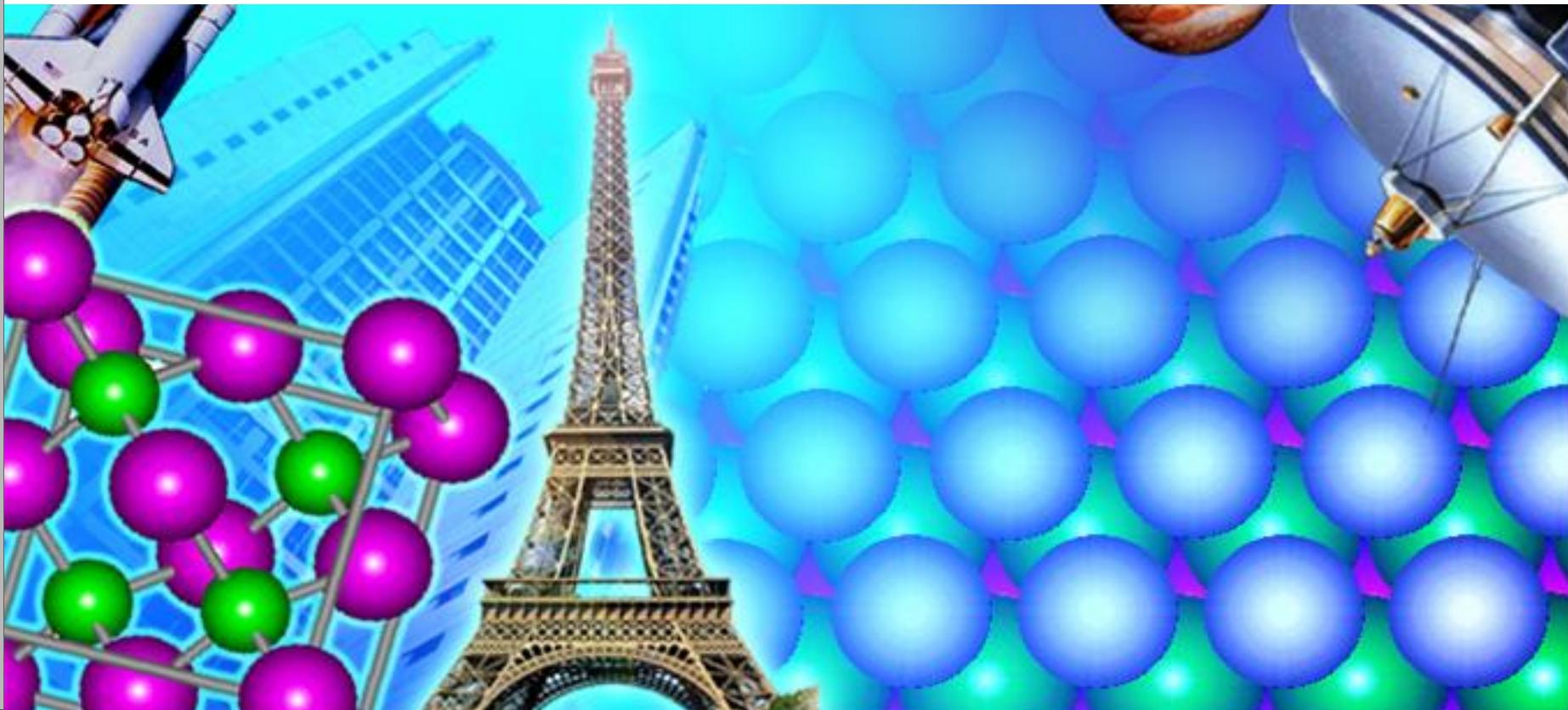




# 第七章 晶体结构的点阵理论

Chapt 7 Lattice Theory of Crystal Structure



### § 7.1 晶体的点阵结构与晶体的缺陷

7.1.1 晶体概述 ►

7.1.2 晶体的点阵结构理论 ►

### § 7.2 晶体结构的对称性

7.2.1 晶体的宏观对称性 ►

7.2.2 晶体宏观对称性的分类 ►

7.2.3 晶体的微观对称性 ►



## 绚丽多姿的晶体



名称：桃花洞水晶  
尺寸：(厘米) 高25

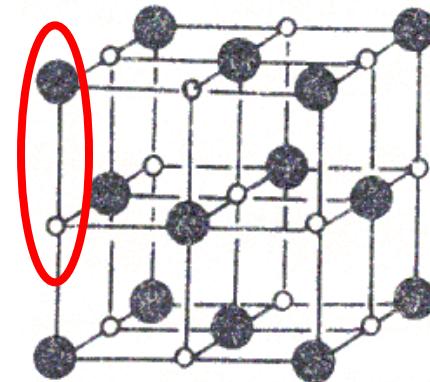


名称：绿松石  
尺寸：20×40×150  
重量：1900克 第二届





固态物质按其原子（或分子、离子）在空间排列是否长程有序分成晶态和无定形两类。



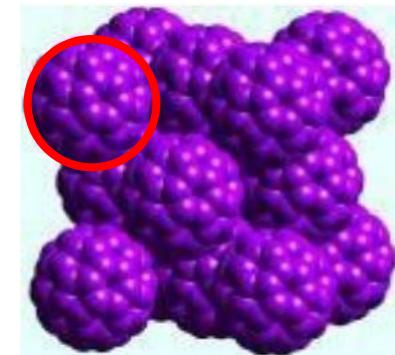
NaCl晶体

## § 7.1 晶体的点阵结构与晶体的缺陷

### 7.1.1 晶体概述

#### 7.1.1.1 晶体及其特性

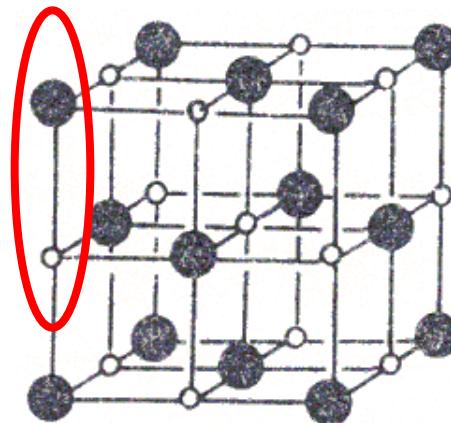
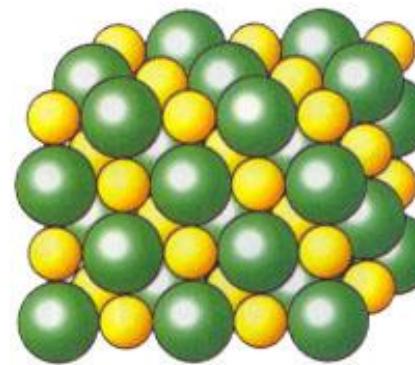
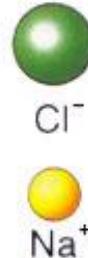
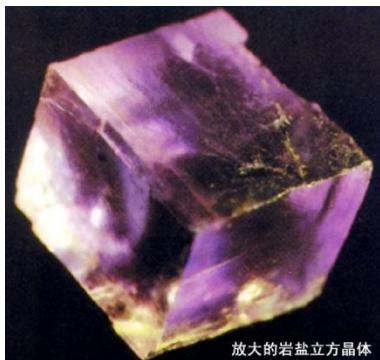
晶体是由原子(离子、分子)或基团(分子片段)在空间按一定规律周期重复地排列构成的固体物质。

C<sub>60</sub>晶体结构



晶体的内部质点(分子、原子或离子等)在空间有规则地排列。

### 食盐(NaCl)的晶体结构



理想晶体也可以看成是由一个**基本单位**在空间按一定的规则周期性无限重复构成的。



## 晶体特性：

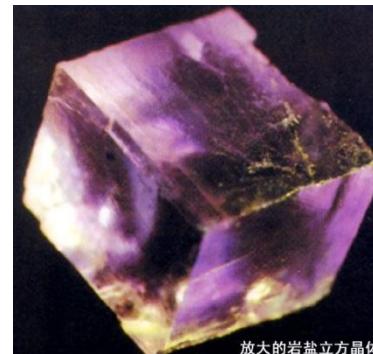
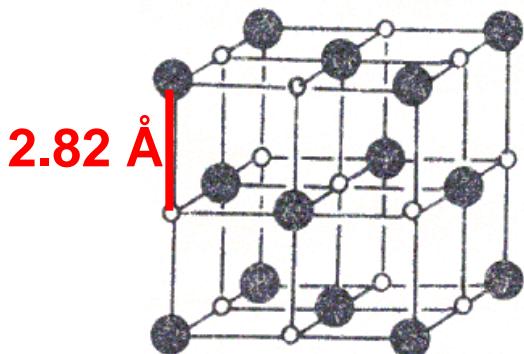
**1.自范性：**自发地形成多面体外形。

自发形成晶面，晶面相交成为晶棱，晶棱会聚成顶点，由此形成多面体外形。



**2.均匀性：**晶体各部分的宏观性质完全相同。

晶体中原子周期性排布，由于周期极小，宏观分辨不出微观的不连续性。





### 3. 各向异性：晶体在不同方向的性质可能各不相同。

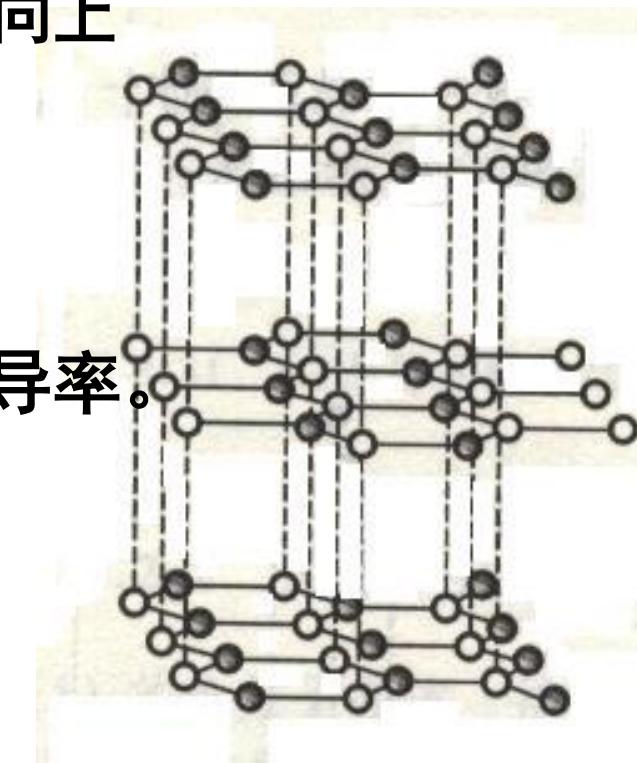
晶体内部三维的结构基元可能在不同方向上  
原子、分子的排列与取向不同。

例：石墨晶体，层状结构，  
层向的电导率 $\gg$ 与层相垂直方向的电导率。

### 4. 确定的熔点：

因为微粒规整排列。

NaCl晶体的熔点为801 °C



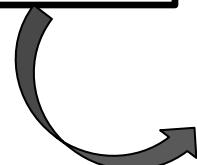


其它：对称性、衍射特性、晶体缺陷等。

当电磁波照射到晶体上时，被晶体中原子散射，各散射电磁波之间产生互相干涉现象，称为晶体的衍射特性。可用于晶体结构的测定。

人们通常利用光子衍射、中子衍射和电子衍射来研究晶体结构。

单晶衍射、粉末衍射…

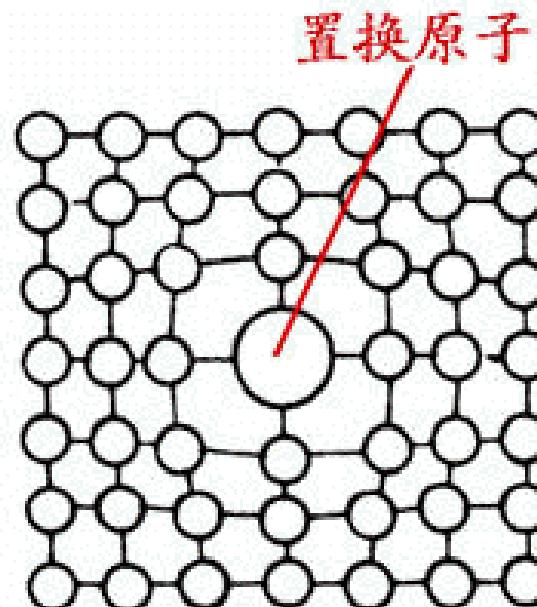
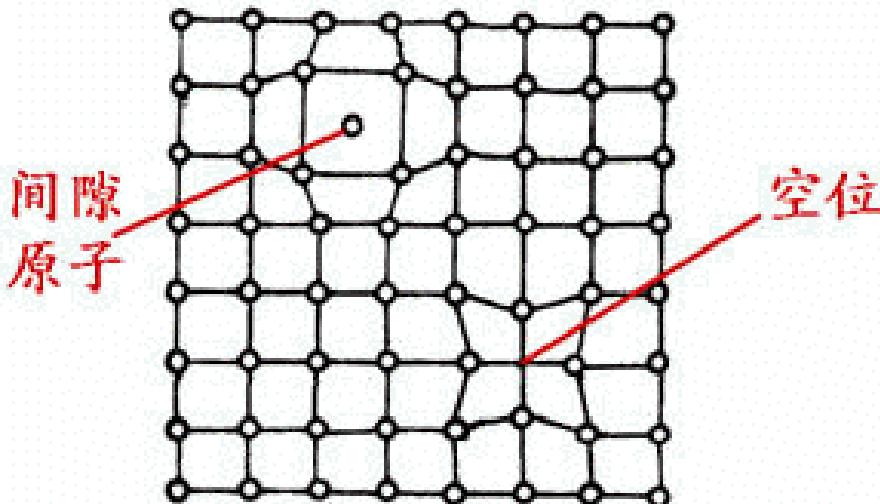


样品多是多晶体块或单晶粉末，  
它不仅能测定单晶体，而且也能  
有效地测定多晶体



## 晶体缺陷

在实际的晶体中，由于晶体形成条件、原子的热运动及其它条件的影响，原子的排列与完整周期性点阵结构的**偏离**就是**晶体中的缺陷**。**点、线、面、体缺陷。**



