

## 1.3.5 三维布拉维晶胞

布拉维晶胞实际上是一种对称化晶胞，选取布拉维晶胞的原则是：

(1) 选择的平行六面体应能代表整个空间点阵的对称性。

(2) 平行六面体中有尽可能多的相等的棱和角。

(3) 平行六面体中有尽可能多的直角。

(4) 在满足上述三条件下，选取体积最小的平行六面体。

结晶学中，属于立方晶系的布拉维胞有简单立方、体心立方和面心立方三种，如图1.9所示。

立方晶系的三个基矢长度相等，且互相垂直

$$\mathbf{a} = \mathbf{b} = \mathbf{c}, \mathbf{a} \perp \mathbf{b}, \mathbf{b} \perp \mathbf{c}, \mathbf{c} \perp \mathbf{a}$$

布拉维原胞的基矢沿晶轴方向，取晶轴作为坐标轴，用 $i$ 、 $j$ 、 $k$ 表示坐标系的单位矢量。

书中图1-8，1-9为立方晶系的布拉维原胞和晶胞的示意图。

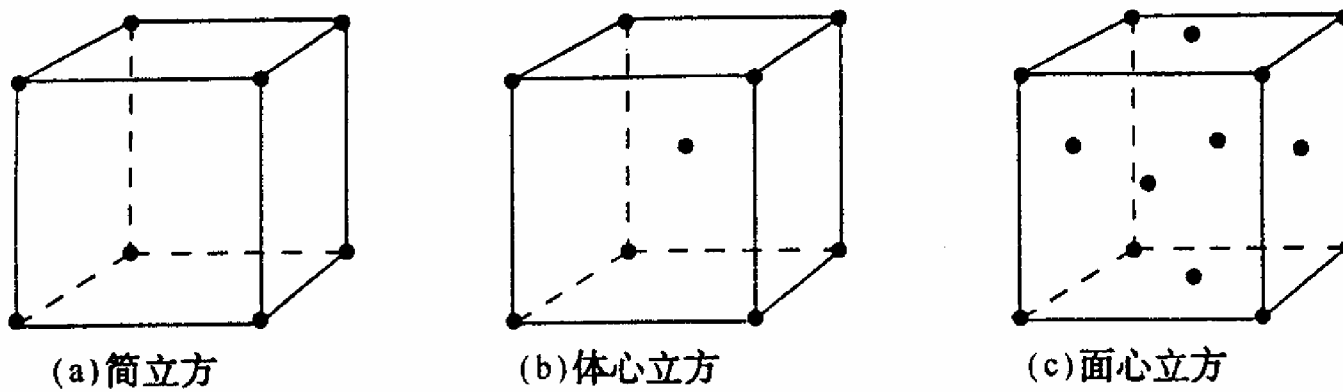


图1.8 立方晶系布拉维原胞

### 1. 简立方

原子位于边长为 $a$ 的立方体的8个顶角上。每个原子为8个晶胞所共有，对一个晶胞的贡献只有 $1/8$ ；晶胞的8个顶点上的原子对一个晶胞的贡献恰好是一个原子，这种布拉维晶胞只包含一个原子，即对于简立方，原胞和晶胞是一致的。

# 第一章 晶体结构

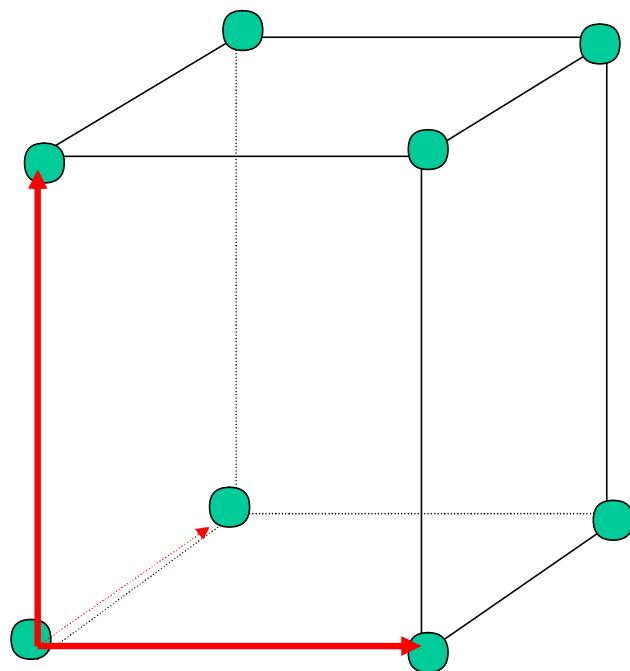


图3 简单立方的布拉维原胞示意图

简立方原胞的基矢为：

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_2 = a\mathbf{j}, \quad \mathbf{a}_3 = a\mathbf{k}$$

## 2.体心立方

除立方体顶角上有原子外，还有一个原子在立方体的中心，故称为体心立方。将体心立方沿体对角线平移，可知顶角和体心上原子周围的情况相同。由于晶胞中包含两个原子，而固体物理要求布拉维原胞中只包含一个原子，因此原胞采用如图1.9 (a) 的方法选取。



# 第一章 晶体结构

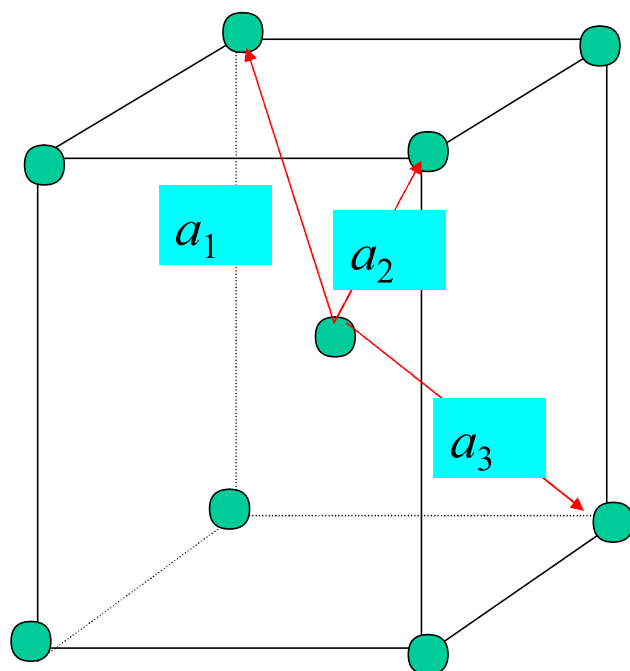


图9 (a) 体心立方的布拉维原胞示意图

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}(-\mathbf{a} + \mathbf{b} + \mathbf{c}) = \frac{a}{2}(-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{a} - \mathbf{b} + \mathbf{c}) = \frac{a}{2}(\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k})$$

$$\mathbf{a}_3 = \frac{1}{2}(\mathbf{a} + \mathbf{b} - \mathbf{c}) = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k})$$

$$\Omega = a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = \frac{1}{2} a^3$$

