

第四章 晶体的基本概念

- 第一节 晶体的基本性质
- 第二节 空间点阵
- 第三节 整数定律及晶面指数
- 第四节 晶体投影

晶体研究的早期成就

1690年惠更斯提出：晶体中质点的有序排列导致晶体具有某种多面体外形。

1812年浩羽(R.J.Hauy)提出：晶体是由具有多面体外形的“分子”构成的。

1669年，丹麦人斯登诺（Steno,N.1638-1686），1783年法国矿物学家爱斯尔（Del Isle,R.1736-1790）分别在观测各种矿物晶体时发现了晶体的第一个定律——晶面夹角守恒定律。

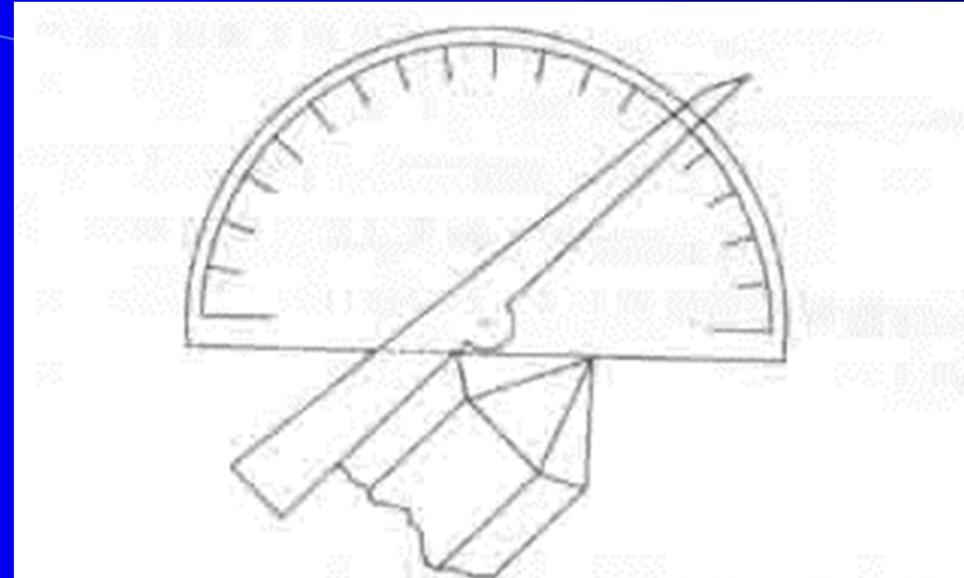


图 1-2-3 接触式测角器示意图

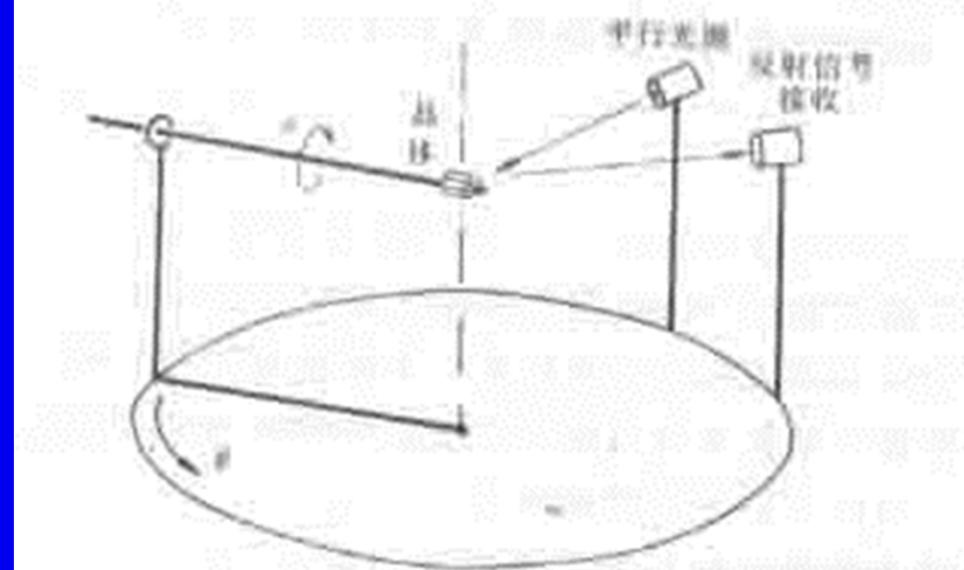


图 1-2-4 光学测角仪的工作原理示意图

晶体的对称原理

在 1805—1809 年间，德国学者魏斯 (Weiss,C.S.1780-1856) 开始研究晶体外形的对称性

1830 年德国人赫塞尔 (Hessel,J.F.Ch.1796-1872)，1867 年俄国人加多林分别独立地推导出，晶体外形对称元素的一切可能组合方式（也就是晶体宏观对称类型）共有 32 种（称为 32 种点群）

19 世纪 40 年代，德国人弗兰根海姆 (Frankenheim,M.L.1801-1869) 和法国人布拉维 (Bravais,A.1811-1863) 发展前人的工作，奠定了晶体结构空间点阵理论（即空间格子理论）的基础。弗兰根海姆首次提出晶体内部结构应以点为单位，这些点在三度空间周期性的重复排列。他于 1842 年推出了 15 种可能的空间点阵形式。

布拉维明确地提出了空间格子理论。认为晶体内物质微粒的质心分布在空间格子的平行六面体单位的顶角、面心或体心上，从而它们在三度空间作周期性的重复排列。他于 1848 年指出，弗兰根海姆的 15 种空间点阵形式中有两种实质上是相同的，确定了空间点阵的 14 种形式

德国人松克 (Sohncke,L.1842-1897) 在前人工作的基础上进行深入研究晶体的微观对称性，提出晶体全部可能的微观对称类型共有 230 种（称为 230 个空间群）

在 1885—1890 年间，俄国结晶学家弗多罗夫完成了 230 个空间群的严格的推引工作。

在 19 世纪的最后十年中，几何晶体学理论已全部完成了

第一节 晶体的基本性质

- 自范性（自限性）
 - 晶体具有自发地形成封闭的几何多面体外形的能力的性质，即晶体有整齐、规则的几何外形。
- 各向异性
 - 同一晶体在不同方向上所测得的性质表现出差异的特性。
- 均一性（均匀性）
 - 同一晶面的任何一个部分都具有相同的物理和化学性质的特性。
- 对称性

晶体的物理性质

晶体总是沿一定的晶面碎裂的，所以碎裂后的碎块和原来大块晶体的外形相同，这就是晶体的解理性。

如：云母片沿某一平面的方向容易撕成薄片

压电效应：通过纯粹的机械作用（如压缩或位伸）使晶体极化，导致晶体表面荷电的现象称为压电效应。具有这一性质的晶体则称为压电晶体。

如：应用最广泛的是 α -石英。压电效应是由于晶体形变使正负电荷重心分离所致，所以它不会发生在具有对称中心的晶体中。

压电晶体可用于频率稳定器、扩音器、电话、钟表等领域。

酒石酸钾钠、磷酸二氢铵、钽酸锂、铌酸锂、碘酸锂等晶体也都是相当有希望的压电晶体材料。

热释电材料：因温度变化而引起晶体表面荷电。

热释电效应是由于晶体受热膨胀时，带电粒子之间发生相对位移，导致晶体的总电矩发生变化所致。同压电效应一样，具有对称中心的晶体不会有热释电效应。

红外探测器是热释电效应的一个重要应用领域，通过热释电效应可以将微弱的温度变化转换成电信号，从而有可能通过精密的电信号测量来达到测量温度变化的目的

具有热释电效应的晶体可以同时具有压电效应，但是具有压电效应的晶体却不一定具有热释电效应。

电光效应：有些晶体当在它的某一特殊方向上施加电场时，它的折射率会发生变化，

电光效应最重要的应用是作电光快门。目前主要的电光晶体有磷酸氧钛钾KTP，磷酸二氢钾KDP，磷酸二氢铵ADP，钽铌酸钾KTN，铌酸钾LN。

1669年，丹麦学者巴尔托林发现，当光束通过冰洲石晶体时会分解成两束，它们沿着略微不同的方向前进。离开晶体后，两束光的传播方向与原光束的传播方向平行，这就叫做晶体的双折射现象。

方解石的双折射现象可制成偏光棱镜

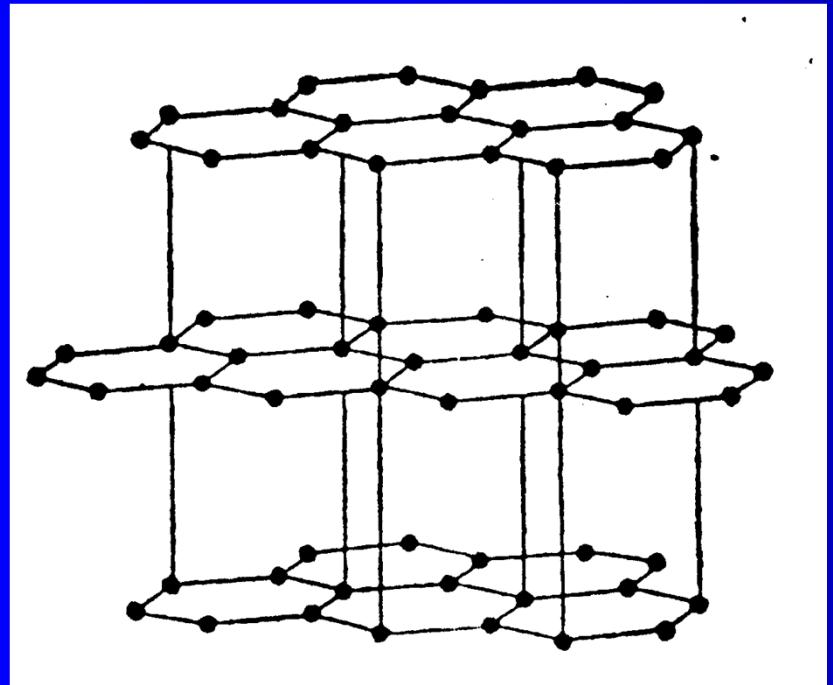
氯化钠、溴化钾等碱卤晶体的透红外性能制作各种红外分光光度计的窗口；氯化镁晶体的机械强度和抗热冲击性好，可用于飞行器的红外透镜。铌酸锂单晶是新型的电光晶体材料，具有良好的铁电、压电和热电性能，电光效应大，折射率高，化学稳定性好，应用于激光中。锗酸铋晶体是一种新开发的闪烁晶体，阻挡高能射线能力强、分辨率高，适合于高能粒子和高能射线的探测。磷酸氧钛钾(KTiOPo_4 , KTP) 在蓝绿激光器中有重要的应用。最有希望的介质光波导材料有两种，一种是砷化镓，另一种是铌酸锂、钽酸锂晶体。碲镉汞在红外热成像中很有用。

第二节 空间点阵

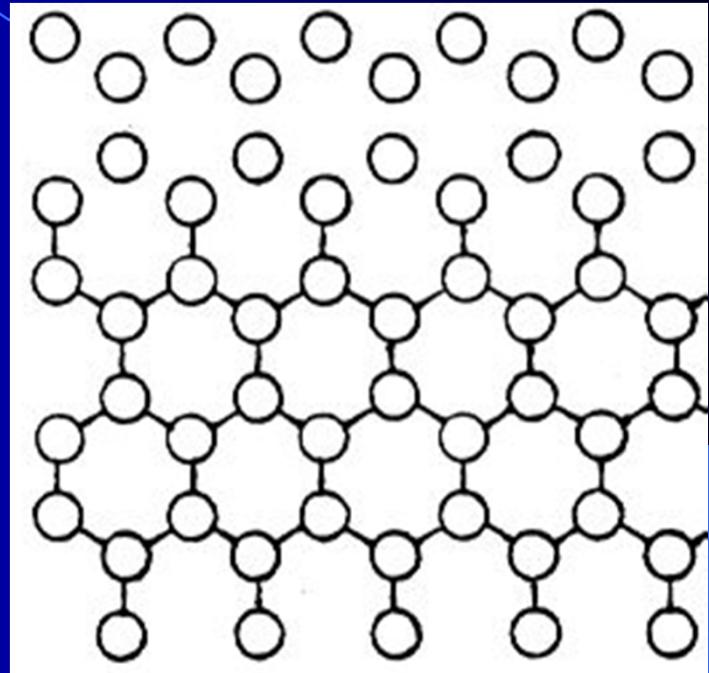
一、空间点阵的概念

晶体是三维空间上原子具有周期性排列的固体，晶体的性质（自范性、均匀性、各向异性等）都是晶体周期性的表现。研究晶体结构必须对其周期性进行抽象概括。

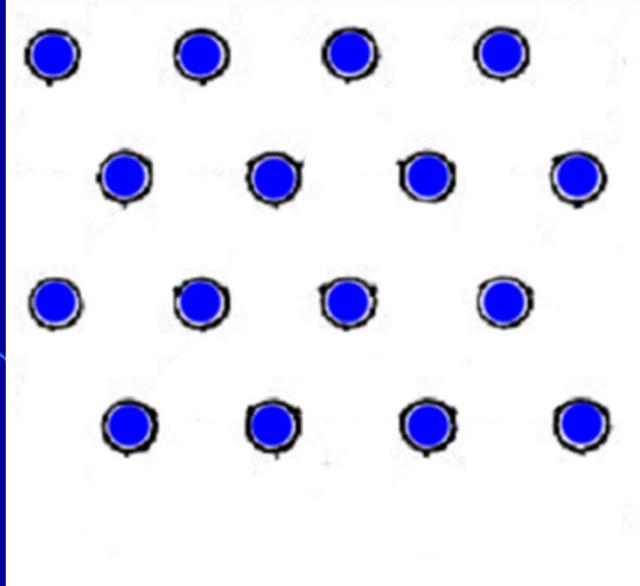
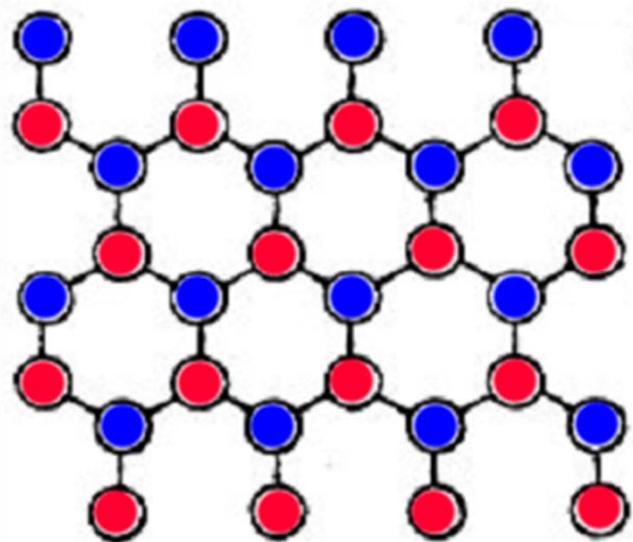
点阵 — 空间中几何环境相同的点形成的无限阵列。



