第一章 晶体结构与晶体结合

Crystal Structure and bonding

2.0 引言

一、基本内容

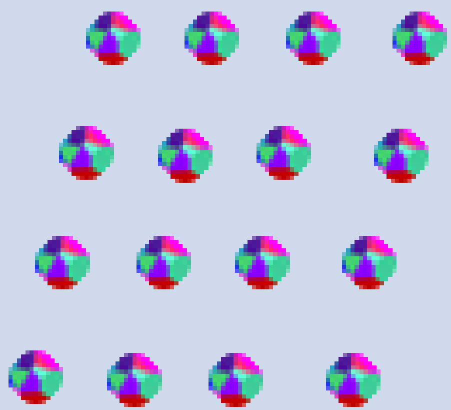
- 晶体结构
- 晶体衍射
- 倒易点阵

二、学习要点

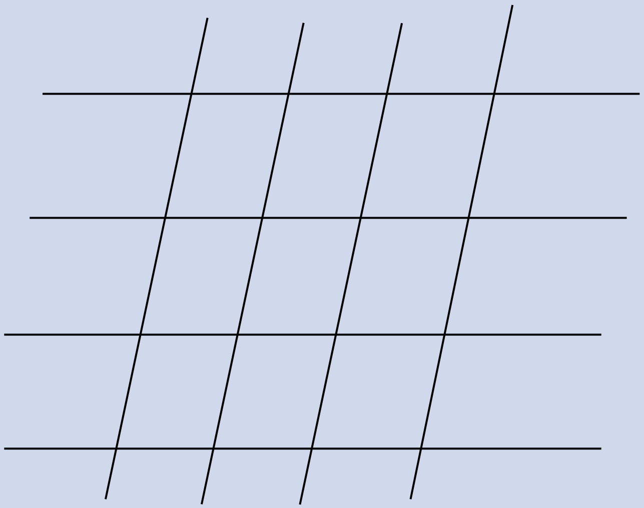
- 布拉菲格子及布拉菲单胞
- 布拉格方程
- 倒易点阵及布里渊区

2.1 点阵与元胞

一、布拉菲点阵



基元的规则排列



布拉非格子

- 基元：组成晶体的最小单元。
- 布拉非格子（点阵），晶体一定具有平移周期性
  在每个基元里找一个点，使他们具备完全相同的物理、化学和几何环境，即等同点。
- 晶体＝基元＋布拉菲点阵。

1.1 点阵与元胞

二、基矢和元胞

- 基矢 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$：

（1） 起点，终点必须落在阵点上。

（2） $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$不共面。

（3）基矢上不能有阵点。

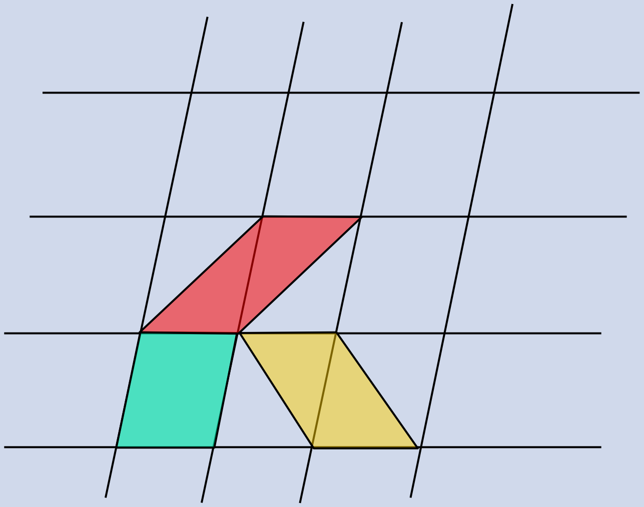
任何一个阵点的位置矢量都可以写为：

$\boldsymbol{R}_m = m_1\boldsymbol{a}_1 + m_2\boldsymbol{a}_2 + m_3\boldsymbol{a}_3$ (m_1, m_2, m_3为整数)

