

样品中晶粒的取向几乎是连续的, 因此, 总有一些面间距分别为 d_2, d_3, d_4, \dots 的晶面与入射光之间的夹角 $\theta_2, \theta_3, \theta_4, \dots$ 满足布喇格定律, 因而组合成一组同轴衍射锥。从衍射底片上看, 是一系列以 Z 为公共轴的同心圆(图 1.28(b))。

参考书: 3、4、5、17(第 5 卷)。

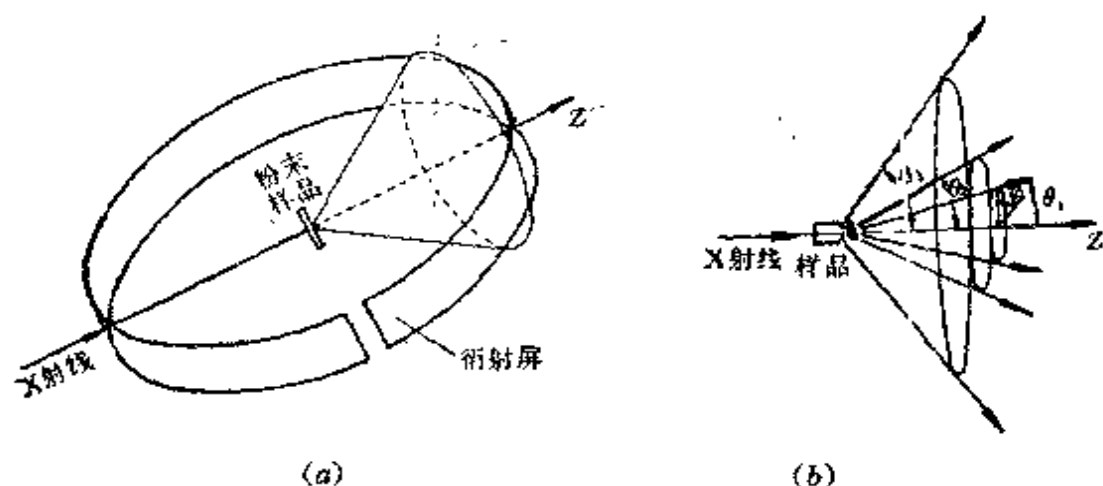


图 1.28 粉末法衍射图形成因分析

1.7 七大晶系、十四种布喇菲格子

本节不借用数学群的严格概念, 只利用对称操作及其集合的概念扼要介绍布喇菲格子分为七种晶系和十四种布喇菲格子的基本思想。

讨论晶系时, 我们可以把基本的点对称操作按从低对称性到高对称性的顺序作用于晶胞上, 然后分析对称操作的作用对晶胞基矢所施加的限制, 从而得到七种晶系。每一种晶系都有一个具有最大点群对称性的初基布喇菲格子, 通过对这个格子有心化的方法可推演出十四种布喇菲格子。关于这方面的论述读者可以参阅专门的书籍^①。考虑到教学时数的限制, 这里要介绍的是一种较为直观的阐述布喇菲格子分类的方法。

^① 例如可参阅俞文海, 周贵恩译, 固体科学中的空间群, 高等教育出版社, 1984。

下面的叙述要用到关于对称群或空间群以及点群的概念。在这里我们不阐述这一群论语言的严格涵义，只把对称群或空间群不太严格地理解为使布喇菲点阵自身重合的一组对称操作的集合，而把点群理解为固定空间格子中的一个点所形成的对称群。布喇菲格子的对称群包含有下列形式的对称操作：

1. 点阵平移操作；
2. 保持一个格点不变的点对称操作，例如转动，反演，平面反映等；
3. 上列两种形式的连续操作。

先研究如何按照点群对称性对晶格加以分类的问题。具有最高对称性的点群是立方点群 O_h ，它可看做是使一个立方体（图 1.29(a)）与自己图形重合的真转动和非真转动的对称操作的集合，