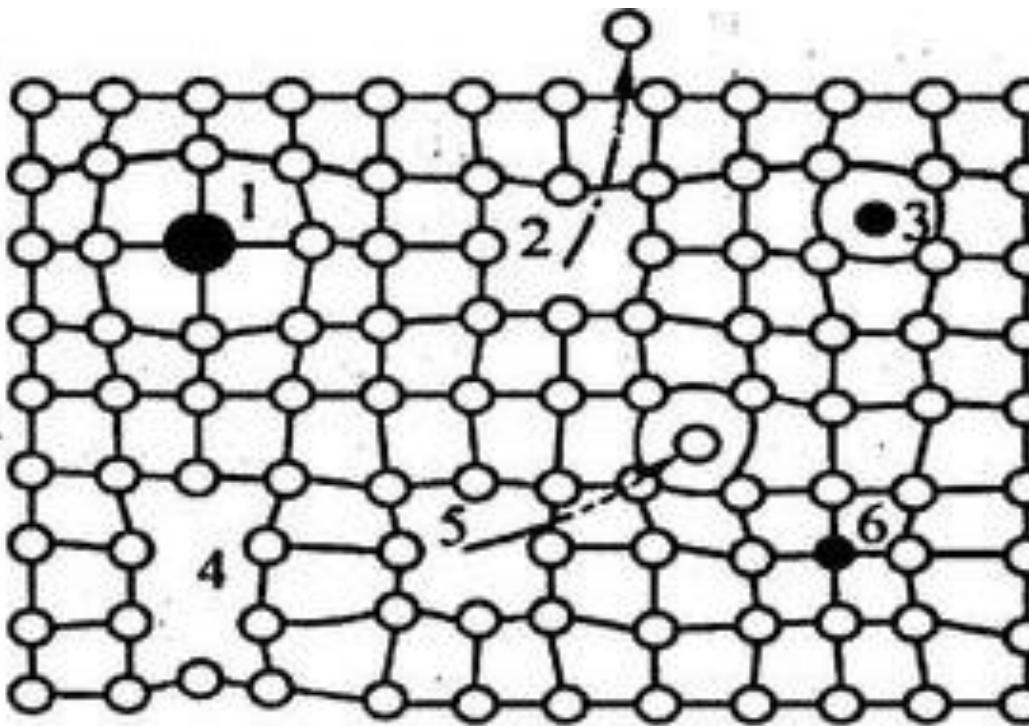
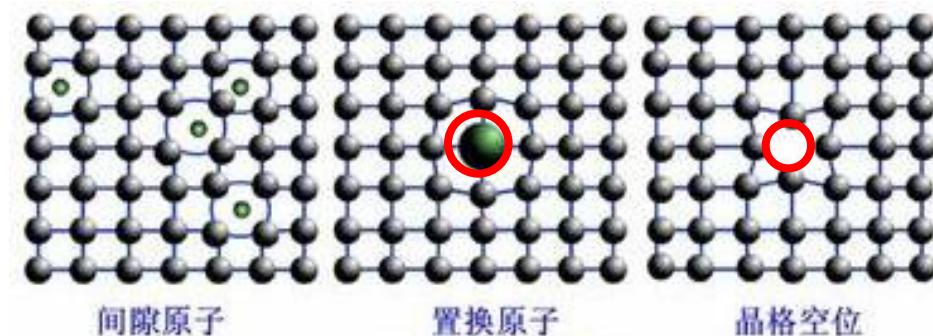


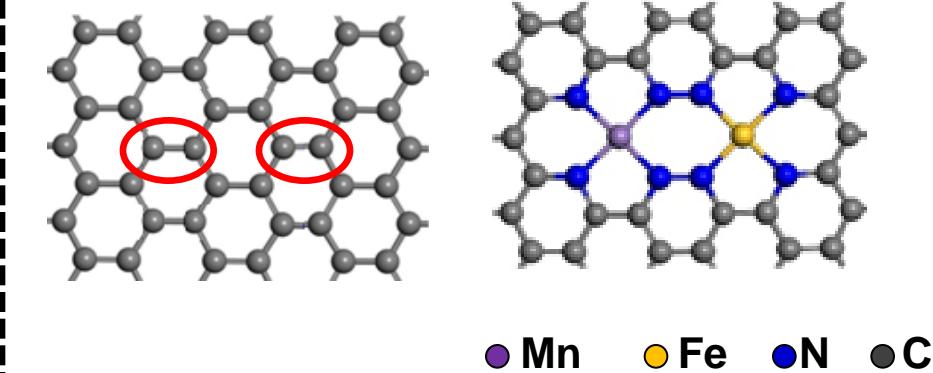
图 1.37 晶体中的各种点缺陷

1—大的置换原子； 2—肖脱基空位； 3—异类间隙原子； 4—复合空位； 5—弗兰克尔空位；  
6—小的置换原子

晶体缺陷的存在对晶体的性质会产生明显的影响。实际晶体或多或少都有缺陷。适量的某些点缺陷的存在可以大大增强半导体材料的导电性和发光材料的发光性，起到有益的作用；而位错等缺陷的存在，会使材料易于断裂，比近于没有晶格缺陷的晶体的抗拉强度，降低至几十分之一。



catalysts for  $N_2$  electroreduction



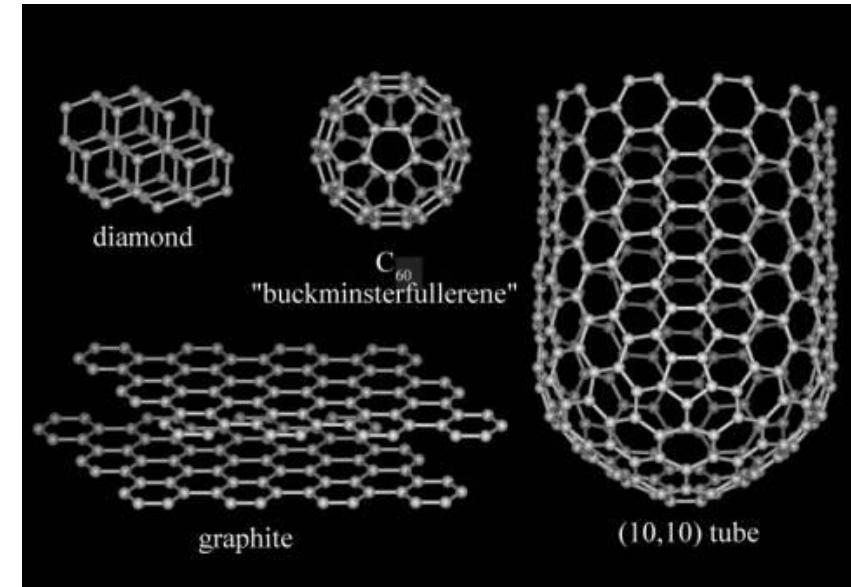


## 7.1.1.2 晶体的同素异构及其应用示例

### (1) 同素异构

同一种原子或基团可能形成不同结构的晶体。

例：金刚石、石墨和C<sub>60</sub>等是碳的同素异构体。



### (2) 人工智能材料

#### 形状记忆合金

50%钛和50%镍形成的合金，称为镍钛诺尔。

这类合金能够记住自己的形状，对它进行变形后，它仍能恢复自己原来的形状。

不同条件下形成的同素异构体，出现了相变和逆相变而使其具有了形状记忆功能。





## 7.1.2 晶体的点阵结构理论



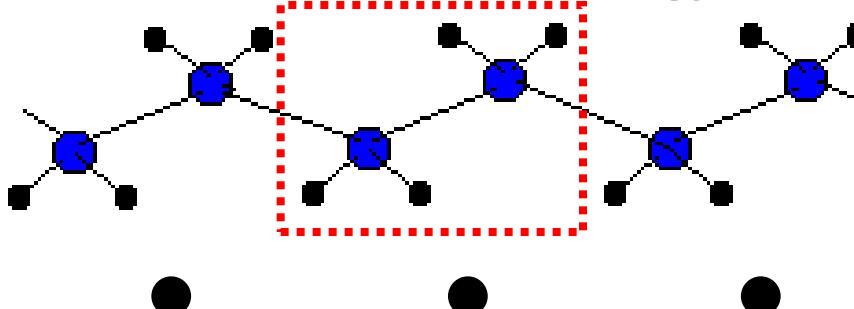
晶体空间结构的数学描述形式

### 7.1.2.1 点阵和结构基元

#### (1) 点阵和平移

将晶体中重复的**结构单元**用一个**点**表示，这些点在空间按周期性排列，就构成一个**点阵**。

例：聚乙烯  $(-\text{CH}_2-\text{CH}_2)_n$





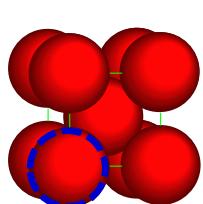
## (2) 结构基元

点阵点所代表的具体内容，

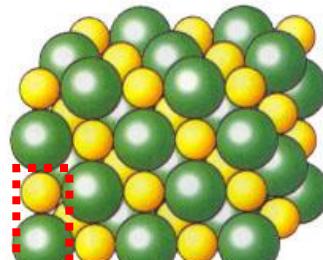
如上例中，点阵点代表-(CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>)-。

晶体中所有基本单位（也称基元， motif）的化学组成相同、空间结构相同、排列取向相同、周围环境相同。

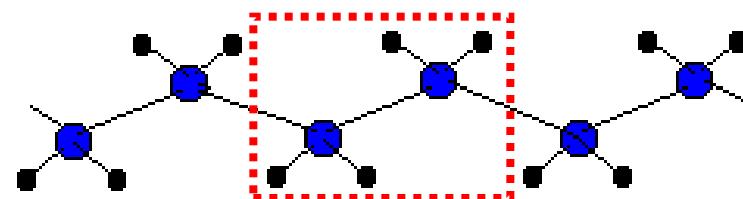
基元可以是单个原子，也可以是一组相同或不同的原子。



$\alpha\text{-Fe}$



NaCl晶体



聚乙烯  $(-\text{CH}_2-\text{CH}_2-)_n$

晶体结构=点阵+结构基元

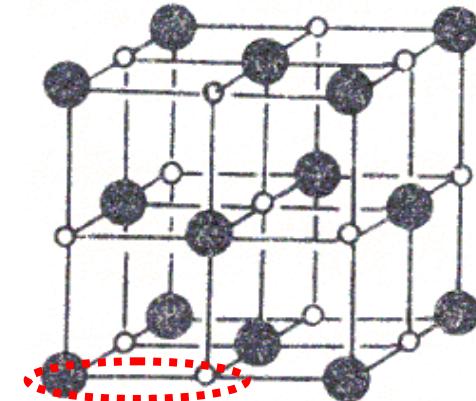
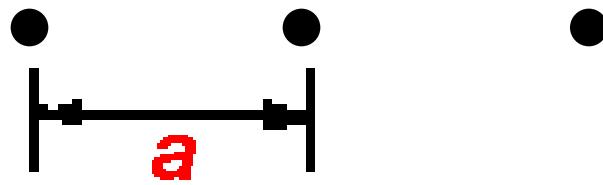
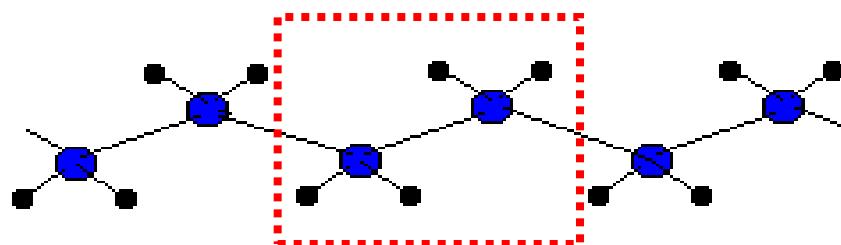
●的分布 ●



### (3) 直线点阵

例：NaCl晶体中一条晶棱上原子排列：

例：聚乙烯  $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ <sub>n</sub>

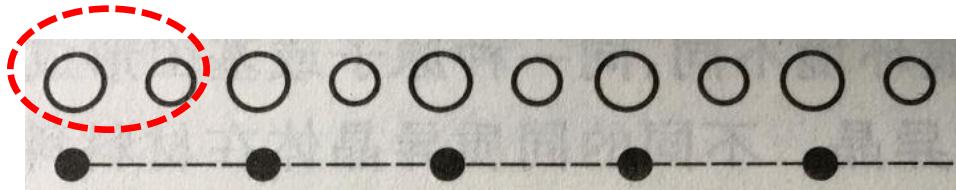


NaCl晶体

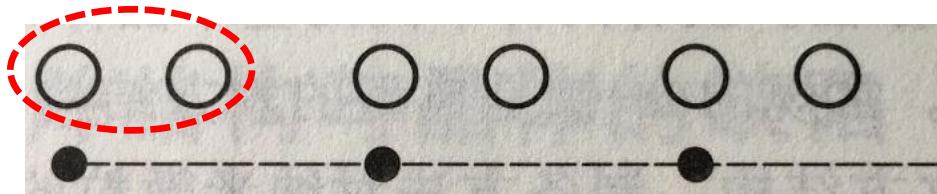
任意两个点相连可得一向量，  
按此向量平移能使它复原。  
即点阵具有平移操作对称性。

$$\text{平移群: } T = m\underline{a}$$

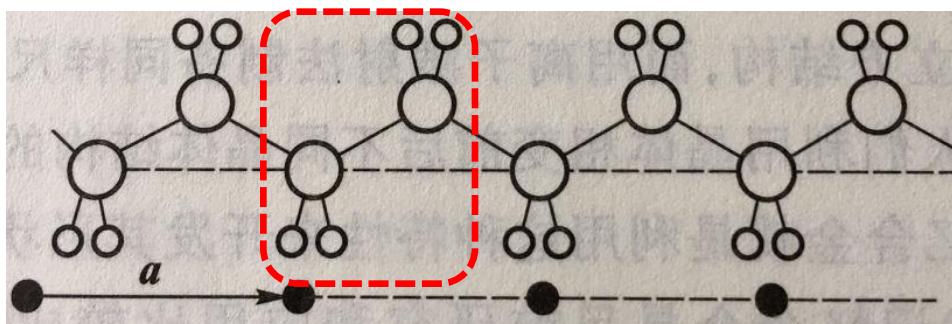
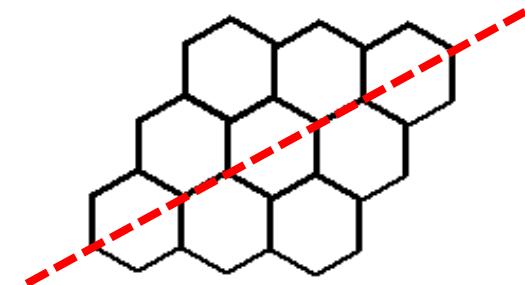
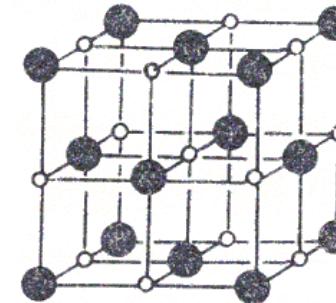
a 为素向量, ma 为复向量 ( $m=1, 2, 3, \dots$ )



NaCl晶体的晶棱



石墨某方向上C原子的排列

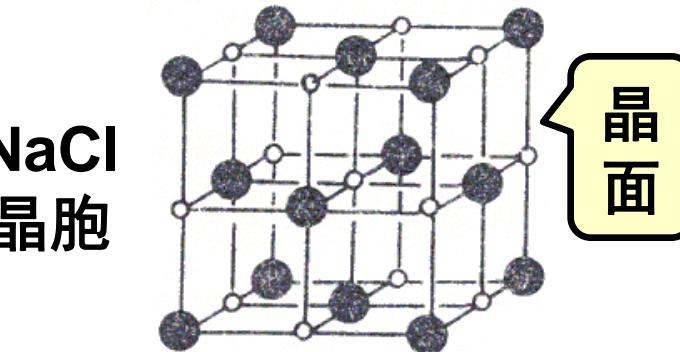
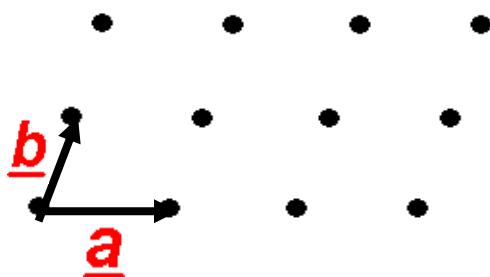
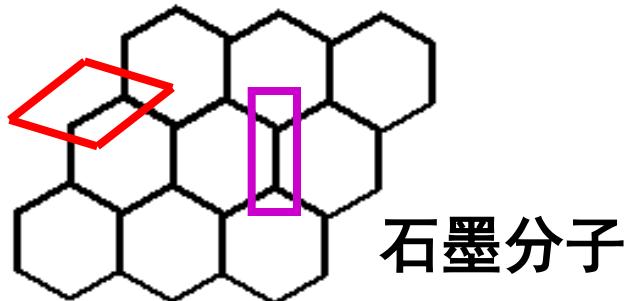
聚乙烯长链  $(\text{CH}_2 - \text{CH}_2)_n$ 

以上三种情况都抽象出来了一维点阵，但是其中的“点阵点”代表的结构基元内容不一样。共同之处都存在一维平移操作。

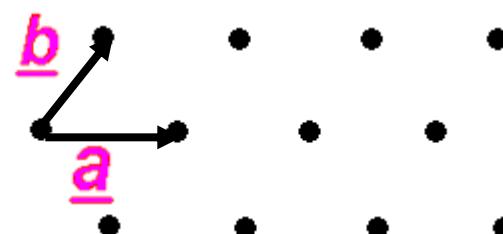


## (4) 平面点阵

平面构型的晶体分子  
或晶体的某个晶面, ect.