- 元胞：由$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$组成的平行六面体

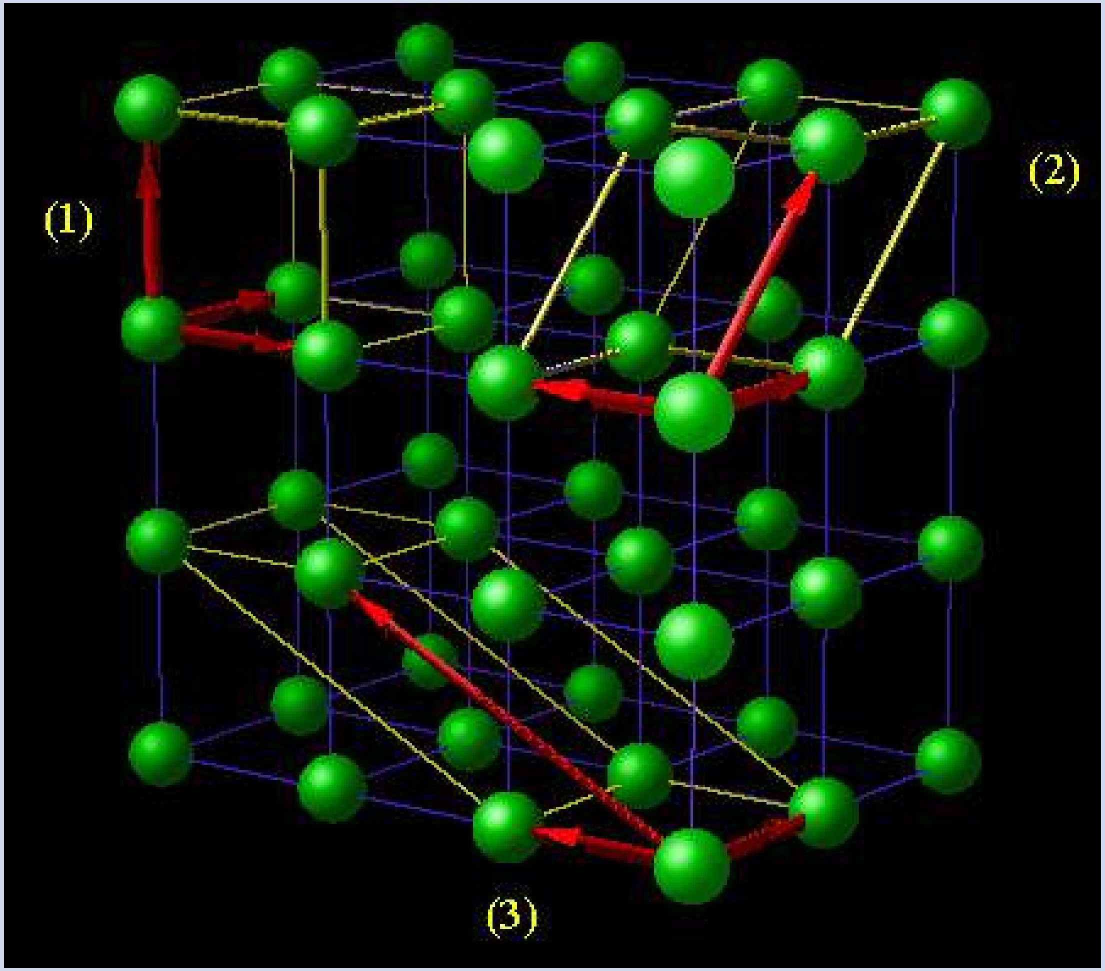
原胞的体积：$V_c = \boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)$

- 元胞不是唯一的



元胞选取的不唯一性

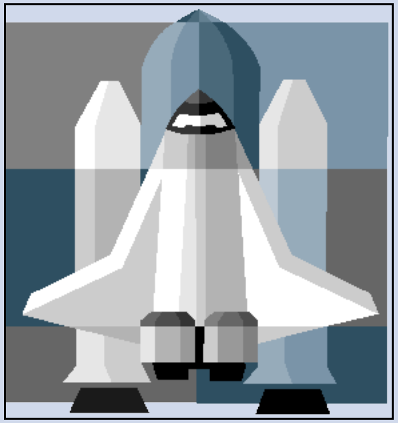
1.1 点阵与元胞



元胞选取的不唯一性

1.2 晶体的宏观对称性

- 对晶体施加某种几何操作后，晶体可以完全复原的性质，称为晶体的对称性，这种几何操作为对称操作。
- 在晶体对称操作过程中，若至少有一点保持不变，这种对称操作称为点对称操作，晶体的这种对称性称为点对称性或宏观对称性



对称图形举例

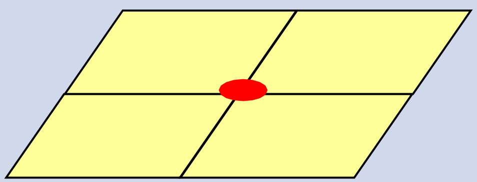
1.2 晶体的宏观对称性与布拉菲单胞

一、旋转对称性

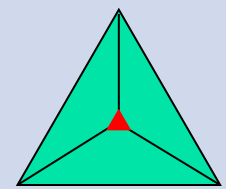
若晶体经过 2π / n旋转后复原，称晶体有n次旋转对称性。该转轴称为n次旋转对称轴, n=1, 2, 3, 4, 6

