晶体结构与衍射指标标定

20171302030 材料化学 霍丙南

#### 晶体与晶胞模型

晶体是大量微观物质单位（原子、离子、分子）按一定规则有序排列的结构，晶体都具有固定的熔点，这是区分晶态物质与非晶态物质的显著特征。对于晶体的具体研究需要建立起相应的模型，这其中就包含了最为基础的，描述晶体结构的晶胞模型。在晶胞模型中，我们把物质中的微粒抽象地看作几何上的点，称为点阵点，点阵点在空间上做周期性的排列是晶体物质内部结构的普遍特征，这也是点阵的物理含义。

点阵分为直线点阵、平面点阵与空间点阵。在晶胞模型中，我们最为常用的就是空间点阵，空间点阵就是不处于同一平面上，而是分布在三维空间的点阵成为空间点阵。在空间点阵中任意取四个不在同一个平面上的点，除此之外这四个点还需要满足无三个处于同一直线上的点。设，，，由矢量确定的平行六面体（由点的选取限制条件可得，向量，，必然线性无关，可以构成一组基矢）。而整个空间点阵，则可以看作是由这三个线性无关的向量所构成的平行六面体在空间中平移所得。当然，这组基矢的选取并不唯一。虽不唯一，但是基矢也并不是随意选取的，除了上文所说的最基本的准则外，还需要满足布拉维法则（Brarisa rule）。一旦我们选取好三个基矢，那么三个基矢之间的夹角也就确定了。我们按照标准记：

至此，通过上文六个参数即可描述出一个晶胞的结构信息，通过这六个参数，可以将晶胞划分为14中不同的类别，分别为：三斜、单斜、单斜C