7.2.3 晶体的空间点阵型式

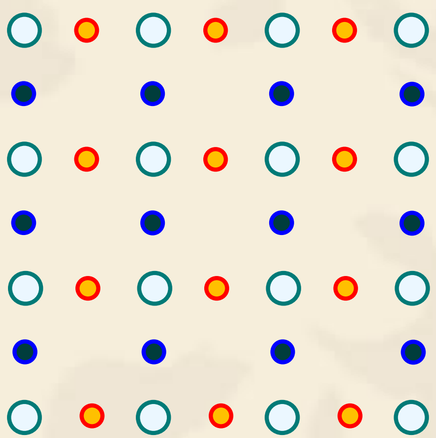
7 个晶系的晶胞（7 种平行六面体）由特征对称元素确定，任意晶体必属于其中一类。

晶胞可以是素单位，也可以是复单位，两种晶体可能同属一个晶系，但晶胞内容并不相同，它们除了特征对称元素相同外，其它对称元素可能并不相同，因此在晶系的基础上需要继续将晶体分类。

空间点阵是晶体结构的高度抽象，在晶系基础上最简单的进一步分类工作就是给空间点阵分类，找出所有可能的空间点阵型式，即**Bravais**格子。

晶体结构基元中的原子排布方式会破坏对称性，因此各晶系的晶胞参数只需等式约束条件。但是点阵点是数学点，不会破坏对称性，需要不等式约束来去掉不需要的对称性。

例：沿*c*轴俯视图，晶轴夹角均为$\alpha = \beta = \gamma = 90°$



正交

原子排布破坏了4，
对边长*a*和*b*无要求

正交

必须要求$a \neq b$，
否则就变为四方

四方

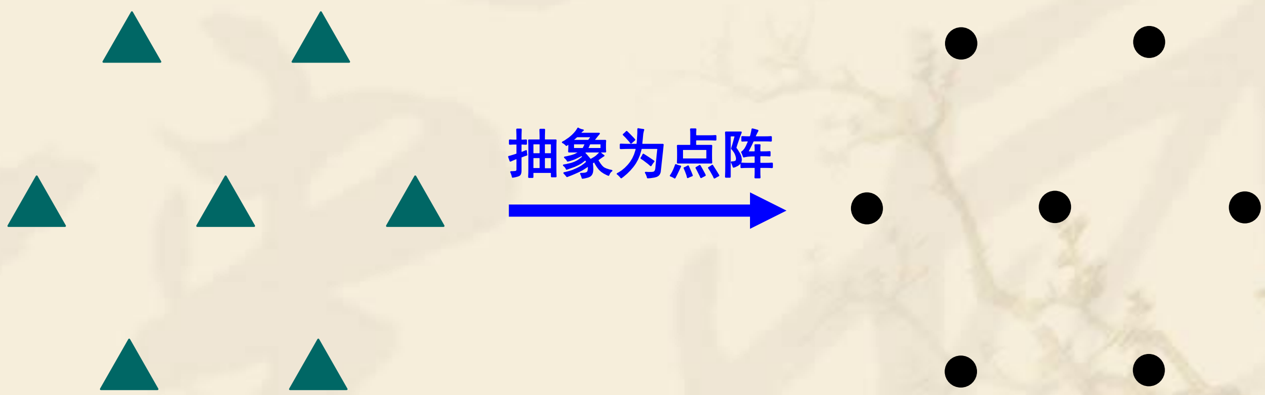
$a = b$

晶系晶胞以及Bravais格子的边角关系

晶系	晶系晶胞	Bravais格子
立方晶系	$a=b=c \quad \alpha=\beta=\gamma=90°$	$a=b=c \quad \alpha=\beta=\gamma=90°$
六方晶系	$a=b \quad \alpha=\beta=90° \quad \gamma=120°$	$a=b\neq c \quad \alpha=\beta=90° \quad \gamma=120°$
三方晶系	$a=b \quad \alpha=\beta=90° \quad \gamma=120°$	$a=b\neq c \quad \alpha=\beta=90° \quad \gamma=120°$
四方晶系	$a=b \quad \alpha=\beta=\gamma=90°$	$a=b\neq c \quad \alpha=\beta=\gamma=90°$
正交晶系	$\alpha=\beta=\gamma=90°$	$a\neq b\neq c \quad \alpha=\beta=\gamma=90°$
单斜晶系	$\alpha=\gamma=90°$	$a\neq b\neq c \quad \alpha=\gamma=90°\neq\beta$
三斜晶系	无要求	$a\neq b\neq c \quad \alpha\neq\beta\neq\gamma\neq 90°$

1. 如果空间点阵的晶胞是素单位

此时，三方晶系和六方晶系的点阵是相同的。三方晶系本来只有 3，但是若三方晶系晶胞是素单位，抽象为点阵后，3 变成了 6，三方晶系可以并入六方晶系，因此，由素单位构成的空间点阵按 6 种晶系划分，有 6 种不同形状的晶胞，它们就是 6 种不同型式的由素单位构成的Bravais格子，用大写字母P表示素单位。



垂直于纸面的3 ⟶ 垂直于纸面的6

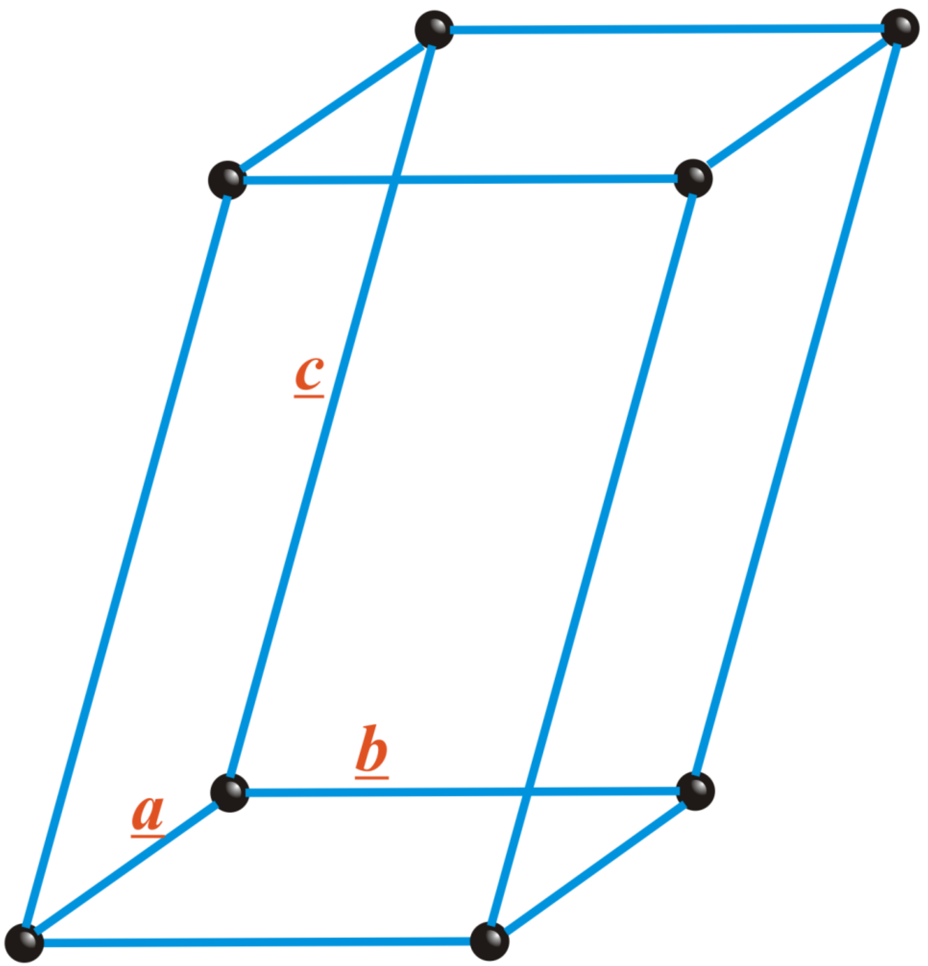
6 种素单位Bravais格子之一：简单三斜（*aP*）

晶系：三斜(a)

几何特征：

$a \neq b \neq c$

$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^{\circ}$



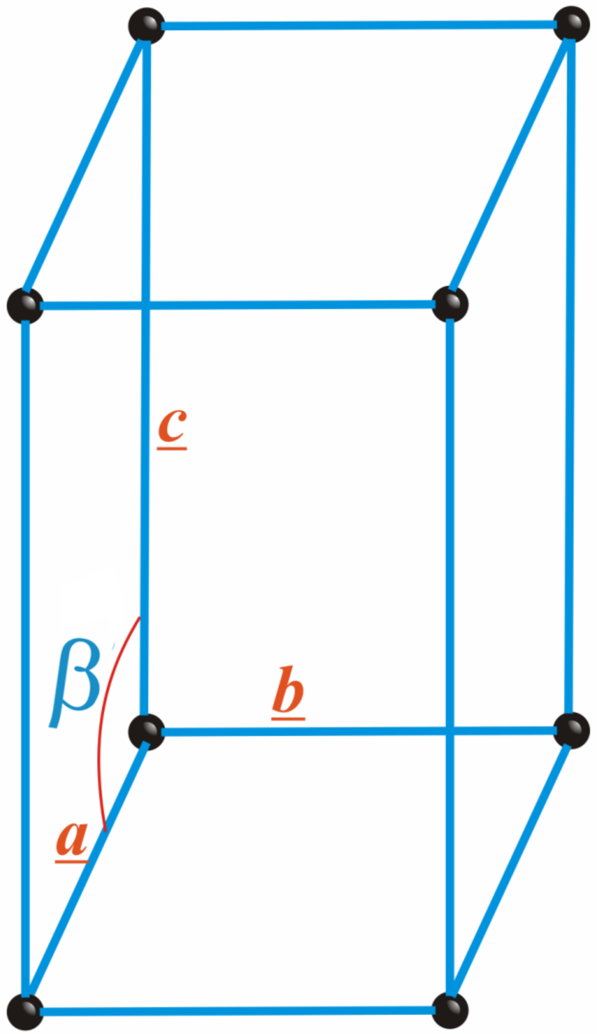
6 种素单位Bravais格子之二：简单单斜（*mP*）

晶系： 单斜(*m*)