n= 1：平庸对称性，单位对称操作，所有晶体均具有的对称性

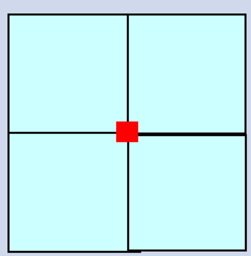
n= 2：



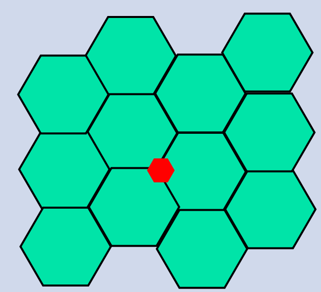
n= 3：



n= 4：

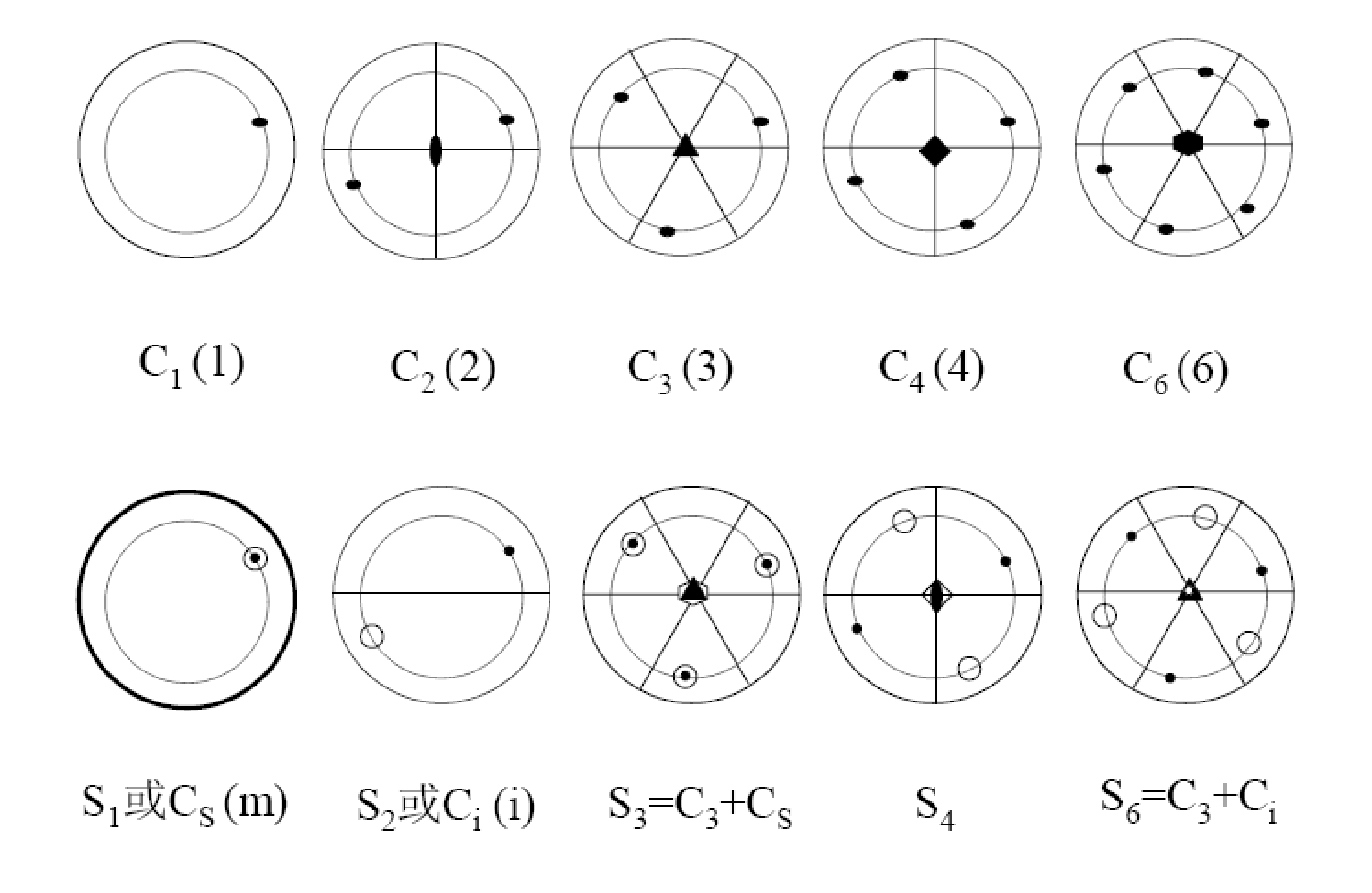


n= 6：



1.2 晶体的宏观对称性与布拉菲单胞

一、旋转对称性



1.2 晶体的宏观对称性

二、反演对称性

如果以某点为原点，令$\boldsymbol{r} \rightarrow -\boldsymbol{r}$ 的操作为反演操作，晶体复原。