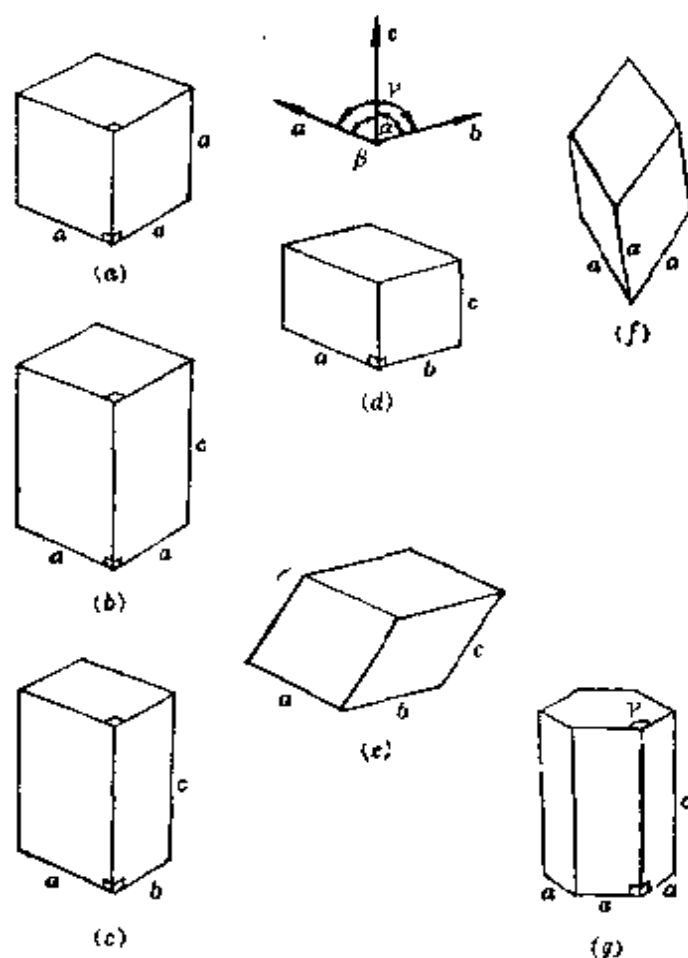


图 1.29 反映七个晶系中最高点群对称性的几何图形

它包含 24 个转动对称操作以及这 24 个转动操作与中心反演的乘积所构成的 24 个非真转动操作, 因此对称操作的总数有 48 个. 对称性稍低于 O_h 的点群是 D_{4h} , D_{2h} , 对称性最低的点群是 C_1 或 C_i . 把 D_{3d} 和 D_{6h} 点群划为另一类(和这些点群对称性相应的宏观图形见下文分析). 现在我们按高对称性到低对称性的顺序(即从 O_h 到 C_1 或 C_i)分析布喇菲格子在这些点群的作用下其晶胞基矢应满足的要求, 然后再考虑 D_{3d} 和 D_{6h} 点群对布喇菲格子的限制. 通过这样的分析可得到七种晶系. 我们将看到, 每一晶系与一套决定布喇菲格子结构的晶胞基矢的选择(包括基矢长度和相互间的夹角)相对应. 每一套基矢的配置决定了一个几何图形, 它同晶系的最高点群对称性的宏观图形(参见表 1.1 和图 1.29)相对应, 该图形所具有的对称操作的集合构成该晶系的最高对称性的点群(参见表 1.1). 因此每一个晶系有一个点群表示它的最高的对称性, 七个晶系所对应的, 描写它的最高对称性的点群, 就是在属于该晶系的点群系统中对称性最高的点群, 详见表 1.1. 从对称性的角度考虑晶格分类时, 如所考虑的除了点群对称操作外, 还包括平移操作以及两者的连续操作时, 则空间格子将具有 14 种不同的空间群, 对应于 14 种不同的布喇菲格子. 这 14 种格子给出在空间格子中格点间各种可能的平移关系. 在布喇菲格点上置放适当的基元, 便得到相应的晶体结构. 晶体结构有 32 种晶体点群. 考虑平移操作后, 空间群由原来的 14 种增加到 230 种. 下面扼要介绍布喇菲点阵分为七大晶系和 14 种布喇菲格子的基本思想.

1. 立方晶系

具有最高对称性的点群是立方点群 O_h . 以 O_h 群作为晶系的最高对称性的点群, 则该晶系属立方晶系, 其晶胞基矢应满足的条件见表 1.1. 该基矢所决定的宏观几何图形(见图 1.29(a))具有 O_h 对称性, 该图形是立方晶系的初基晶胞(简单立方(P)). 考虑平

表 1.1 七个晶系的有关特性

晶系	布喇菲格子	对称性最高的点群	该点群所对应的图形	晶胞基矢特性
立方晶系	简单立方(P) 体心立方(I) 面心立方(F)	O_h	1.29(a)	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
四方晶系	简单四方(P) 体心四方(I)	D_{4h}	1.29(b)	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=\frac{\pi}{2}$
正交晶系	简单正交(P) 底心正交(C, A, B) 体心正交(I) 面心正交(F)	D_{2h}	1.29(c)	$a \neq b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=\frac{\pi}{2}$
单斜晶系	简单单斜(P) 底心单斜(C, A)	C_{2h}	1.29(d)	$a \neq b \neq c$ $\alpha=\beta=\frac{\pi}{2} \neq \gamma$
三斜晶系	简单三斜(P)	C_1	1.29(e)	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \frac{\pi}{2}$
三方晶系	三方(R)	D_{3d}	1.29(f)	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$ ($<120^\circ$)
六方晶系	六方(P)	D_{6h}	1.29(g)	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\frac{\pi}{2}$ $\gamma=120^\circ$