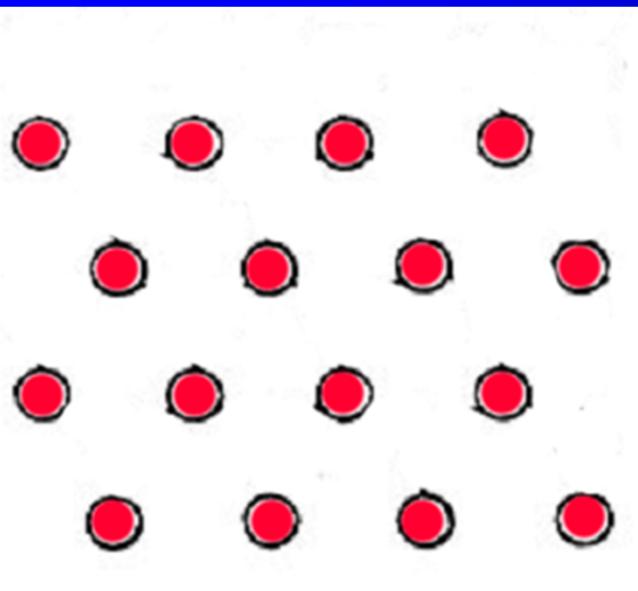
石墨的晶体结构



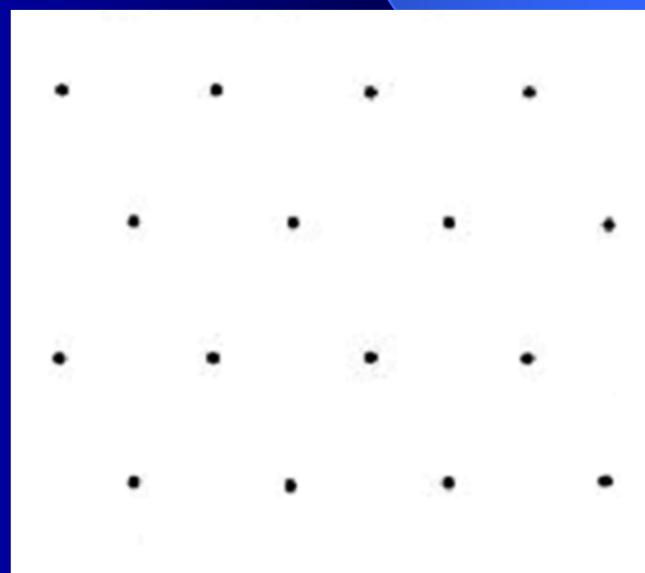
石墨结构平面层



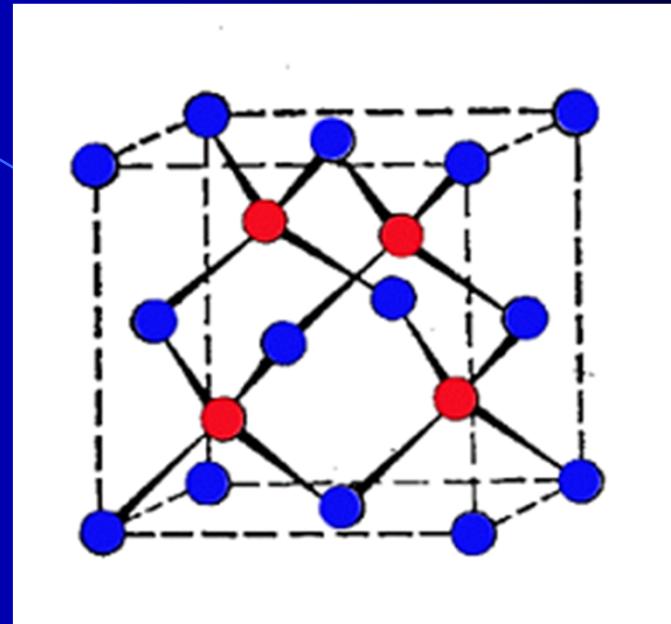
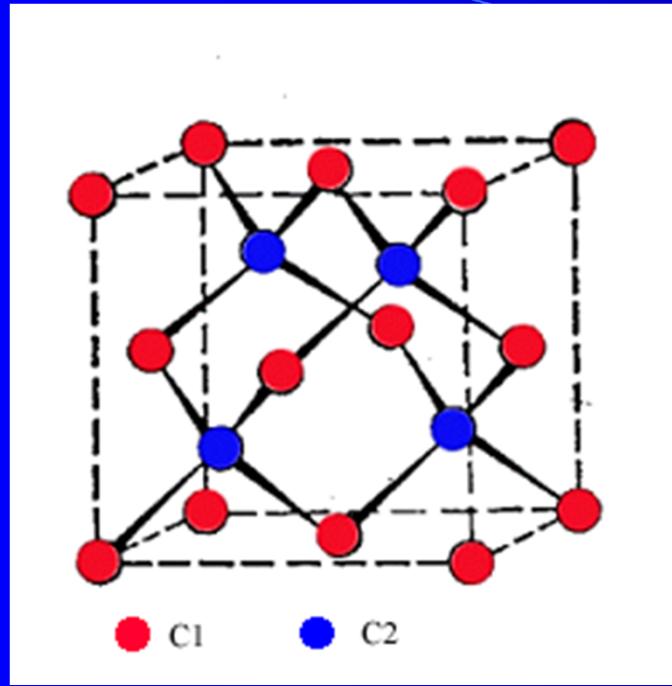
等同点系一



等同点系二



平面点阵

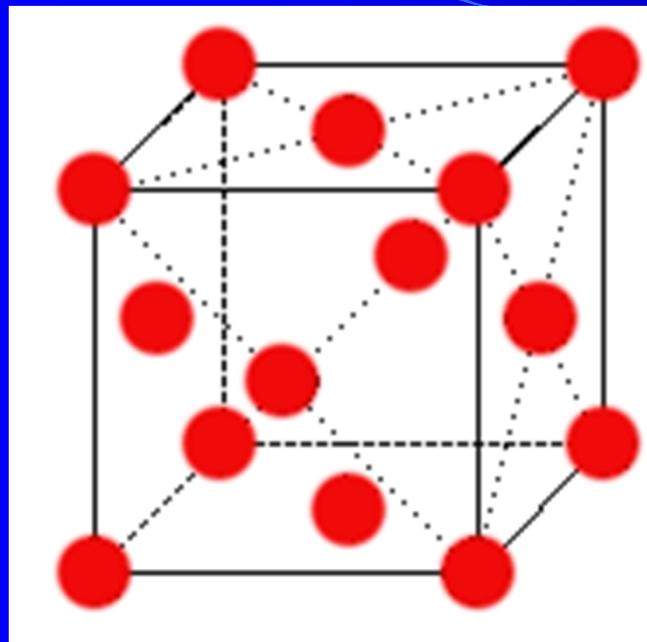


C1坐标: $(0,0,0), (1/2,1/2,0), (1/2,0,1/2), (0,1/2,1/2)$

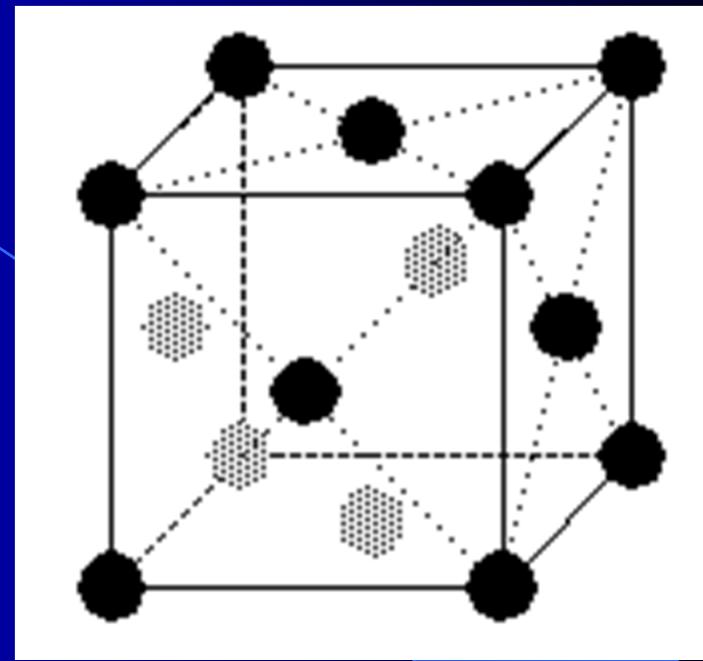
C2坐标: $(3/4,3/4,3/4), (1/4,1/4,3/4), (1/4,3/4,1/4), (3/4,1/4,1/4)$

$(3/4,3/4,3/4), (5/4,5/4,3/4), (5/4,3/4,5/4), (3/4,5/4,5/4)$

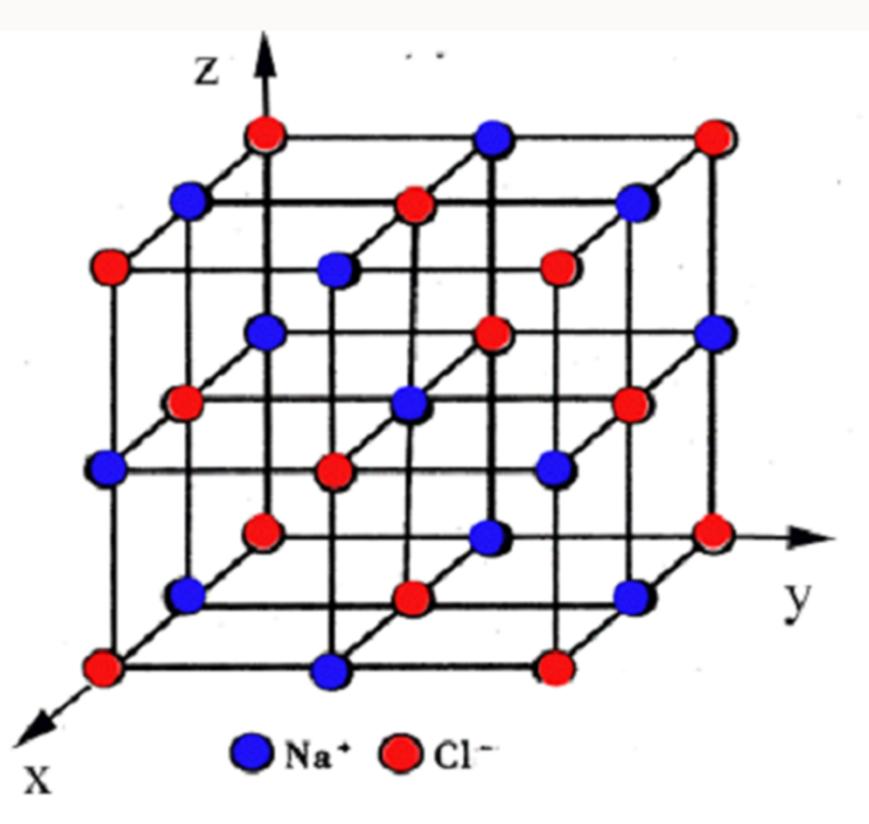
C2 坐标 = C1 坐标 + $(3/4,3/4,3/4)$



金刚石结构中的等同点系

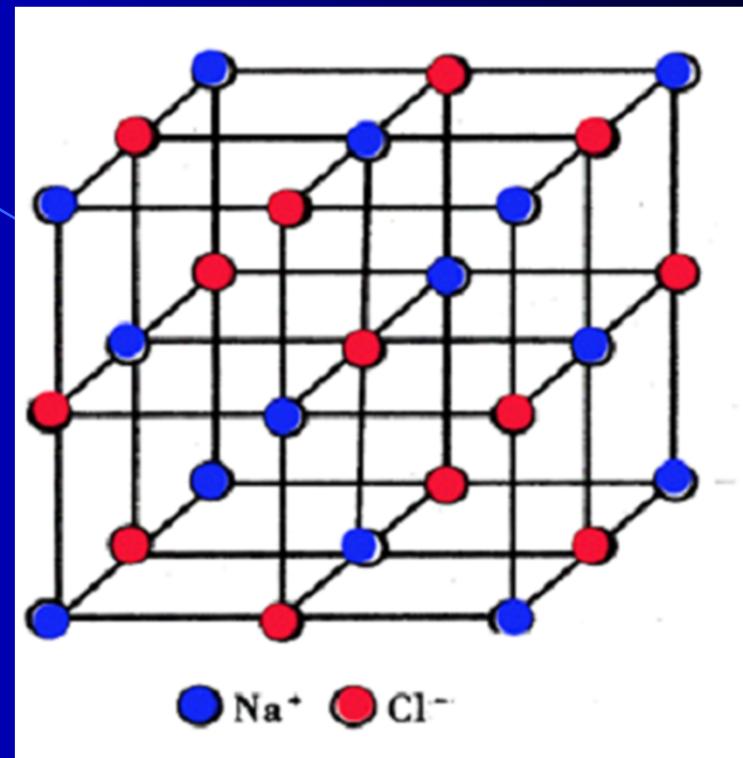


金刚石的空间点阵



Cl: (0,0,0), (1/2,1/2,0)