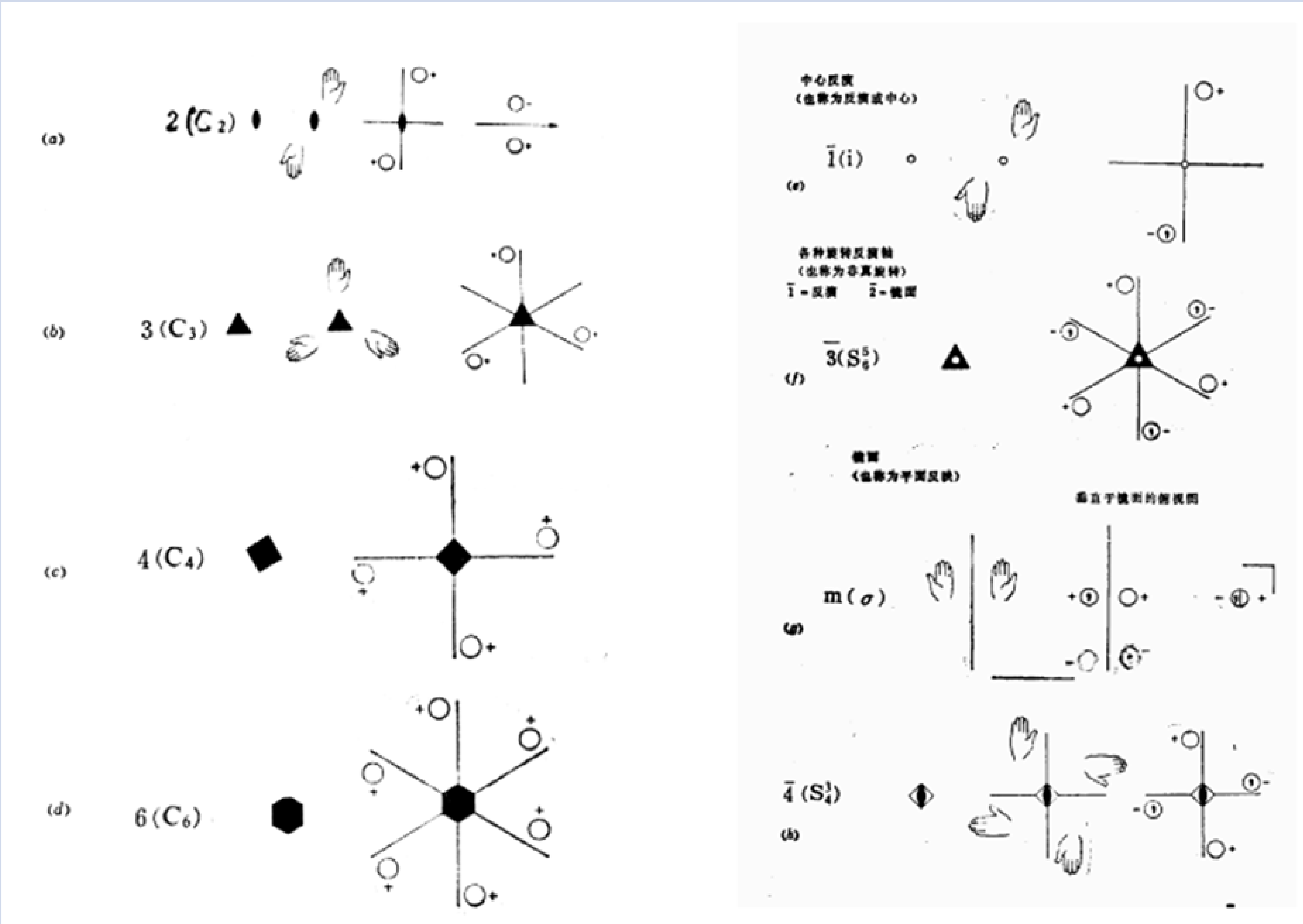
三、镜面对称

对某个平面对晶体进行镜面反映，晶体复原

四、旋转反演对称

先作旋转，再作反演，晶体重合。

1.2 晶体的宏观对称性



1.3 布拉菲单胞

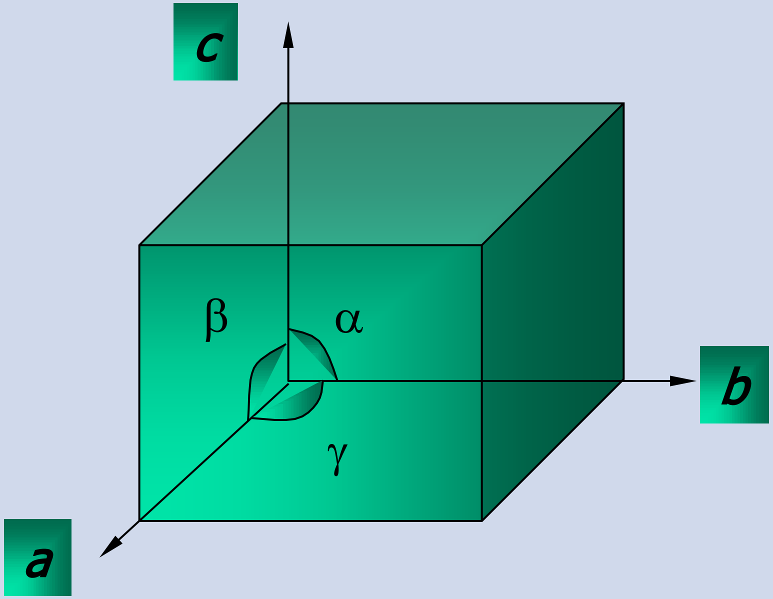
二、布拉菲晶胞

1. 晶胞的对称性和晶体的对称性一样。
2. 晶胞（六面体）的棱要尽可能的垂直。

晶胞常数：***a*, *b*, *c*** 的长度a, b, c

α =（b, c） β=(c, a)　γ=(a, b)