几何特征：

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$$



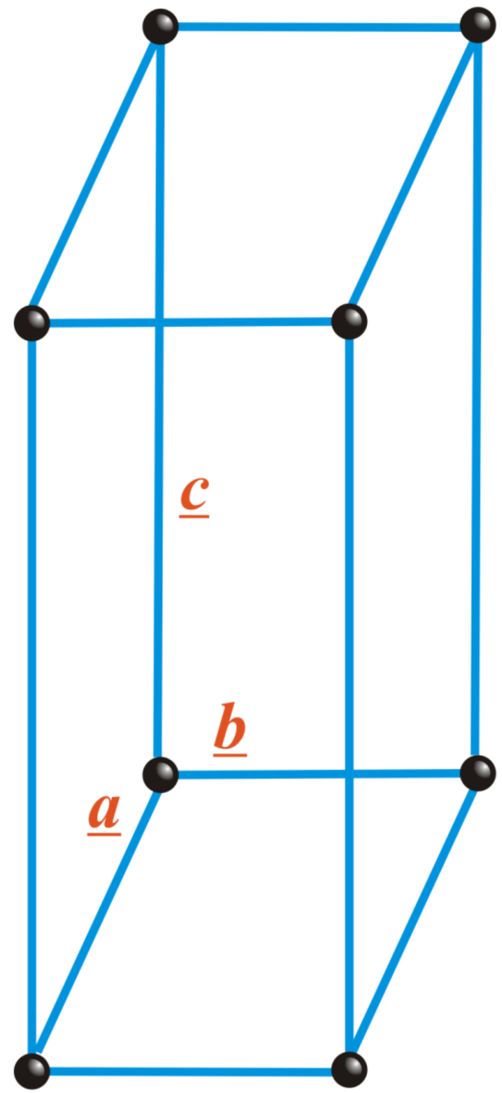
6 种素单位Bravais格子之三：简单正交（*oP*）

晶系：正交(*o*)

几何特征：

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$$



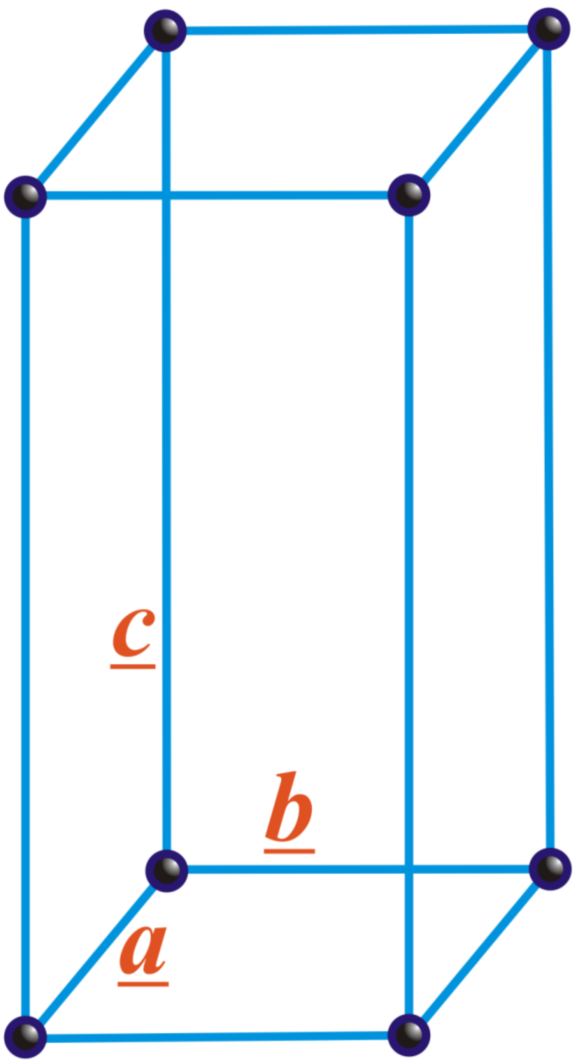
6 种素单位Bravais格子之四：简单四方（*tP*）

晶系：四方(t)

几何特征：

$a=b\neq c$

$\alpha=\beta=\gamma=90^{\circ}$



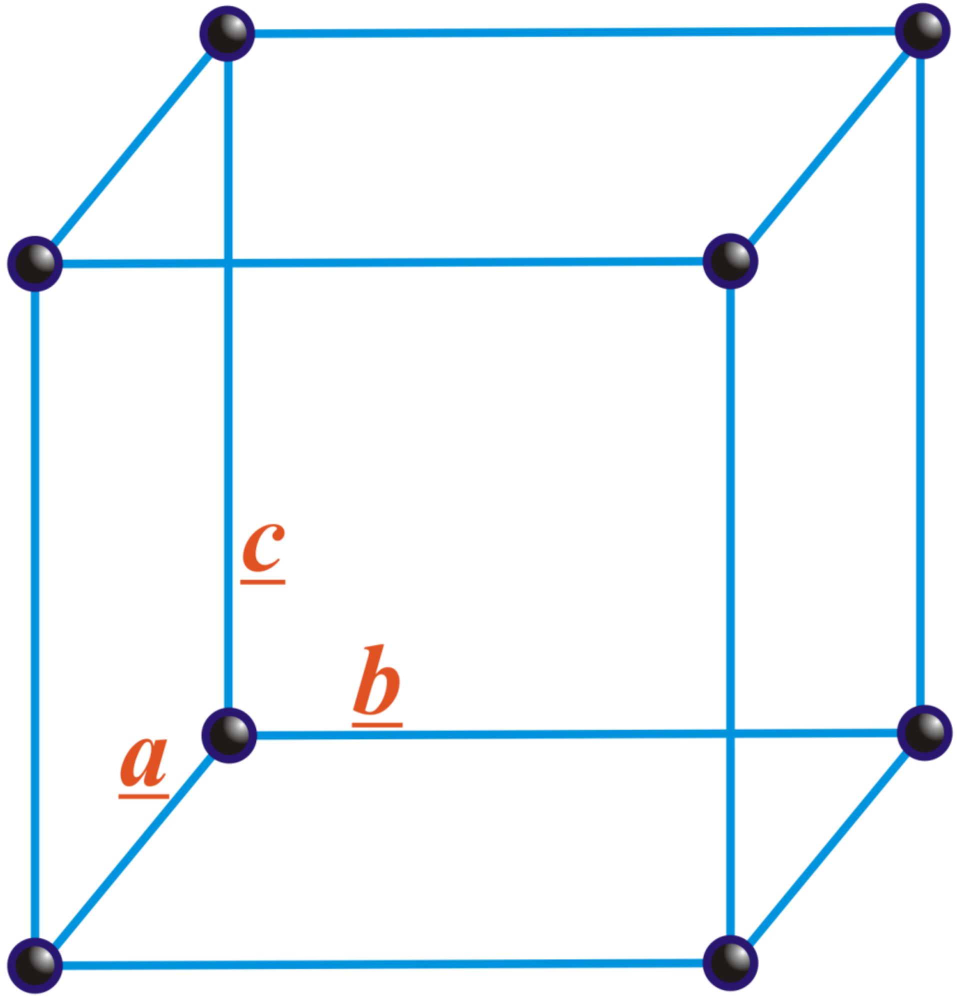
6 种素单位Bravais格子之五：简单立方（*cP*）

晶系：立方(c)