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



Na: (1/2,0,0), (0,1/2,0)

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

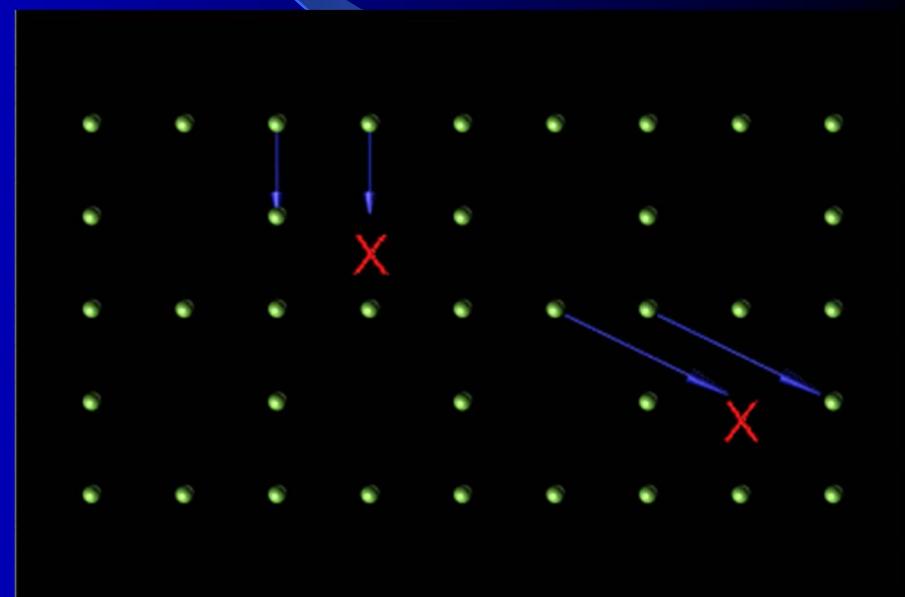
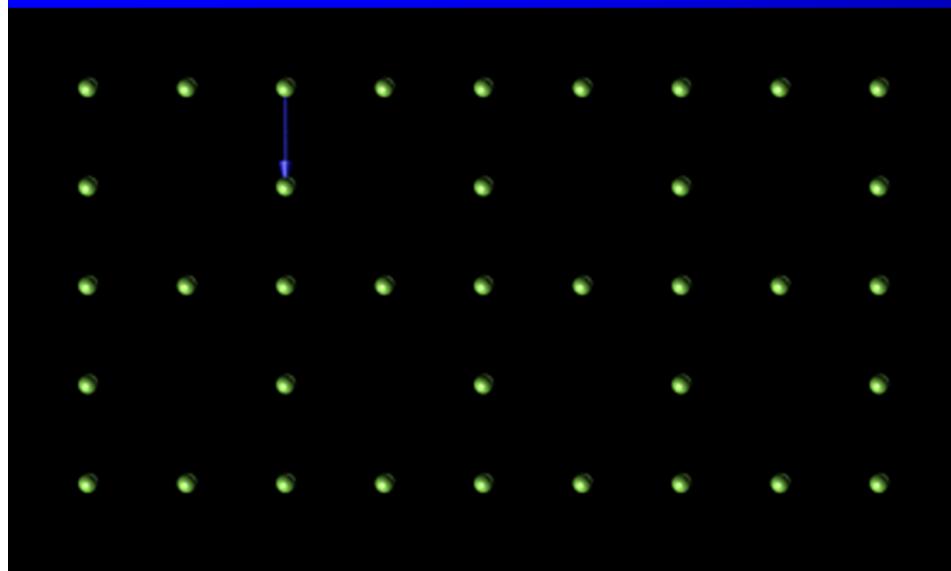
$$\text{坐标 (Na)} = \text{坐标 (Cl)} + (1/2, 0, 0)$$

定义：点阵（lattice）-- 空间中环境相同的点形成的无限阵列。

晶体的空间点阵理论的提出基于一个假设，即晶体是无限大的。由于实际晶体的大小远超出晶体结构的重复周期，可以认为晶体构造是在三维空间无限伸展。

具有不同结构的晶体可以有相同的空间点阵（空间格子），如NaCl和金刚石。由同种物质构成的晶体可以有不同的空间点阵，如金刚石和石墨。

判断一组点是否为点阵，最简单有效的方法是连接其中任意两点的矢量进行平移，只有能够复原才为点阵。



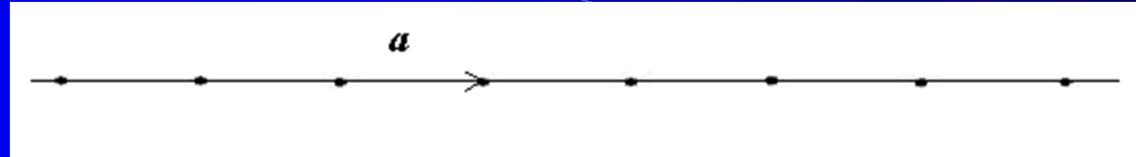
二、点阵和点阵格子

- 点阵
 - 直线点阵
 - 平面点阵
 - 空间点阵
- 点阵格子
 - 简单 (P, Primitive or Simple) 格子
 - 体心 (I, Body Centered) 格子
 - 面心 (F, Face Centered) 格子
 - 底心 (C, C Centered) 格子

Lattice and lattice grid

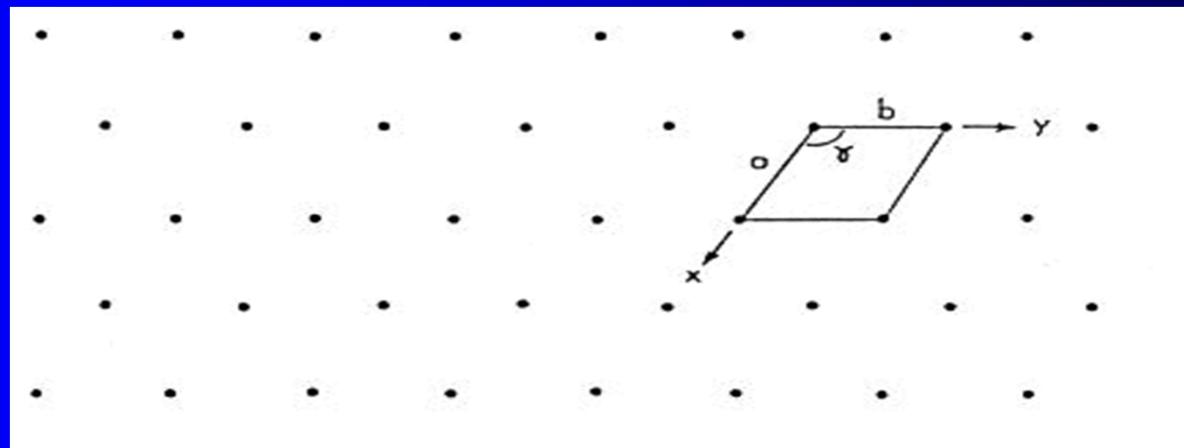
- Lattice
 - 1D lattice
 - 2D lattice
 - 3D lattice
- Lattice grid
 - Simple grid (P, Primitive or Simple)
 - Body centered grid (I, Body Centered)
 - Face centered grid (F, Face Centered)
 - C centered grid (C, C Centered)

- 直线点阵



阵点的位置矢量 (lattice vector)为: $\mathbf{R} = m\mathbf{a}$

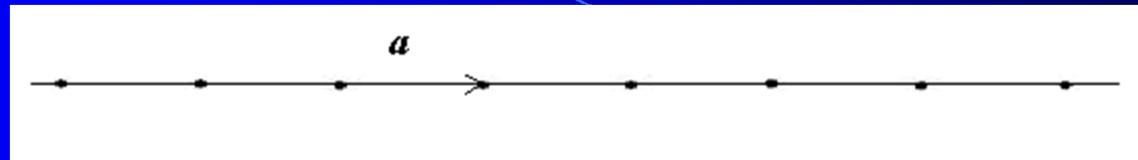
- 平面点阵



位置矢量: $\mathbf{R} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b}$

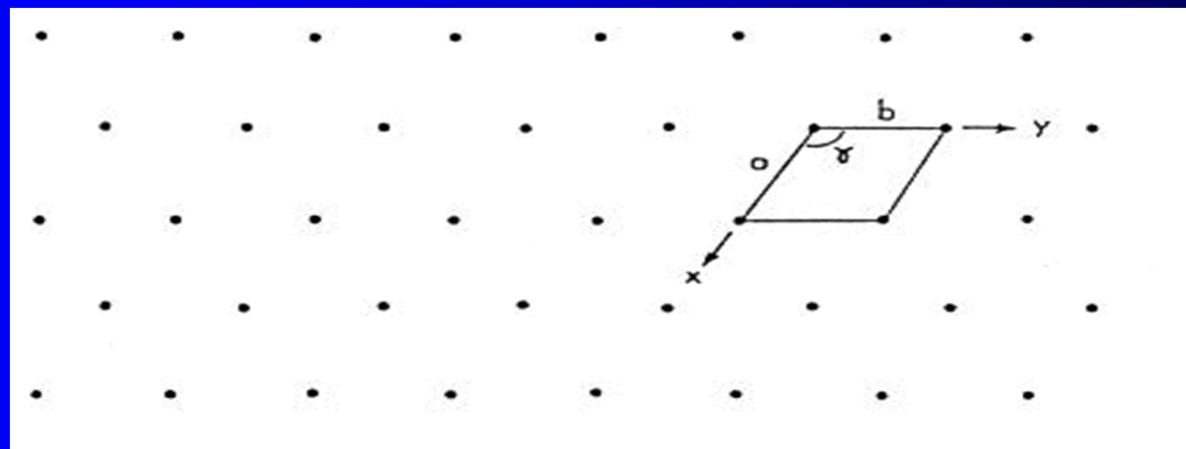
点阵参数(lattice parameter): a, b, γ

- 1D lattice



lattice vector: $\mathbf{R} = m\mathbf{a}$

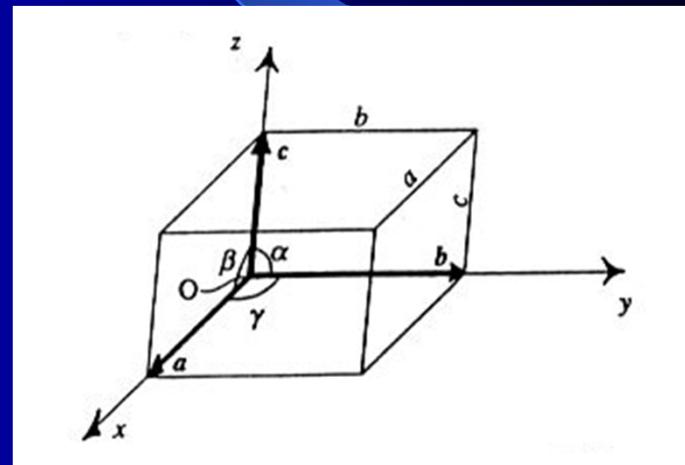
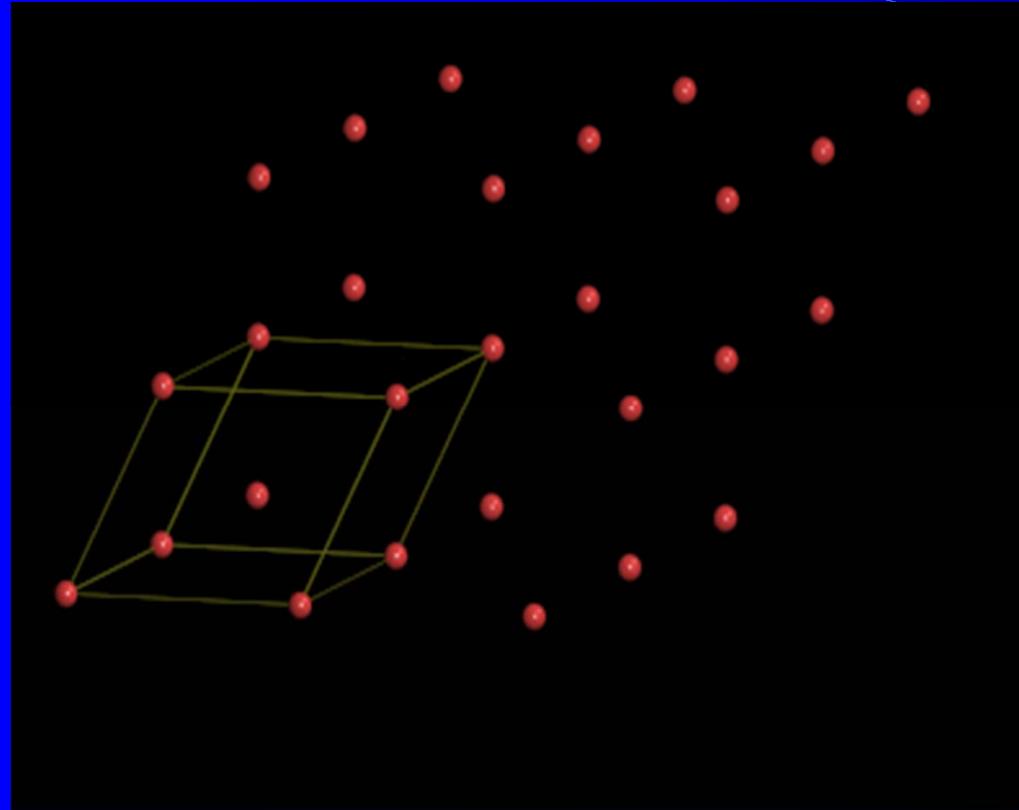
- 2D lattice