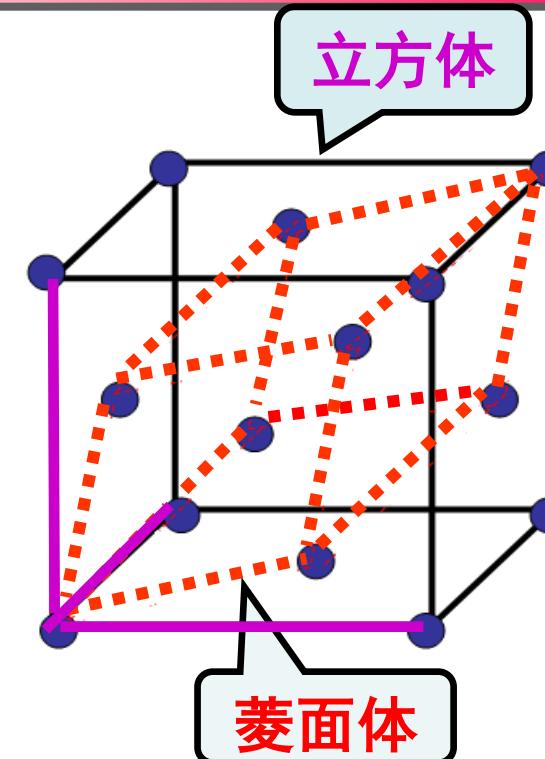
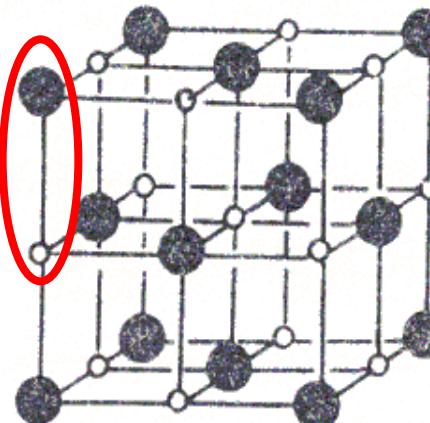
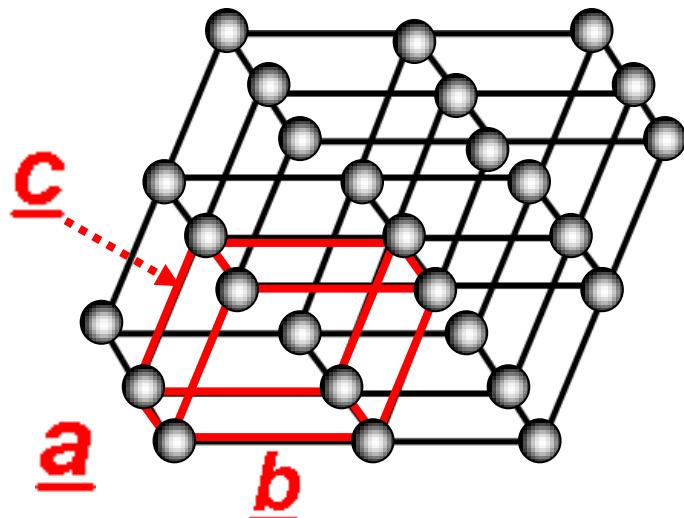


石墨分子, 选取不同的结构单元,  
可能导致不一样的点阵结构,  
应如何选呢?



平移群:  $T = m\underline{a} + n\underline{b}$  {  $\begin{matrix} m=1,2,3... \\ n=1,2,3... \end{matrix}$  }

## (5) 空间点阵 —— 三维晶体结构



平移群:  $T = m\underline{a} + n\underline{b} + p\underline{c}$

$$m = 1, 2, 3 \dots$$

$$n = 1, 2, 3 \dots$$

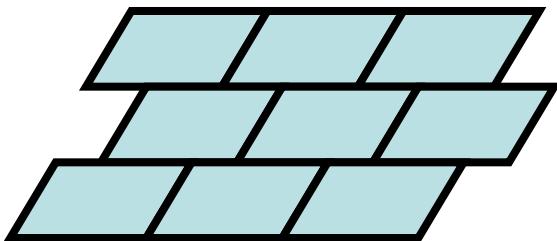
$$p = 1, 2, 3 \dots$$

选择不同的基向量,  
六面体形状不同。  
那么如何选?

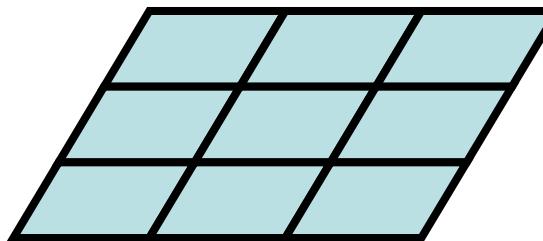


## 7.1.2.2 晶胞及晶胞二要素

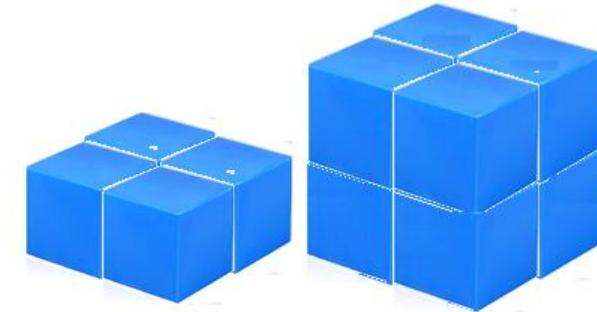
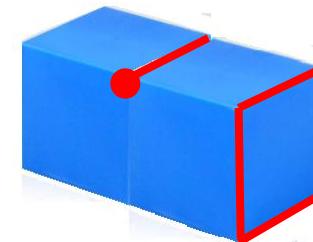
(1) 晶胞：晶体结构的基本重复单位。  
六面体，并置堆砌构成晶体。



非并置堆砌



并置堆砌

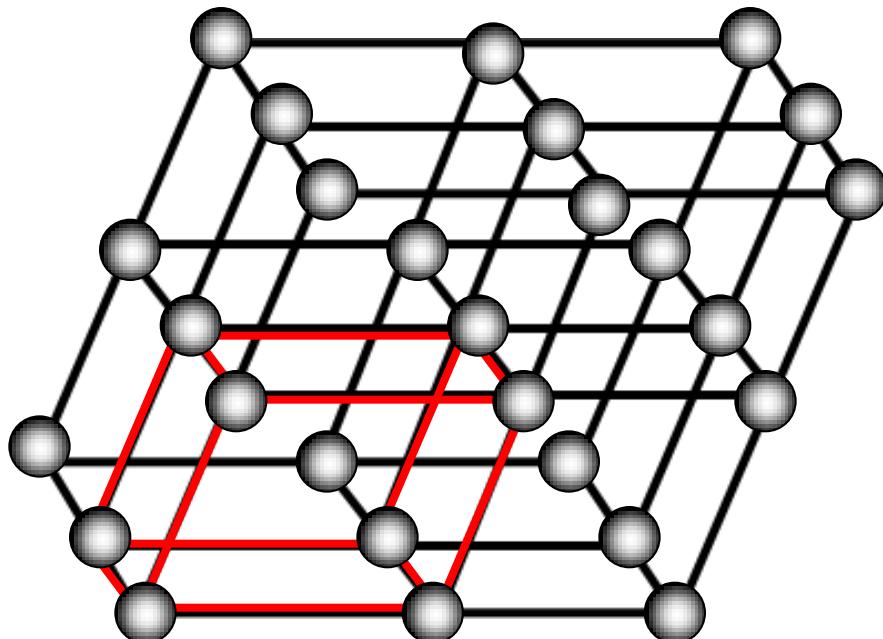


顶点：8个晶胞共享  
边：4个晶胞共享  
面：两个晶胞共享

晶胞 { 素晶胞：含结构基元(点阵点)：1个  
复晶胞：含结构基元(点阵点)： $\geq 2$ 个



## 晶胞内点阵点数目计算



点阵点分摊

顶点.....1/8

棱上点.....1/4

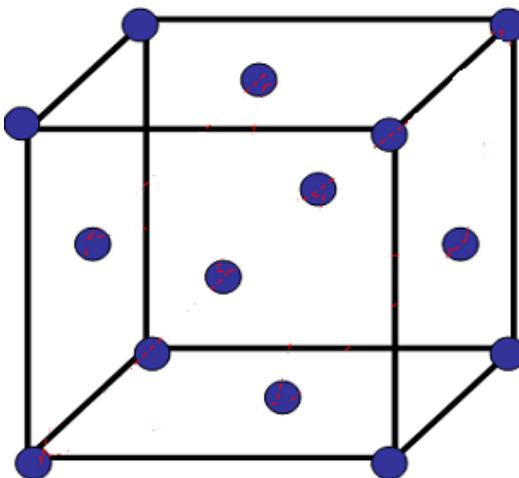
面上点.....1/2

体内点.....1



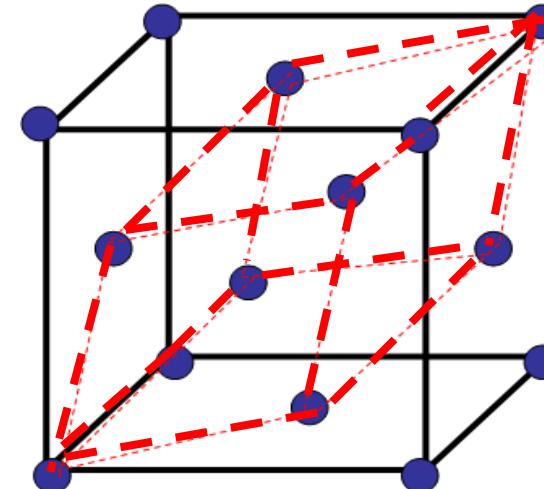


例:立方面心点阵



$$\text{点阵点} = 8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$$

立方体: 复晶胞



$$\text{点阵点} = 8 \times 1/8 = 1$$

菱面体: 素晶胞

同一晶体, 选择素向量不同, 可得到不同形状的晶胞。



## 正当晶胞 —— 对称性高、含结构基元少的晶胞



晶轴的夹角  
优先考虑 $90^\circ$ 、 $60^\circ$  ...

优先素晶胞  
其次复晶胞

### Notes:

- ①优先考虑对称性；
- ②对称性相同时，优先选择素晶胞

---

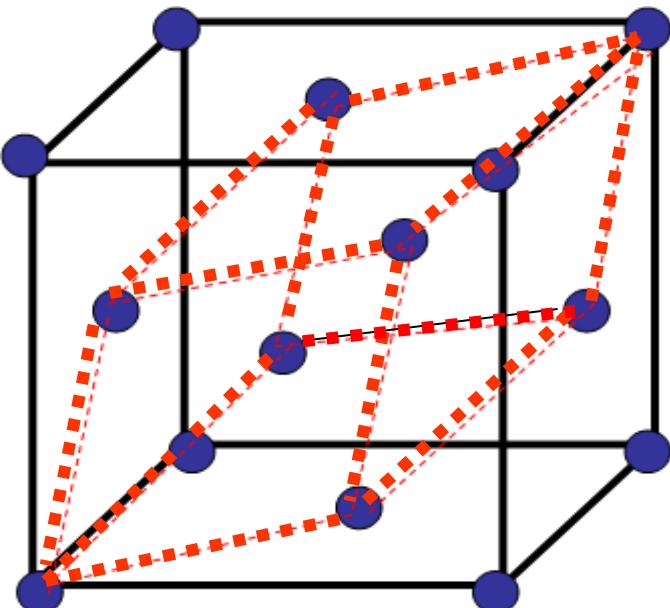
晶胞 { 素晶胞：含结构基元(点阵点)1个  
          复晶胞：含结构基元(点阵点)  $\geq 2$  个

