1.1

2025年2月26日　13:55

1.1 晶格的基本知识

晶体：

解释1：周期性空间排列，长程取向有序、平移对称性

解释2：平移对称性、**旋转对称性**

准晶：

不具有平移对称性，有旋转对称性

单晶：

整块材料规则排列

多晶：

由大量微小（宏观小微观大）的单晶组成

晶体结构：

基元basis：最小的重复单元

基元重复排列的形式：空间点阵，布拉维格子

布拉维格子的基矢：

$\mathbf{R_n} = \mathrm{n}_1\mathbf{a_1} + \mathrm{n}_2\mathbf{a_2} + \mathrm{n}_3\mathbf{a_3}$，n取整数

理想点阵，忽略了缺陷和振动

重点**：每个**格点周围情况完全相同

简单格子和复式格子：基元中的原子数$\mathrm{p} = 1, \mathrm{p} > 1$，子格子

原胞primitive cell：

晶体中**体积最小**的周期性重复单元

通常是以基矢为边的平行六面体

*不唯一

区别：

基元-成分，原胞-形状？

维格纳-塞茨原胞

格点连线的垂直平分线围成的面积

*导空间

简单立方布拉维格子

体心立方布拉维格子 BCC

$$\boldsymbol{a_1} = \frac{a}{2}(-\boldsymbol{i} + \boldsymbol{j} + \boldsymbol{k})$$

$$\boldsymbol{a_2} = \frac{a}{2}(\boldsymbol{i} - \boldsymbol{j} + \boldsymbol{k})$$

$$\boldsymbol{a_3} = \frac{a}{2}(\boldsymbol{i} + \boldsymbol{j} - \boldsymbol{k})$$

\+ - +

+ + -
配位数=8
晶胞格点数=2
*原胞永远只有一个格点
原胞体积=$\frac{a^3}{2}$?

面心立方布拉维格子 FCC
$\mathbf{a_1} = \frac{a}{2}(j + k)$
I k
I j
晶胞：4格点
原胞体积$\frac{a^3}{4}$

简单六角布拉维格子 Simple Hexagonal
*面上密堆积
3格点
配位数6
原胞体积$\Omega = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2c$

晶胞
平行六面体
轴矢（晶体学基矢）：$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$
晶格常数
*可包含多个原胞（格点）

有唯一的取法
简单立方 sc
体心立方结构 bcc
面心立方结构 fcc

几种常见的晶体结构
氯化钠 FCC
氯化铯 套构
金刚石 FCC 套构，两种碳原子
闪锌矿 类似金刚石
密排六角复式格子 hcp
环境不同：两层格子不等价，是复式格子（相同操作得到不同结果）

1.2 晶格的配位数、晶面、晶向
配位数 coordination number
只可能是12，8 ,6 ,4 ,3 ,2

氯化铯结构：r=0.73R

- NaCl结构：r=0.414R
  - 不同方式相切的最密堆积

- 密堆积
  - 配位数=12
  - 六角密堆 hexagonal close-packed, hcp
    - ABABAB
  - 面心立方 fcc
    - ABCABC
    - #两种空隙
    - ***思考题***

- 晶向crystal direction
  - 晶列（无数条，晶列族）
  - 晶向指数[m, n, p]
    - 最小公倍数
    - 负记作$[\bar{1}\ 0\ 0]$
    - 默认由晶胞定义
  - 晶面 lattice plane
    - 晶面指数（原胞的基矢）
    - *密勒指数（轴矢）
    - [] () <>

1.3 晶体结构的对称性与晶系

- Neother原理（定理）
  - 表征晶体对称性及其物理性质对称性之间的关系（每个连续对称性都有着相应的守恒定律，E-t,r-t）
- 对称性的重要性：
  - 晶体的任一宏观物理性质一定具有它所属**点群**的一切对称性
- 宏观对称性（点群）、微观对称性（还包括平移对称性）
  - 宏观对称性：
    - 旋转、镜面、中心反演
    - 至少有一个点不动，因此操作构成的群称为点群
    - 正交变换：
      - 变换后任意两点距离不变
      - 正交阵表示（单纯旋转，正交阵det=1；加上中心反演或镜面，det=-1）（三维情况，中心反演=镜面+旋转$180°$）
      - 正交变换后不变（本学期只关心正交变换的对称操作）
    - *不具有平移对称性
    - e.g. 立方体48个对称操作（3种轴，以及不动，加中心反演翻倍）（没有数镜面）
    - 正四面体的对称操作⊂立方体(24个)

平移对称性：

- 对转动的限制：只能有1,2,3,4,6重轴（晶体的对称性定律）
- 点对称操作的命名
  - $C_n(n)$：转动
  - σ, m：镜面反映
  - $i, I, \bar{1}$：中心反演
  - S_n：旋转 − 镜面反映
  - $\bar{C}_n, \bar{n}$：旋转 − 中心对称
- C_n和S_n的对应关系
- 两种命名：
  - Hermann-Mauguim符号（国际符号）
  - Schoenflies符号（熊夫利符号）
    - 主轴：对称性最高的旋转轴
    - σ_h:水平面（垂直于主轴）
    - σ_v:垂直面
    - σ_d:二面体面(dihedron)
- 对称操作群
  - $G = \{E, A, \ldots\}$
  - 群：
    - 广义“乘积”的闭合性
    - 单位元素E
    - 逆元P^{-1}
    - 结合律
  - 极射赤面投影图
    - 32种点群。。。
    - 14种布拉维格子（对应点群）
    - 晶系（对应对称性相同的布拉维格子）