vector: $\mathbf{R} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b}$

lattice parameter: a, b, γ

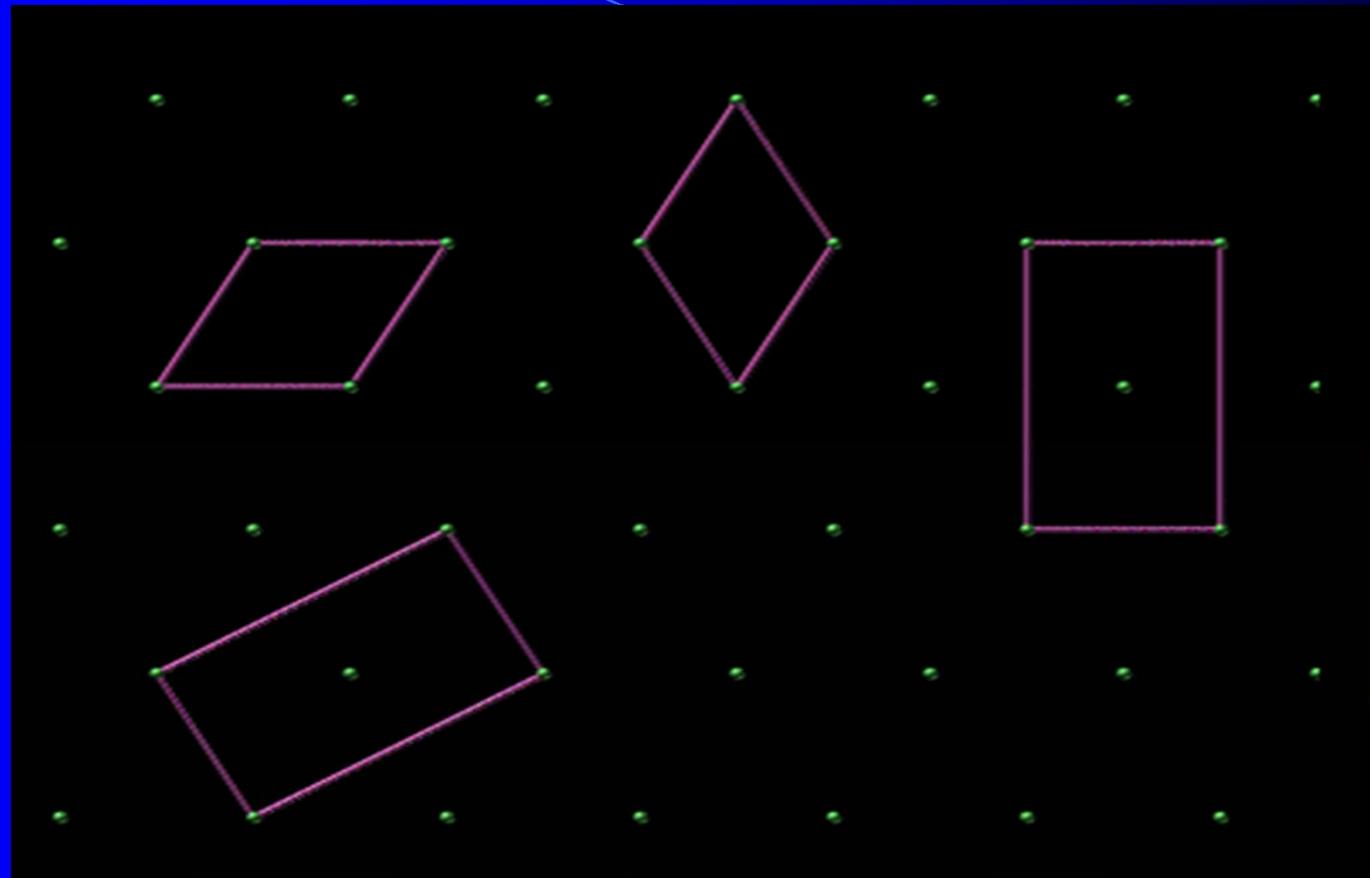
- 空间点阵



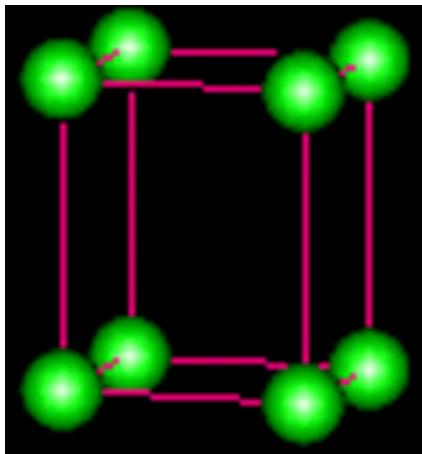
$$\mathbf{R} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$$

点阵参数: a, b, c

α, β, γ

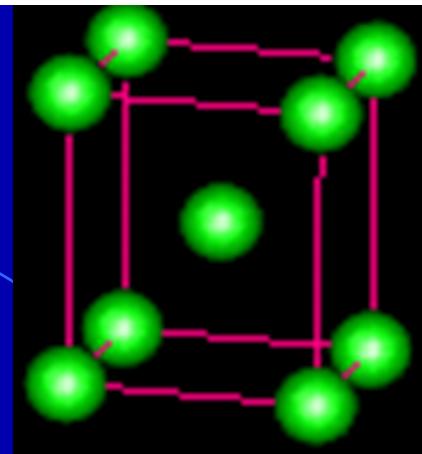


平面点阵格子的取法



(0,0,0)

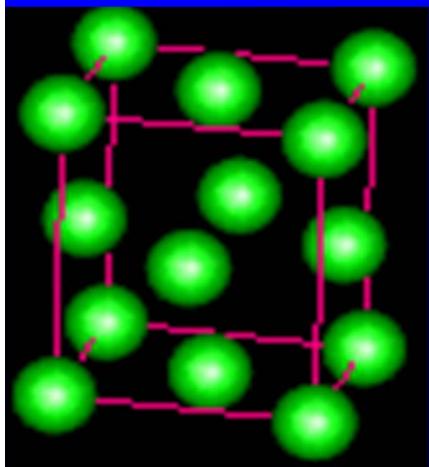
P 阵点数: $8 \times 1/8 = 1$



(0,0,0)

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

I 阵点数: $8 \times 1/8 + 1 = 2$



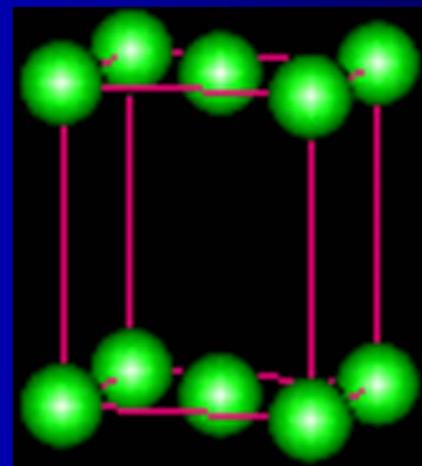
(0,0,0)

(1/2,1/2,0)

(1/2,0,1/2)

(0,1/2,1/2)

F 阵点数: $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$



(0,0,0)

(1/2,1/2,0)

C 阵点数: $8 \times 1/8 + 2 \times 1/2 = 2$

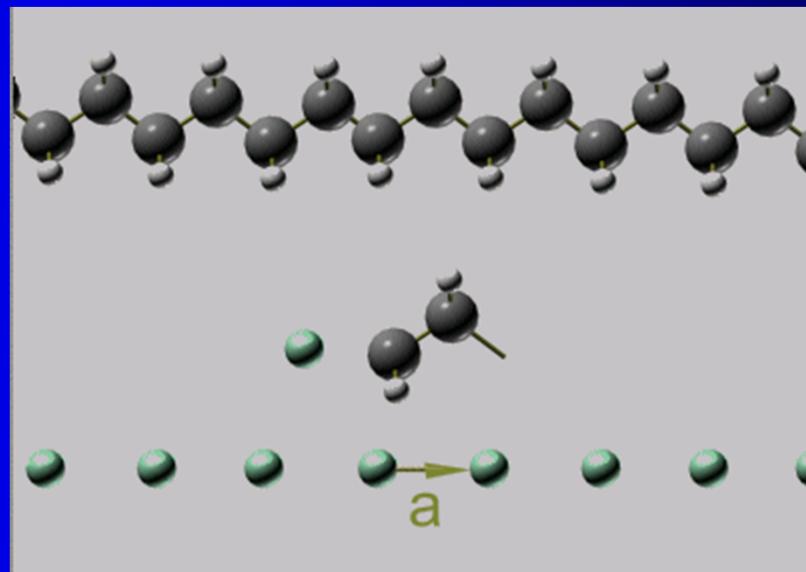
三、空间点阵与晶体结构

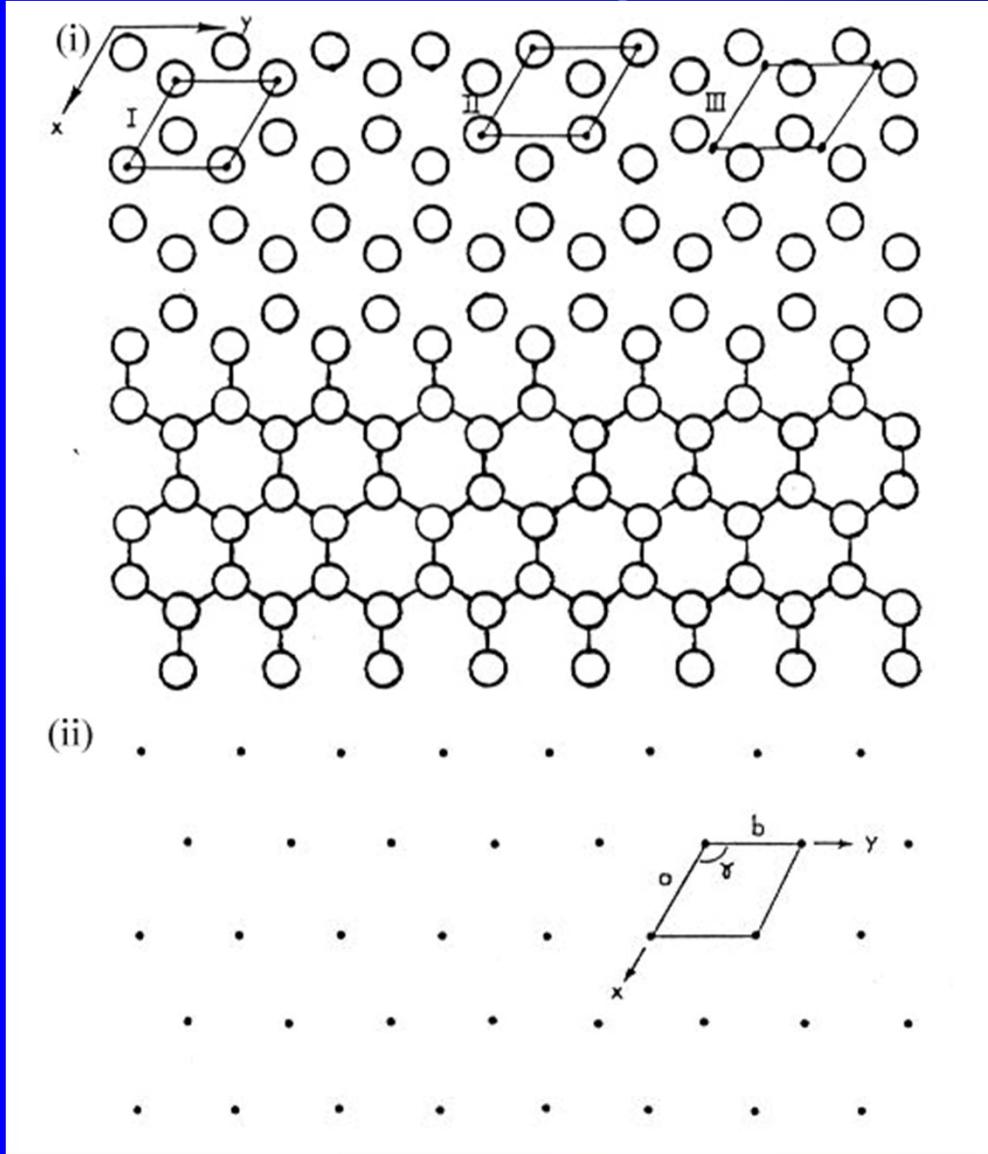
晶体结构 = 点阵 + 结构基元

晶胞 = 点阵格子 + 结构基元

Crystal structure = lattice + primitive

Cell = grid + primitive





石墨的平面结构层

结构基元为两个碳原子。

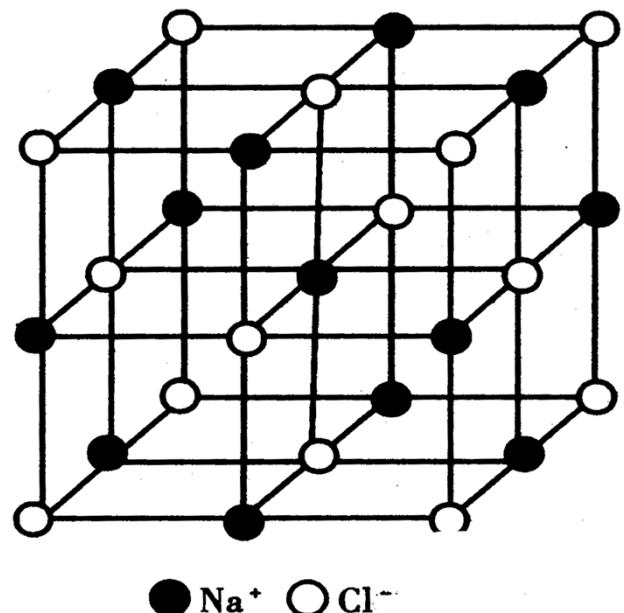
结构基元中碳原子的坐标：

I $(0,0), (2/3,1/3)$

II $(0,0), (1/3,2/3)$

III $(1/6,1/3), (5/6,2/3)$

石墨的平面点阵



NaCl的晶体结构中，结构基元为 Na^+ 和 Cl^- 。

结构基元的离子坐标： Na (0,0,0),
 Cl ($1/2,0,0$)。

晶胞中离子坐标为结构基元的离子坐标按面心立方格子平移得到。

面心立方格子阵点坐标：

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

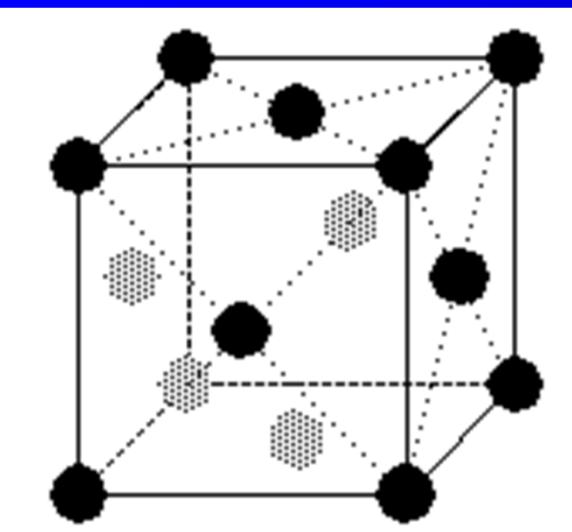
(0, $1/2,1/2$)