$a$ 是晶胞的边长，又称晶格常数。

因为晶胞包含两个原子或对应两个格点，原胞包含一个原子或对应一个格点，因而原胞体积为晶胞体积的一半。

## 3. 面心立方

这种结构除顶角上有原子外，在立方体的六个面的中心处还有6个原子，故称为面心立方。

沿面的对角线平移面心立方结构，可以证明面心处原子与顶角处原子周围的情况相同。每个面为两个相邻的晶胞所共有，因此面心立方的晶胞具有4个原子。

# 第一章 晶体结构

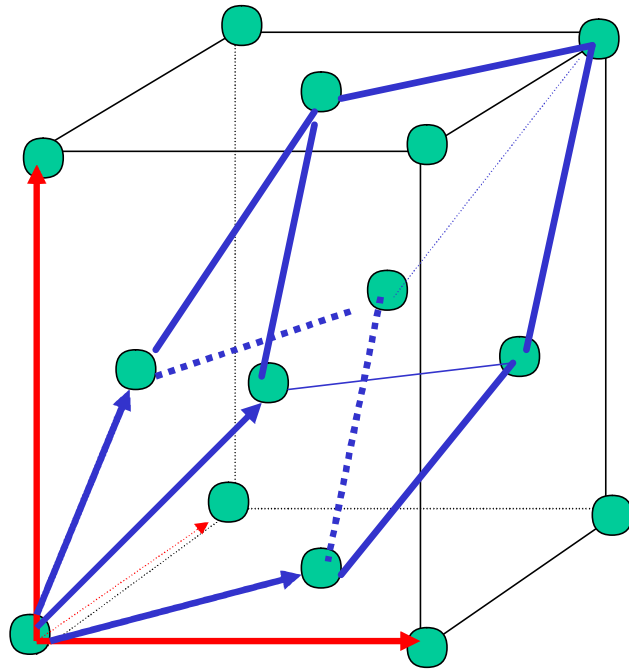


图2 面心立方的布拉维原胞和晶胞示意图

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}(\mathbf{b} + \mathbf{c}) = \frac{a}{2}(\mathbf{j} + \mathbf{k})$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{c} + \mathbf{a}) = \frac{a}{2}(\mathbf{k} + \mathbf{i})$$

$$\mathbf{a}_3 = \frac{1}{2}(\mathbf{a} + \mathbf{b}) = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j})$$

$$\Omega = a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = \frac{1}{4} a^3$$

原胞中只包含一个原子

## 4. 布拉维晶胞

法国晶体学家Bravais（1811~1863）在考虑了对称性的情况下，用数学方法证明空间点阵只有14种：7种初基点阵和7种有心点阵。

根据对称性，这14种布拉维晶格（Bravais Lattice）可以分为七大类或七大晶系（crystal system）、三十二种点群。



# 第一章 晶体结构

对称性	晶系	布拉维晶胞类型	符号
低级	三斜 ( <b>triclinic</b> ) $a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma$	简单三斜	<b>P</b>
	单斜( <b>monoclinic</b> ) $a \neq b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	简单单斜 底心单斜	<b>P</b> <b>C</b>
中级	正交 ( <b>orthorhombic</b> ) $a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单正交 底心正交 体心正交 面心正交	<b>P</b> <b>C</b> <b>I</b> <b>F</b>

# 第一章 晶体结构

对称性	晶系	布拉维晶胞类型	符号
中级	四方 ( <b>tetragonal</b> )	简单四方 体心四方	<b>P</b> <b>I</b>
	$a=b \neq c; \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 六方( <b>hexagonal</b> ) $a=b \neq c;$ $\alpha=\beta=90^\circ \gamma=120^\circ$	简单六方	<b>P</b>
	三方 ( <b>rhombohedral</b> ) $a=b=c; \alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	简单三方	<b>R</b>

# 第一章 晶体结构

对称性	晶系	布拉维晶胞类型	符号
高级	立方 ( <b>cubic</b> ) $a=b=c; \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单立方 体心立方 面心立方	<b>P</b> <b>I</b> <b>F</b>

平均结点数为**1**的称为初基胞或简单胞，记作**P**。

平均结点数大于或等于**2**的称为非初基胞。

处于六面体中心的称为体心胞，记作**I**；  
如果四边形中心各有一个点，称为面心胞，记作**F**；

只有上、下层中心各一个结点称为底心胞；

如果底心面相应的轴是**c**轴，则记作**C**；

相应的轴是**b**轴，记作**B**；

相应的轴是**a**轴，则记作**A**。

三角晶系的晶胞为一类，记作***R***。

在标记晶体结构类别时，经常采用**P**、**I**、**F**、**R**、**C**（或**A**，或**B**）等布拉维点阵符号（**Bravais Lattice Notation**, 简写为**BLN**）。

由于选取布拉维晶胞时尽量考虑了对称性，所以在计算一些结晶学参数时可以简化公式，分析计算也较方便，它已是人们历来惯用的体系。

现在绝大多数的晶体结构数据就是按这个体系整理出来的。

## 6. W-S原胞

在能带计算中也常选用另外一种原胞，即维格纳-赛茨（**Wigner-Seitz**）原胞，简称**WS**原胞。**WS**原胞是以晶格中某一格点为中心，作其与近邻的所有格点连线的垂直平分面，这些平面所围成的以该点为中心的凸多面体即为该点的**WS**原胞。



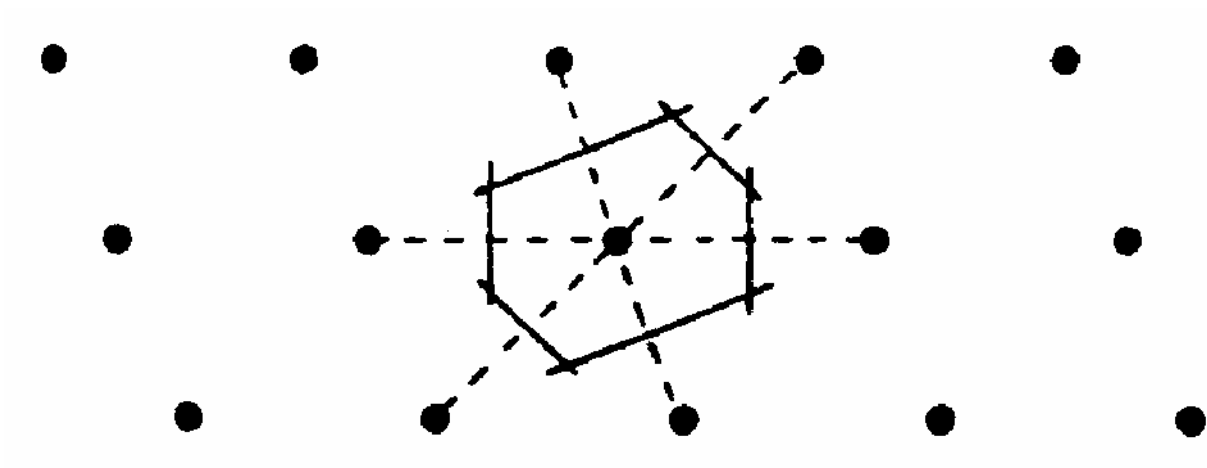


图1.11 一个格点的WS原胞

由于WS原胞的构造中不涉及对基矢的任何特殊选择，因此，它与相应的布拉维晶胞有完全相同的对称性，又称对称化原胞。

## § 1.4 密堆积与配位数

### 1.4.1 密堆积

原子在晶体中的平衡位置处结合能最低，因此原子在晶体中的排列应该采取尽可能的紧密方式。

晶体中原子排列的紧密程度，可以用原子周围最近邻的原子数来表述，这个数称为配位数。

原子排列的愈紧密，配位数愈大。

### 1.4.2 密堆积结构

把全同小球平铺在平面上，使任一个球都和6个球相切，每三个相切的球的中心构成一等边三角形，且每个球的周围有6个空隙，这样构成的平面，称为密排面。

第二层也是同样的密排面，但要注意的是由于在每个球周围同一平面上只有相间的3个空隙的中心，第二层的小球要放在第一层相间的3个空隙里，这会构成又一个等边三角形。

第二层的每个球和第一层相应位置的三个球紧密相切。第三层也为密排面，但第三层的堆法有两种，从而决定了密堆积结构也有两种。

**Spheres are arranged in a single closest packed layer A by placing each sphere in contact with six others.**

**This layer may serve as either the basal plane of an hcp structure.**

**A second similar layer B may be added by placing each sphere of B in contact with three spheres of bottom layer, as show in Fig. 8**