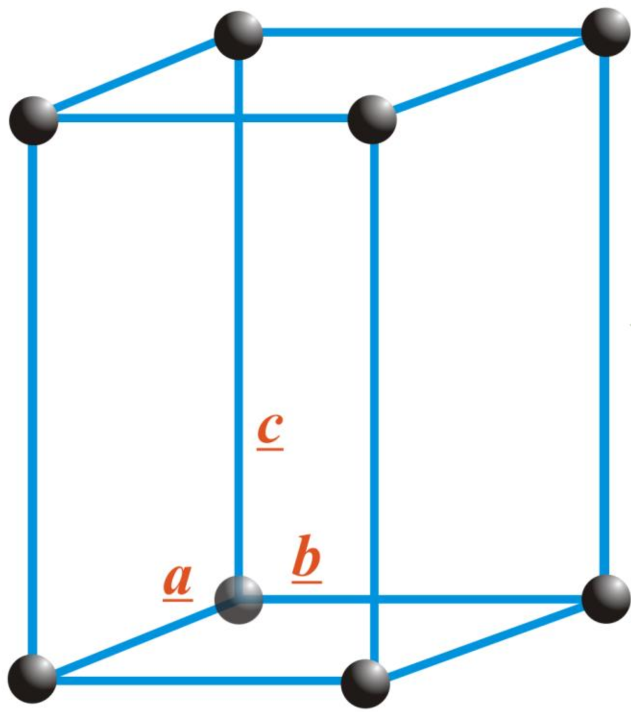
几何特征：

$a=b=c$

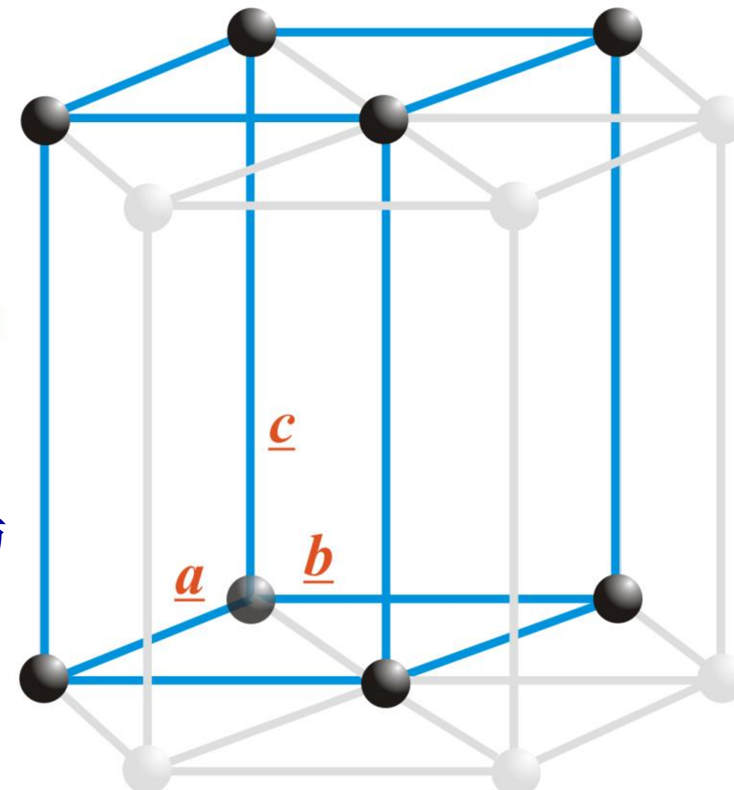
$\alpha=\beta=\gamma=90^{\circ}$



6 种素单位Bravais格子之六：简单六方（*hP*）



黑色与灰白色点都是点阵点. 黑点与蓝线表示一个正当格子



六方简单 (*hP*)格子可用于六方晶系, 也可用于三方晶系, 只算一种格子。

几何特征：$a=b\neq c$，$\alpha=\beta=90°$，$\gamma=120°$

2. 如果空间点阵的晶胞是复单位

在素单位Bravais格子中加点构成复单位，要求加上点后不破坏点阵的平移对称性，可以证明满足要求的点只能加在素单位的 4 个特殊位置上：用大写字母**I**表示体心，**F**表示面心，**C**表示底心，**R**表示R心。在这 4 个位置上加点后，新点阵有可能破坏原晶系的对称性要求或者虽满足原晶系的对称性要求但与晶系中其它型式点阵重复。这些因素限制了点阵型式的数量，最终得到另外 8 种不同型式的由复单位构成的Bravais格子。