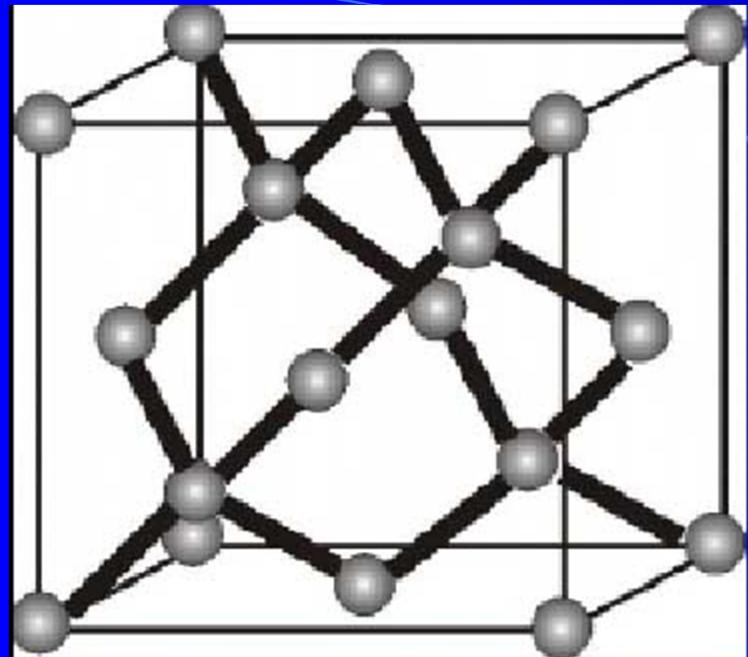
Na : (0,0,0), ($1/2,1/2,0$)

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

Cl : ($1/2,0,0$), (0, $1/2,0$)

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





金刚石的晶体结构中，结构基元为两个C。

结构基元的原子坐标： C (0,0,0),
 $(1/4,1/4,1/4)$

晶胞中原子坐标为结构基元的原子坐标按面心格子平移得到。

面心格子阵点坐标：

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

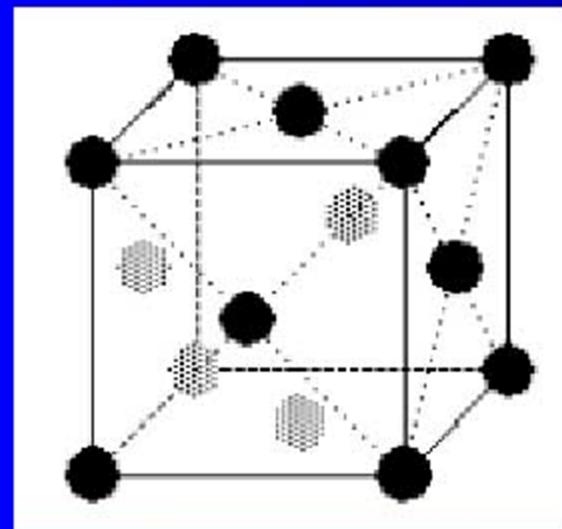
$(0,1/2,1/2)$

晶胞原子坐标： $(0,0,0), (1/2,1/2,0)$

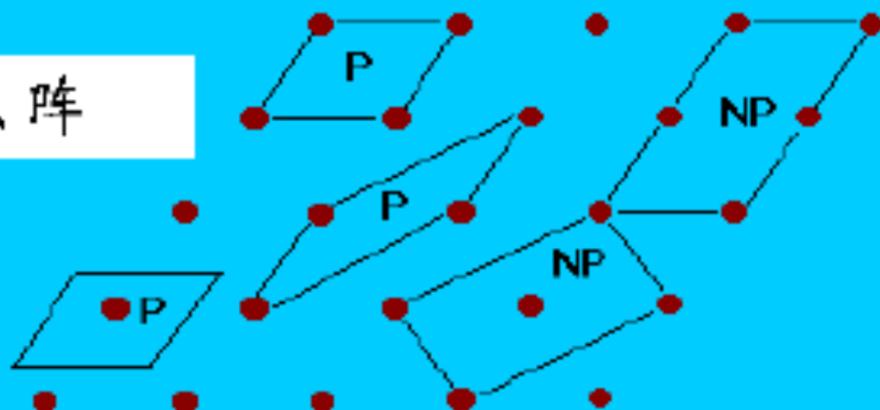
$(1/2,0,1/2), (0,1/2,1/2), (1/4,1/4,1/4),$

$(1/4,3/4,3/4), (3/4,1/4,3/4),$

$(3/4,3/4,1/4)$



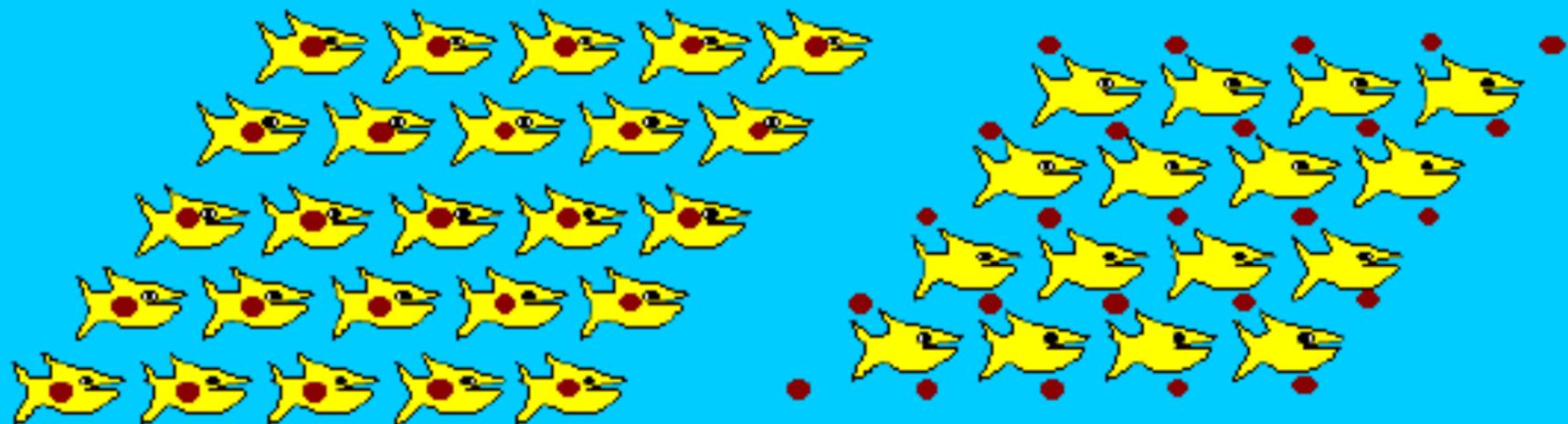
点阵



结构基元



晶体结构



第三节 阵点指数、晶向指数和晶面指数

- 阵点指数
- 晶向指数
- 整数定律
- 晶面指数
- 晶带

- 阵点指数即为空间点阵中阵点的坐标

由位置矢量: $\mathbf{R} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$

阵点指数为m, n, p。

对于简单格子, m,n,p为整数。对于复格子, m,n,p为整数或分数。

P格子阵点坐标: (0,0,0)

I格子阵点坐标: (0,0,0), (1/2,1/2,1/2)

F格子阵点坐标: (0,0,0), (1/2,1/2,0), (1/2,0,1/2), (0,1/2,1/2)

C格子阵点坐标: (0,0,0), (1/2,1/2,0)

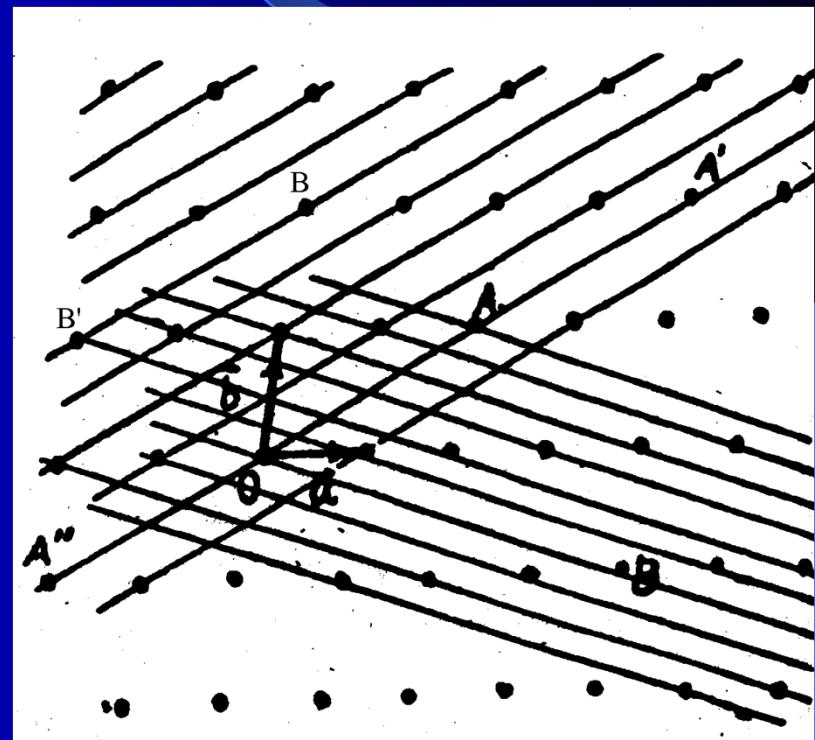
• 晶向指数

点阵中穿过若干阵点的直线方向称为晶向，其指数为 $[uvw]$ 。晶向指数代表的是一族平行的直线。

晶向指数可如下求得：

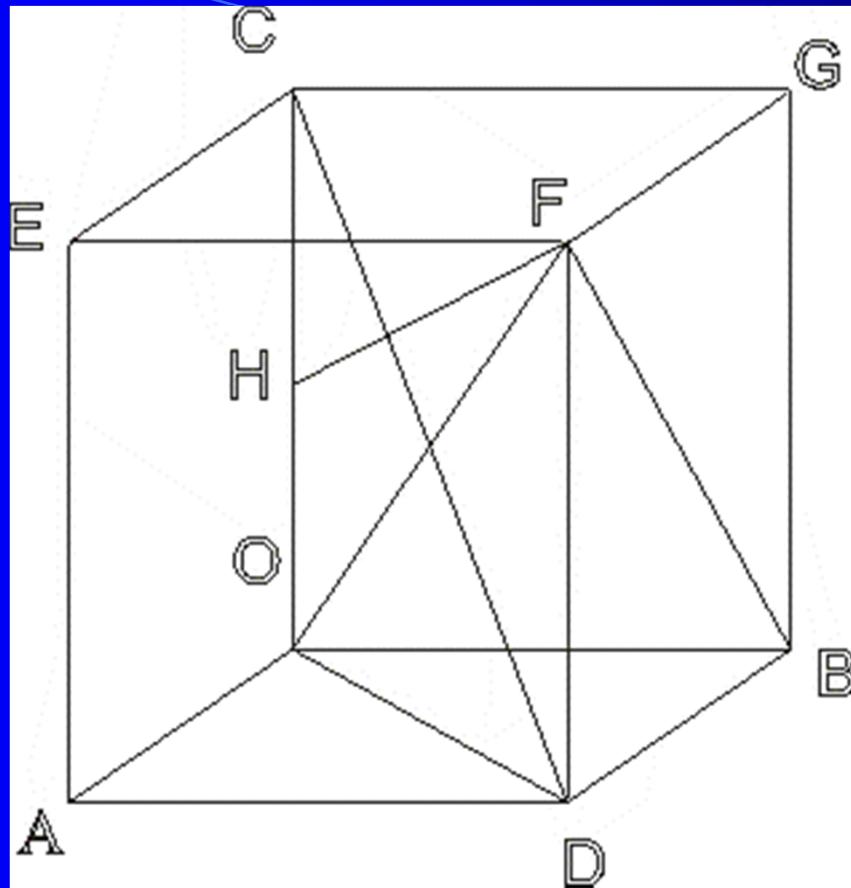
- 1、通过原点作一平行于该晶向的直线；
- 2、求出该直线上任一点的坐标 (u', v', w') ；
- 3、 u', v', w' 的互质整数为 u, v, w ，则 $[uvw]$ 晶向指数。