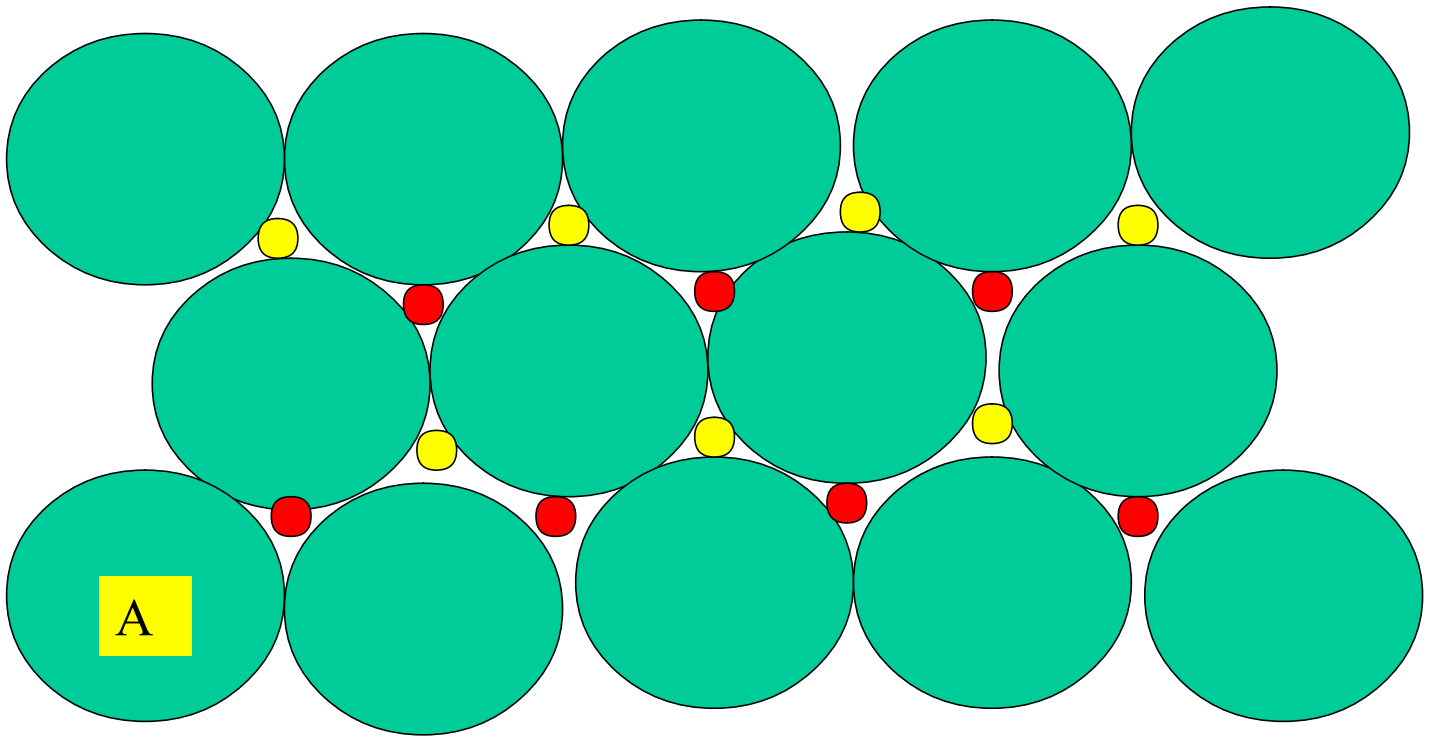
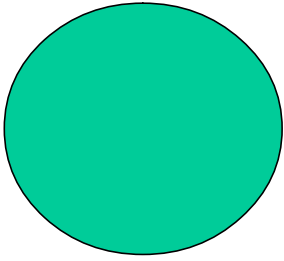


图8 密堆积示意图



为第一层原子中心的位置；  
标记为A



为第二层原子中心的位置；



标记为B, C



**A third layer C may be added in two ways.**

**If the spheres of the third layer are added over the holes in the first layer that are not occupied by B, we obtain **the fcc structure****

**The layer sequence is ABCABCABC.....**

We obtain **the hcp structure** when the spheres in the third layer are placed directly over the centers of the spheres in the first layer.

The layer sequence is **ABABAB.....**

### 1. 六方密堆积

如果把第三层的球放在第二层的3个相间的空隙内，并且沿竖直方向观察使第三层球与第一层球平行吻合，如图1.12（a）所示。

第四层与第二层也满足平行吻合。

这样每两层为一组规则地堆积下去，即按照**ABABAB.....**排列，形成了垂直方向具有**6度旋转反演轴**的晶体结构。

这种结构称为**六方密堆积**。

**Be, Cd, Mg, Ni, Zn**等金属具有这种结构。

## 2. 立方密堆积

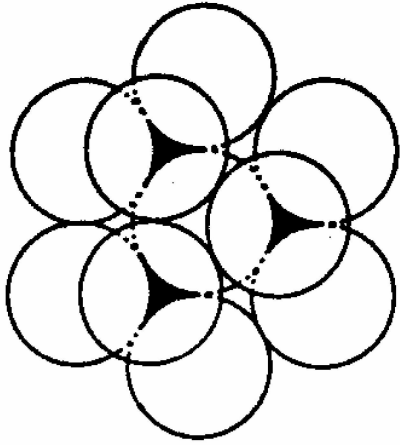
如果把第三层放在第二层3个相间的空隙内，但第三层的球是放在第二层的其他3个没有被第一层占据的空隙上面，如图1.12 (b) 所示。

而第四层的球则完全按第一层排列，即与第一层平行吻合。

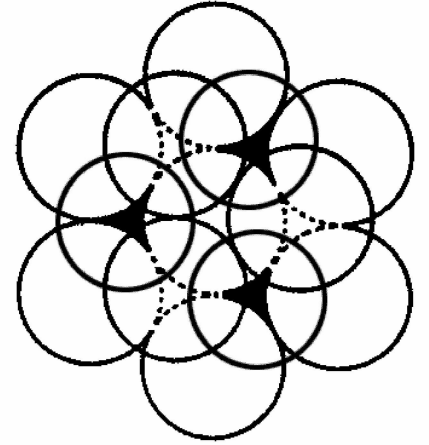
这样每三层为一组规则地堆积下去，即按照**ABCABCABC.....**排列，形成面心立方结构。

这种结构称为立方密堆积。

**Ag, Au, Co, Cu, Ni, Pd, Pt**等金属具有这种结构。



(a) 六角密积



(b) 立方密积

(a) 六方密堆积

(b) 立方密堆积

图1.12 密堆积

### 1.4.3 最大配位数

无论是六方密堆积还是立方密堆积，每个球在同一层内与**6**个球相切，又与上下层**3**个球相切，所以每个球最近邻的球数是**12**，即晶体结构中最大的配位数为**12**。



如果晶体不是由同一种原子构成，那么相应小球的体积不等，从而不可能形成密积结构，因此配位数一定小于**12**。

考虑到周期性和对称性的特点，晶体不可能具有配位数**11、10，9，7**。

晶体中最高的配位数是**12**，以下的配位数依次是**8、6、4、3、2**。

## 1.4.4 致密度

致密度  $\eta$ ，或堆积因子 (**packing factor**) 是指晶胞中所有原子的体积与晶胞体积之比；通常用下式表示：

$$\eta = \frac{\text{晶胞中原子的体积之和}}{\text{晶胞体积}}$$

例：试计算简立方晶胞的致密度  $\eta$ 。

解：设简立方晶胞的边长为  $a$ ，则堆垛成简立方晶胞的原子半径最大为  $a/2$ 。

由于简立方晶胞中只有一个原子。

$$\therefore \eta = \frac{\frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2}\right)^3}{a^3} = \frac{\pi}{6} \approx 0.5236$$