3. 晶胞体积要尽可能的小。（在1，2基础上）



1.3 布拉菲单胞

二、布拉菲晶胞

上述原则加对称性决定所有晶体有七个晶系14种布拉非晶胞：

① $a=b=c$, $\alpha=\beta=\gamma=90°$：立方晶系三种点阵：

P－初级点阵, I－体心点阵BCC, F－面心点阵FCC

② $a=b\neq c$, $\alpha=\beta=\gamma=90°$:四方晶系（正方晶系）：

P－初级点阵, I－体心点阵BCC

③ $a\neq b\neq c$，$\alpha=\beta=\gamma=90°$：正交晶系，

有P,I,F及C点阵。

④ $a\neq b\neq c$，$\alpha=\beta=90°$，$\gamma=120°$：六方晶系：

只有初级点阵P，无含心点阵。

⑤ $a=b=c$, $\alpha=\beta=\gamma\neq 90°$:三方晶系（或菱方）：

只有P点阵。

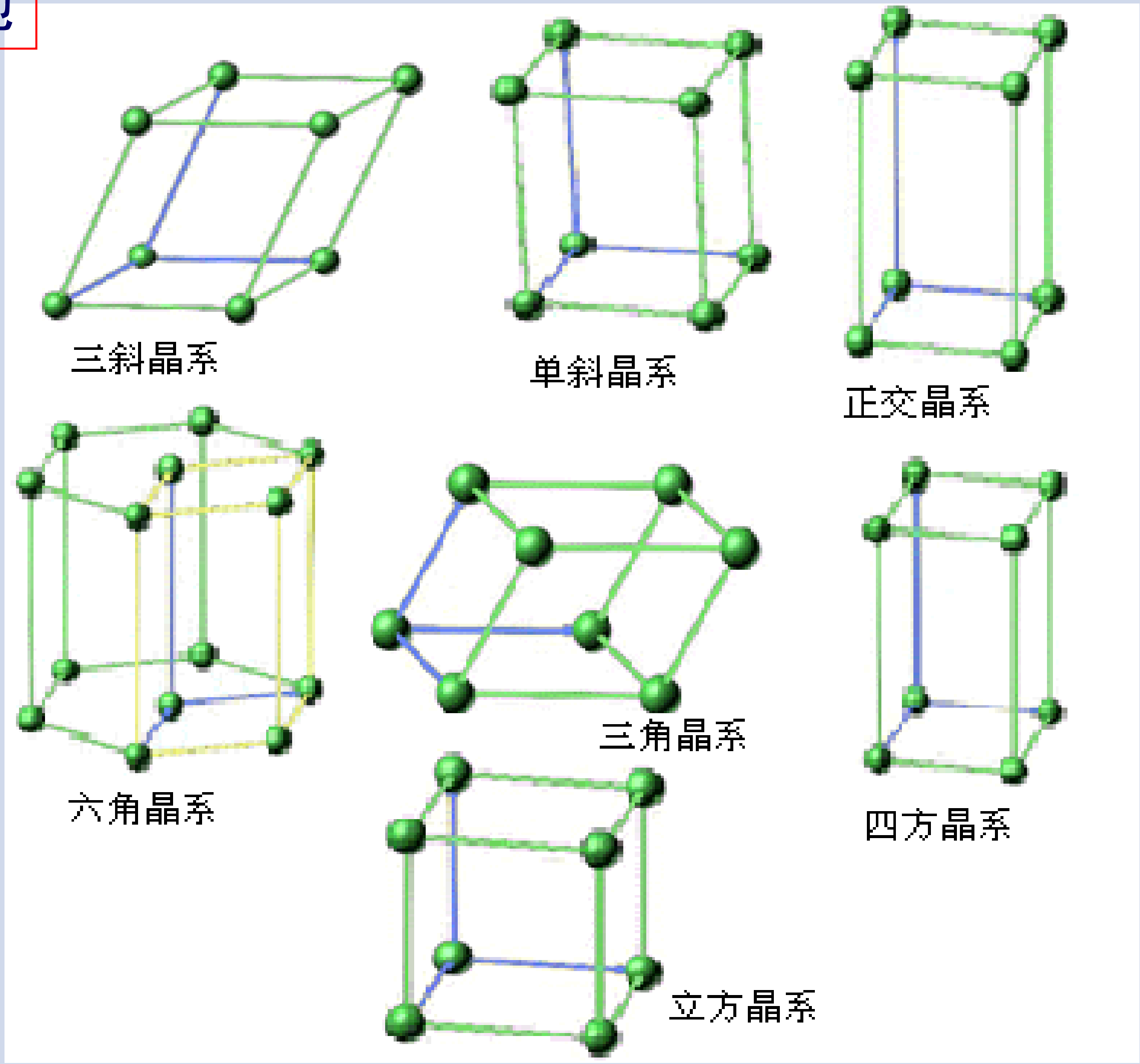
⑥ $a=b\neq c$，$\alpha\neq\beta\neq\gamma$：单斜晶系

