相当于旋转90°后再对中心反演而图形不变。
- 这是一个独立的对称操作。它既没有 4 次旋转轴也没有对称中心，不能分解成其他基本对称要素的组合。

小结

晶体中只存在有 8 种独立的对称要素， 分别为。

i, m, 1, 2, 3, 4, 6, $\bar{4}$

任何宏观晶体所具有的对称性都是这些对称要素的组合。

晶体的宏观对称性

- 宏观晶体的几何外形是多种多样的，不同晶体中存在的对称要素也不同。
- 晶体中有几个对称要素共存时，它们在空间的分布也应该符合整体的对称关系。因此，对称要素的组合具有一定的规律。
- 晶体中对称要素的集合称为晶体的对称型。已经证明：在一切宏观晶体中，总共可能出现的对称型只有 32 种。

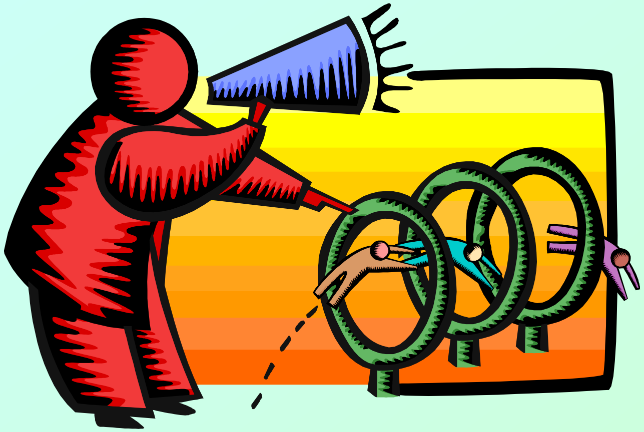
点群：在宏观晶体中存在的所有对称要素都必定通过晶体的中心，因此不论如何进行对称操作，晶体中至少有一个点是不变的，因此对称型也称为点群。

空间群：晶体结构中还有一些微观的对称要素，微观对称要素的核心是平移轴，微观对称要素的集合构成平移群。晶体结构中存在的一切对称要素 (包括平移轴在内) 的集合称为空间群。晶体中可能存在的空间群只有 230 种。

需要掌握的内容

- ✓晶体的宏观特征
- ✓晶格、晶胞、晶格参数、晶系等概念
- ✓空间点阵相关的基本概念：基元、等同点、等同原子等
- ✓单位平行六面体的选取原则
- ✓14 种布拉维点阵及其几何特征
- ✓晶体中的 8 种基本对称要素
- ✓结点位置、晶向、晶面及其表示方法

习 题



- 画出一个面心立方布拉维格子，标出其中的 [111]、[121] 及 $[1\bar{1}0]$ 晶向。
- 找出面心立方格子中的一些对称面，写出其晶面米勒指数。