OA [210] OA'' [-2-10]



OB [4-10]

a b c



OA [100]	OB [010]
OC [001]	OD [110]
OF [111]	CD [111̄]
BF [101]	HF [221]

通常用 $\langle uvw \rangle$ 表示晶体中由对称性相联系的一系列等同晶向组成的等效晶向族。

- 整数定律

点阵中通过若干阵点的平面称为点阵平面。晶体外形中每个晶面都和一族点阵平面平行，可以用相同的指数来表示。整数定律就反映了点阵面与晶面这种统一的关系。

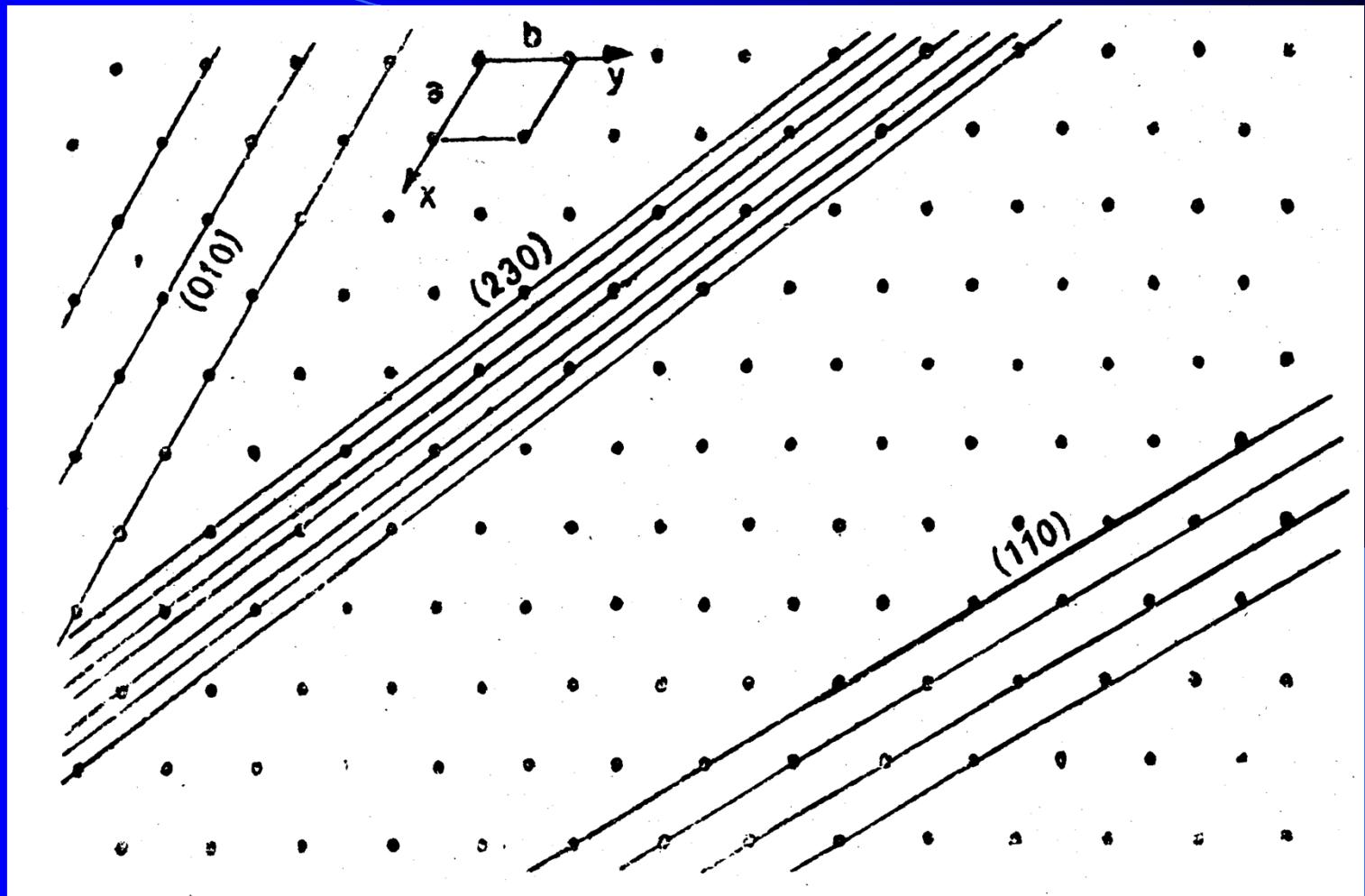
整数定律（有理指数定律）：晶体上任意一晶面在三条晶棱上的截距系数之比，为一简单的整数比。

- 晶面指数Crystal plane

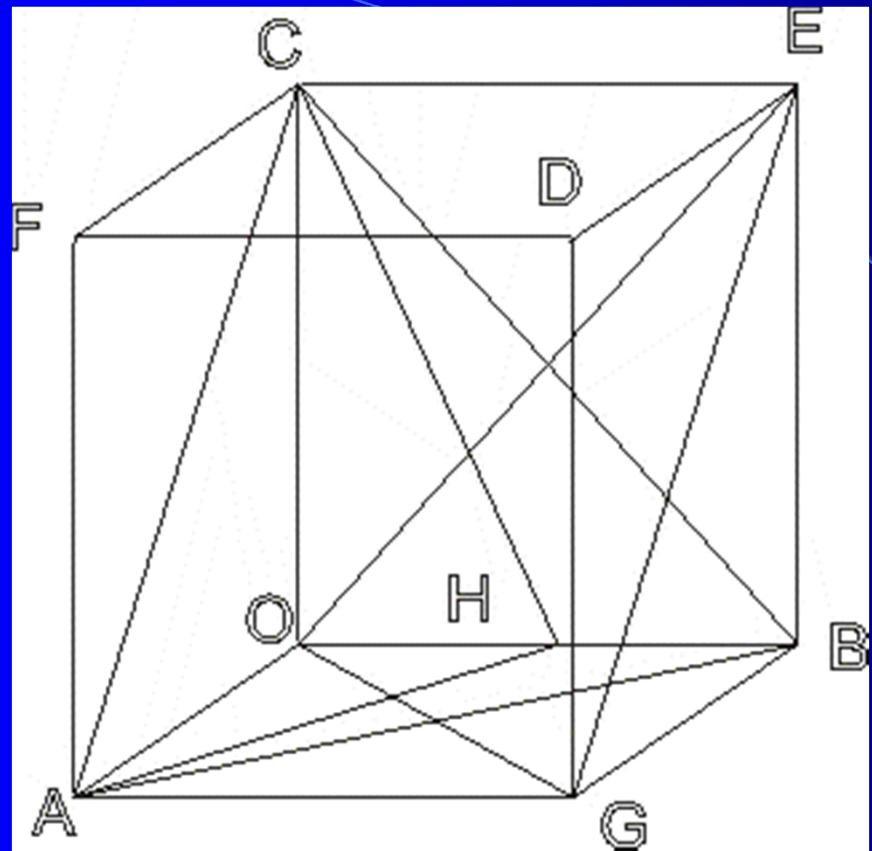
如某一不通过原点的平面在三个轴矢方向上的截距为
 m （以 a 为单位）， n （以 b 为单位）和 p （以 c 为单位）。
令

$$1/m : 1/n : 1/p = h : k : l$$

$h : k : l$ 为互质整数比，称为晶面指数或米勒指
数（miller index），记为 (hkl) 。它代表了一族相
互平行的点阵平面。



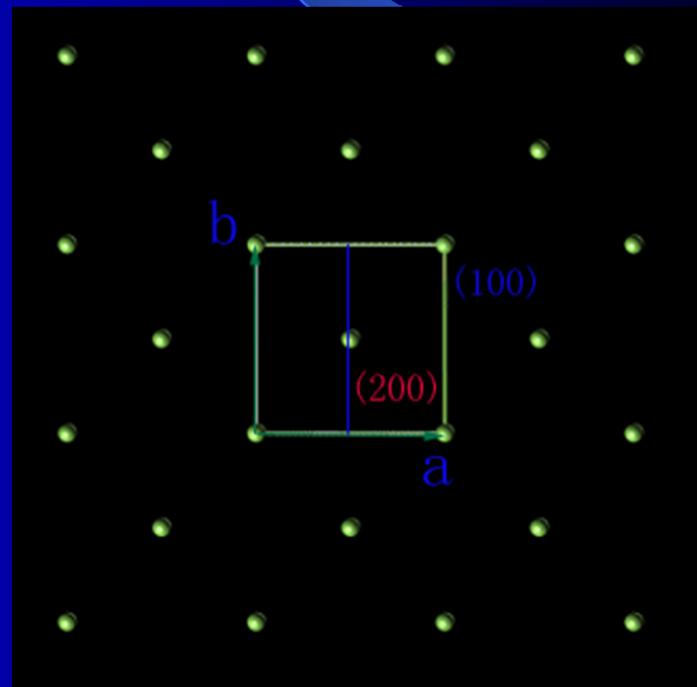
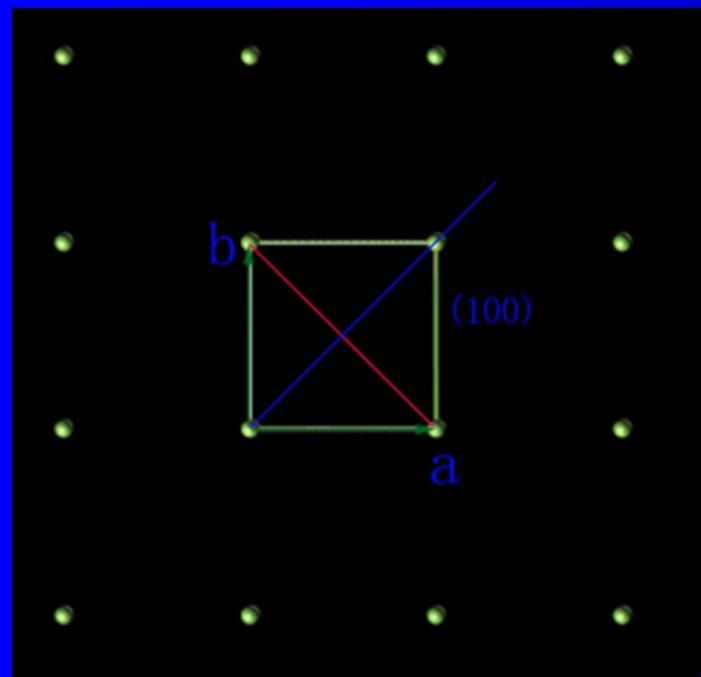
a *b* *c*

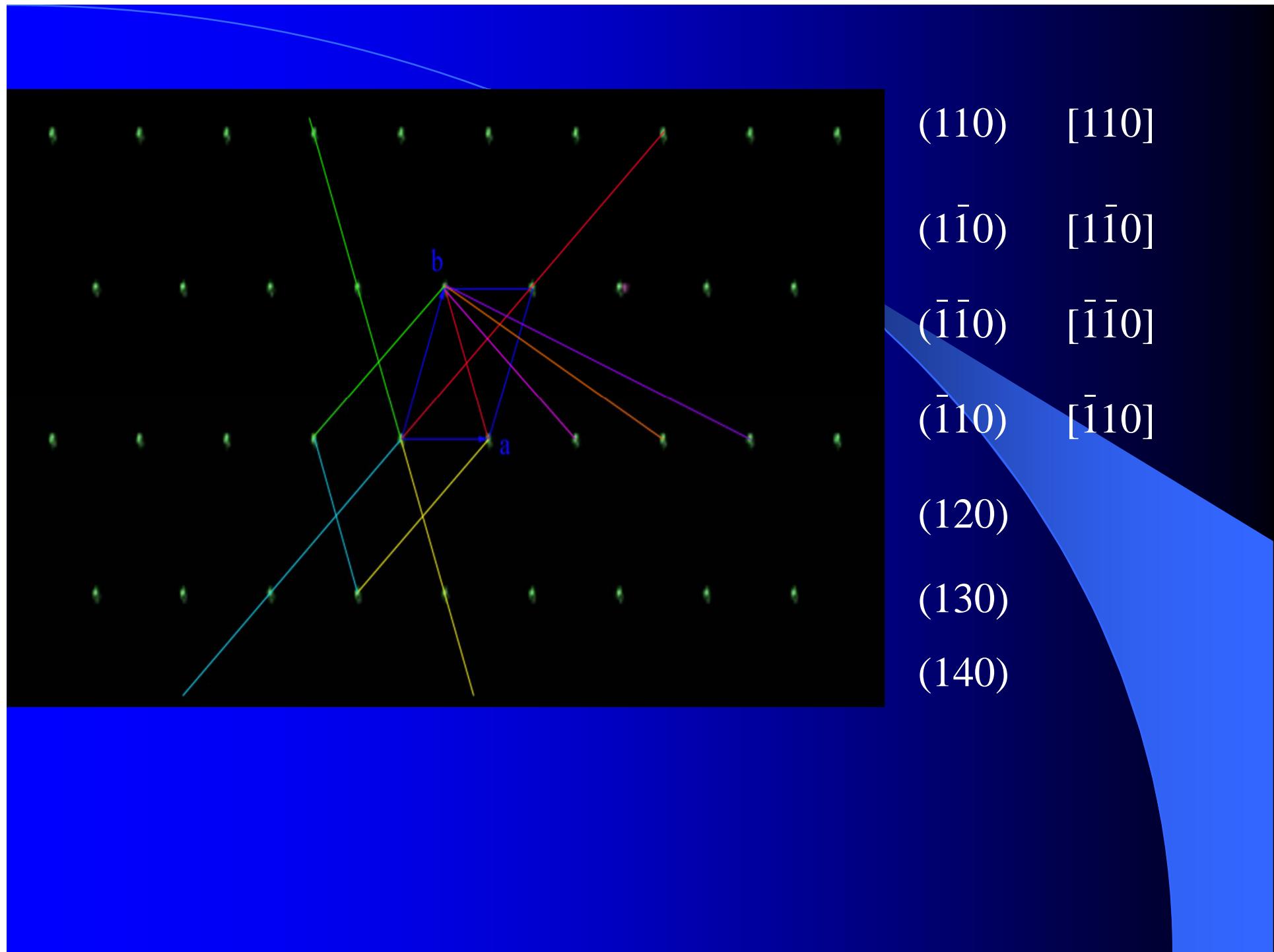


AGDF	(100)
BEDG	(010)
CEDF	(001)
ACEG	(101)
ABC	(111)
AHC	(121)
OEG	(1̄1̄1)