P和C心点阵

⑦ $a\neq b\neq c$，$\alpha\neq\beta\neq\gamma$：三斜晶系

1.3 布拉菲单胞

二、布拉菲晶胞



1.4 元胞与单胞的关系

体心立方晶体的原胞

基矢

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$

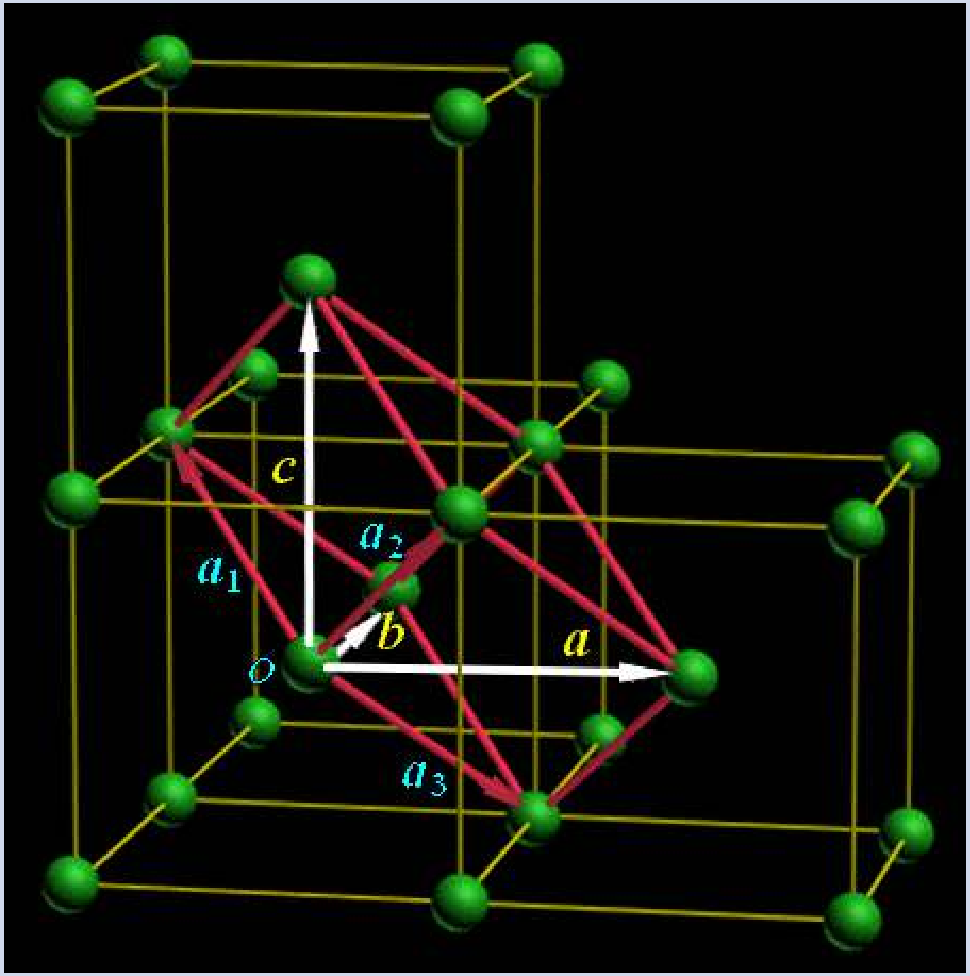
$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

体积

$$V = \frac{1}{2}a^3$$

结点数　1



1.4 元胞与单胞的关系

面心立方晶体的原胞

基矢

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{k})$$

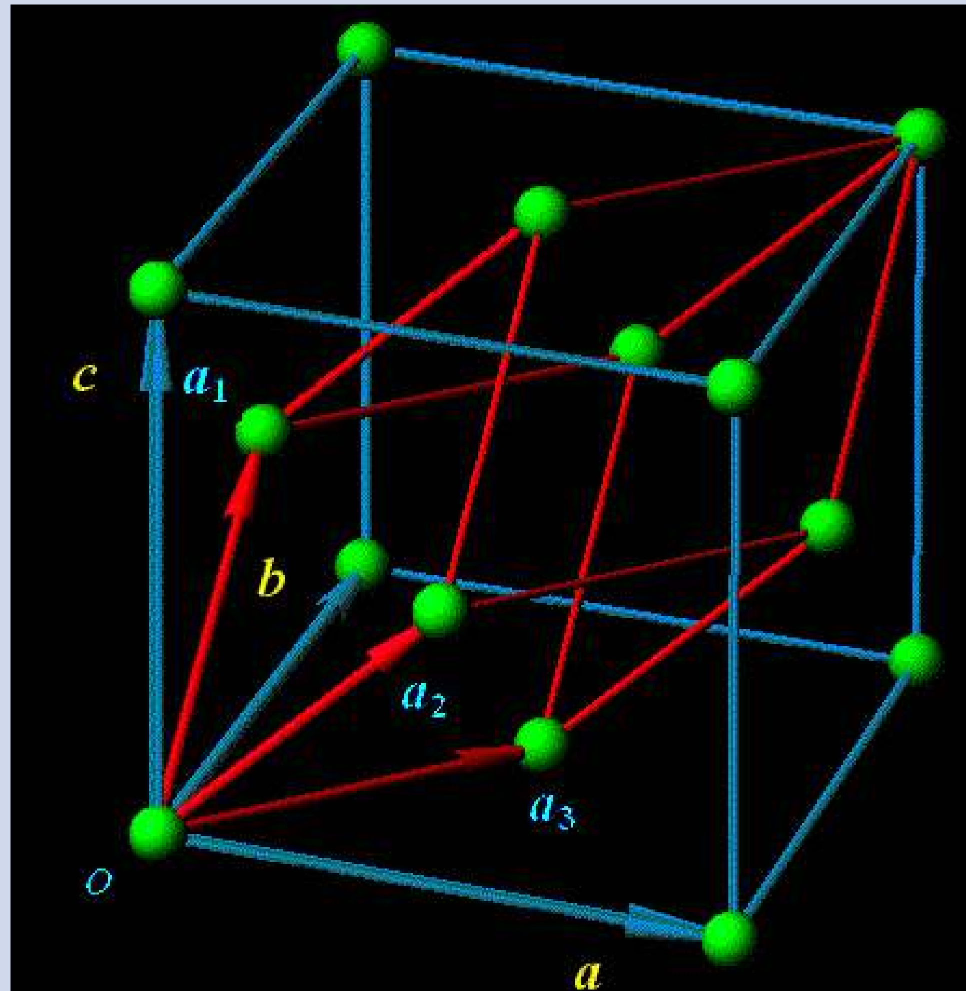
$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j})$$