## 1.4.5 晶胞的几何特性

对于各种晶胞，一般要用以下九个几何特性参数进行表征：

以立方晶系为例

# 第一章 晶体结构

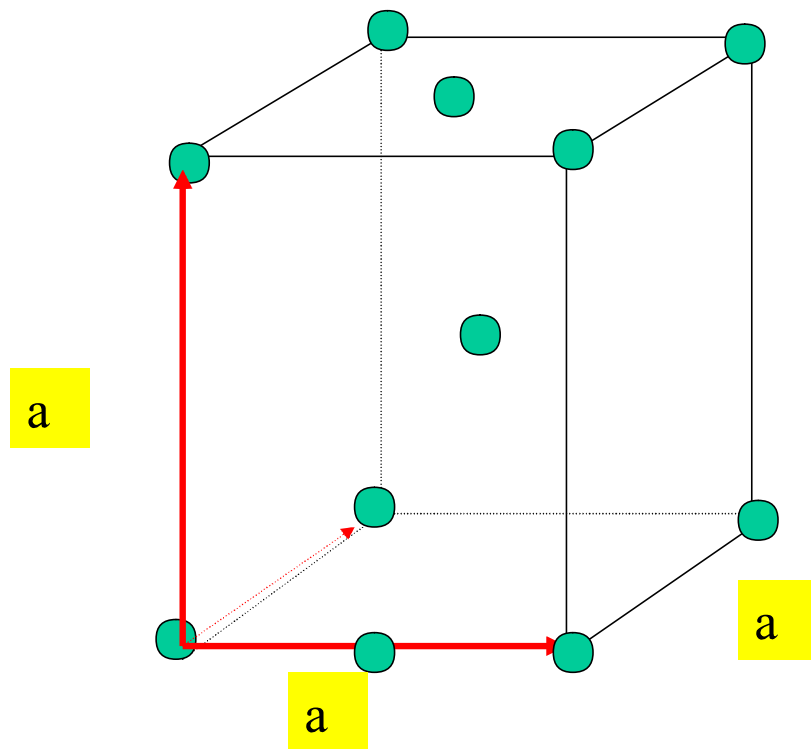


图5 立方晶系的晶胞原子位置示意图

## 1、晶胞体积 (volume)

对立方晶系，如晶胞边长为 $a$ ，则有

$$V=a^3$$

## 2、晶胞内原子数(atom numbers) (或格点数 lattice points)

对立方晶系：

顶角的原子是与八个晶胞共用的，故每个晶胞内只计算 $1/8$ 个原子；

棱边的原子是与四个晶胞共用的，故每个晶胞内只计算 $1/4$ 个原子；

面心的原子是与两个晶胞共用的，故每个晶胞内只计算 $1/2$ 个原子；

体心的原子只属于晶胞本身的，故每个晶胞内可计算 $1$ 个原子；



### 3、原胞体积 (volume of primitive cell)

原胞体积=晶胞体积/晶胞内原子数

如简单立方，晶胞体积 $a^3$  晶胞内原子数1  
则原胞体积为 $a^3 / 1 = a^3$

而体心立方，晶胞体积 $a^3$  晶胞内原子数2  
则原胞体积为 $a^3 / 2 = (1/2) a^3$

#### 4、单位体积原子数（格点数）

单位体积原子数=晶胞内原子数/晶胞体积

如简单立方，晶胞内原子数1，晶胞体积 $a^3$   
则单位体积原子数为  $1/a^3$

## 5、最近邻原子数

(**number of nearest neighbors**)

一个原子附近相距的距离最短的原子的个数

越大，原子排列越密集。

如简单立方，最近邻原子数为**6**

体心立方，最近邻原子数为**8**

面心立方，最近邻原子数为**12**

## 6、最近邻原子间距 (nearest-neighbor distance)

一个原子附近最近邻原子相距的距离  
越大，原子排列越稀疏。

如简单立方，最近邻原子间距为 **$a$**

体心立方，最近邻原子间距为 **$0.866a$**

面心立方，最近邻原子间距为 **$0.707a$**

## 7、次近邻原子数

**(number of second neighbors)**

一个原子附近相距的距离第二短或次短的原子的个数



如简单立方，次近邻原子数为**12**

体心立方，次近邻原子数为**6**

面心立方，次近邻原子数为**6**

## 8、次近邻原子间距

(**second neighbor distance**)

一个原子附近次近邻原子相距的距离

如体心立方，次近邻原子间距为 $a$

面心立方，次近邻原子间距为 $a$

9、堆垛因子(或致密度)  
(packing factor)

$$\text{堆垛因子 } \eta = \frac{\text{晶胞内原子的体积}}{\text{晶胞的体积}}$$

例：计算简单立方晶胞的堆积因子

解：∵ 简单立方晶胞的体积为 $a^3$ ，  
晶胞内有一个原子，设原子半径为 $0.5a$

$$\therefore \eta = \frac{\frac{4}{3} \pi \left(\frac{1}{2} a\right)^3}{a^3} = \frac{\pi}{6} \approx 0.524$$

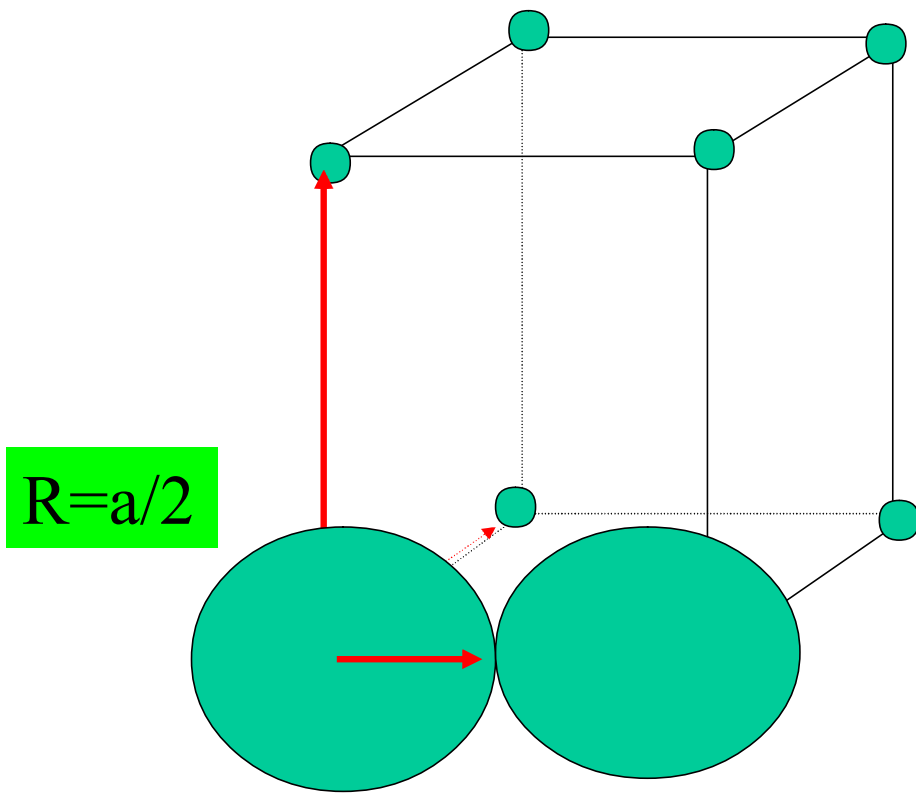


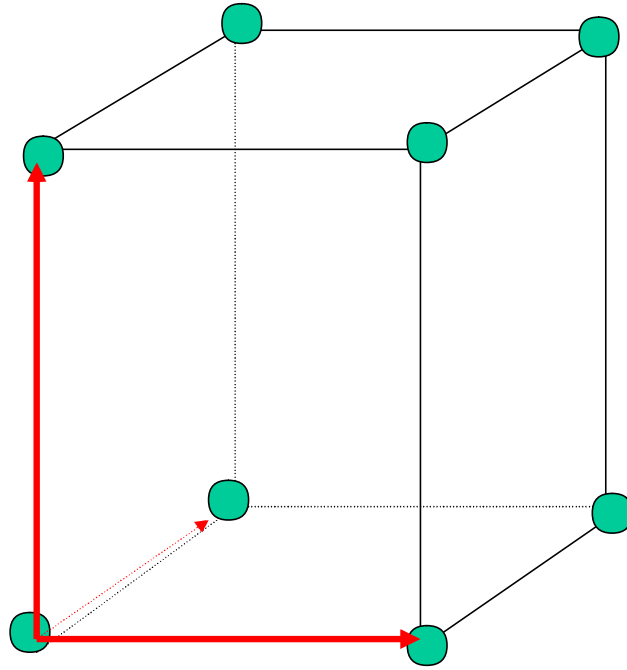
图6 简单立方的布拉维原胞示意图

## 1.5 几种典型的晶体结构

(some typical crystal structures)

We discuss some simple crystal structures of interest: the simple cubic, body-centered cubic, face-centered cubic, sodium chloride, cesium chloride, hexagonal close packed, diamond, and cubic zinc sulfide structures.