给素单位点阵加心后可能违背对称性要求也可能与其它点阵重复：

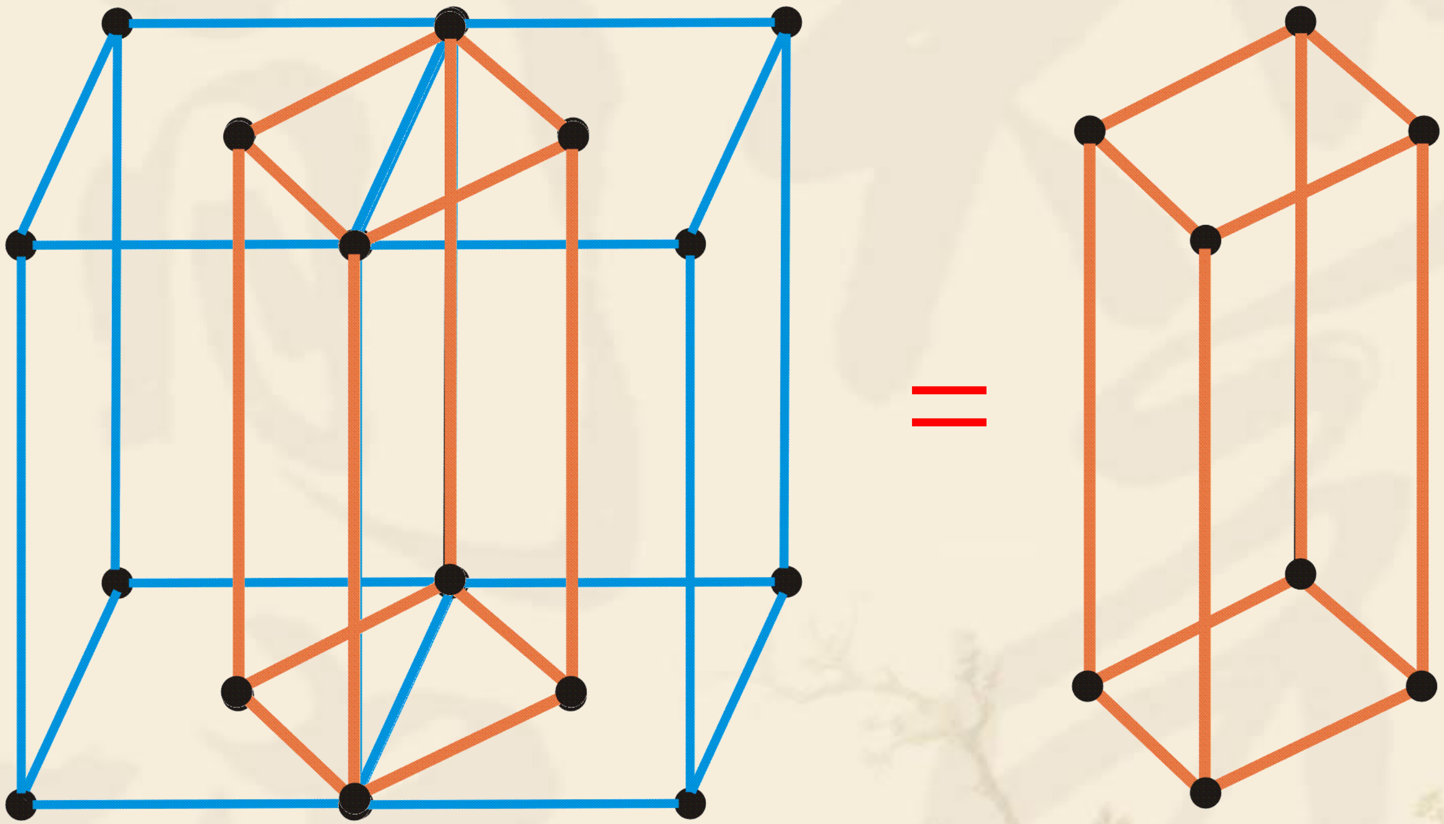
一：有些晶系的特征对称元素不允许加心。

例如：立方晶系不可能存在底心点阵，否则，与立方晶系含有四个3的要求不符。

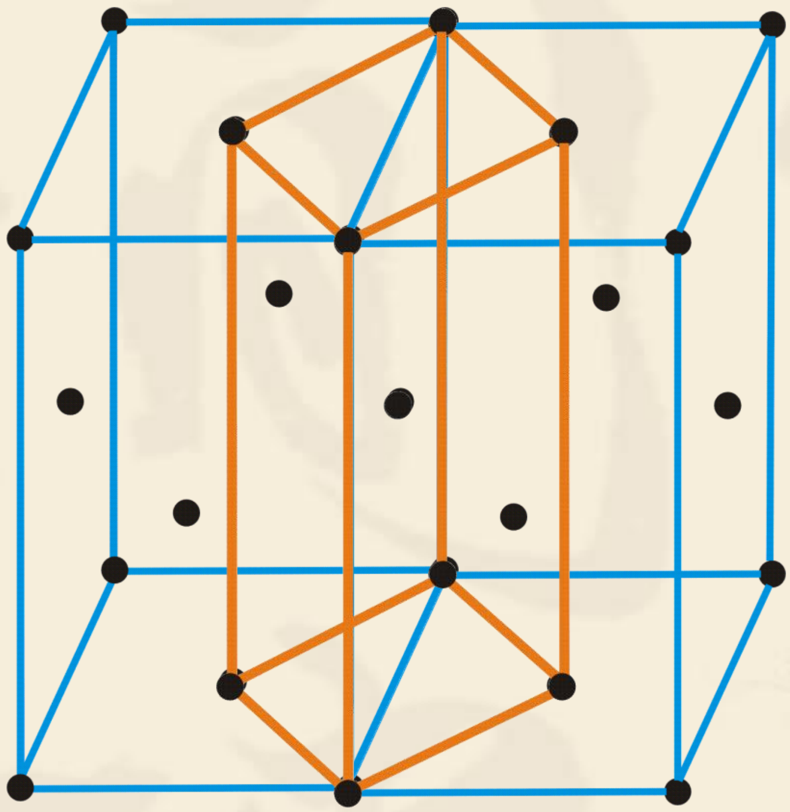
二：有些晶系的面心或底心加点后可以划分为体积更小的对称性不变的平行六面体单位

例如：四方底心可划为四方简单

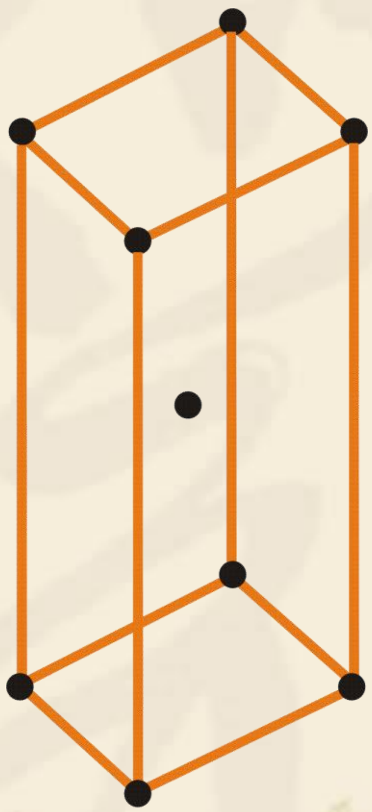
四方面心可划为四方体心



“四方底心” = 四方简单



=



“四方面心” = 四方体心

A. 体心

除了晶胞（平行六面体）的8个顶点处有点阵点外，在 $\mathbf{r} = (\mathbf{a} + \mathbf{b} + \mathbf{c})/2$ 处还有一个点阵点，此点就是体心。

只有三种体心Bravais格子。

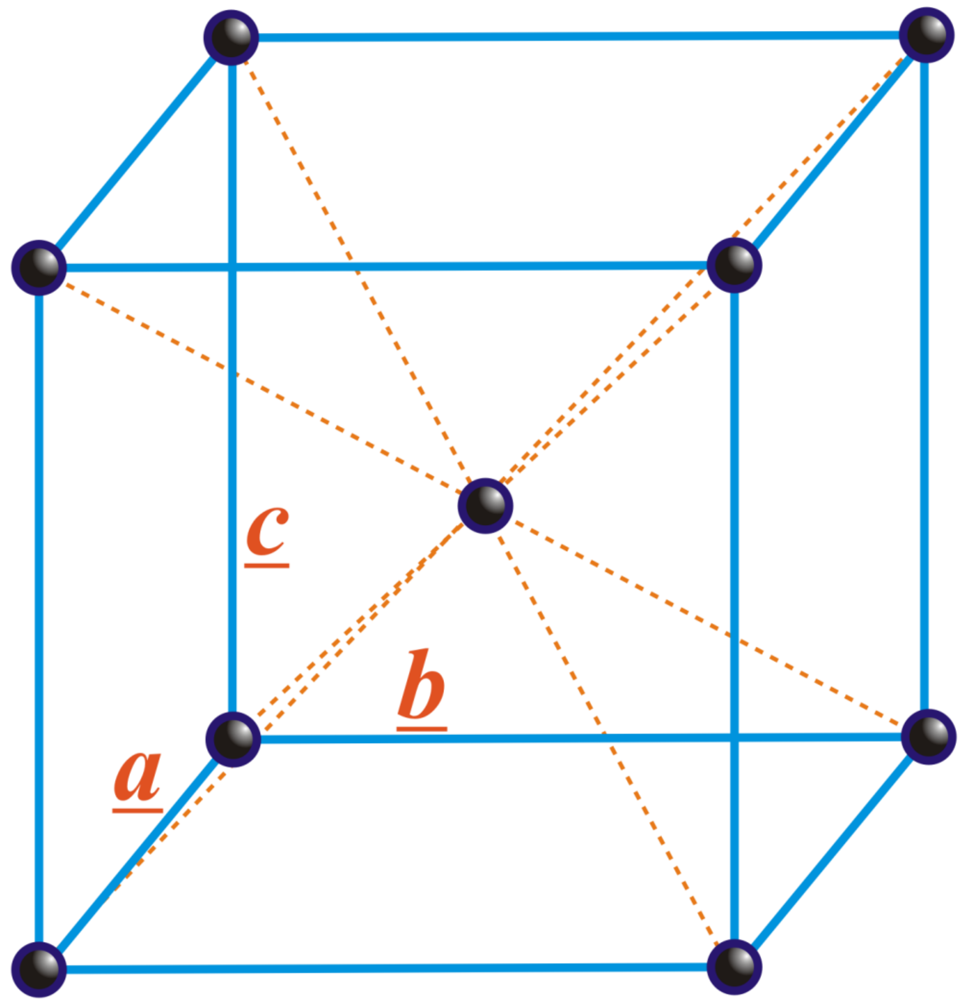
3 种体心Bravais格子之一：体心立方（*cI*）

晶系：立方(*c*)

几何特征：

$a=b=c$

$\alpha=\beta=\gamma=90°$



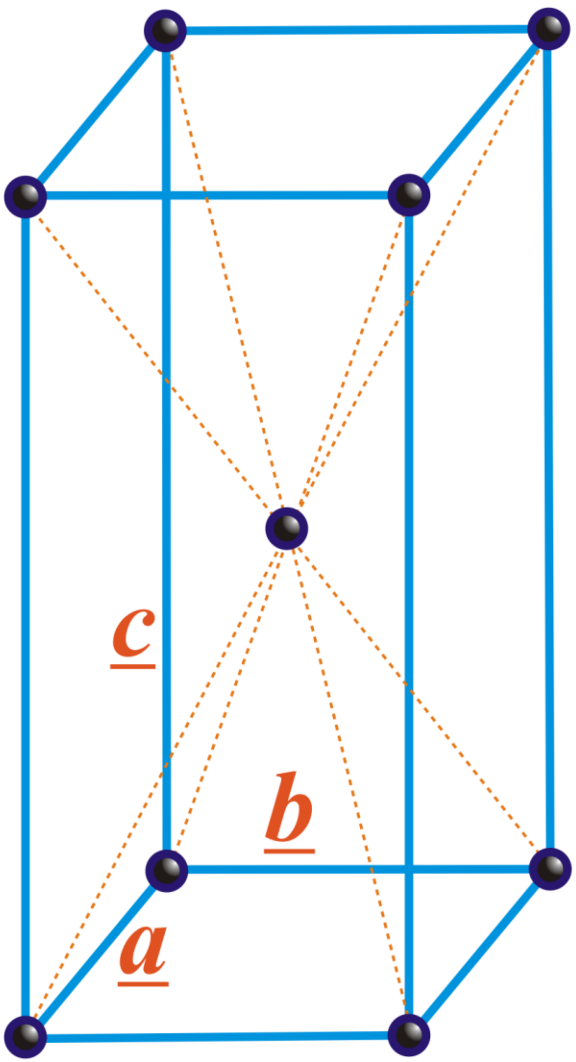
3 种体心Bravais格子之二：体心四方（*tI*）

晶系：四方(t)

几何特征：

$a=b\neq c$

$\alpha=\beta=\gamma=90^{\circ}$



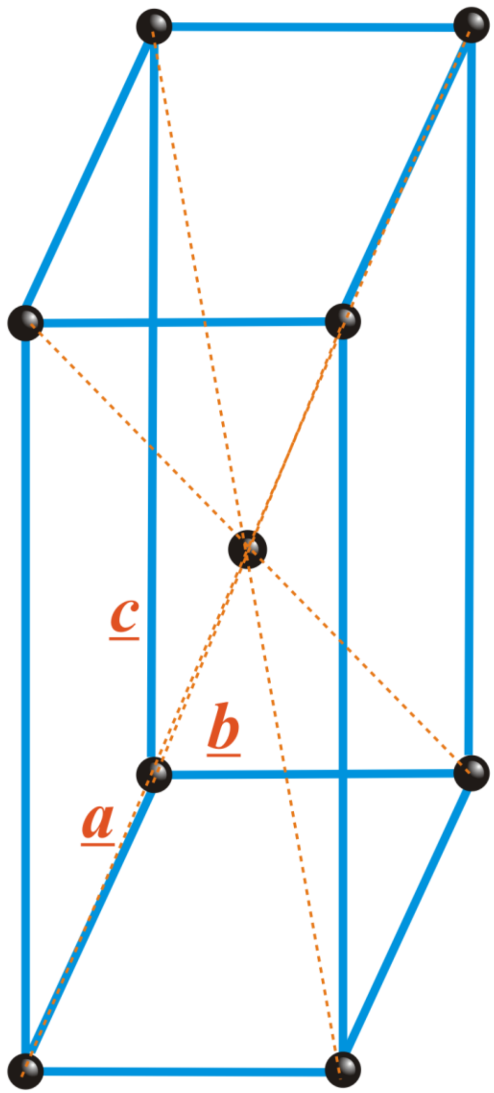
3 种体心Bravais格子之三：体心正交（*oI*）

晶系：正交(*o*)