体积

$$V = \frac{1}{4}a^3$$

结点数

1



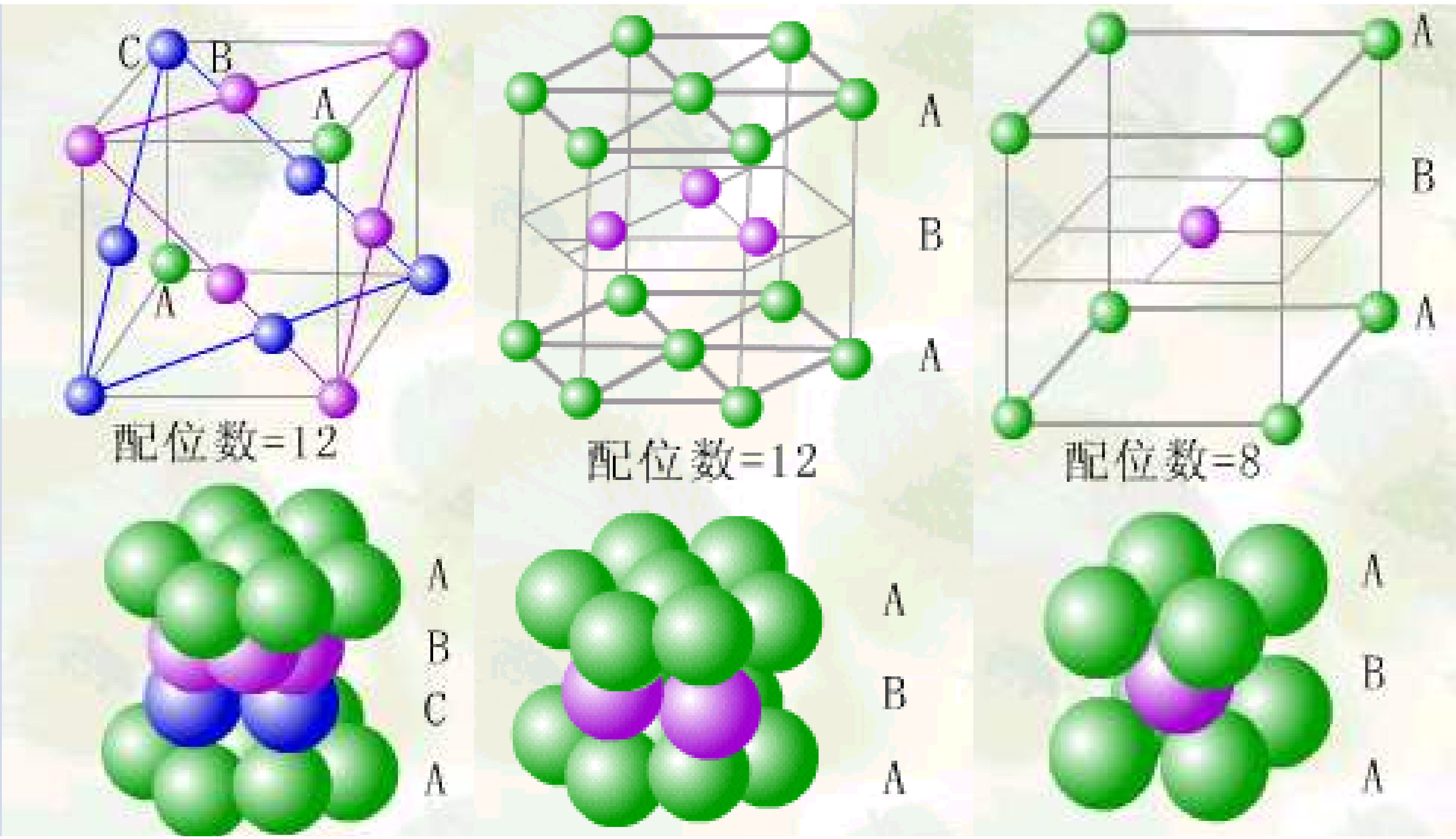
1.5 实际晶体举例


六角相绿玉
单斜相石膏
Hexagonal beryl
Monoclinic gypsum
Trigonal quartz
Amorphous amber (no underlying crystal symmetry)
三角相石英
非晶琥珀