点阵符号规定如下:

P : 初基, I : 体心, F : 面心, C, A, B : 底心, R : 菱形, C, A, B 代表底心点阵, C, A, B 分别表示晶轴 a, b, c ; c, a 所在的平面中心有一个格点.

I 代表体心点阵, 其符号来自德文 "Innenzentrierte" 的第一个字母 "I".

移对称操作后, 立方晶系存在三种布喇菲点阵, 即简单立方 (sc) (P), 体心立方 (bcc) (I), 面心立方 (fcc) (F), 见图 1.20. 它们具有不等价的对称群, 但具有相同的立方点群 O_h .

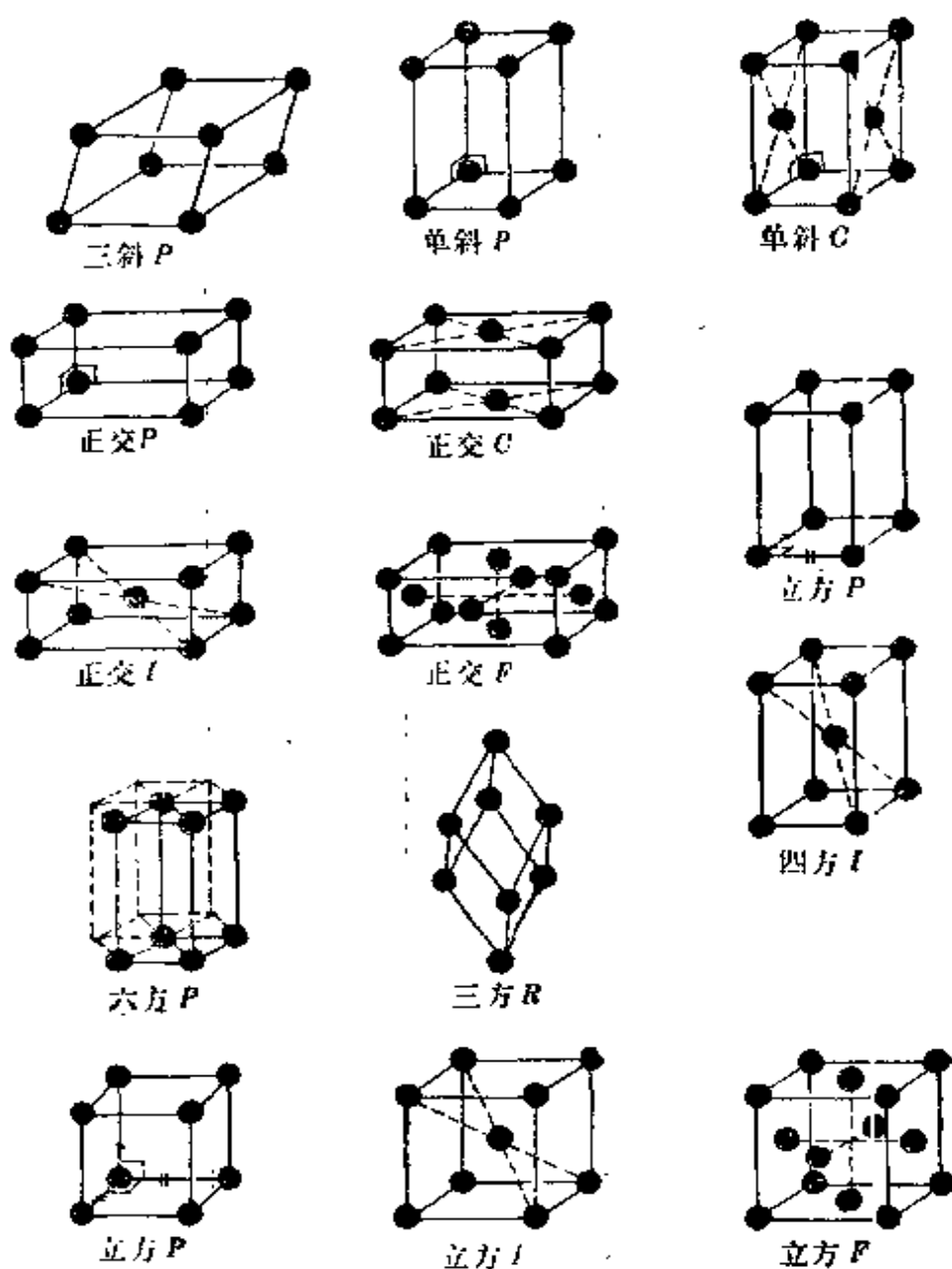


图 1.30 14 种布喇菲格子

2. 四方晶系

现在考虑 D_{4h} 群对布喇菲格子的限制。具有 D_{4h} 点群对称性的几何图形如图 1.29(b) 所示。可设想该图形是从图 1.29(a) 演变而来的。将具有 O_h 对称性的立方体沿垂直方向(c 方向)伸长, 使高度不等于底边, 但保持底边为正方形, 对称图形从具有 O_h 对称性的立方体变为如图 1.29(b) 所示的图形, 它的对称性降低, 具