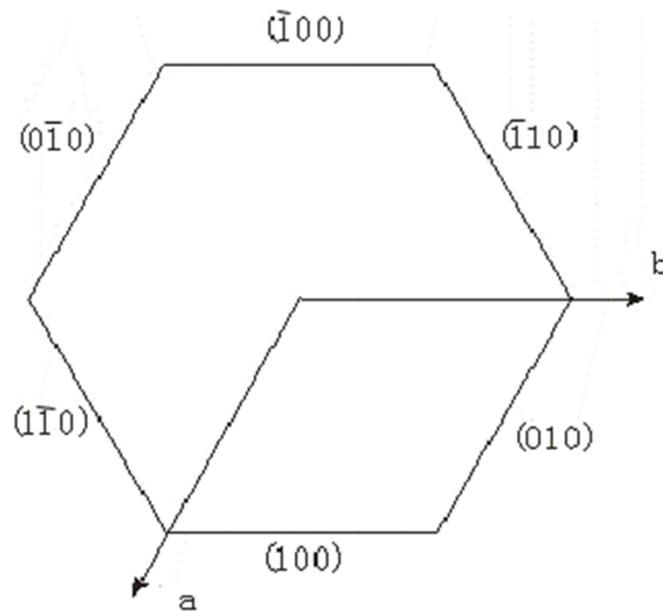
通常用 $\{hkl\}$ 表示由对称性联系的一组晶面，称为等效晶面族。如立方晶系中， $\{100\}$ 代表的一组晶面为(100), (010), (001), (100), (010), (001)。

晶体的晶面指数与点阵面指数及衍射指数的主要区别：晶面指数（米勒指数） h,k,l 必定是互质的；而点阵面指数可以为不互质的整数。

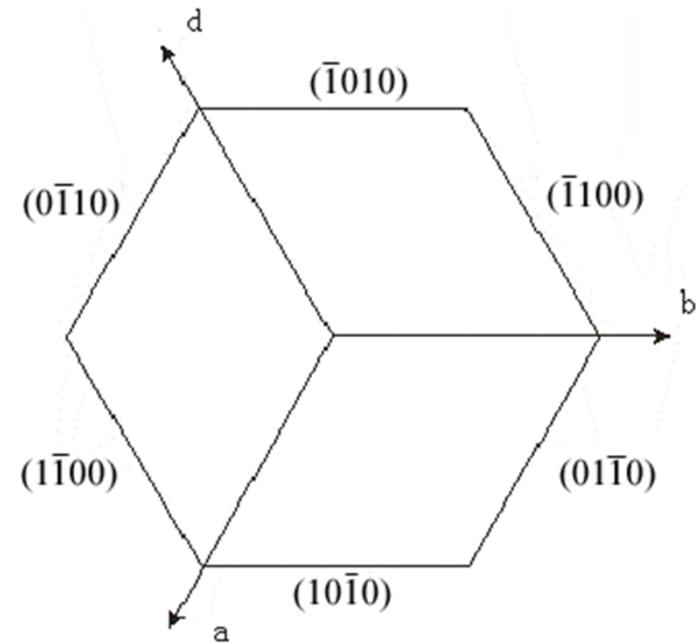




六方晶系的四轴定向



三轴定向



四轴定向
Miller-Bravais指数: $(hkil)$

$$i = - (h + k)$$

六方晶系的三轴坐标系的晶向指数[UVW]与四轴坐标系的晶向指数[uvtw]的换算关系

$$U = u - t, \quad u = (2U - V)/3$$

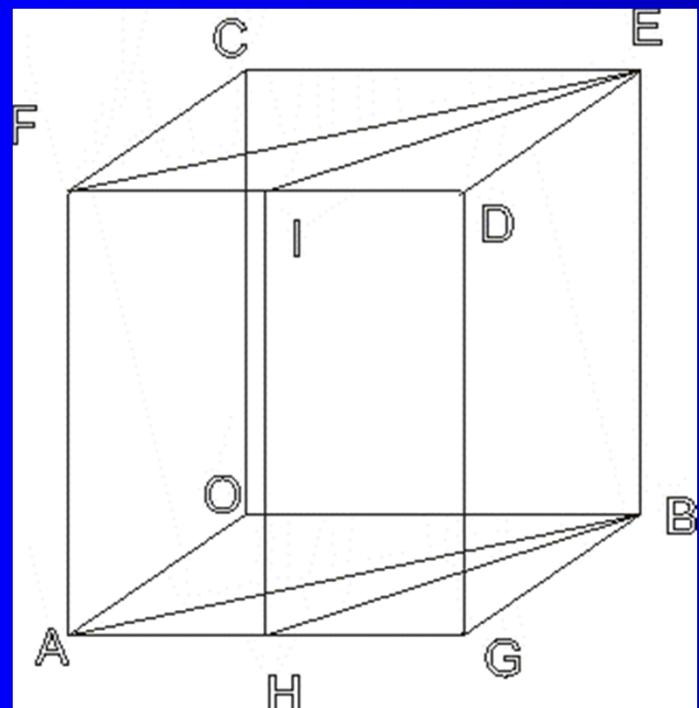
$$V = v - t, \quad v = (2V - U)/3$$

$$W = w, \quad t = -(u + v) = -(U + V)/3$$

$$w = W$$

• 晶带

晶体中若干个晶面平行于某个轴线方向，这些平行晶面称为晶带，轴线方向为该晶带的晶带轴。用该轴线的晶向指数 $[uvw]$ 作为带轴符号。



在立方晶体中，属于 $[001]$ 晶带的晶面有：
 (100) , (010) , $(\bar{1}00)$,
 $(0\bar{1}0)$, (110) , $(\bar{1}\bar{1}0)$, $(1\bar{1}0)$,
 $(\bar{1}10)$, $(2\bar{1}0)$, (120) 等等。

在晶体中每一个晶面至少同时属于两个晶带轴，每一个晶带轴至少包含两个互不平行的晶面。任何两个晶带轴相交处的平面，必定是晶体上的一个可能晶面。这称为晶带定律。

晶带方程： $hu + kv + lw = 0$

即： 晶面(hkl)属于带轴[uvw]的条件。

晶带方程可证明如下：

晶面 (hkl) 的平面方程为： $x/m + y/n + z/p = 1$

平行于该晶面，并通过原点的平面方程为：

$$x/m + y/n + z/p = 0 \quad \text{即: } hx + ky + lz = 0 \quad (1)$$

通过原点与晶面 (hkl) 平行的带轴 $[uvw]$ ，必在过原点的平面内，对于带轴上任一点坐标 (x_0, y_0, z_0) ，有：

$$u:v:w = x_0:y_0:z_0$$

代入方程 (1)，得：

$$hu + kv + lw = 0$$

由晶带定律，两个晶面决定一个晶带轴。

已知晶面 $(h_1k_1l_1)$, $(h_2k_2l_2)$ 属于晶带轴 $[uvw]$, 则:

$$h_1u + k_1v + l_1w = 0$$

$$h_2u + k_2v + l_2w = 0$$

$$u:v:w = (k_1l_2 - k_2l_1) : (l_1h_2 - l_2h_1) : (h_1k_2 - h_2k_1)$$

同样，两个晶带轴决定一个晶面。

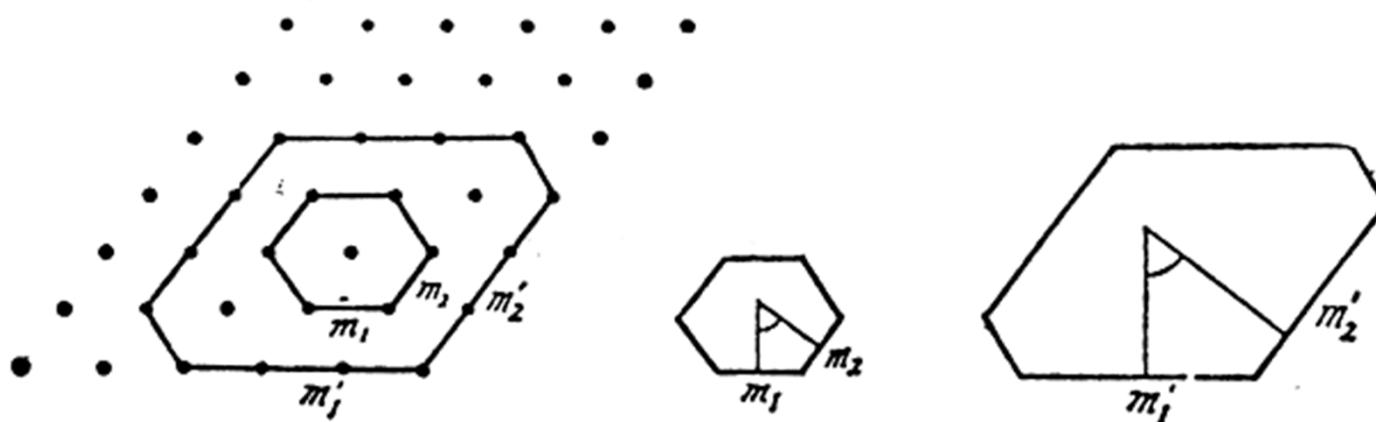
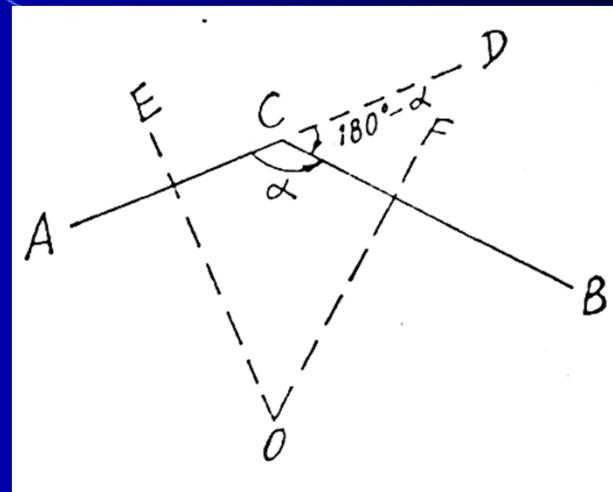
晶带轴 $[u_1v_1w_1]$, $[u_2v_2w_2]$ 都在晶面 (hkl) 上，则:

$$h:k:l = (v_1w_2 - v_2w_1) : (w_1u_2 - w_2u_1) : (u_1v_2 - u_2v_1)$$

第四节 晶体投影

- 面角守恒定律

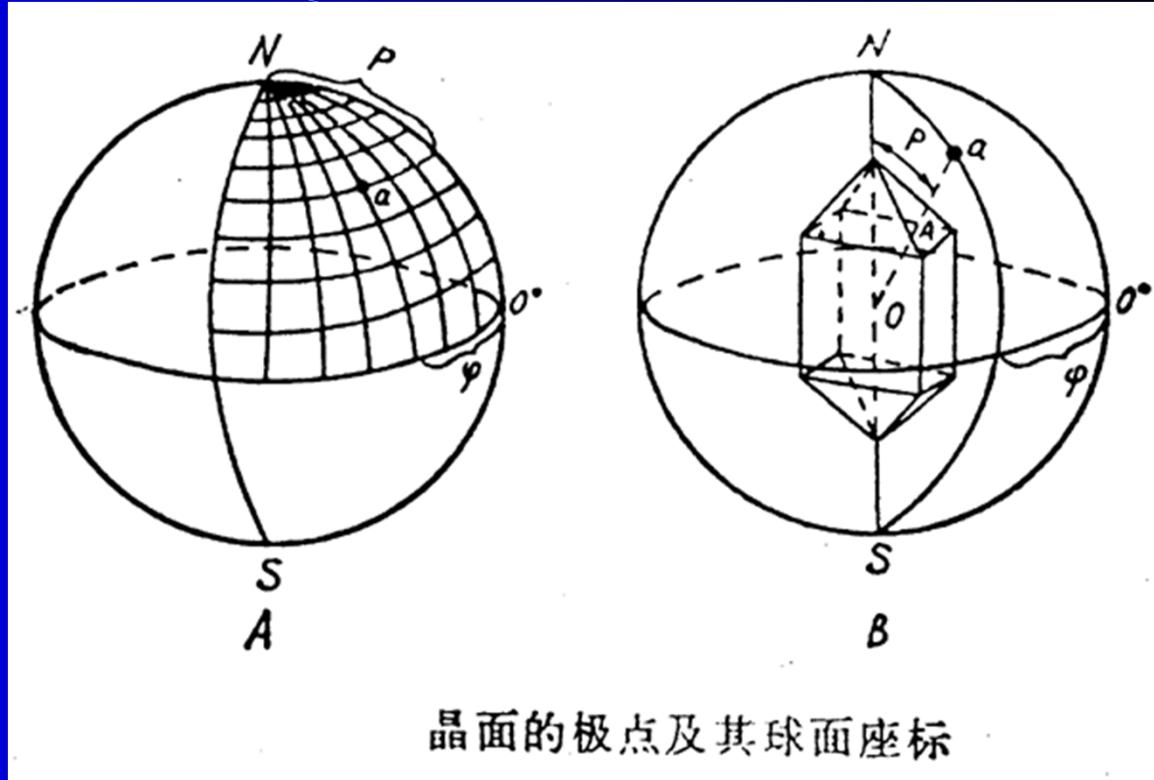
在相同温度和相同压力的条件下，组成和结构均相同的同种晶体，其对应晶面之间的夹角是守恒的。