正当晶胞：对称性高、含结构基元少的晶胞。  
可能是素晶胞，也可能是复晶胞。



## 例1：立方面心点阵

P185 图7.22



对称性高

立方体：  
复晶胞

正当晶胞

$$\text{点阵点} = 8 * 1/8 + 6 * 1/2 = 4$$

菱面体：  
素晶胞

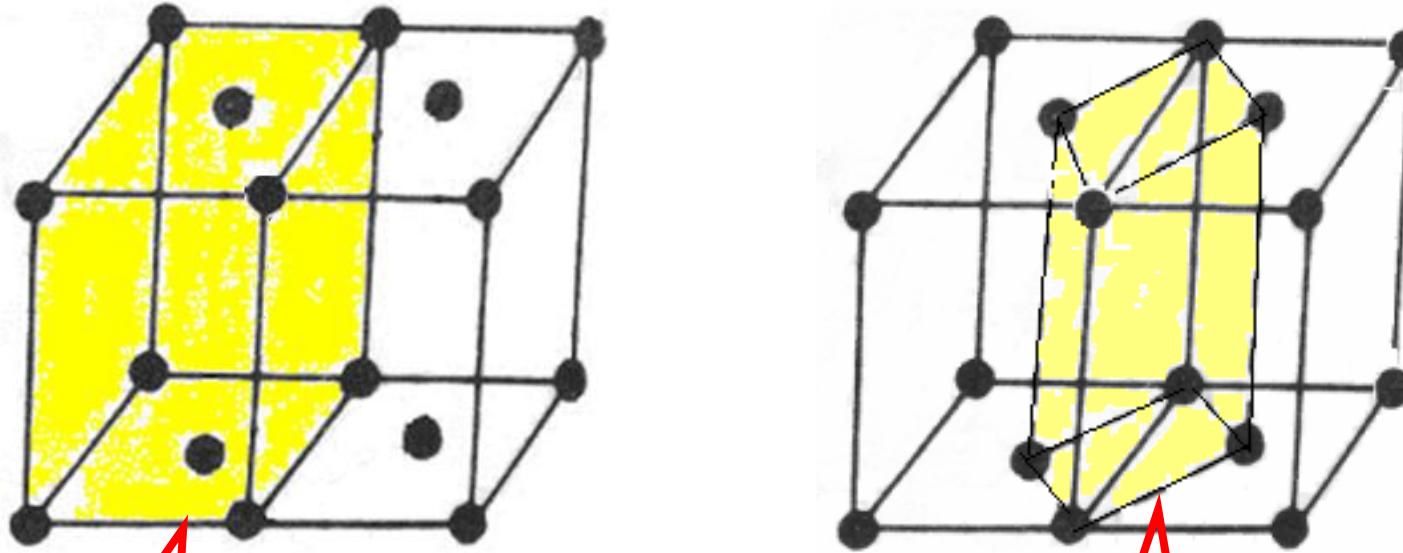
X

$$\text{点阵点} = 8 * 1/8 = 1$$



## 例2：底心四方点阵

P185 图7.22



底心四方  
复晶胞



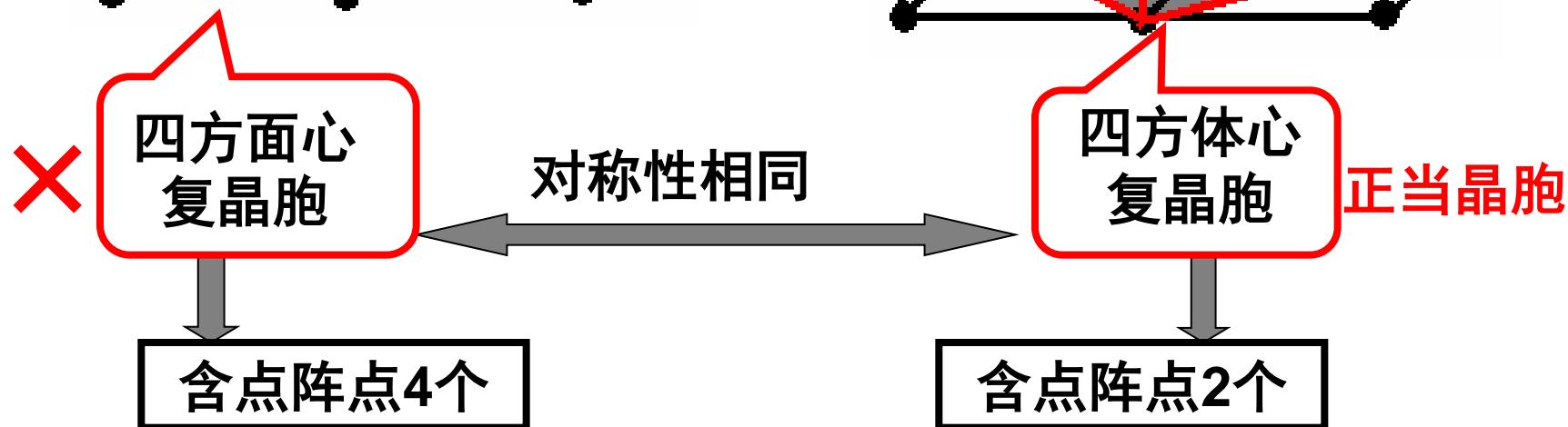
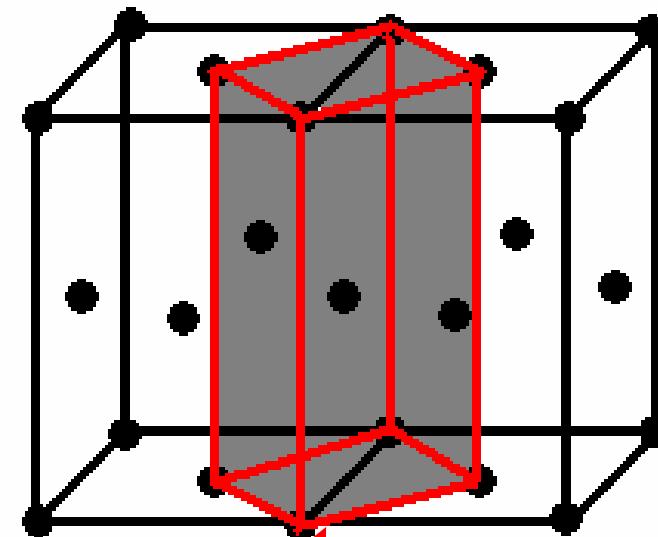
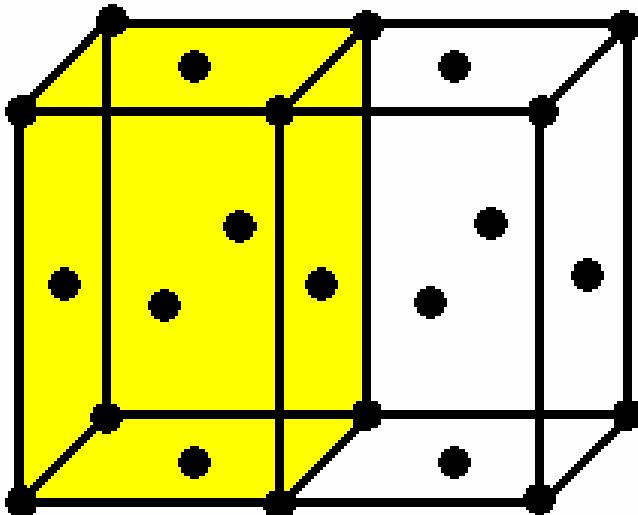
对称性相同

简单四方  
素晶胞

正当晶胞

例3：四方面心点阵

图7.22



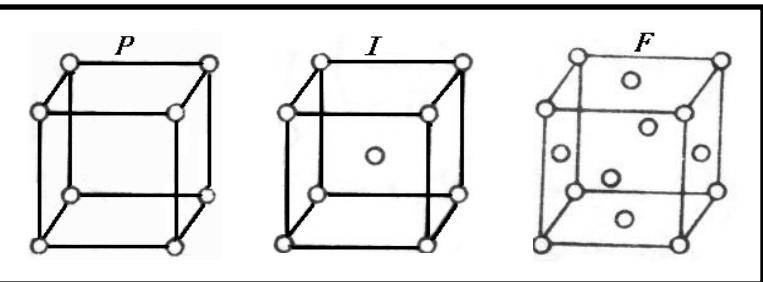


对称性高、  
含结构基元少的晶胞

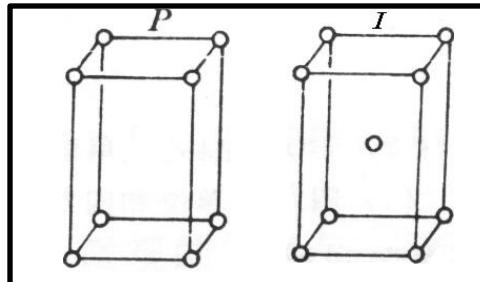
正当晶胞的选择

晶胞：7种形状14种型式

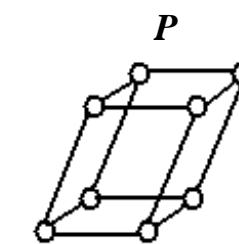
立方、三方、六方、四方、正交、单斜、三斜



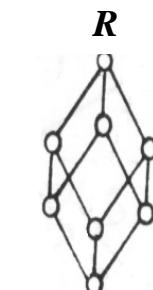
立方晶胞



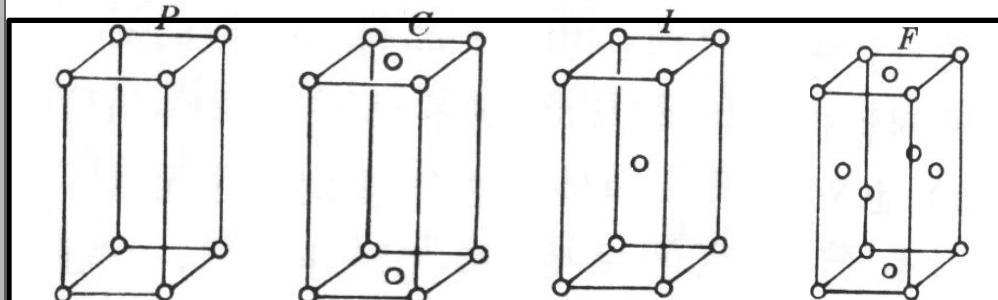
四方晶胞



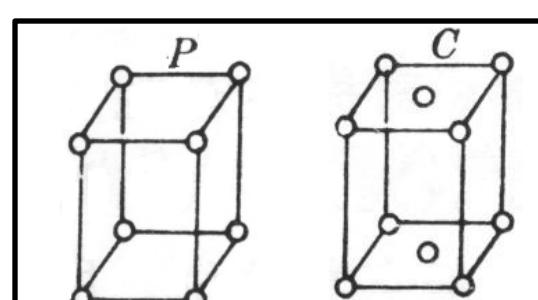
三斜晶胞



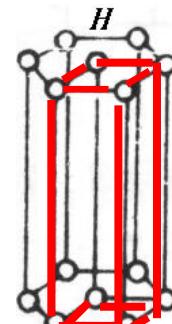
三方晶胞



正交晶胞



单斜晶胞



六方晶胞



## (2) 晶胞的二个基本要素

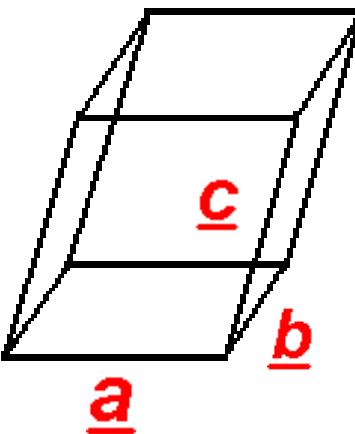
① 晶胞参数  $\rightarrow$  晶胞形状

$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$

$$\alpha = \underline{b} \wedge \underline{c}$$

$$\beta = \underline{a} \wedge \underline{c}$$

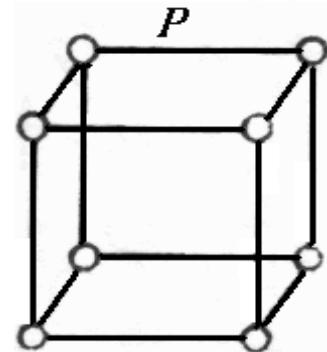
$$\gamma = \underline{a} \wedge \underline{b}$$



立方晶胞

$$a=b=c$$

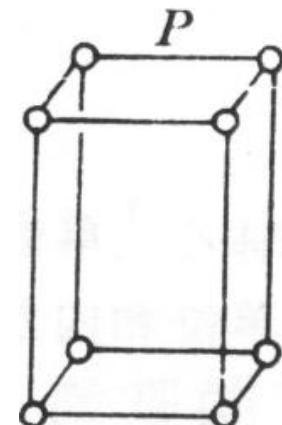
$$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$



四方晶胞

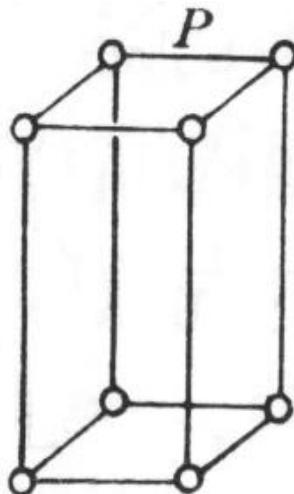
$$a=b \neq c$$

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





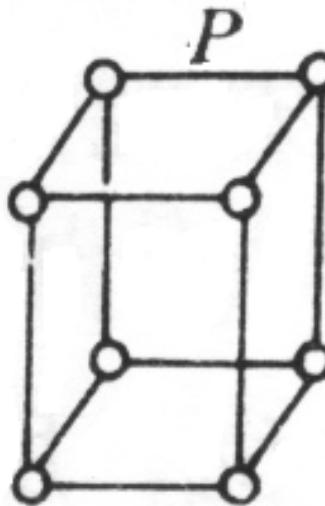
## 正交晶胞



$$a \neq b \neq c$$

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

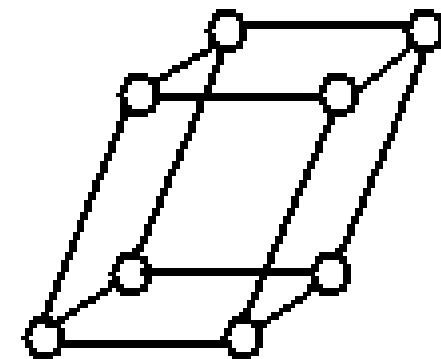
## 单斜晶胞



$$a \neq b \neq c$$

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

## 三斜晶胞

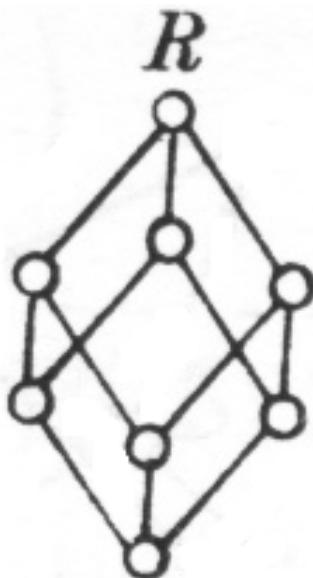


$$a \neq b \neq c$$

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



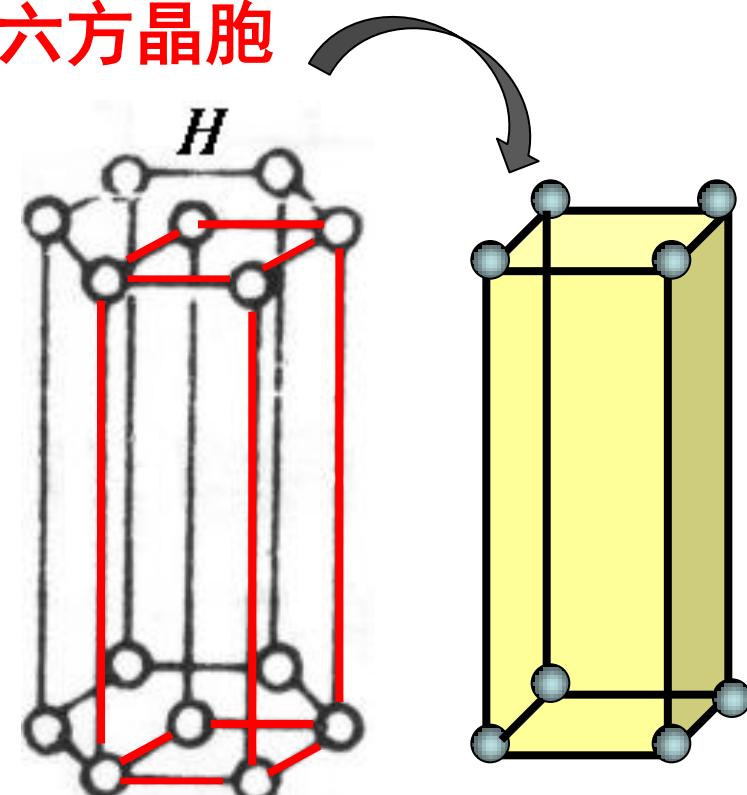
## 三方晶胞



$$a=b=c$$

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

## 六方晶胞



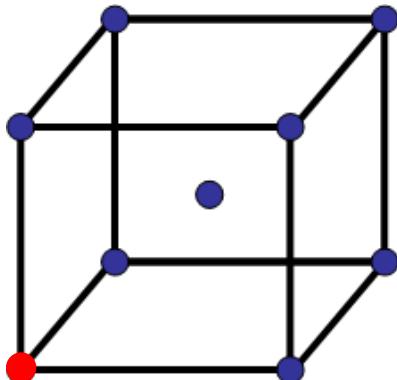
$$a=b \neq c$$

$$\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$$



## ②晶胞内各原子的位置 ← 分数坐标

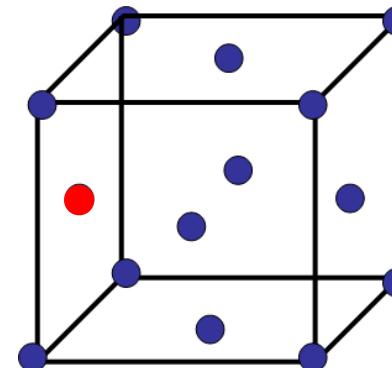
例1：某种金属，  
立方体心晶胞



含原子数为： $8 \times 1/8 + 1 = 2$

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

例2：某种金属，  
立方面心晶胞



含原子数为  $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$

$(0,0,0), (1/2,1/2,0)$   
(顶点1)  
 $(1/2,0,1/2)$   
 $(0,1/2,1/2)$   
(面心3)