1.5 实际晶体举例

一、金属密堆积结构

不同颜色代表堆垛次序



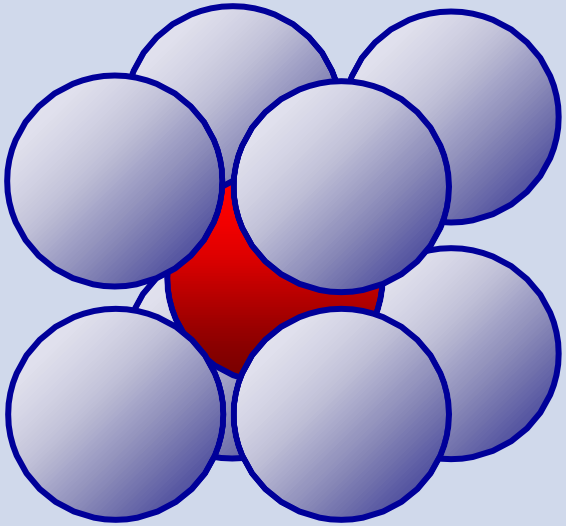
Al, Ag, Cu, Au等

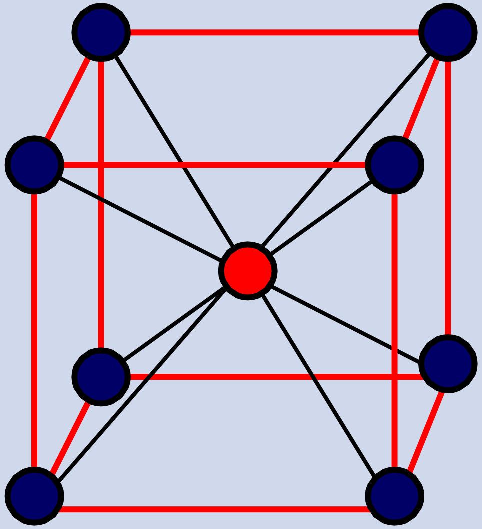
Mg，Co等

Fe，Mo等

1.5 实际晶体举例

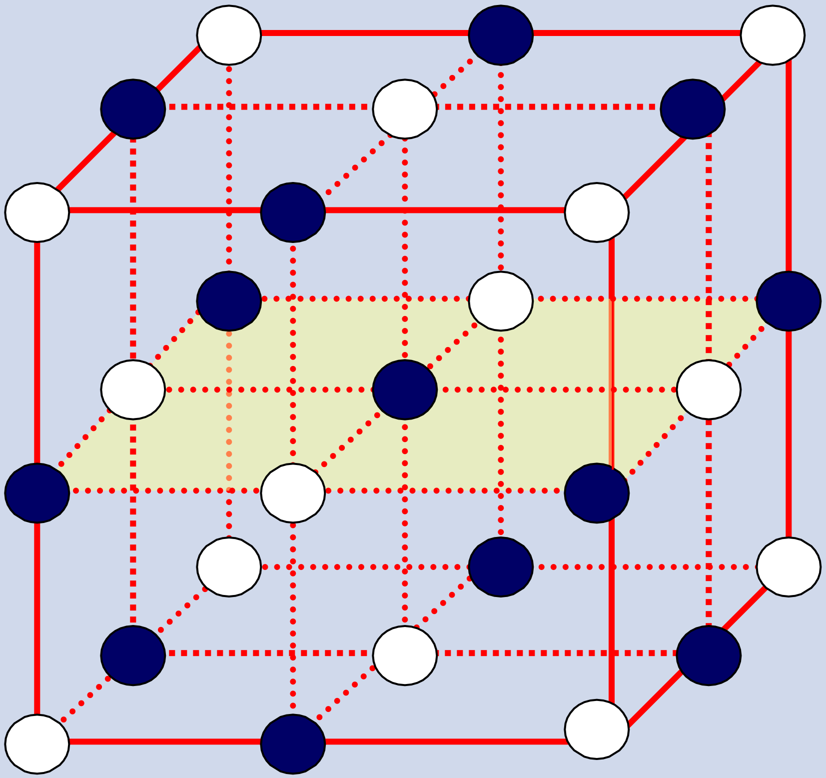
二、CsCl结构





1.5 实际晶体举例

三、NaCl结构



1.5 实际晶体举例

四、金钢石