几何特征：

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$$



B. 面心

除了晶胞（平行六面体）的8个顶点处有点阵点外，在每一个面的中心处都有一个点阵点，这六个点就是面心，其分数坐标为：

(1/2, 1/2, 0)， (1/2, 0, 1/2)， (0, 1/2, 1/2)

只有两种面心Bravais格子。

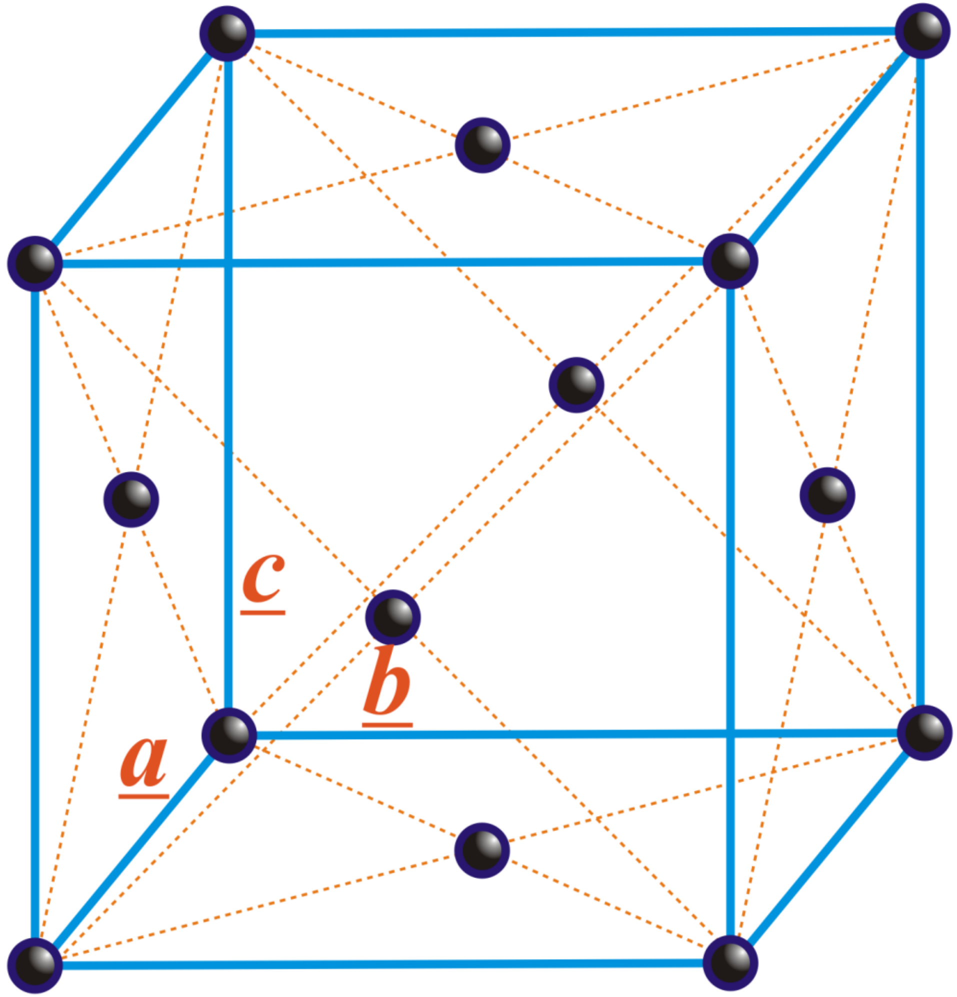
2 种面心Bravais格子之一：面心立方（*cF*）

晶系：立方(*c*)

几何特征：

$a=b=c$

$\alpha=\beta=\gamma=90°$



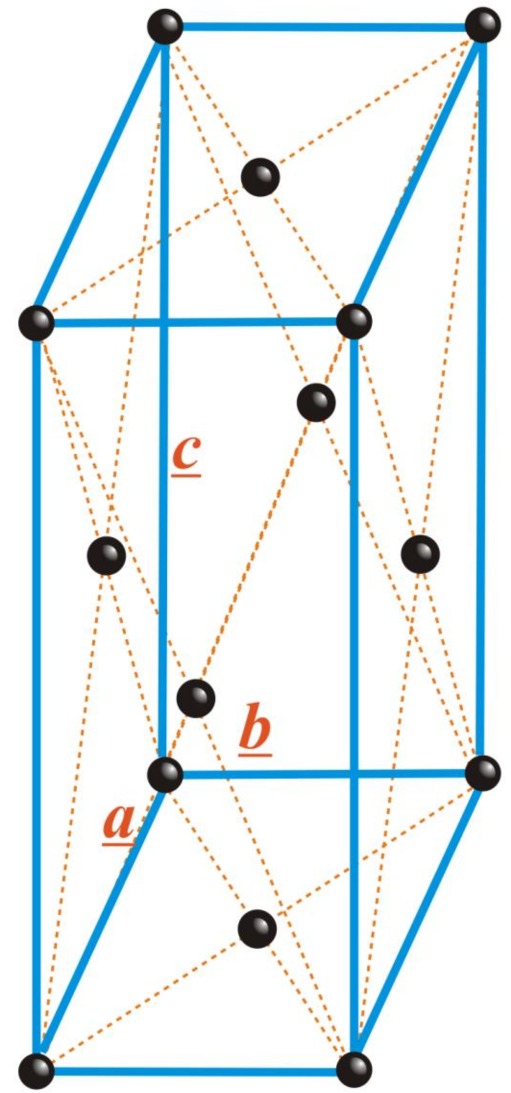
2 种面心Bravais格子之二：面心正交（*oF*）

晶系：正交(*o*)

几何特征：

$a \neq b \neq c$

$\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$



C．底心（C心）

与c轴垂直的两个面的中心处各有一个点阵点，这两个点就是底心（C心），其分数坐标为：

(1/2, 1/2, 0)

只有两种C心Bravais格子。

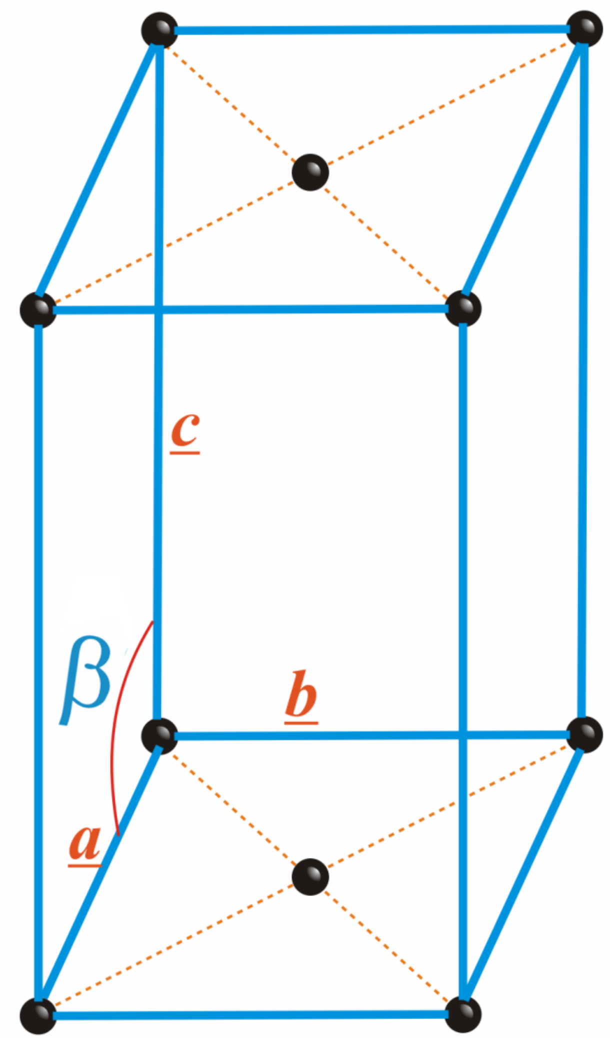
2 种底心Bravais格子之一：*C*心单斜（*mC*）

晶系： 单斜(m)

几何特征：

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$



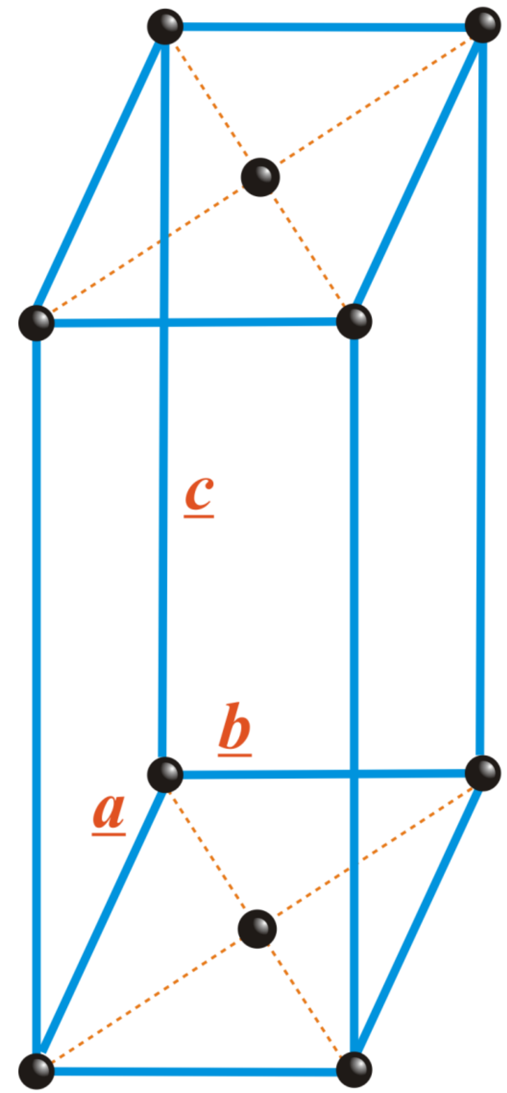
2 种底心Bravais格子之二：*C*心正交（*oC*）

晶系： 正交(*o*)