1、简单立方（simple cubic）：





只在八个顶角处有原子。每个原子为八个晶胞所共有。

每个晶胞仅有一个原子。

**晶胞与原胞是相同的。**

晶轴关系为：

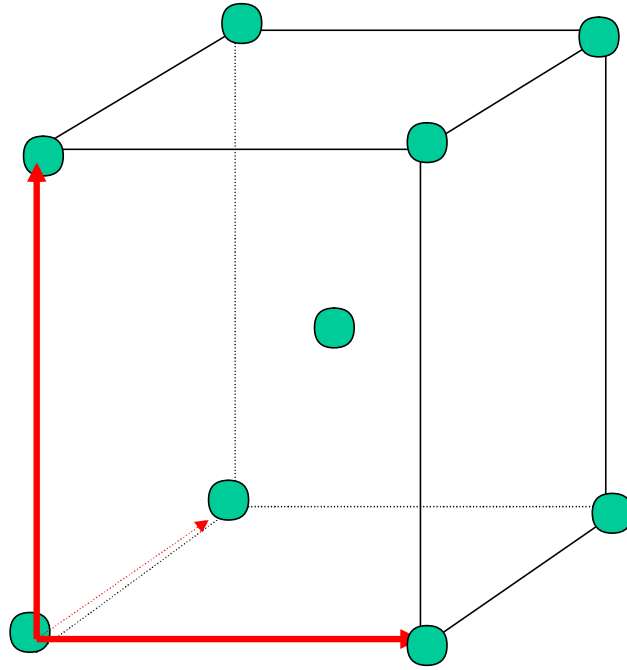
$$\mathbf{a}_1 = a \mathbf{i}$$

$$\mathbf{a}_2 = a \mathbf{j}$$

$$\mathbf{a}_3 = a \mathbf{k}$$

其中 $\mathbf{i}$ 、 $\mathbf{j}$ 、 $\mathbf{k}$ 为单位矢量。

## 2、体心立方 (Body-centered cubic)



体心立方（**BCC**）晶胞里：

在八个顶角处有原子。每个原子为八个晶胞所共有。

在立方体的体心还有一个原子。

因此每个晶胞有两个原子。

位于顶角处的原子和位于体心的原子是等同的。

故顶角处的原子和位于体心的原子属于布喇菲格子。

原胞里只应有一个基元——原子。

原胞的基矢一般如下选取：

$$\mathbf{a}_1 = (a/2)(-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})$$

$$\mathbf{a}_2 = (a/2)(\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k})$$

$$\mathbf{a}_3 = (a/2)(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k})$$

