

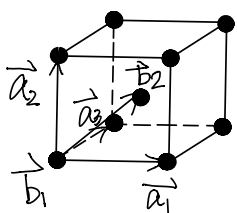
回顾P2

1. 布拉维格子

2. 晶体结构=布拉维格子+基元

三维布拉维格子

体心立方 (bcc) :

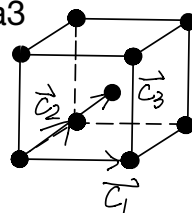


可以看成晶体结构，简单立方布拉维格子 a_1, a_2, a_3

+基元 $b_1=0, b_2$ 如左图

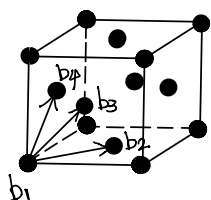
可以看成布拉维格子

此时初基矢量是 c_1, c_2, c_3 如右图



用简单立方+基元描述，对称性更明显，所以常用晶体结构方式描述。称作常用 (conventional) 晶胞

面心立方 (fcc) :

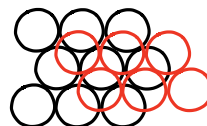
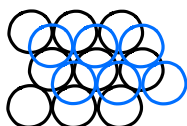


晶体结构：简单立方布拉维格子+基元 $b_1=0, b_2, b_3, b_4$

布拉维格子：初基矢量是 b_2, b_3, b_4

三维球体堆积

第一层球称为A



有两种堆积方式：B第二层**蓝球**堆在第一层A形成的 \wedge 上，C第二层**红球**堆在 \vee 上

面心立方密堆积 (fcc) = ABCABC...

六角密堆积 (hcp) = ABABAB...

晶胞 (unit cell)

通过布拉维格子平行移动能够不重叠不遗漏覆盖全部空间的区域称为晶胞。

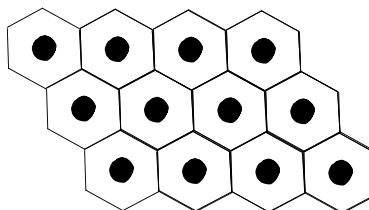
空间中任何一点的矢量都能分解为一个布拉维格点矢量和一个晶胞中的矢量。

在二维情况下有： $\vec{r} = \vec{R} + s_1 \vec{a}_1 + s_2 \vec{a}_2$ $0 \leq s_1, s_2 \leq 1$

维格纳赛兹晶胞 (W.S. unit cell)

以 $\mathbf{R}=0$ 为最近布拉维格点的点集。W.S.晶胞与初基矢量的选取无关。

三角晶格的W.S.晶胞如右图



remark

W.S.晶胞保持了布拉维格子的对称性

晶体结构的晶胞就是底层布拉维格子的晶胞

每一个布拉维格子都有晶胞