几何特征：

$$a \neq b \neq c$$

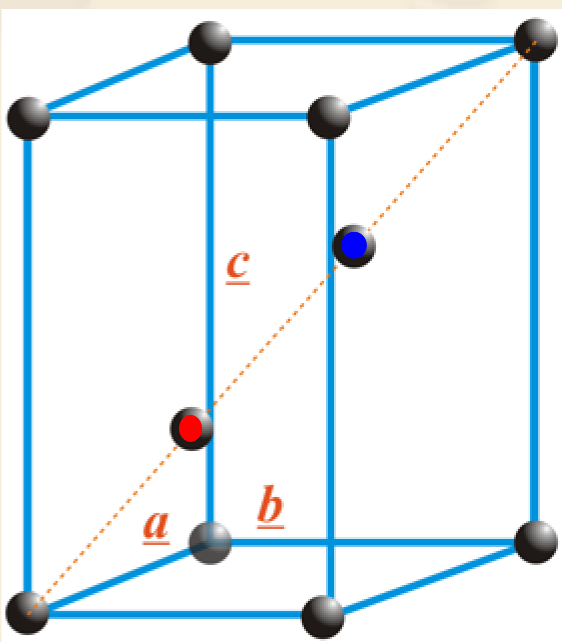
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$$

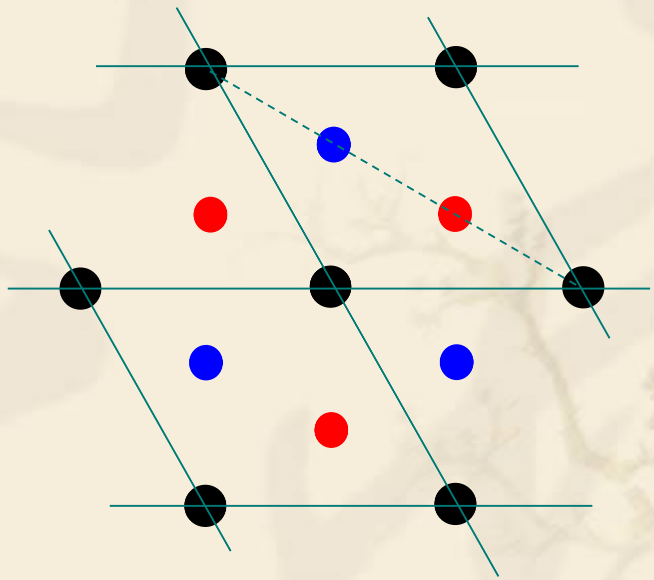


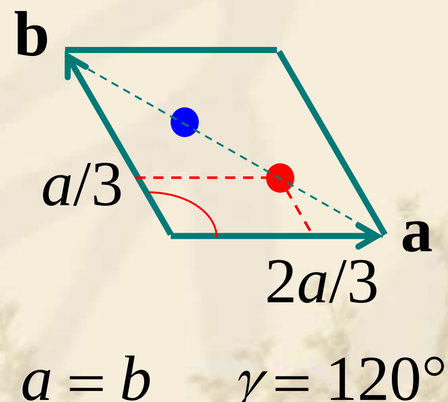
D. R心

只有简单六方Bravais格子才能加入R心，但是加了R心后，6对称性被破坏，只有3对称性，因此R心六方属于三方晶系。R心的分数坐标为：

(2/3, 1/3, 1/3), (1/3, 2/3, 2/3)