例3. 某化合物属立方晶系，含Hg、Cs和Cl三种元素，  
Hg位于体心，Cs位于顶点，Cl则位于面心。

各原子的分数坐标为：

Hg: (1/2, 1/2, 1/2) ,

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

Cs: (0, 0, 0)

晶体的化学式为HgCsCl<sub>3</sub>

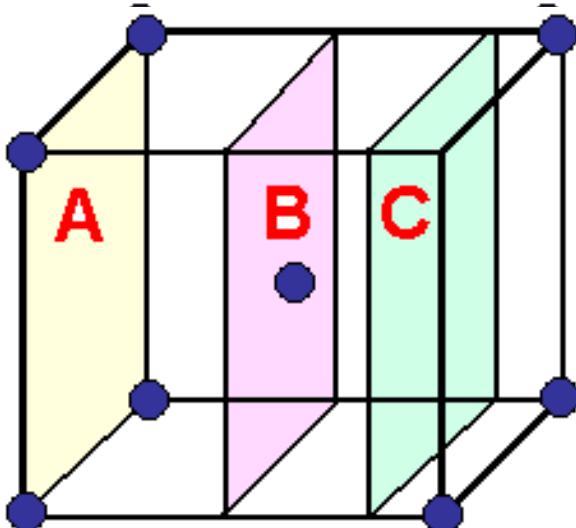


### 7.1.2.3 晶面和晶面指标

结构基元

(1) **晶面** ← 点阵点构成的平面

例1：体心立方点阵



A、B是晶面

C不是晶面



## (2) 晶面指标 (Miller指标)

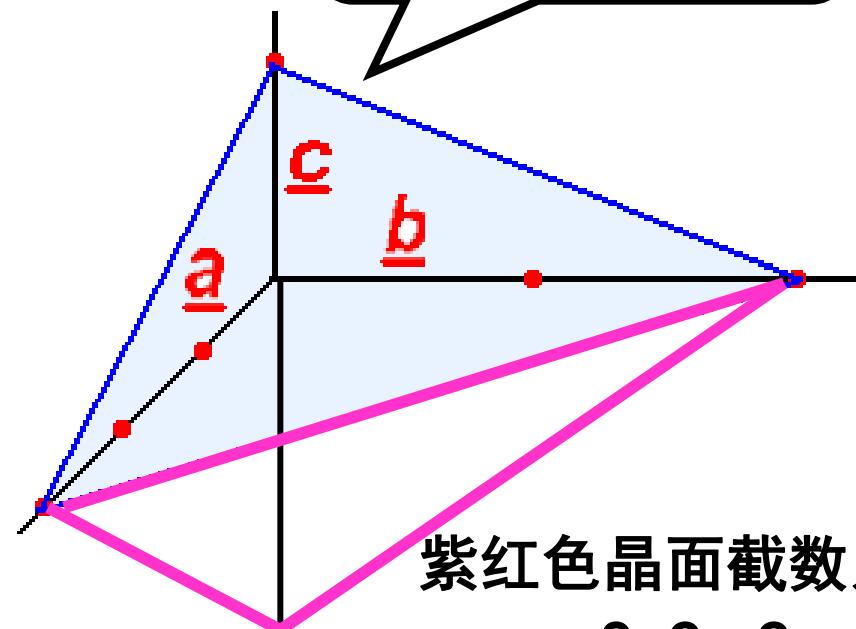
晶面在三个晶轴上的  
倒易截数的互质比

设：晶面在三个晶轴上的  
截距分别为  $h'a, k'b, l'c$

截数 —  $h', k', l'$

倒易截数 —  $\frac{1}{h'}, \frac{1}{k'}, \frac{1}{l'}$

蓝色晶面截数为：  
3, 2, 1





$$\frac{1}{h'} : \frac{1}{k'} : \frac{1}{l'} = h^* : k^* : l^* \text{ (互质比)}$$

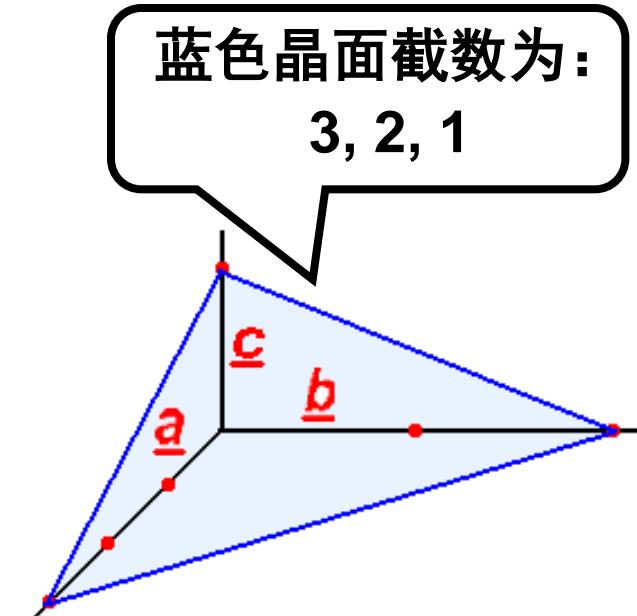
$(h^* k^* l^*)$  —— Miller指标

例1：上图，晶面截数 3, 2, 1

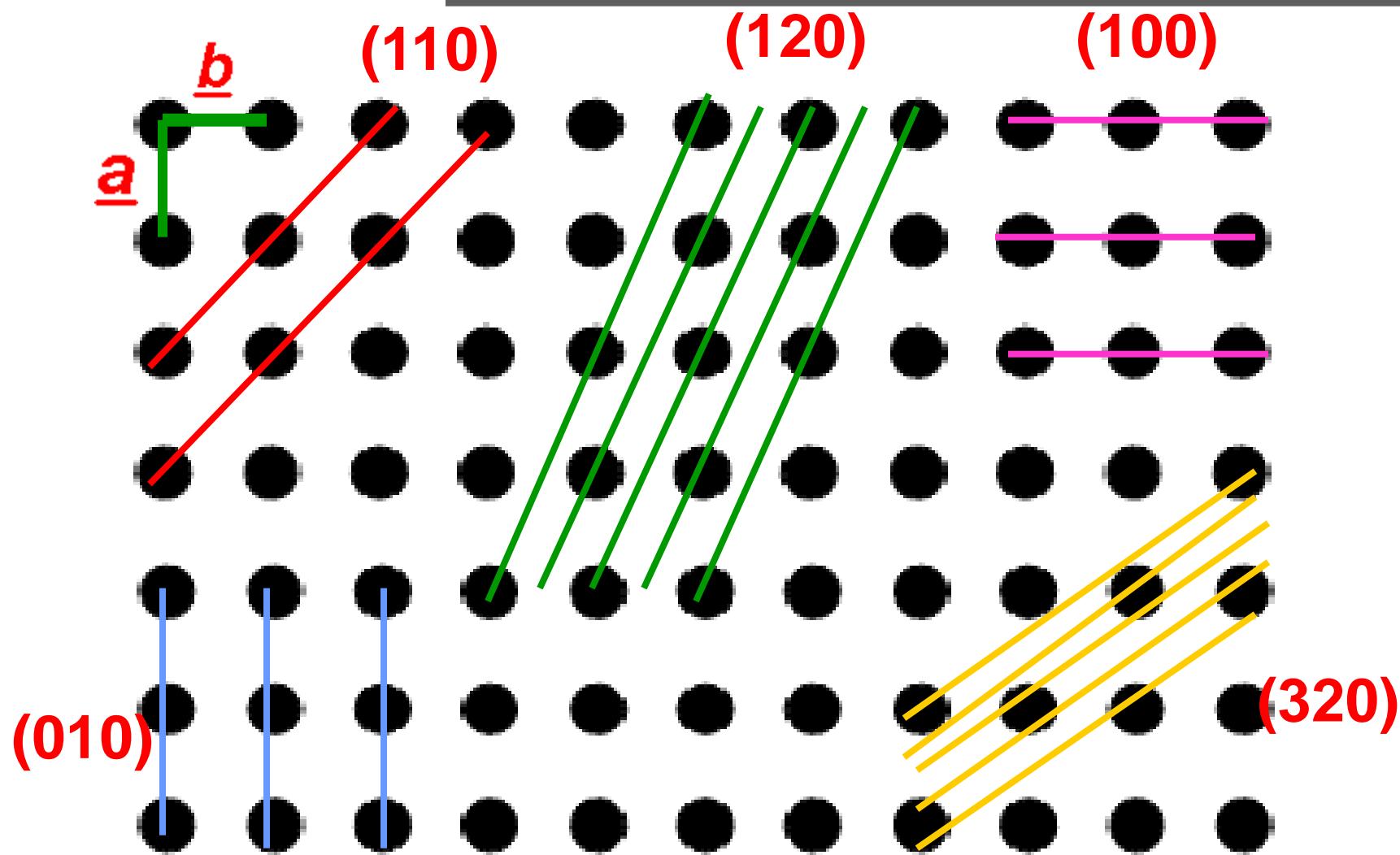
$$\frac{1}{3} : \frac{1}{2} : \frac{1}{1} = 2 : 3 : 6$$

该蓝色晶面指标为 (236)

$(h^* k^* l^*) \rightarrow$  一组平行的晶面



晶面截数: 6, 4, 2  
晶面指标: (236)

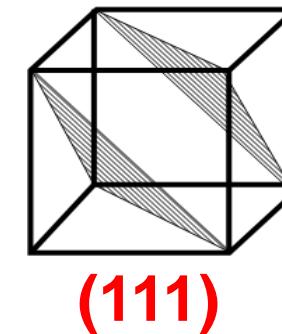
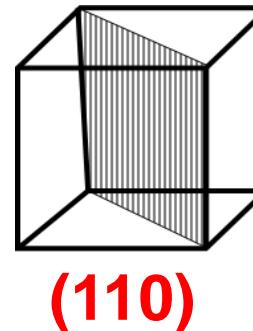
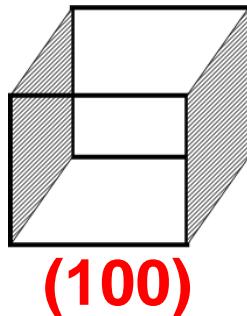
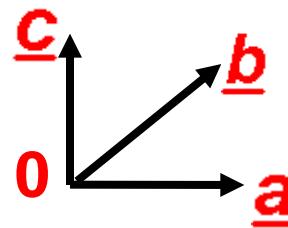


晶面指标数字↑，晶面距↓

后



## 例2：立方晶体的几组晶面指标



Notes:

①  $(h^*k^*l^*)$

$h^*=0 \rightarrow$  晶面平行于 a

$k^*=0 \rightarrow$  晶面平行于 b

$l^*=0 \rightarrow$  晶面平行于 c

② 截数为负时，加“-”，

例  $(\bar{2}\bar{3}\bar{3})$



③ $(h^*k^*l^*)$ ---等间距平行晶面

晶面间距 ( $d$ ) 一晶面 $(h^*k^*l^*)$ 中相邻的两个平面的间距。

当晶胞常数 $a$ 、 $b$ 、 $c$ 、 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 已知时, 即可用下列公式算出:

$$d = V [h^{*2} b^2 c^2 \sin^2 \alpha + k^{*2} a^2 c^2 \sin^2 \beta + l^{*2} a^2 b^2 \sin^2 \gamma]$$

$$+ 2 \underline{h^* k^*} abc^2 (\cos \alpha \cdot \cos \beta - \cos \gamma)$$

$$+ 2 \underline{k^* l^*} a^2 bc (\cos \beta \cdot \cos \gamma - \cos \alpha)$$

$$+ 2 \underline{h^* l^*} ab^2 c (\cos \alpha \cdot \cos \gamma - \cos \beta)]^{-\frac{1}{2}}$$

$$V = abc (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cdot \cos \beta \cdot \cos \gamma)^{\frac{1}{2}}$$



正交晶系:

$$d_{h^*k^*l^*} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h^*}{a}\right)^2 + \left(\frac{k^*}{b}\right)^2 + \left(\frac{l^*}{c}\right)^2}}$$

四方晶系:

$$d_{h^*k^*l^*} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h^{*2}+k^{*2}}{a^2}\right) + \left(\frac{l^*}{c}\right)^2}}$$

立方晶系:

$$d_{h^*k^*l^*} = \frac{a}{\sqrt{(h^*)^2 + (k^*)^2 + (l^*)^2}}$$

例: 某正交晶系晶胞参数为  $a=5 \text{ \AA}$ ,  $b=10 \text{ \AA}$ ,  $c=15 \text{ \AA}$

$$d_{123} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{1}{5}\right)^2 + \left(\frac{2}{10}\right)^2 + \left(\frac{3}{15}\right)^2}} \\ = 2.88 \text{ (\AA)}$$

$$d_{236} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{2}{5}\right)^2 + \left(\frac{3}{10}\right)^2 + \left(\frac{6}{15}\right)^2}} \\ = 1.56 \text{ (\AA)}$$