其中 $\mathbf{i}$ 、 $\mathbf{j}$ 、 $\mathbf{k}$ 为单位矢量。

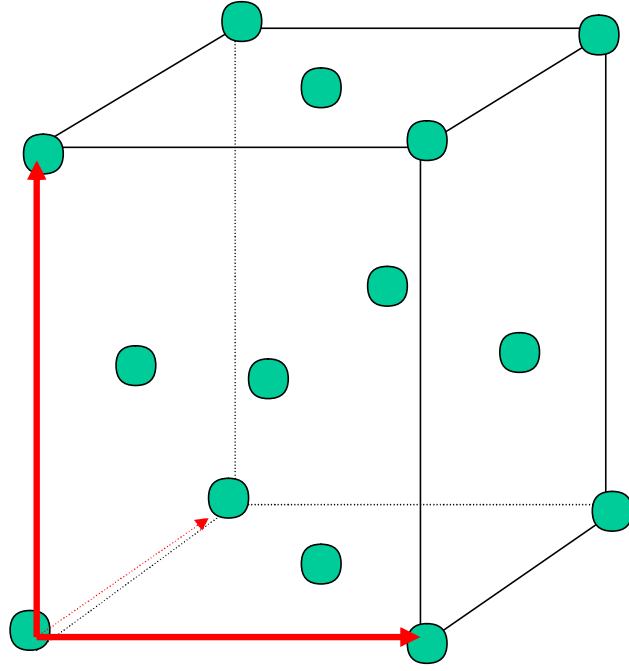
每个原胞只有位于顶角处的原子

即这样选择的原胞的体积为 $a^3/2$

只有一个原子。

**BCC的晶胞与原胞是不相同的。**

### 3、面心立方(Face-Centered Cubic)





面心立方（FCC）晶胞里：

在八个顶角处有原子。每个原子为八个晶胞所共有。

在立方体的六个面的面心还各有一个原子。

因此每个晶胞有四个原子。

位于顶角处的原子和位于面心的原子是等同的。

故顶角处的原子和位于面心的原子属于布喇菲格子。

原胞里只应有一个基元——原子。

原胞的基矢一般如下选取：

$$\mathbf{a}_1 = (a/2)(\mathbf{j} + \mathbf{k})$$

$$\mathbf{a}_2 = (a/2)(\mathbf{k} + \mathbf{i})$$

$$\mathbf{a}_3 = (a/2)(\mathbf{i} + \mathbf{j})$$

其中 $\mathbf{i}$ 、 $\mathbf{j}$ 、 $\mathbf{k}$ 为单位矢量。

# 第一章 晶体结构

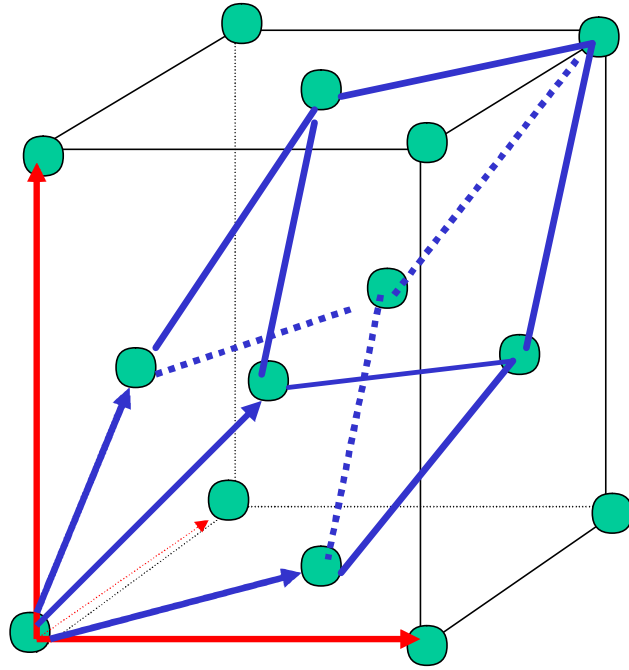


图7 面心立方的布喇菲原胞和晶胞示意图

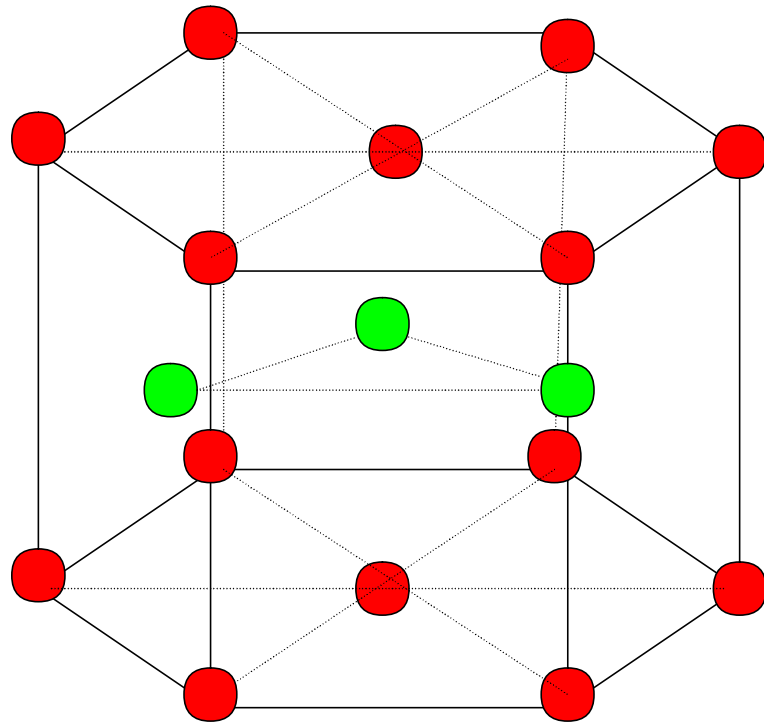
这样每个原胞只有位于顶角处的原子

即这样选择的原胞的体积为 $a^3/4$

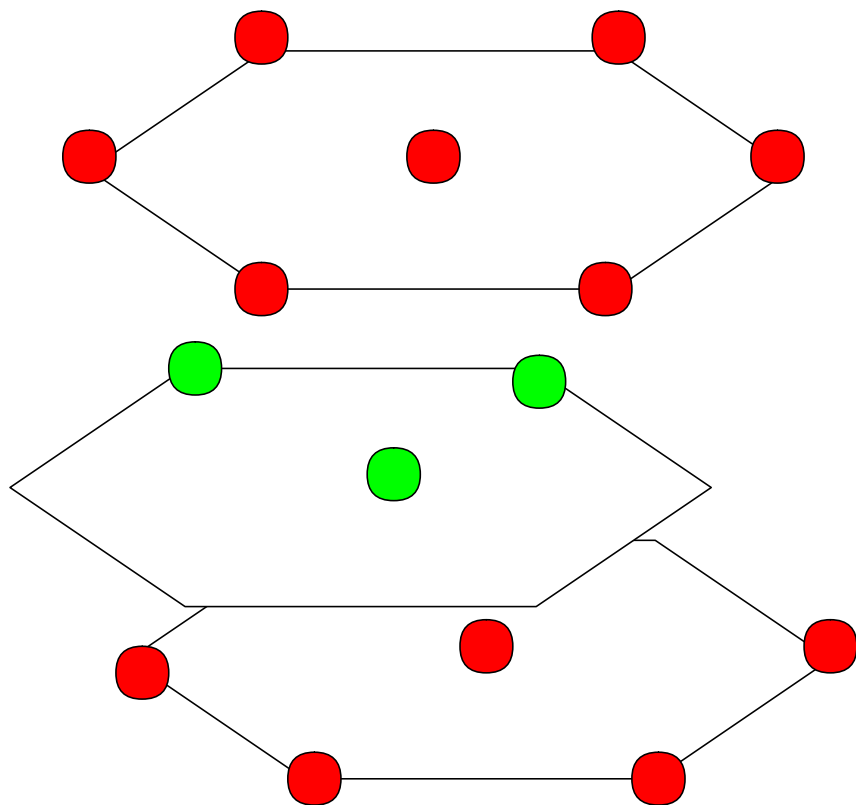
只有一个原子。

**FCC的晶胞与原胞是不相同的。**

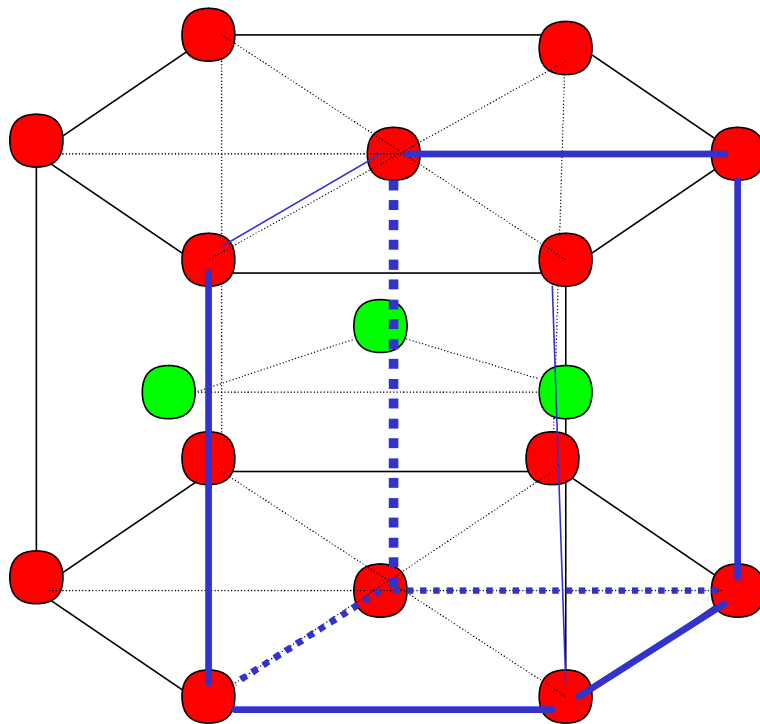
## 4、六方密堆积 (Hexagonal close-packed)



六方密堆积结构的晶胞可以看成是两个六方布喇菲格子套构而成的。



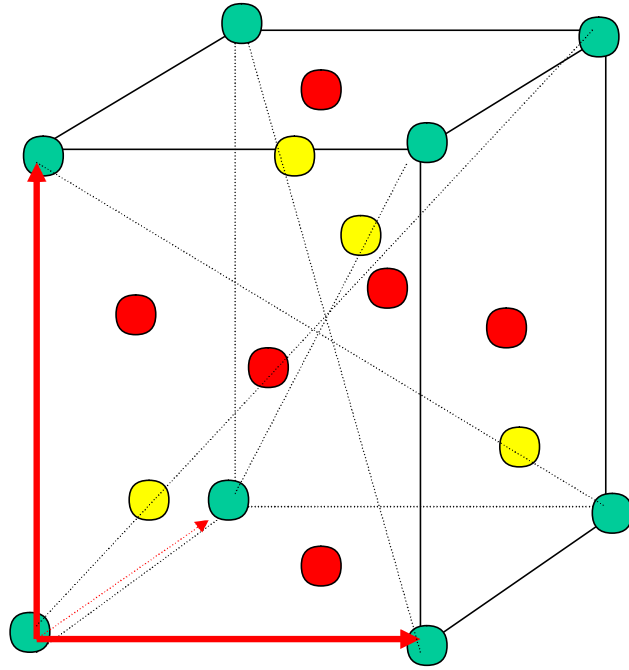
**The hcp has the primitive cell of the hexagonal lattice, but with a basis of two atoms.**