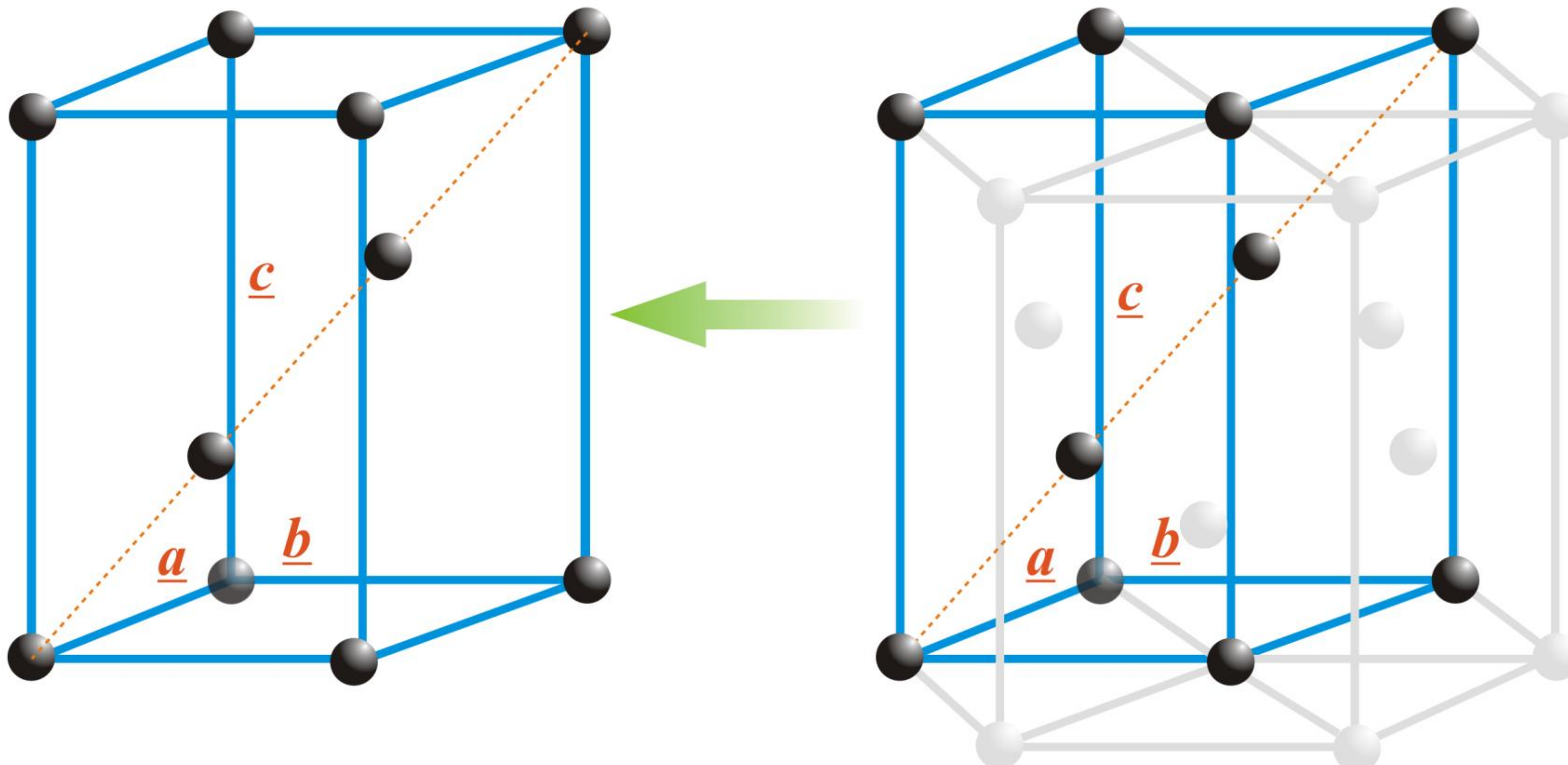






R心的c轴方向投影

1 种带心六方Bravais格子：*R*心六方（*hR*）



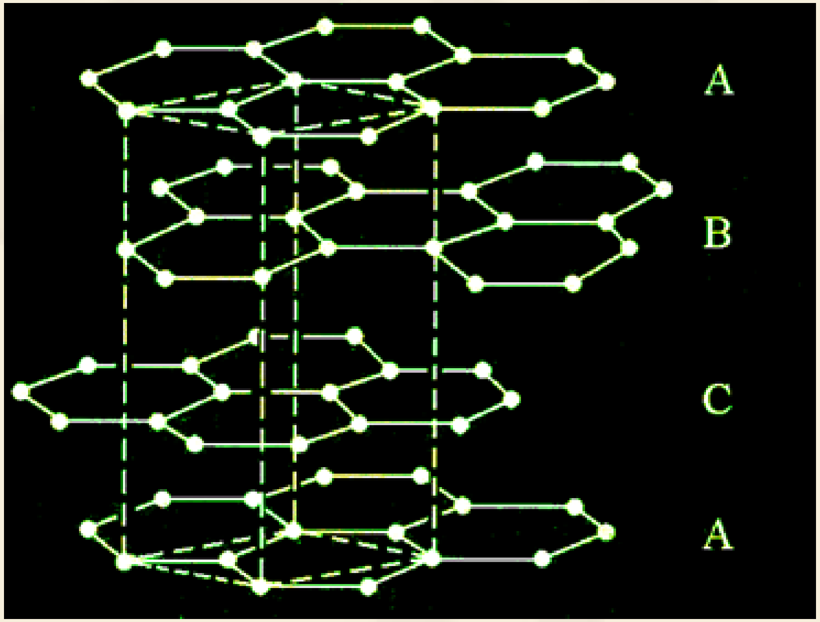
六方*R*心 (*hR*)格子只用于三方晶系。六方晶系没有这种格子。

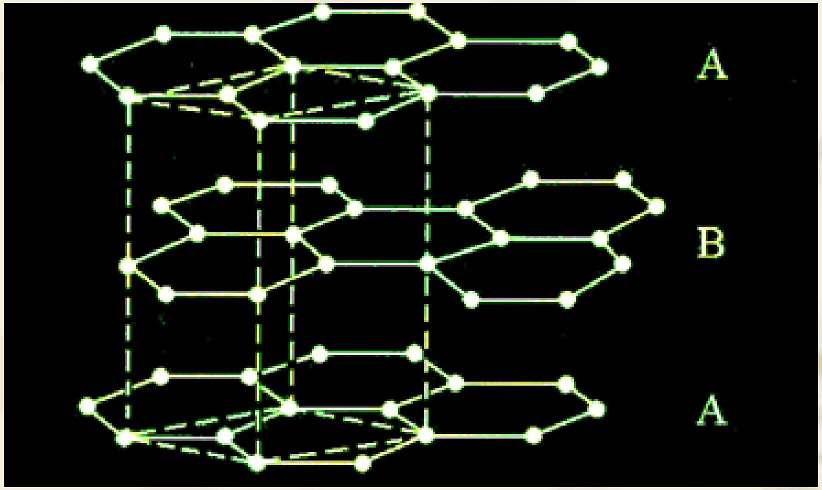
几何特征：$a=b\neq c$，$\alpha=\beta=90°$，$\gamma=120°$

14 种布拉维格子就是在满足晶系划分原则的条件下得到的格子，又称为正当格子。

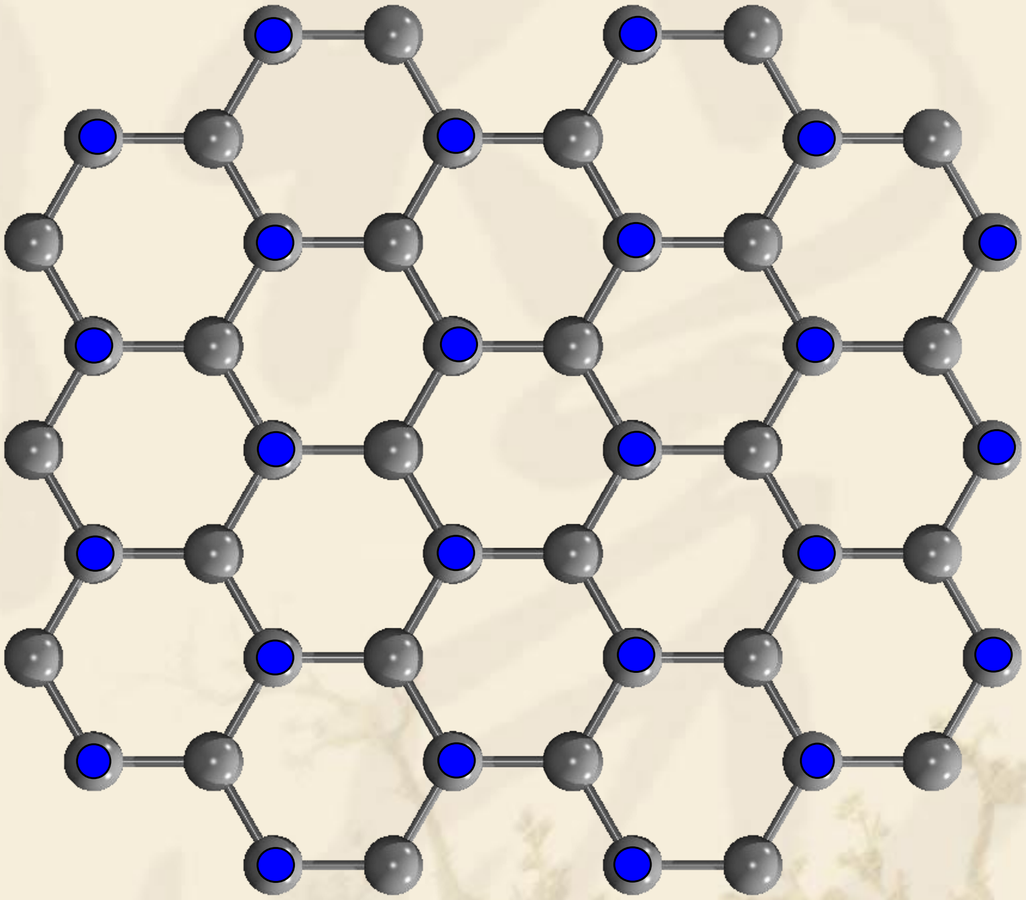
例：六方石墨和三方石墨

石墨层平行堆积构成石墨，层内碳原子以化学键结合，层间以范德华力结合。每一层石墨层可有ABC三种放置方式，当排列顺序为ABCABCABC…时，为三方石墨，当排列顺序为ABABAB…时，为六方石墨。



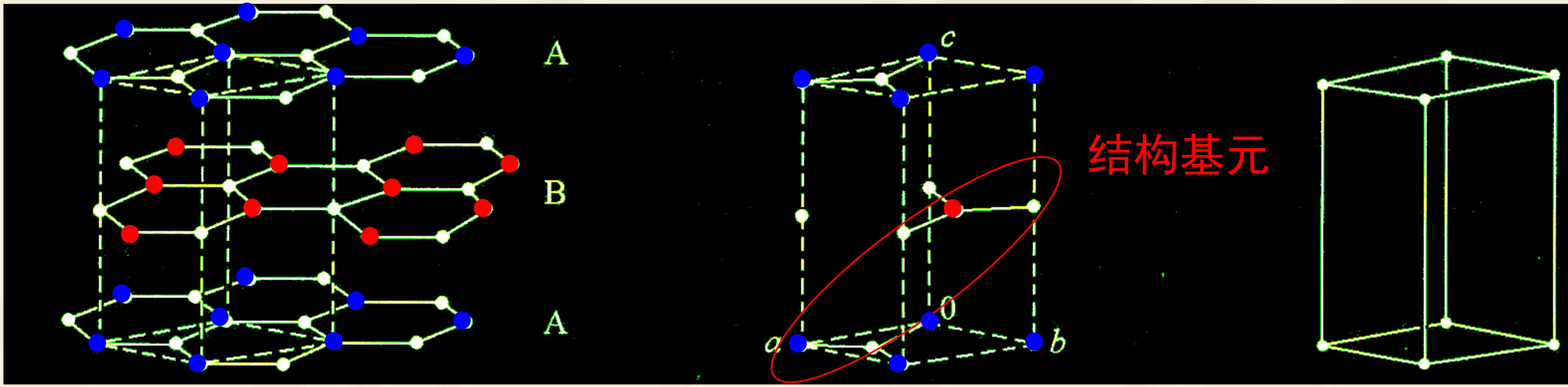


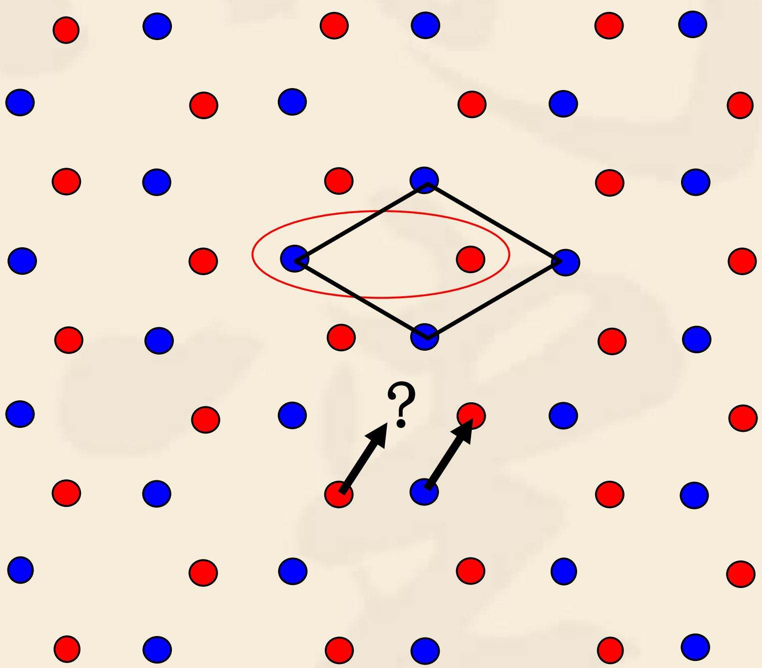
垂直于石墨层，过任意碳原子有转轴3，过任意六元环中心有转轴6，但是多个石墨层是交错排列的，转轴6会穿过其它石墨层的碳原子，因而不是这些石墨层的对称元素，因此，从微观上看石墨不具备六次转轴，然而从宏观上看，六方石墨晶体的外观却会呈现出六次旋转对称性，有转轴6。