面角守恒定律与晶体构造间的关系

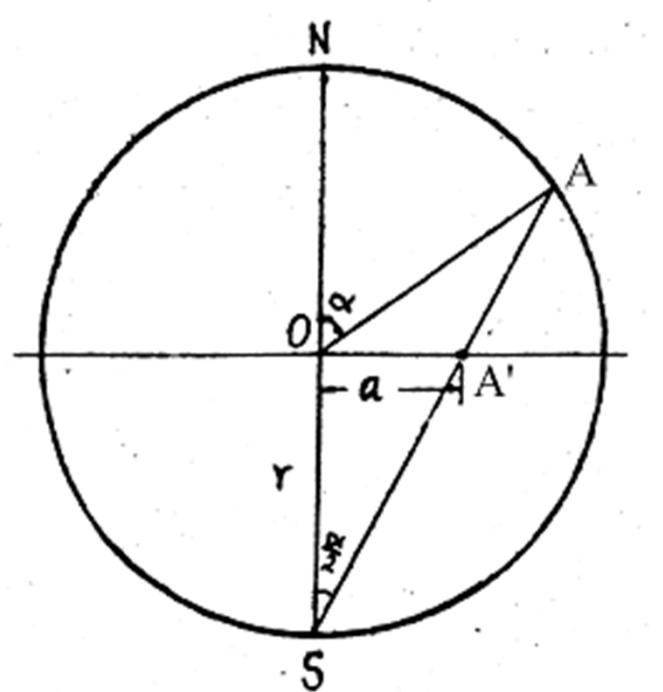
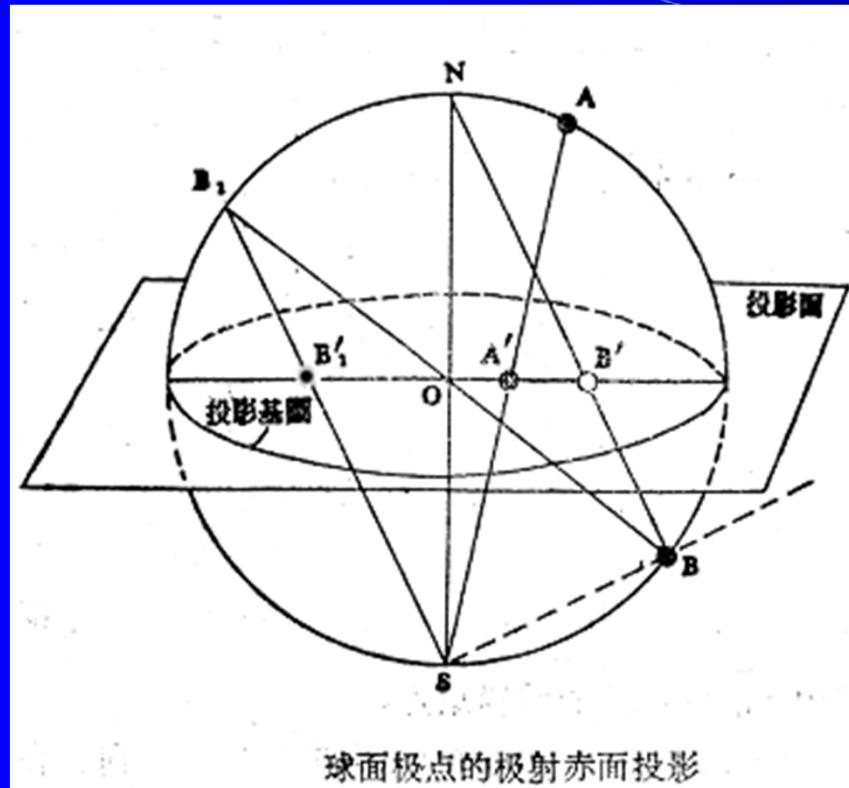
• 晶体的球面投影

以晶体的中心为球心，任意长为半径作一球面(参考球)。从球面出发，向所有晶面作一法线，并延长使之与球面相交一点，即为晶面的球面投影点(极点)。极点的位置用球面坐标：极距角(ρ)和方位角(φ)确定。



晶面的极点及其球面座标

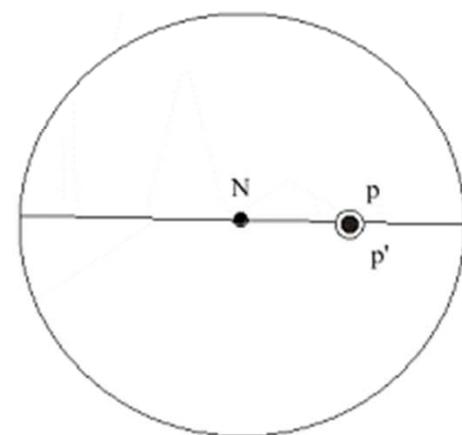
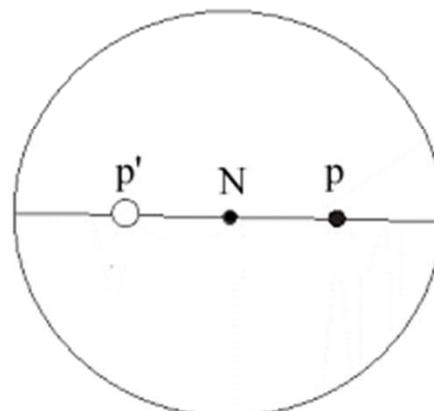
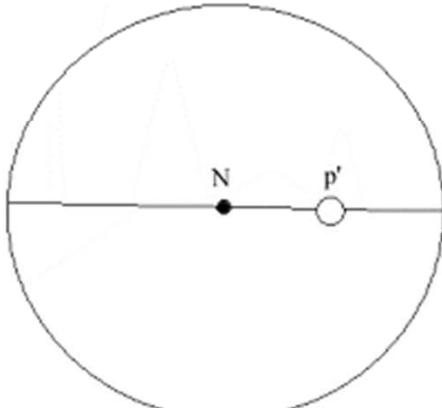
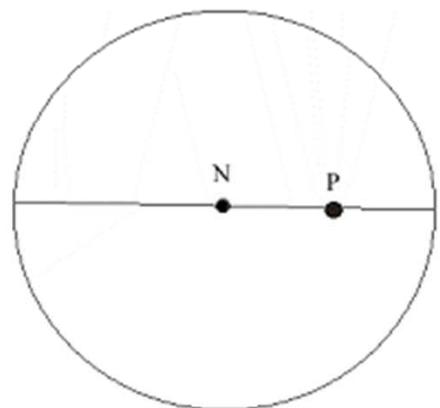
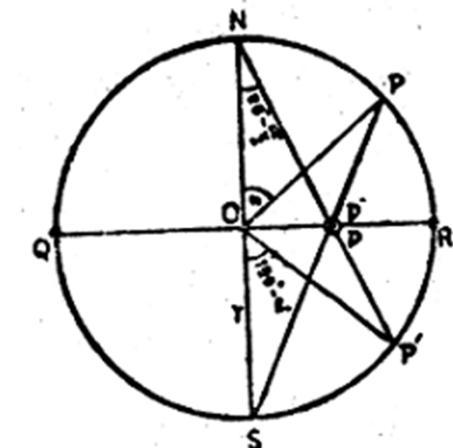
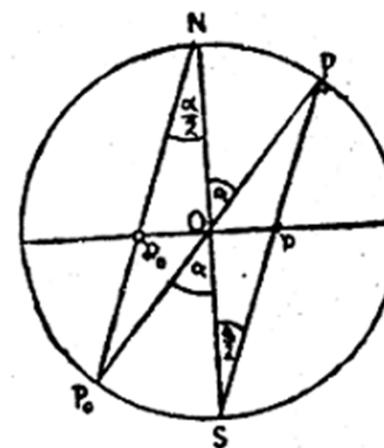
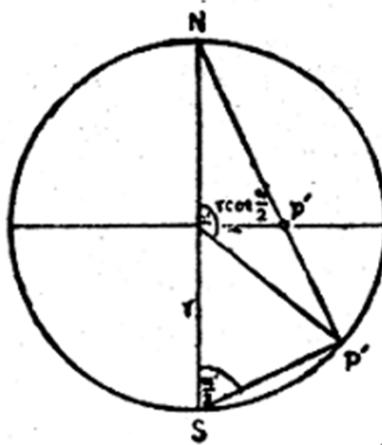
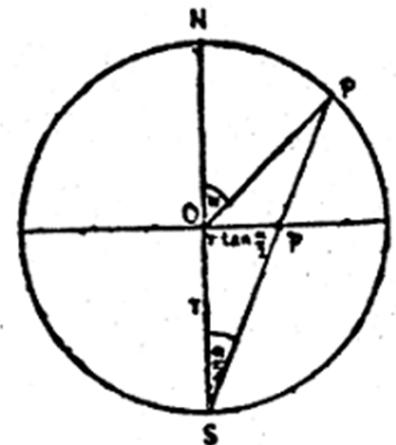
• 极射赤面投影



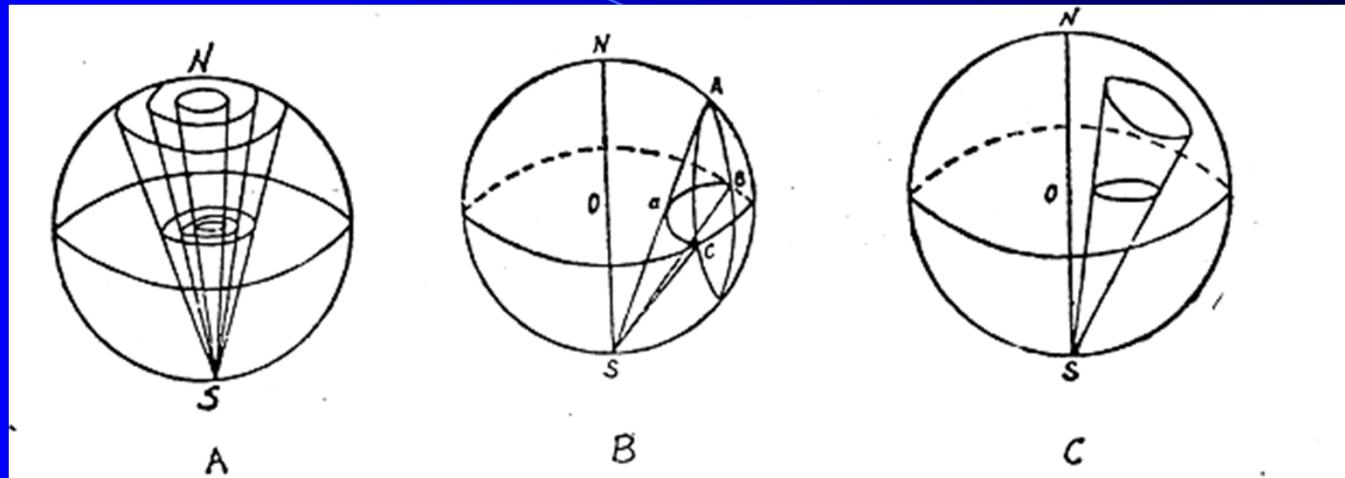
投影点到原点距离推导

极射赤面投影以赤道平面为投影圆，以S或N为视点。投影面与参考球相交成赤道大圆（基圆）。连接南极S和极点A的连线SA与投影面相交于A'点，A'点即为极点A的极射赤面投影。 $a=r \cdot \tan(\alpha/2)$

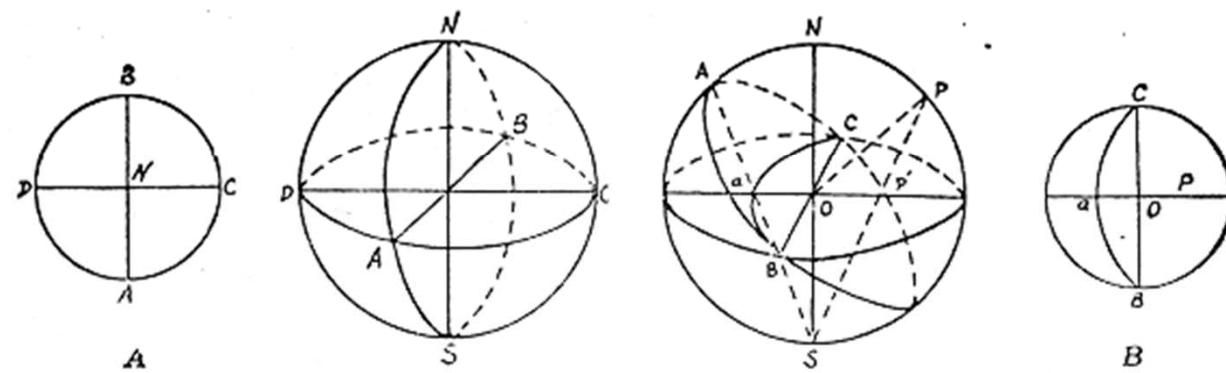
晶面的极射赤面投影



平面的极射赤面投影



球面上小圆的极射赤平投影



大圆的极射赤平投影

A—水平和直立大圆；B—倾斜大圆

晶带的极射赤面投影