## § 7.2 晶体结构的对称性

晶体的对称性不同于分子的对称性。

### 7.2.1 晶体的宏观对称性 → 晶胞形状

晶体的宏观对称性又称为点对称性。因为宏观对称操作中空间至少有一点不动(点对称操作)。

#### 7.2.1.1 晶体宏观对称元素、对称操作

① 旋转轴  $n$

旋轴  $L(2\pi/n)$

顺时/逆时转

② 反映面  $m$

反映  $M$

③ 对称中心  $i$

倒反  $I$

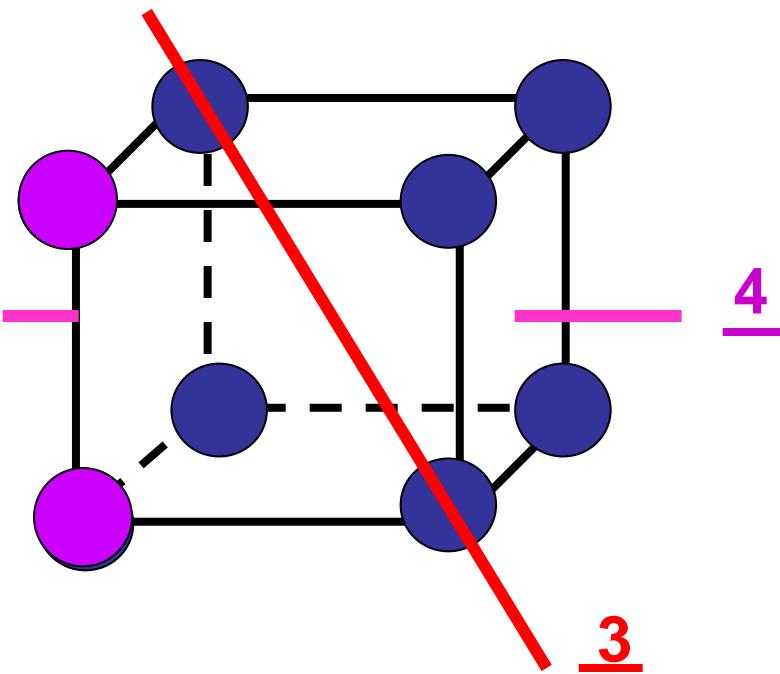
复合操作，没有先后顺序

④ 反轴  $\bar{n}$

旋转倒反  $L(2\pi/n) I$

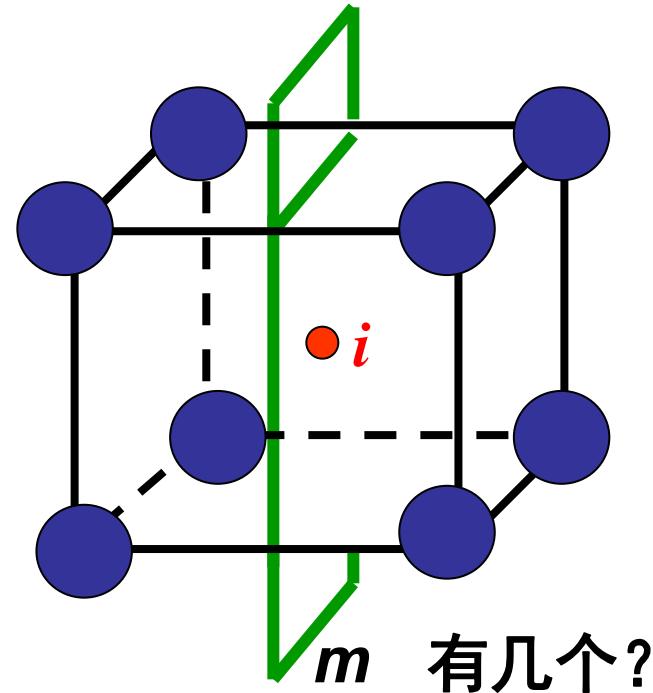


例：简单立方P格子



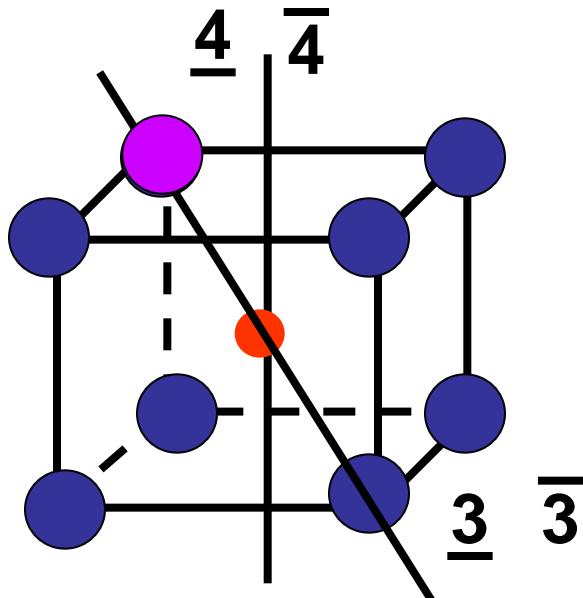
顺时/逆时转

4个3、  
3个4





$\bar{n}$  : 直线+点



穿过体心的  
直线+体心

$\bar{4}$

常见的反轴有:  $\bar{3}$ ,  $\bar{4}$ ,  $\bar{6}$

可以独立存在



理想晶体只有4次反轴。

不能独立存在

$$\bar{1} = IL \left( \frac{2\pi}{1} \right) = I$$

$$\bar{2} = IL \left( \frac{2\pi}{2} \right) = M$$

$$(\bar{3})^2 = \left( IL \left( \frac{2\pi}{3} \right) \right)^2 = \underline{3}$$

$$(\bar{3})^3 = \left( IL \left( \frac{2\pi}{3} \right) \right)^3 = I$$

$$(\bar{6})^2 = \left( IL \left( \frac{2\pi}{6} \right) \right)^2 = \underline{3}$$

$$(\bar{6})^3 = \left( IL \left( \frac{2\pi}{6} \right) \right)^3 = M$$

独立存在

$$\bar{4} = IL \left( \frac{2\pi}{4} \right) = L \left( \frac{3\pi}{2} \right) M$$

$$(\bar{4})^2 = \left( IL \left( \frac{2\pi}{4} \right) \right)^2 = \underline{2}$$

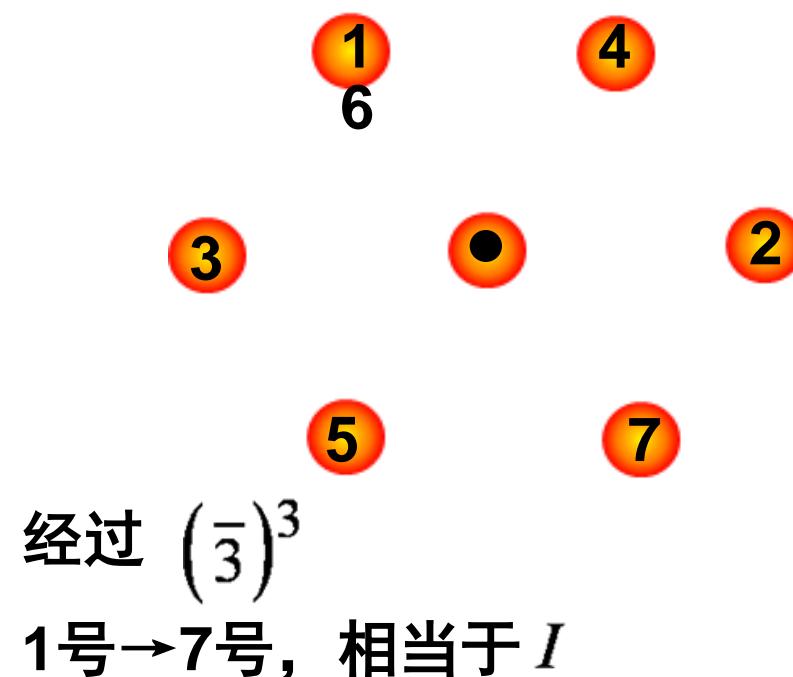
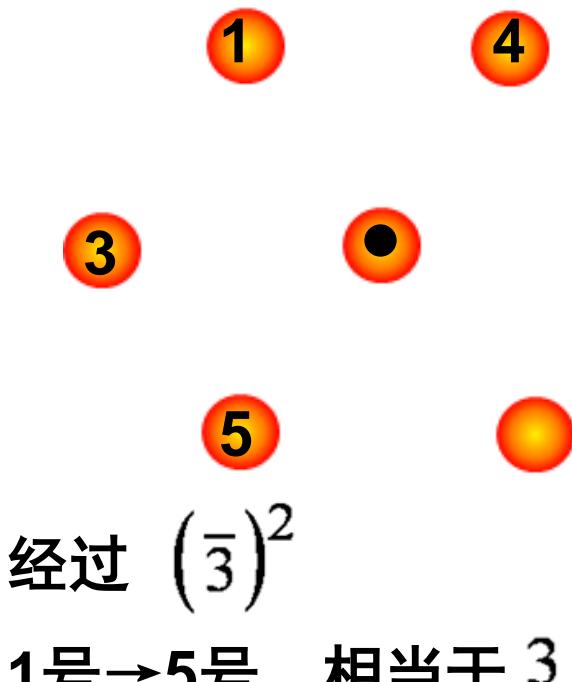
$$(\bar{4})^3 = \left( IL \left( \frac{2\pi}{4} \right) \right)^3 = L \left( \frac{\pi}{2} \right) M$$





$$\left(\bar{3}\right)^2 = \left(IL\left(\frac{2\pi}{3}\right)\right)^2 = \underline{3} \quad \left(\bar{3}\right)^3 = \left(IL\left(\frac{2\pi}{3}\right)\right)^3 = I$$

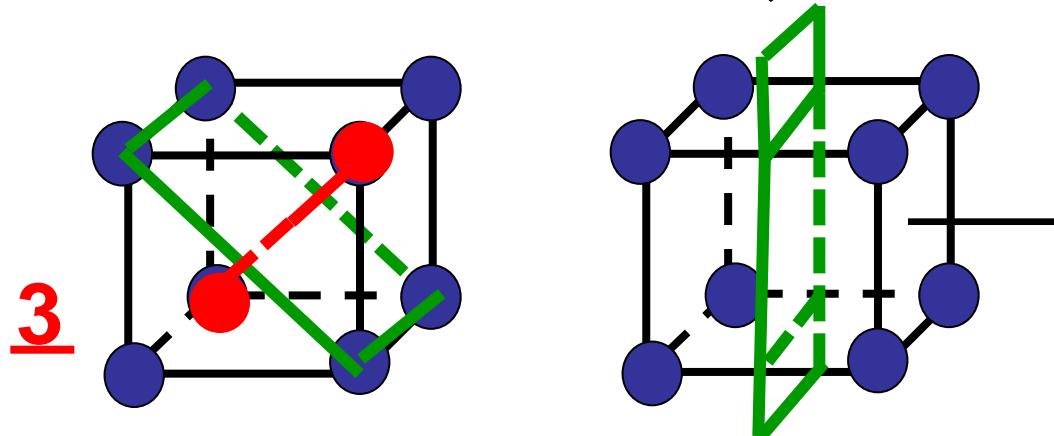
假设 3 及 I 经过  
中心的那个原子





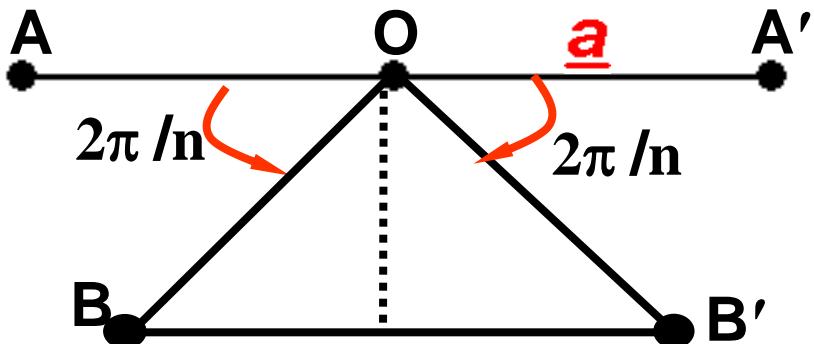
晶体的点阵结构使得晶体的宏观对称性受到限制：

- (1) 任何对称轴必与一组直线点阵对应，与一组平面点阵垂直；  
任何对称面必与一组平面点阵平行，而与一组直线点阵垂直。



- (2) 晶体中的对称轴的轴次仅限于  $n=1, 2, 3, 4$  和  $6$   
可以独立存在的宏观对称元素（四类八个）：

$i$	$m$	<table border="1"><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>6</td></tr></table>	1	2	3	4	6	$\overline{4}$	反轴
1	2	3	4	6					
		旋转轴							



n (过O)

$$BB' = m \underline{a}$$

$$ma = 2/OB/\cos(2\pi/n) = 2a \cos(2\pi/n)$$

$$m/2 = \cos(2\pi/n)$$

$$|m/2| \leq 1$$

$$m = 2, 1, 0, -1, -2$$

$$n=1,2,3,4,6$$

P182 表7.3



实际晶体上可以存在的旋转轴只有五种(1, 2, 3, 4, 6次)。  
五次和高于六次的旋转轴都不存在，  
此定律为晶体的对称定律。



 $m=2, 1, 0, -1, -2$ 

$$m/2 = \cos(2\pi/n)$$

P182 表7.3

$m$	$\cos(2\pi/n)$	$2\pi/n$	$n$
2	1	$2\pi$	1
1	$1/2$	$2\pi/6$	6
0	0	$2\pi/4$	4
-1	$-1/2$	$2\pi/3$	3
-2	-1	$2\pi/2$	2



## 7.2.2 晶体宏观对称性的分类

### 7.2.2.1 宏观对称元素的组合和32个点群

晶体中可能存在的宏观对称元素只有8种：

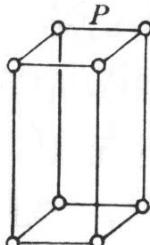
$i \ m \ \underline{1} \ \underline{2} \ \underline{3} \ \underline{4} \ \underline{6} \ \bar{4}$

一种晶体可能存在1种或多种( $\leq 8$ )宏观对称元素，相互组合，可形成32种晶体学点群。同样采用熊夫里符号表示，参见P183-184.

Notes: 晶体点群

例：晶态苯的

正交结构 $D_{2h}$



符号相似  
层次不同

分子点群

苯分子

$D_{6h}$



# 晶系的划分及32个晶体学点群（部分）

晶系	特征对称元素	晶胞类型	点群			对称元素 <sup>①</sup>
			序号	熊夫里斯记号	国际记号	
立方	4个 $\bar{3}$ 在立方体的体对角线方向	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	28	T	2 3	4 $\underline{3}, \underline{3} \underline{2}$
			29	$T_h$	$\frac{2}{m} \bar{3}$	4 $\underline{3}, \underline{3} \underline{2}, 3m, i$
			30	O	4 3 2	4 $\underline{3}, \underline{3} \underline{4}, 6 \underline{2}$
			31	$T_d$	$\bar{4} \ 3 \ m$	4 $\underline{3}, \underline{3} \underline{4}, 6m$
			32	$O_h$	$\frac{4}{m} \bar{3} \ \frac{2}{m}$	4 $\underline{3}, \underline{3} \underline{4}, 6 \underline{2}, 9m, i$
正交	二个互相垂直的 $m$ 或三个互相垂直的 $2$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	6	$D_2$	2 2 2	$\underline{3} \underline{2}$
			7	$C_{2v}$	$mm2$	$\underline{2}, 2m$
			8	$D_{2h}$	$\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	3 $\underline{2}, 3m, i$
四方	$4$	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	9	$C_4$	4	$\underline{4}$
			10	$S_4$	$\bar{4}$	$\bar{\underline{4}}$
			11	$C_{4h}$	$\frac{4}{m}$	$\underline{4}, m, i$
			12	$D_4$	4 2 2	$\underline{4}, \underline{4}, \underline{2}$
			13	$C_{4v}$	$4 \ m \ m$	$\underline{4}, 4m$
			14	$D_{2d}$	$\bar{4} \ 2m$	$\bar{4}, 2, \underline{2}, 2m$
			15	$D_{4h}$	$\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	$\underline{4}, \underline{4} \underline{2}, 5m, i$

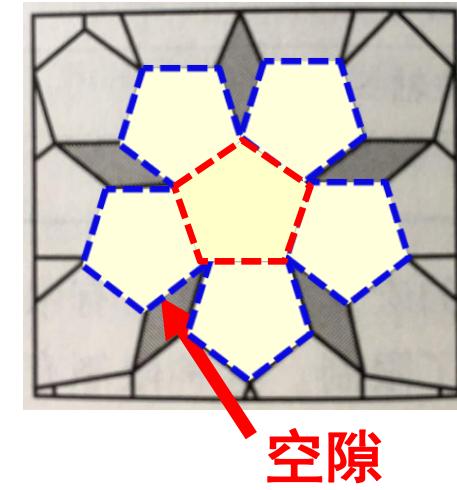


例如：二茂铁分子存在C<sub>5</sub>轴，



但是晶体中没有五重旋转轴

平面正五边形（或n≥7的正多边形）不能并置  
铺满二维平面而不留任何空隙，因此，以正五  
边形为基础的二维点阵是不存在的。



1982, Daniel Shechtman

2011诺贝尔化学奖

准晶体的结构特征是介于晶体与玻璃态非晶体之间，  
不具备完全的周期性（具有准周期性）。

X-Ray测试，显示可能存在五次、八次、十次、十二次旋转轴。

(Al<sub>62</sub>Si<sub>3</sub>Cu<sub>20</sub>Co<sub>15</sub>准晶体)