石墨一层

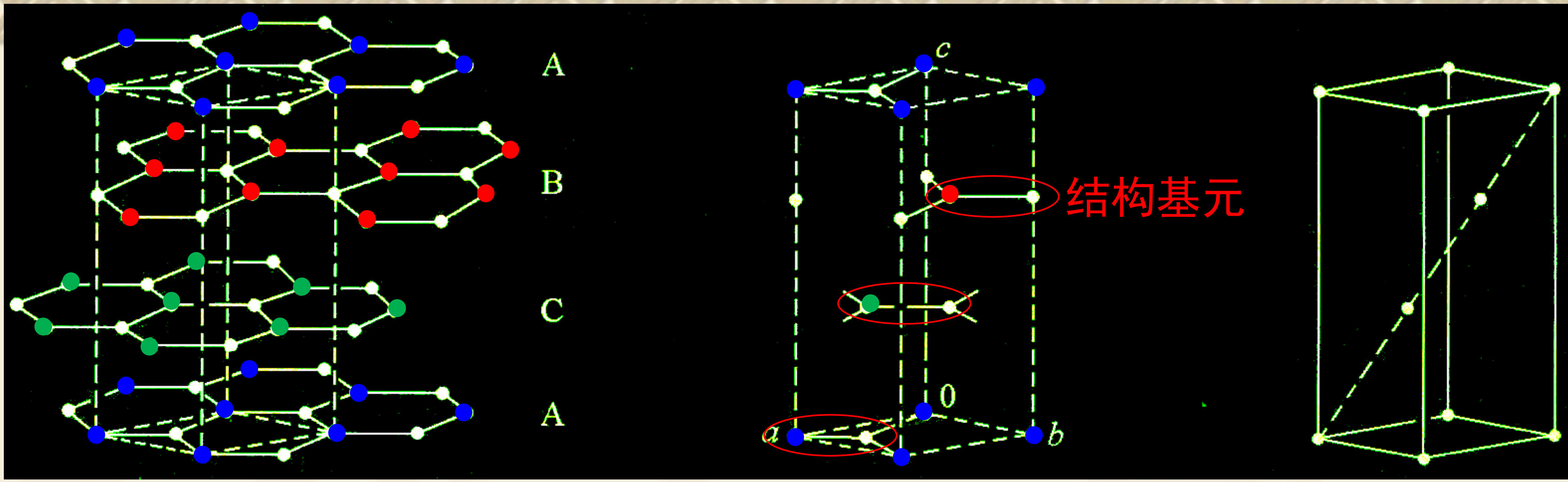
蓝点为平面点阵的点阵点

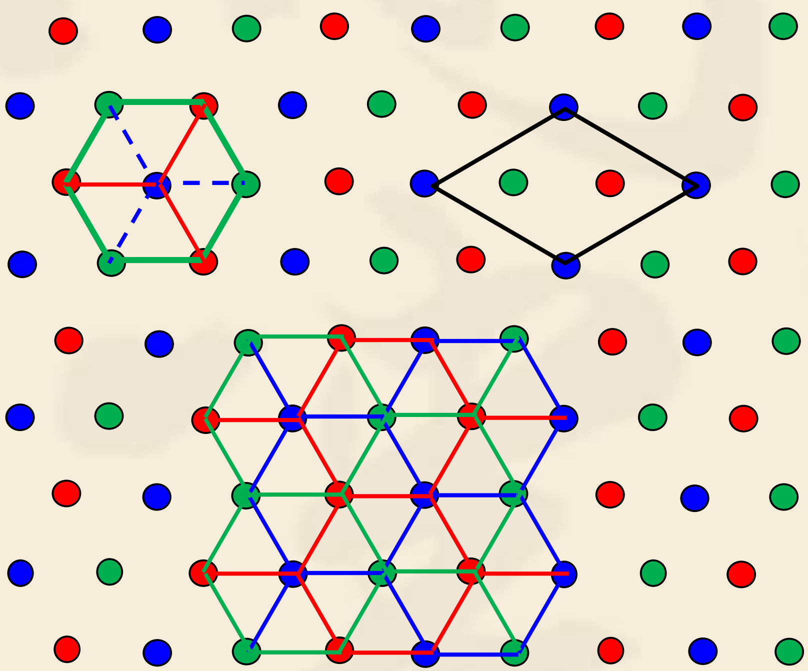




AB两层碳原子不等同，因此结构基元必含AB两层共四个碳原子，从俯视图看，若将红蓝点都作为点阵点，则平移对称性被破坏。

垂直于石墨层过任意碳原子有转轴3，任意石墨层又是σ_h，两者组合即I_6。

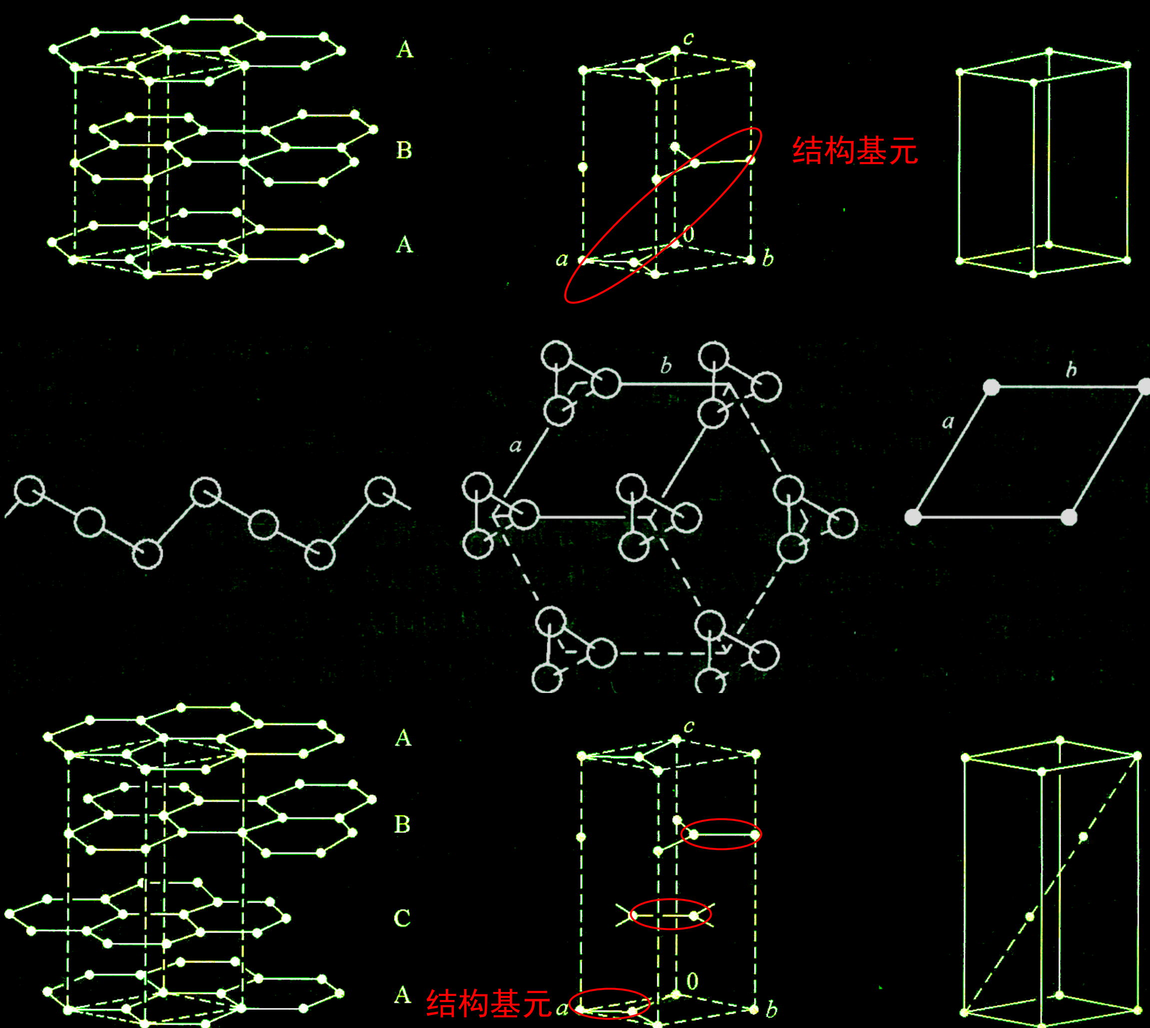




从俯视图看出，石墨层平面点阵的阵点就是石墨空间点阵的阵点，结构基元只含同层的碳原子。俯视时，**ABC**层阵点和碳碳键都不重叠。

任意转轴3必过某些石墨层的六元环中心，此中心同时也是$\bar{1}$，两者组合即$\bar{3}$。

原子分布　　晶胞　　点阵单位



	晶胞的对称轴	晶系	结构基元	格子中结点数	点阵的对称轴	格子	格子的形状	晶族
六方石墨	六重反轴	六方晶系	4C	1	六重旋转轴	*hP*	六方	六方晶族
α-Se	三重旋转轴	三方晶系	3Se	1	六重旋转轴	*hP*	六方	六方晶族
三方石墨	三重反轴	三方晶系	2C	3	三重旋转轴	*hR*	六方	六方晶族