**The number of nearest-neighbor atoms is 12 for both hcp and fcc structures.**

# 5、金刚石结构 (Diamond Structure)



金刚石结构可以从**fcc**结构变化来：

在八个顶角处有一个原子。每个原子为八个晶胞所共有。

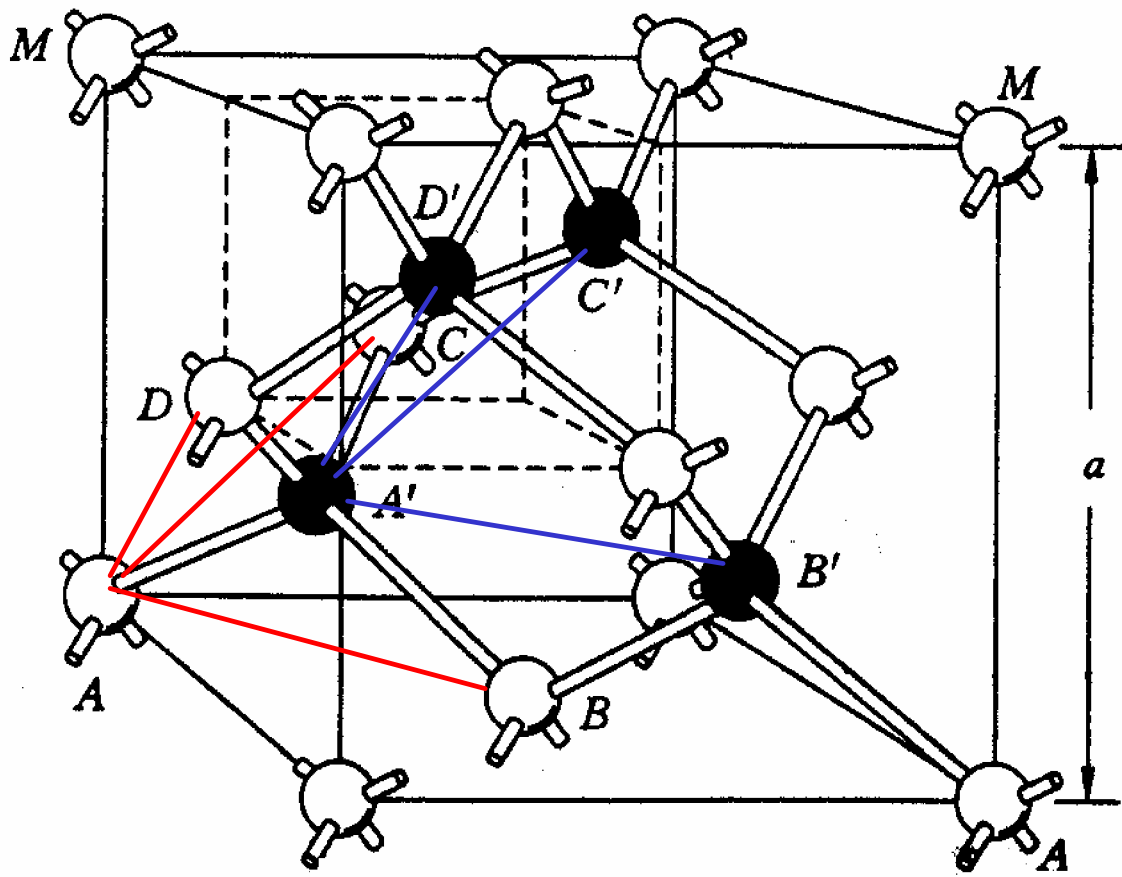
在立方体的六个面的面心还各有一个原子。

在立方体的四条体对角线的 $\frac{1}{4}$ 处还各有一个原子。

金刚石结构可以看成是两个面心立方的布喇菲格子沿体对角线平移 $1/4$ 长度套构而成的。

原胞的基矢的选取与面心立方晶格一样。

每个原胞中含有一个基元——两个不等价的原子

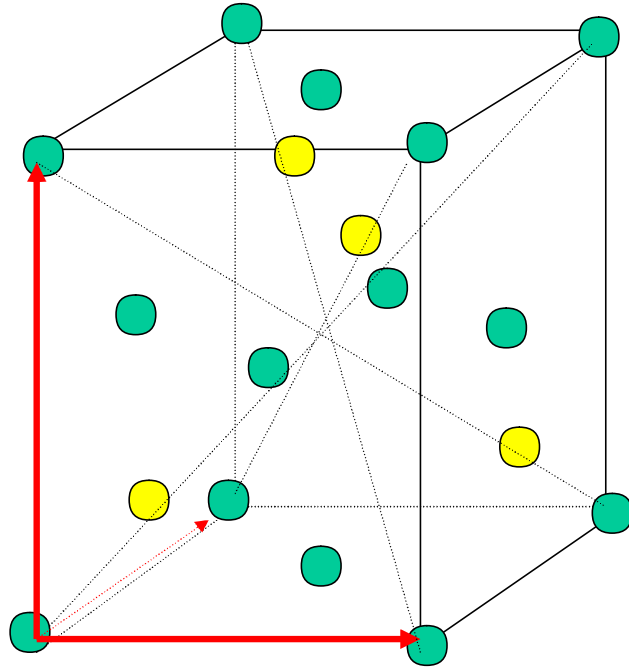


金刚石结构示意图

金刚石结构中，每个原子有四个最近邻原子和12个次近邻原子。

**Carbon, silicon, germanium, and tin can crystallize in the diamond structure, with lattice constants  $a=3.56, 5.43, 5.65,$  and  $6.46$  angstrom, respectively. Here  $a$  is the edge of the conventional cell.**

## 6、闪锌矿结构(Zincblende structure)



闪锌矿结构(**Zincblende structure**) 又称立方硫化锌结构 (**Cubic zinc sulfide structure**)

**The diamond structure may be viewed as two fcc structures displaced from each other by one-quarter of a body diagonal.**

**The cubic zinc sulfide structure results when Zn atoms are placed on one fcc lattice and S atoms on the other fcc lattice.**

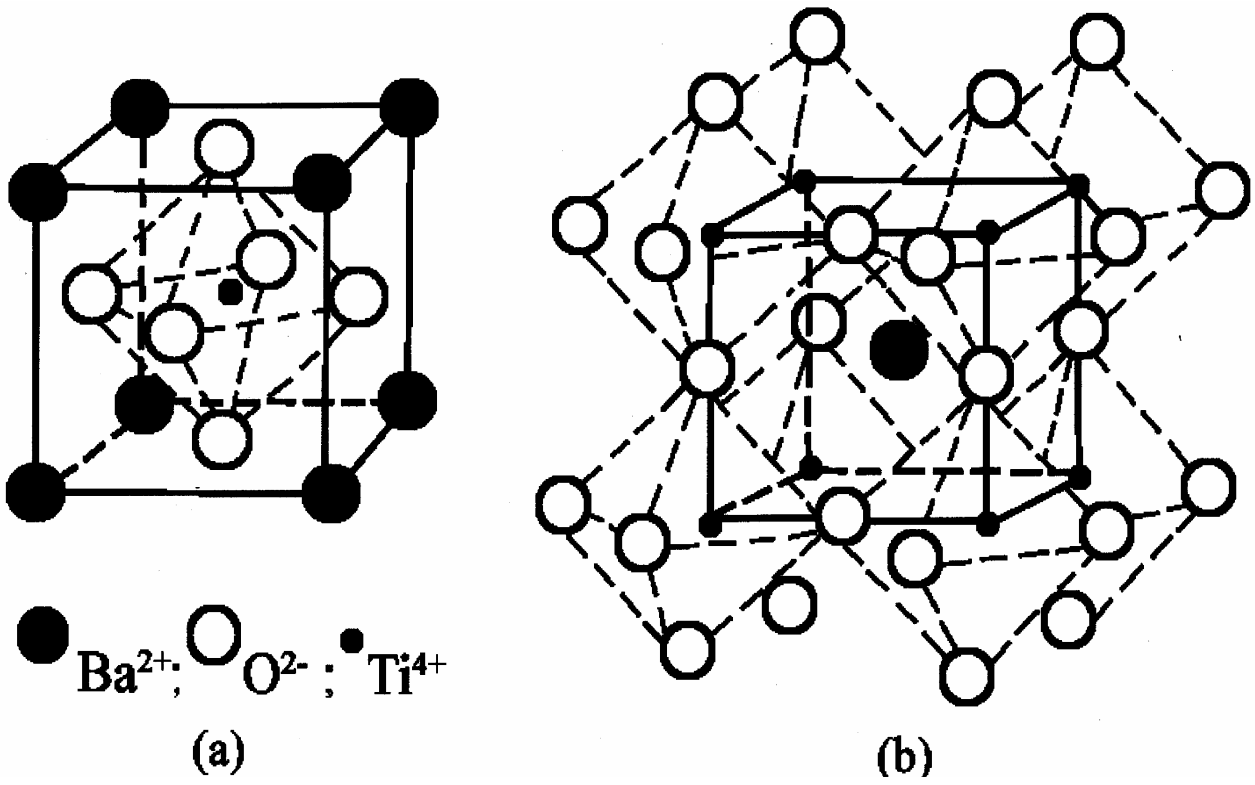


许多重要的化合物半导体如砷化镓  
(**GaAs**)、磷化铟(**InP**)、锑化铟  
(**InSb**)等均属于闪锌矿结构。

## 5. 钙钛矿结构

钙钛矿结构是一大类具有 $ABO_3$ 分子式化合物的结构，如 $CaTiO_3$ ， $BaTiO_3$ ， $PbTiO_3$ ， $PbZrO_3$ ， $LaGaO_3$ 等。