## 7.2.2.2 特征对称元素与7个晶系

32个晶体学点群正好对应于7个晶系：

立方，三方，四方，六方，正交，单斜，三斜。

同一晶系具有相同的特征对称元素。

立方，三方，四方，六方，

正交，单斜，三斜

有4个 3

3    4    6

没有高次轴

高级晶族

中级晶族

低级晶族



## 7.2.2.3 十四种空间点阵

空间正当格子只有七种形状  
(对应于七个晶系) 十四种型式。

布拉维(Bravais A) 1885 布拉维空间格子。

立方晶系：简单立方 $P$ 、体心立方 $I$ 、面心立方 $F$  ►

四方晶系：简单四方 $P$ 、体心四方 $I$  ►

正交晶系： $P$ 、 $I$ 、 $F$ 、 $C$  ►

单斜晶系： $P$ 、 $C$  ►

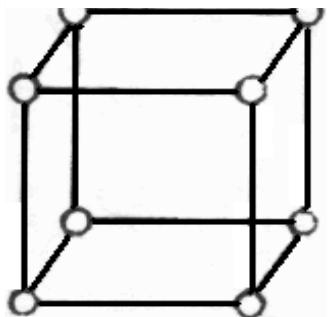
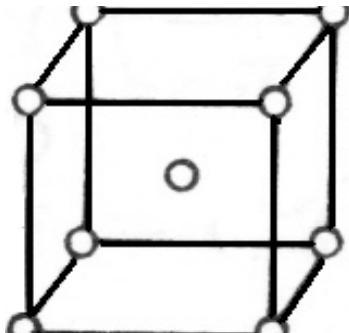
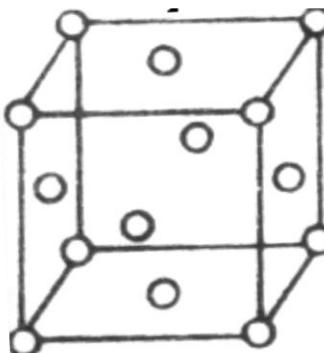
三斜晶系： $P$  ►

三方、六方晶系，分别记为 $R$ 、 $H$  ►



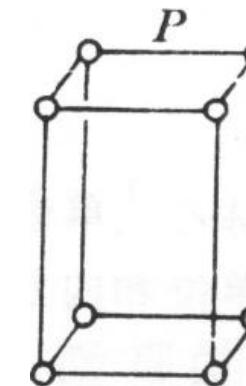
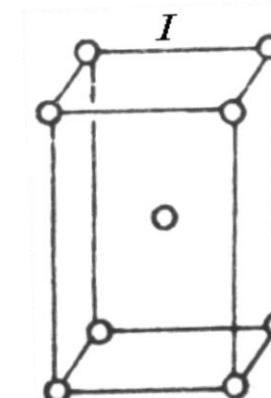
## 立方晶系

$$a=b=c \quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$

简单立方 *P*体心立方 *I*面心立方 *F*

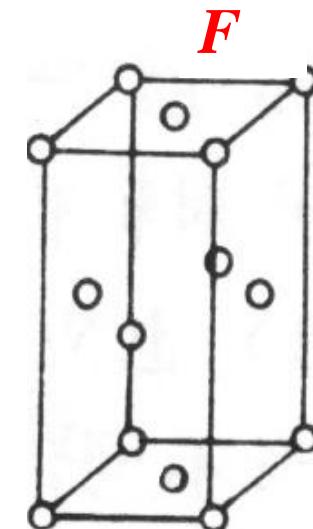
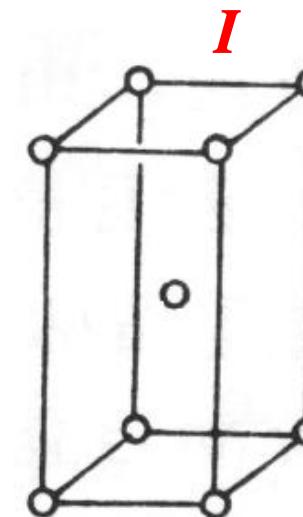
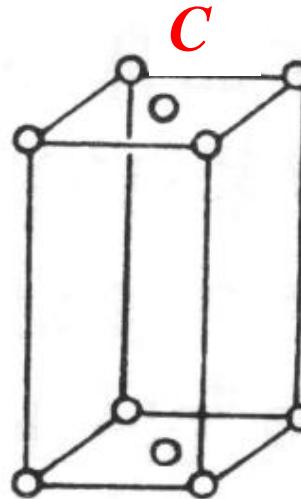
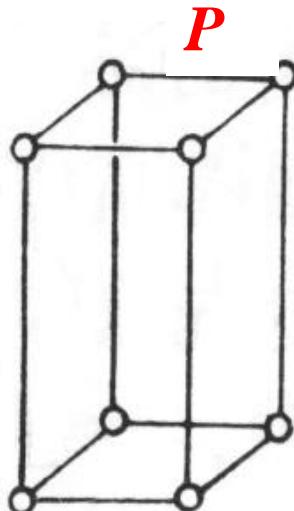
## 四方晶系

$$a=b \neq c \quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$

简单四方 *P*体心四方 *I*

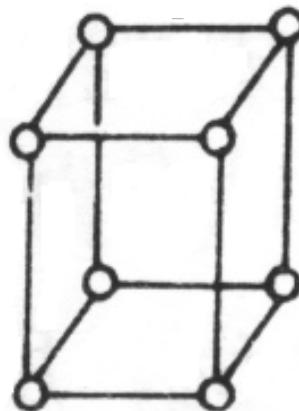
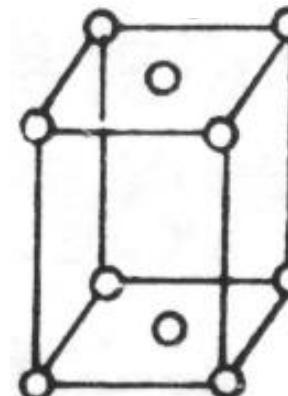


正交晶系

 $a \neq b \neq c$  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 



## 单斜晶系

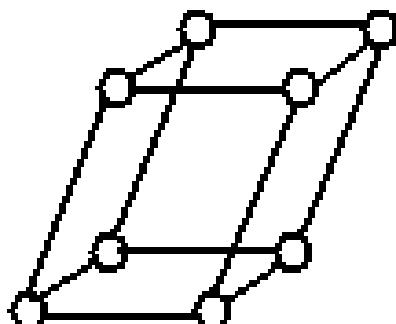
**P****C**

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ,$$

$$\beta \neq 90^\circ$$

## 三斜晶系

**P**

$$a \neq b \neq c$$

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

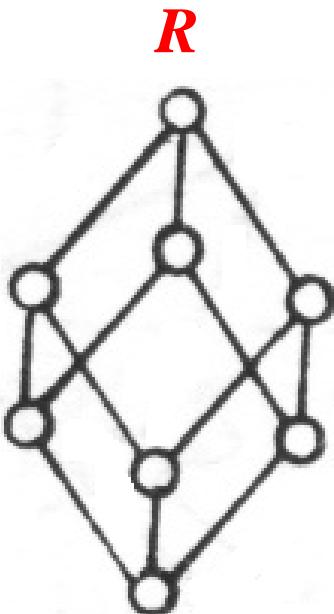




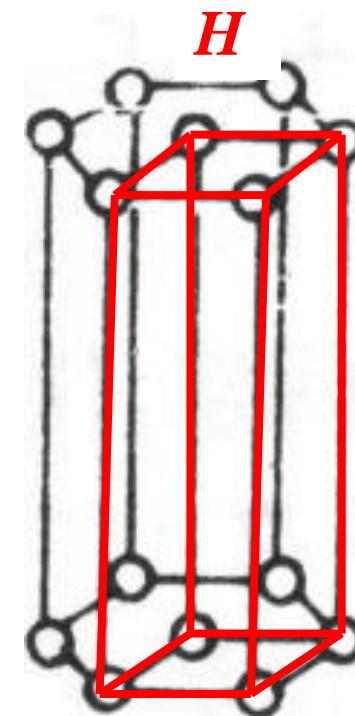
## 三方晶系

$$a=b=c$$

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



## 六方晶系



$$\begin{aligned}a &= b \neq c \\ \alpha &= \beta = 90^\circ, \\ \gamma &= 120^\circ\end{aligned}$$

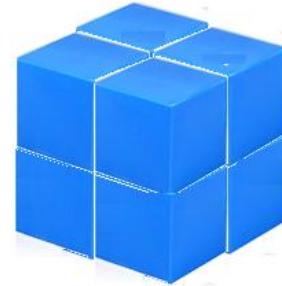


## 7.2.3 晶体的微观对称性

### 7.2.3.1 晶体的微观对称性和对称操作

**晶体的微观对称性：晶体内部点阵结构的对称性。**

晶体的微观结构对称性在宏观对称元素的基础上，**还增加了**下列三种：**平移轴、螺旋轴、滑移面。**

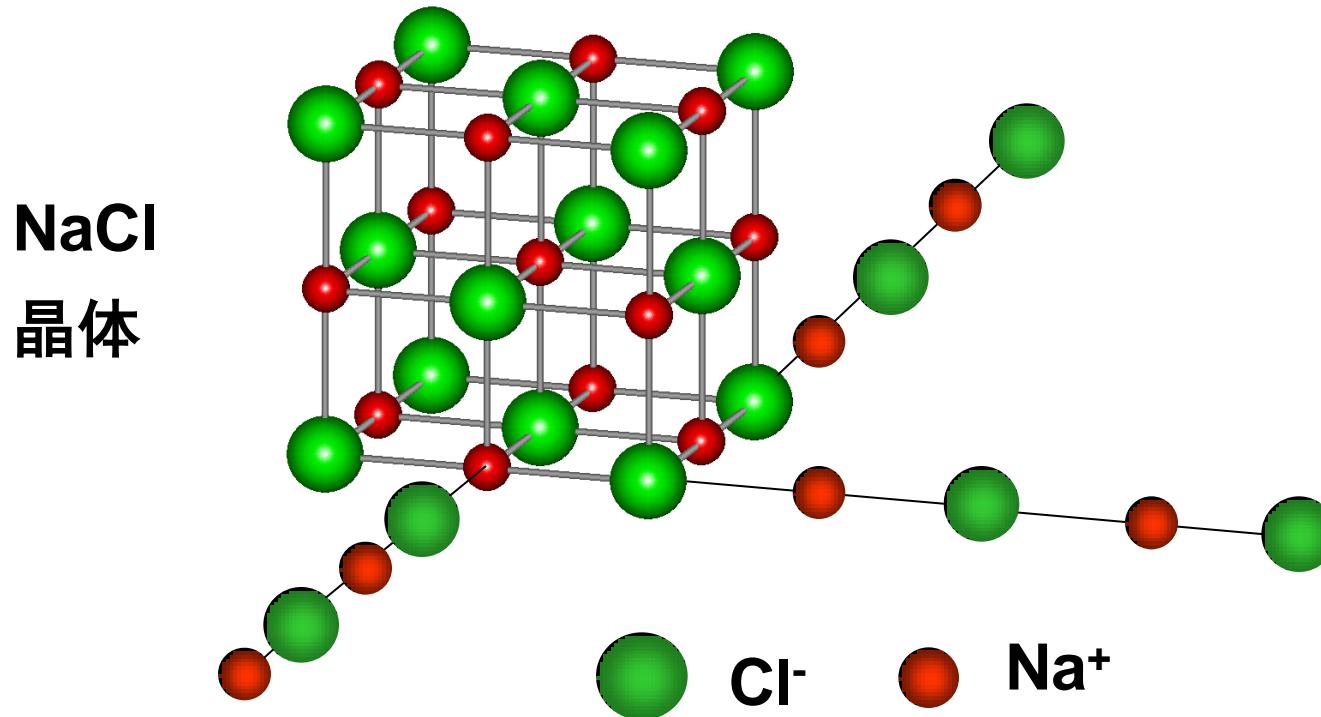


范畴	对称元素	对称操作
宏观 晶胞	镜面(反映面) 旋转轴 对称中心 反轴	反映 旋转 倒反(反演) 旋转倒反
微观 晶体观	平移轴▶ 螺旋轴▶ 滑移面▶	平移 旋转+平移(螺旋旋转) 反映+平移(滑移反映)



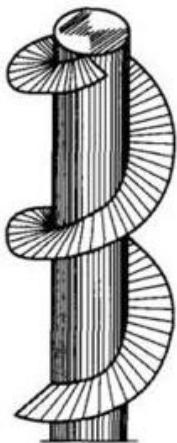


平移轴 ← 晶体中微粒周期性排列 ◀



螺旋轴— $n_s$ 

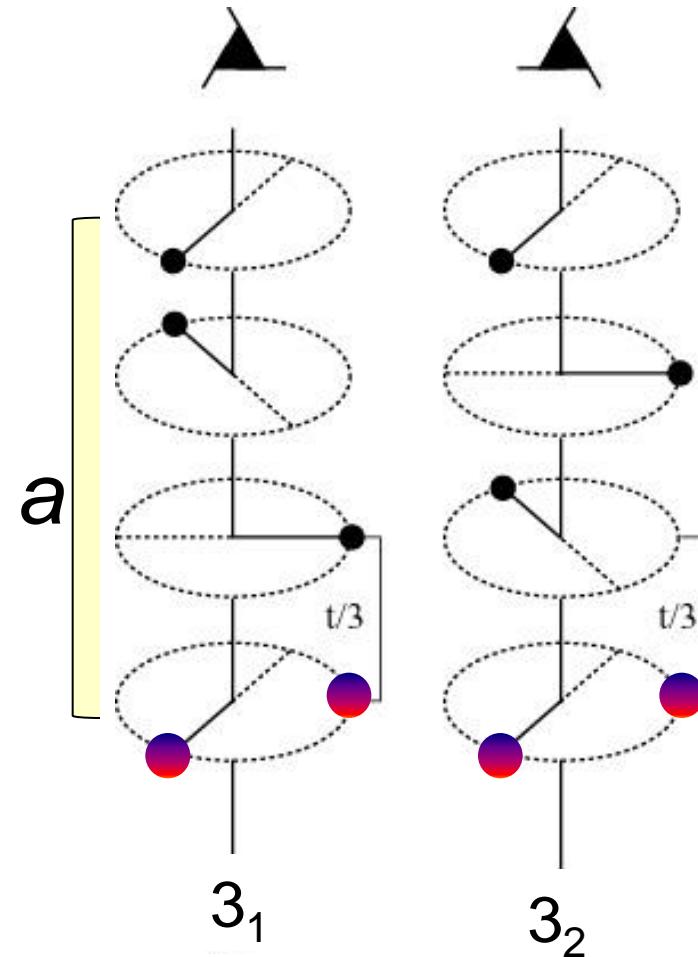
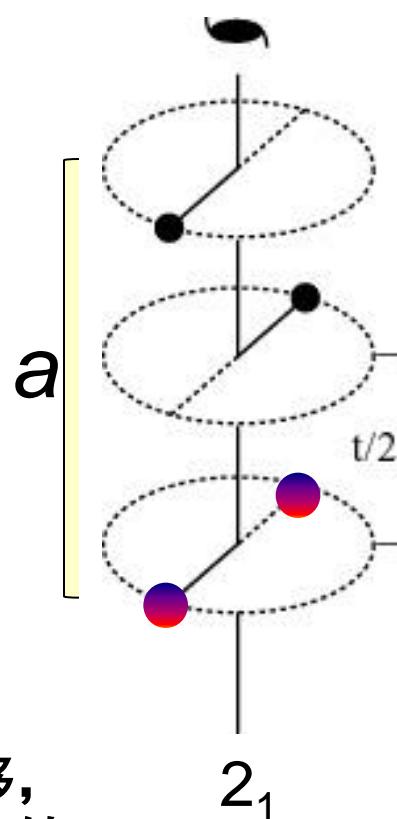
1	1	1	1
2 <sub>1</sub>	3 <sub>1</sub>	4 <sub>1</sub>	6 <sub>1</sub>
3 <sub>2</sub>	4 <sub>2</sub>	6 <sub>2</sub>	
4 <sub>3</sub>	6 <sub>3</sub>		
6 <sub>4</sub>			
6 <sub>5</sub>			