有 D_{4h} 的点群对称性。以 D_{4h} 群作为晶系的最高对称性的点群，则该晶系属四方晶系，其晶胞基矢应满足的条件见表 1.1。该基矢所决定的宏观几何图形(即图 1.29(b))是四方晶系的初基晶胞(简单四方(P))，考虑平移对称性后，四方晶系存在两种布喇菲格子，即简单四方(P)，体心四方(I)。体心四方与面心四方是等价的，这两种格子只能算是一种布喇菲格子，图 1.31 说明其等价性。

图 1.31(a)代表向 c 轴俯视所观察到的格点分布。格点②距离由格点①组成的晶面 $C/2$ 处。如 $C=a$ ，点阵为 bcc。对于已伸长的 bcc, $c \neq a$ ，它是体心四方点阵。

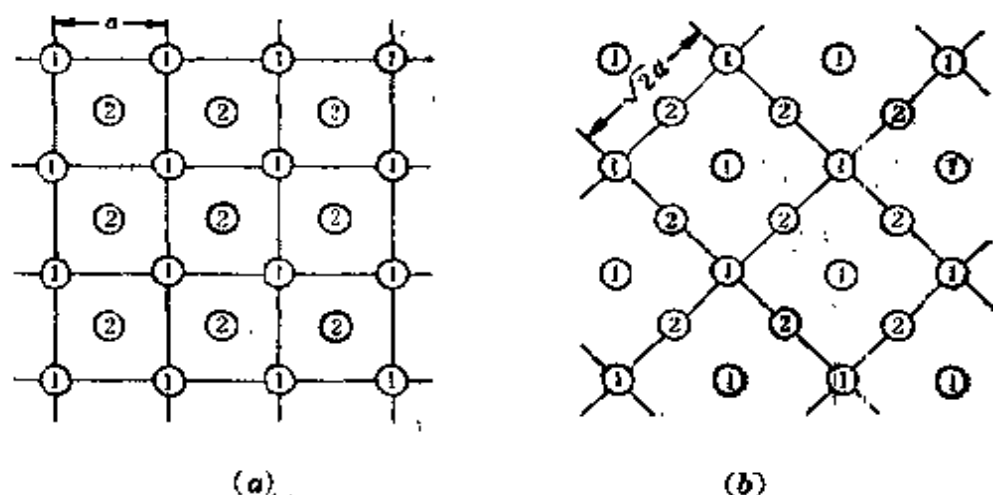


图 1.31 沿 c 轴方向观察到的体心四方点阵的格点分布

图 1.31(b)与 1.31(a)代表同样的点阵，只是观察角度不同。图中①构成四方面心格点，面心格点间的距离 $a' = \sqrt{2}a$ 。如 $C = \frac{a'}{2} = \frac{a}{\sqrt{2}}$ ，则点阵为 fcc。对于一般的 C 值，图 1.31(b)是 fcc 沿 c 轴伸长后的点阵。因此，相同的点阵从图 1.31(a)看是四方体心，从 1.31(b)看是四方面心，因此两种格子只能算一种。