共11种

$$n_s = L(2\pi / n) \cdot T(sa / n)$$

旋转                      平移

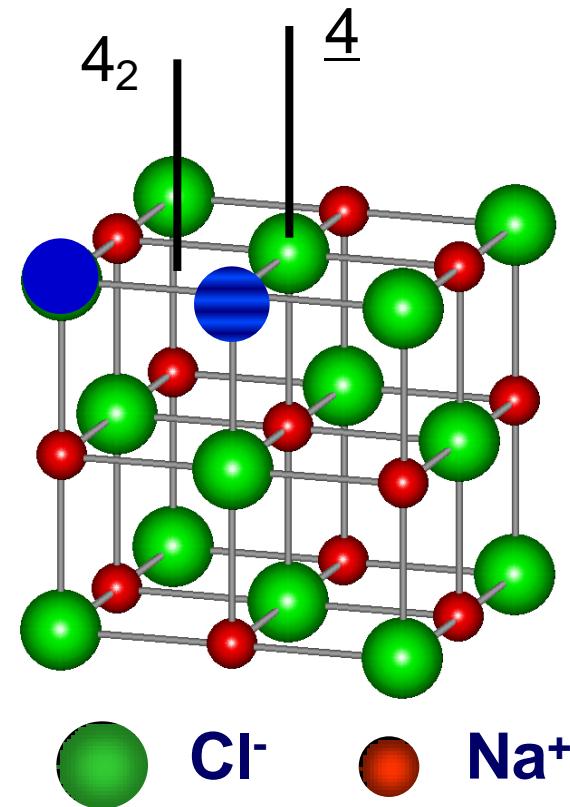


可以先绕轴旋转后平移，  
也可以先平移后绕轴旋转



微观对称性中的螺旋轴与宏观对称性  
中的旋转轴有一定的对应关系。

## NaCl晶体



若晶体宏观上有  $n$ ,  
则微观上与  $n$  平行的方向上必有一  
个或几个螺旋轴。

$$n_s = L(2\pi / n) \cdot T(sa / n)$$

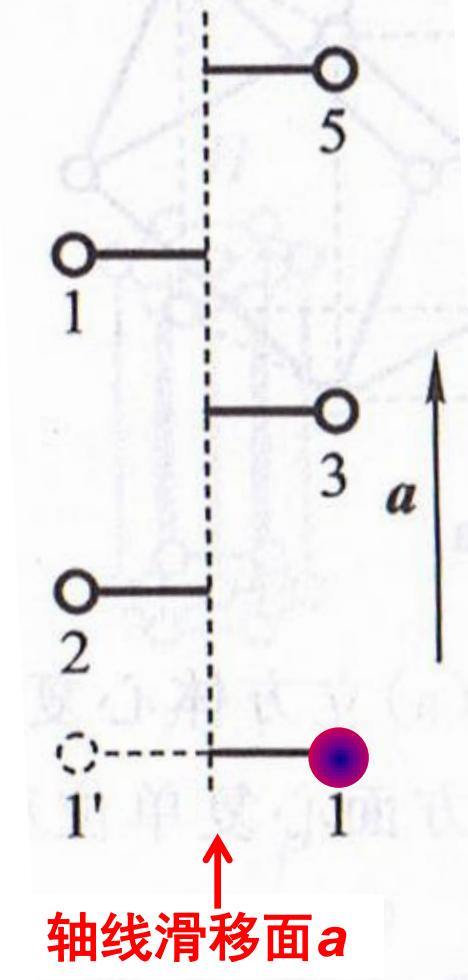
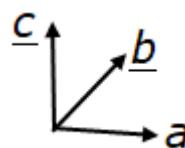
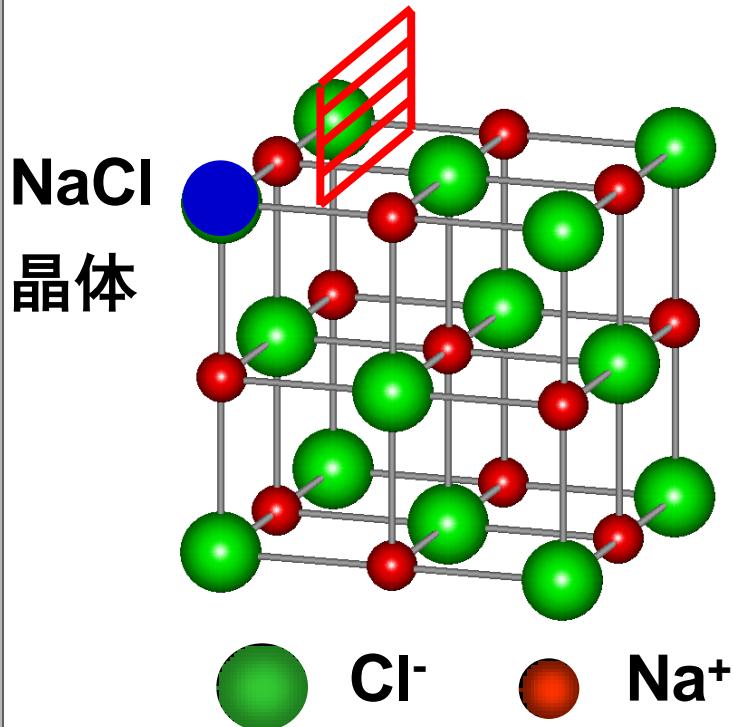


**滑移面:**由反映+平移(平移+反映)构成的符合操作。顺序无关。

1) 轴线滑移面 $a$ (或 $b$ 或 $c$ ):

反映,再沿 $a$ (或 $b$ 或 $c$ )轴

平移 $a/2$ (或 $b/2$ 或 $c/2$ )



2) 对角线滑移面  $n$ 

反映后，再平移 $a/2 + b/2$

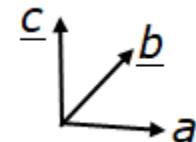
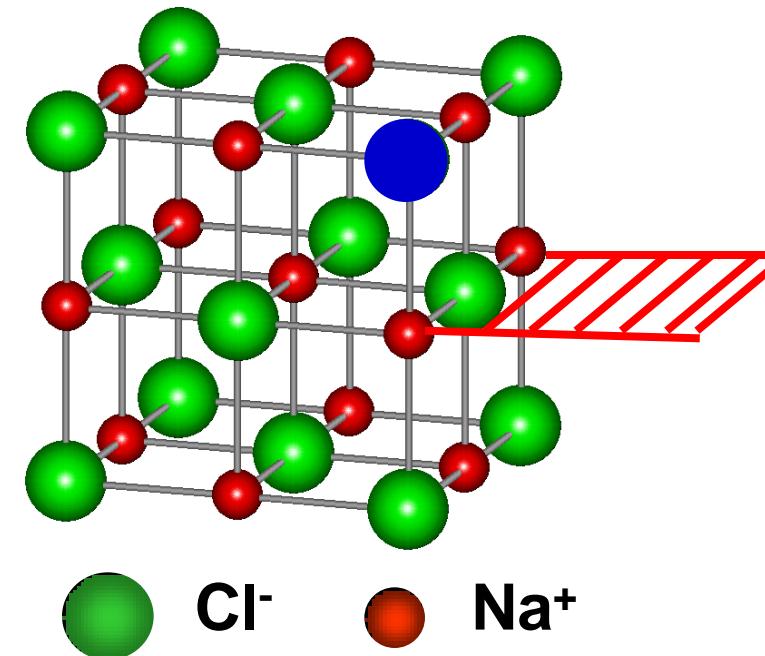
【沿a轴移动 $a/2$ ，  
沿b轴移动 $b/2$ 】

类似地，

反映后，再平移 $b/2 + c/2$

反映后，再平移 $a/2 + c/2$

NaCl 晶体





## 3)菱形滑移面d (金刚石滑移面)

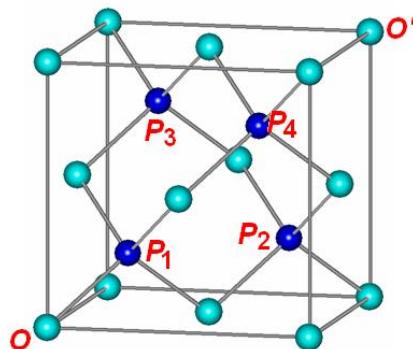
反映后，再平移 $a/4 + b/4$

【沿a轴移动 $a/4$ ，  
沿b轴移动 $b/4$ 】

类似地，

反映后，再平移 $b/4 + c/4$

反映后，再平移 $a/4 + c/4$

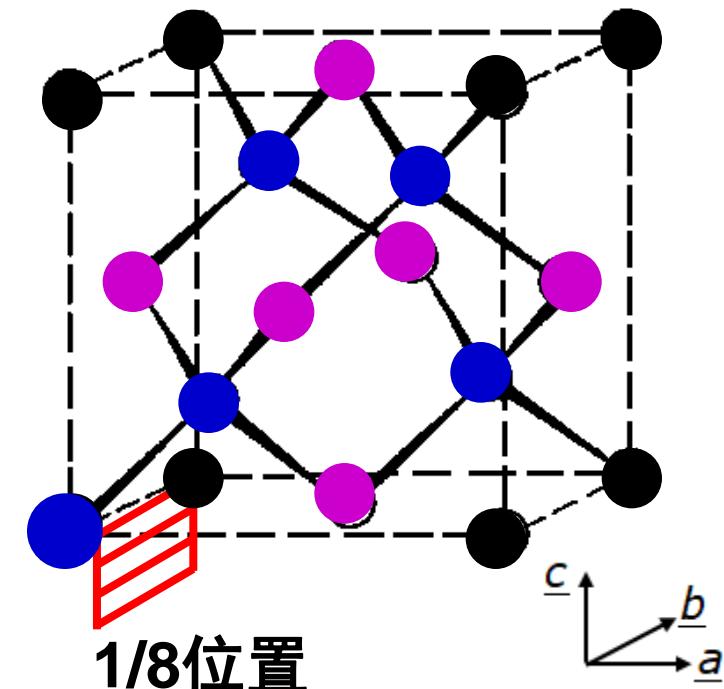


金刚石结构

体内阵点4

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

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





晶体内部结构所有对称元素的集合——空间群

微观对称元素组合，可以得到**230个空间群**( space group)。

**空间群的符号：**

包含了空间格子类型, 对称元素及其相互之间的关系。

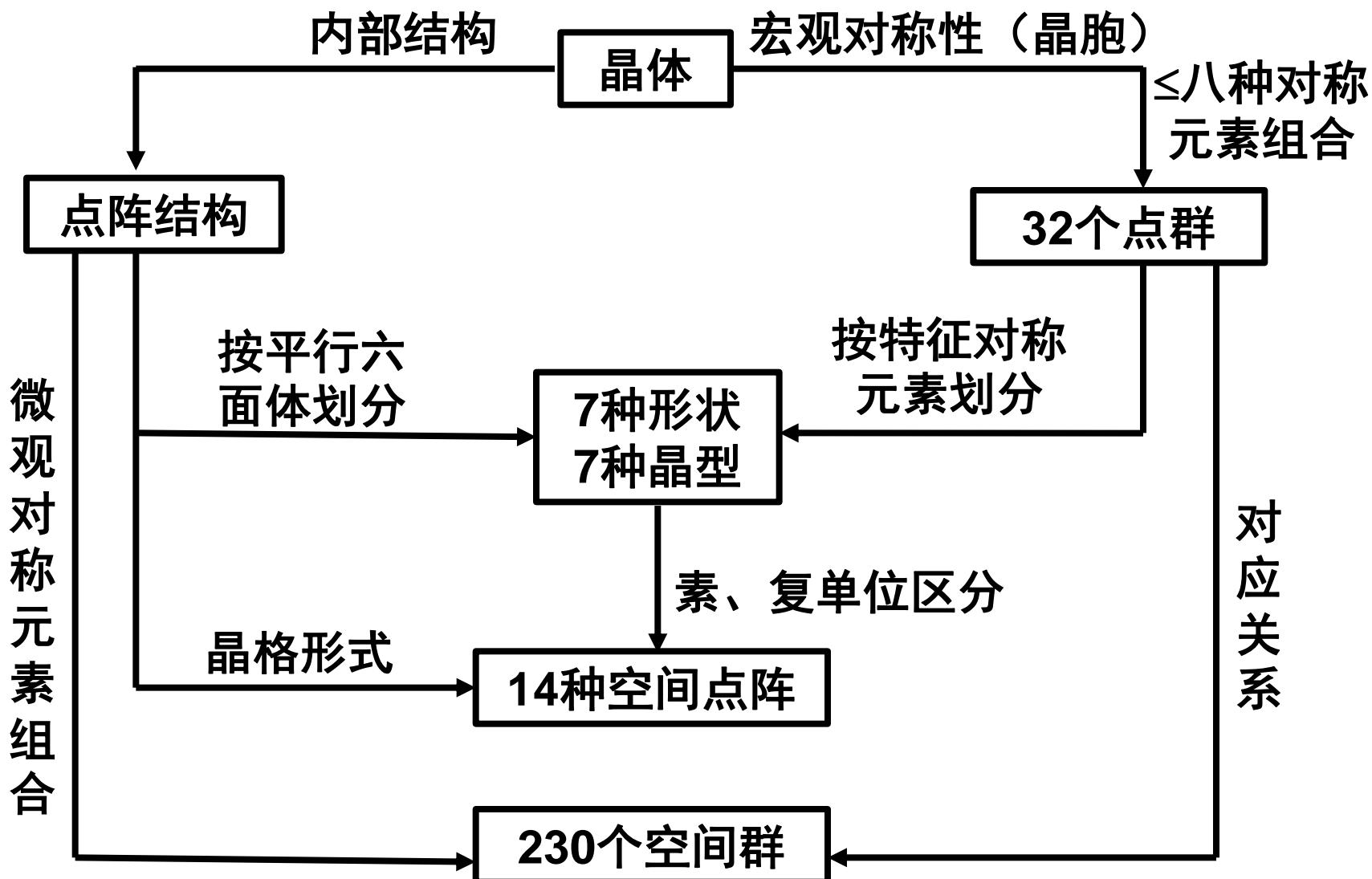
**国际符号分两个部分：**

1)前半部分是平移群的符号，即**布拉维格子的符号**，按格子类型的不同而分别用字母**P、R、I、C、F**等表示之。

2)后半部分则是**其它对称要素之集合的符号**，类似于点群符号的表达, 但有的被微观对称要素取代.

例：**P2<sub>1</sub>/m**

P表示简单P格子（平移群），2<sub>1</sub>/m表示有2次螺旋轴和镜面。





*Thank you for your attention!*