3. 正交晶系

将反映四方晶系最高点群对称性的图形(图 1.29(b))变形，使底面的正方形变成为长方形，并保持相互垂直的三边不等长，可得

到对称性低于四方晶系的图形(图 1.29(c)), 该图形具有 D_{2h} 的点群对称性. 以 D_{2h} 群作为晶系的最高对称性的点群, 则该晶系属正交晶系. 其晶胞基矢应满足的条件如表 1.1 所示, 该基矢所决定的宏观几何图形(即图 1.29(c))是正交晶系的初基晶胞(简单正交(P)). 考虑平移对称性后, 正交晶系有四种布喇菲格子, 即简单正交(P), 底心正交(C, A, B), 体心正交(I), 面心正交(F). 四种点阵具有不等价的对称群, 但具有相同的点群对称性. 将简单四方底面的正方形格子(图 1.32(a))变化为长方形格子(如图 1.32(b)), 然后逐层堆砌, 可得到简单正交格子. 把同样的格子(图 1.32(a))视为面心格子(图 1.32(c)), 使它沿(a)图的面对角线变形, 成为图 1.32(d)所示的长方形底心点阵, 然后逐层堆积, 可得底心正交格子. 同样, 如将四方体心格子(图 1.31(a))沿某一平行晶列拉伸, 可得到体心正交格子. 将图 1.31(b)沿某一平行晶列拉伸, 可得到面心正交格子.

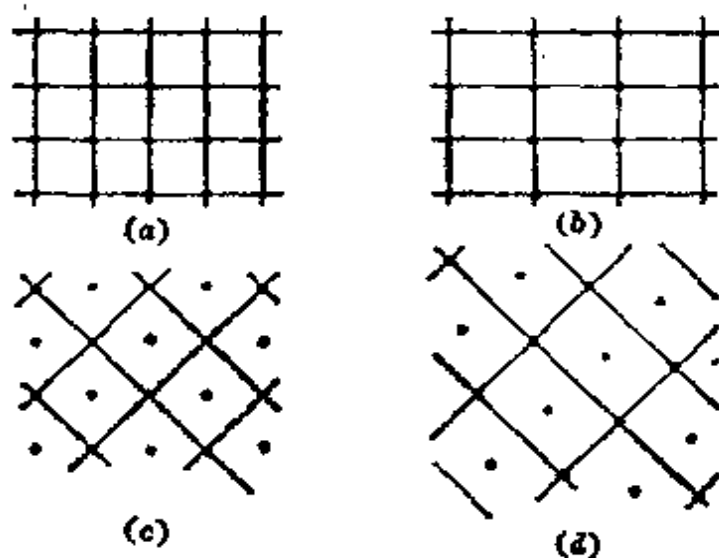


图 1.32 (a)简单四方格子, (b)将图(a)沿平行晶列拉伸, 得简单正交格子(c). 图(a)也可看成面心格子, (d)将图(c)拉伸得到底心正交格子

4. 单斜晶系

把反映正交晶系最高点群对称性的图形(图 1.29(c))变形,

使底面从正方形变为平行四边形, 但保持 c 轴与底面垂直, 可得到对称性低于正交晶系的图形(图 1. 29(d)), 该图形具有 C_{2h} 的点群对称性。 C_{2h} 群是描写单斜晶系最大对称性的点群, 该晶系的晶胞基矢应满足的条件如表 1. 1 所示。 考虑平移对称性后, 单斜晶系有简单单斜(P)和底心单斜(C , A)两种布喇菲格子。 这两种格子是由简单正交和底心正交格子按上述方法变形而得到的。

5. 三斜晶系

将简单单斜格子的晶胞(图 1. 29(d))变形, 使 c 轴与底面倾斜一个角度, 不再与底面垂直, 可得到如图 1. 29(e)的图形, 它是对称性最低的布喇菲格子, 只有反演对称性。 根据布喇菲格子的定义, 它是任何布喇菲格子必定具有的一个对称操作。 三斜晶系对晶胞基矢没有任何要求。

到此我们已获得七个晶系中的五个以及 14 种布喇菲格子中的 12 种, 另外两种晶系可通过如下方法获得。

6. 三方晶系

现在我们考虑 D_{3d} 点群对称性对布喇菲格子的限制。 将立方体沿任一面对角线方向拉伸, 三个直角变化为三个相等的锐角, 而所有边长保持不变, 得到如图 1. 29(f)所示的对称图形, 该图形具有 D_{3d} 点群对称性。 将该图形作为晶胞, 并把它重复堆砌, 所得到的布喇菲格子属三方晶系, 其晶胞基矢应满足的要求见表 1. 1。 很明显, D_{3d} 是描写三方晶系最大对称性的点群, 该晶系只有一种布喇菲格子。

7. 六方晶系

最后考虑 D_{6h} 点群对布喇菲格子的限制。 底面为正六角形的直角棱柱具有 D_{6h} 的点群对称性, 该图形是六方晶系的晶胞, 如图 1. 29(g) 所示, 晶胞基矢的选择见表 1. 1。 D_{6h} 是描写六方晶系最高对称性的点群, 该晶系只有一种布喇菲格子。