$BaTiO_3$ 钙钛矿结构的结晶学原胞如图1.16 (a) 所示，氧八面体与阳离子的关系如图1.16 (b) 所示。



**图1.16 BaTiO<sub>3</sub>钙钛矿结构**  
**(a) 结晶学原胞 (b) 氧八面体的排列**

其中在立方体的八个顶角是低电价，大半径的阳离子A，

处于立方体中心的是高电价、小半径的阳离子B，

位于立方体各面的中心位置的是氧离子O。

三组氧离子（OI、OII、OIII）周围的情况各不相同。

整个晶格可以看成是A、B、 $O_I$ 、 $O_{II}$ 、 $O_{III}$ 各自组成的简立方格子VI一共五个布拉菲格子套构而成的复式格子。

许多重要的功能材料如铁电材料，超导体材料等都具有钙钛矿结构。

## 6. $C_{60}$ 晶体结构

**1985年，H.Kroto，R.Curl和E.Smally等在实验中获得了异常高的由60个碳原子构成的 $C_{60}$ 团簇的丰度，表明它具有特别稳定的结构。**

## 第一章 晶体结构

$C_{60}$ 分子的直径为**0.71nm**。在猜测 $C_{60}$ 分子结构时，**Kroto**等人受到建筑师**Buckminster Fuller** 1965~1967年在蒙特利尔万国博览会上使用五边形和六边形建造薄壳圆穹顶的启发，

猜想： $C_{60}$ 的结构很可能像由**12**个五边形、**20**个六边形组成的共有**60**个顶点的足球类似。

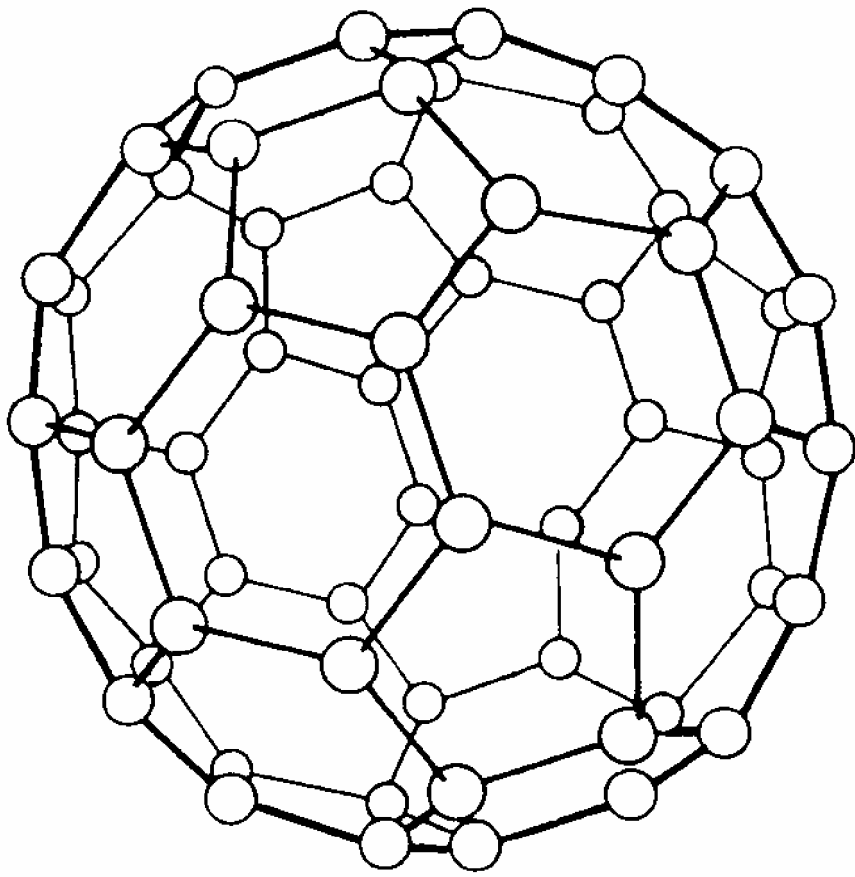


图1.17 C<sub>60</sub>分子结构示意图



$C_{60}$ 分子被命名**Buckminsterfullerene**，简称为富勒烯，也常被称为巴基球或足球烯。

$C_{60}$ 的结构相当于截去12个顶角的截角二十面体，具有二十面体群 ( $I_h$ ) 的对称性。五边形环由单键构成，键长**0.145nm**，两个六边形的公共棱边为双键，键长**0.140nm**。

## 第一章 晶体结构

室温下，固体 $C_{60}$ 为面心立方结构，每个 $C_{60}$ 分子位于面心立方的格点上。晶格常数 $a = 1.4198\text{nm}$ 。固体 $C_{60}$ 分子的取向是无序的，并做高速无规自由转动。可达 $10^9$ 转/秒。

温度降低时会发生旋转相变。固体 $C_{60}$ 的旋转相变发生在 $249\text{K}$ ，在这一温度以下，分子转动停止，取向有序，结构转变为简单立方。固体 $C_{60}$ 是和金刚石、石墨的结构完全不同的碳的第三种形式。

作业：

- 1、试计算面心立方和体心立方的堆积因子
- 2、绘出面心立方的晶胞和原胞示意图。
- 3、设边长为 $a$ ,试绘出二维正方晶格的W-S原胞。
- 4、计算面心立方晶格的最近邻原子数、次近邻原子数；按照WS原胞的构造法，如果FCC中一个原子的所有最近邻原子的连线的中垂面围成一个什么图形，体积为多少？如果FCC中一个原子的所有次近邻原子的连线的中垂面又围成一个什么图形，体积为多少？

## 1.6 晶向与晶面

晶体具有各向异性的特点,沿不同的晶向或晶面的性质是不同的.

### 1.6.1 晶向及其表示

**晶列**—晶格中任意两个格点的连线。

三个晶轴的  
单位矢量的  
大小  $a$ 、 $b$ 、 $c$   
三个晶轴之  
间的夹角  
 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$

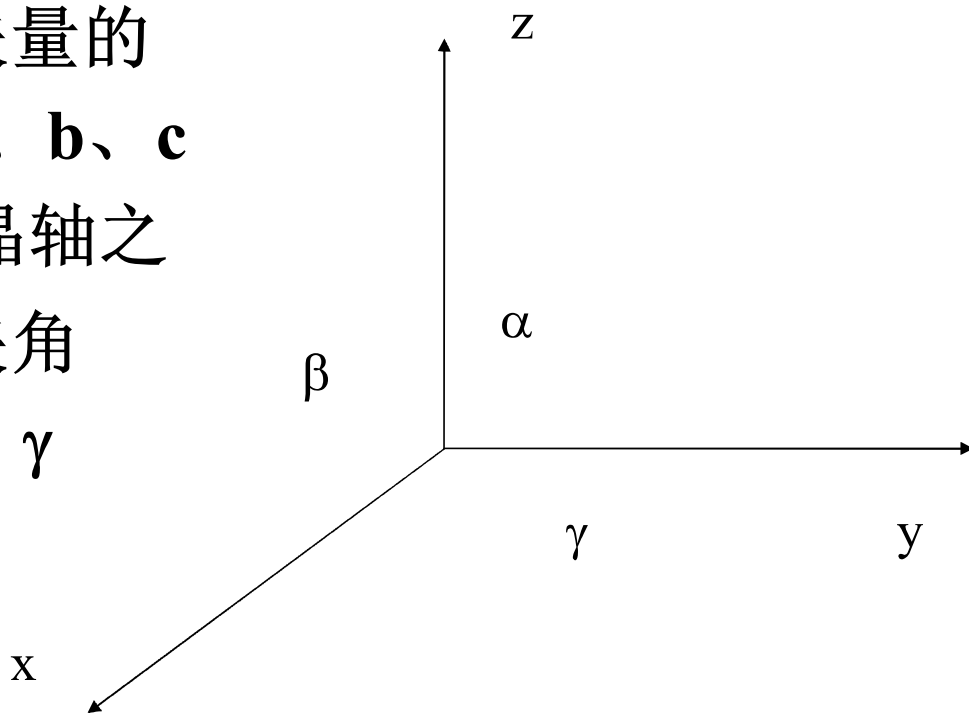
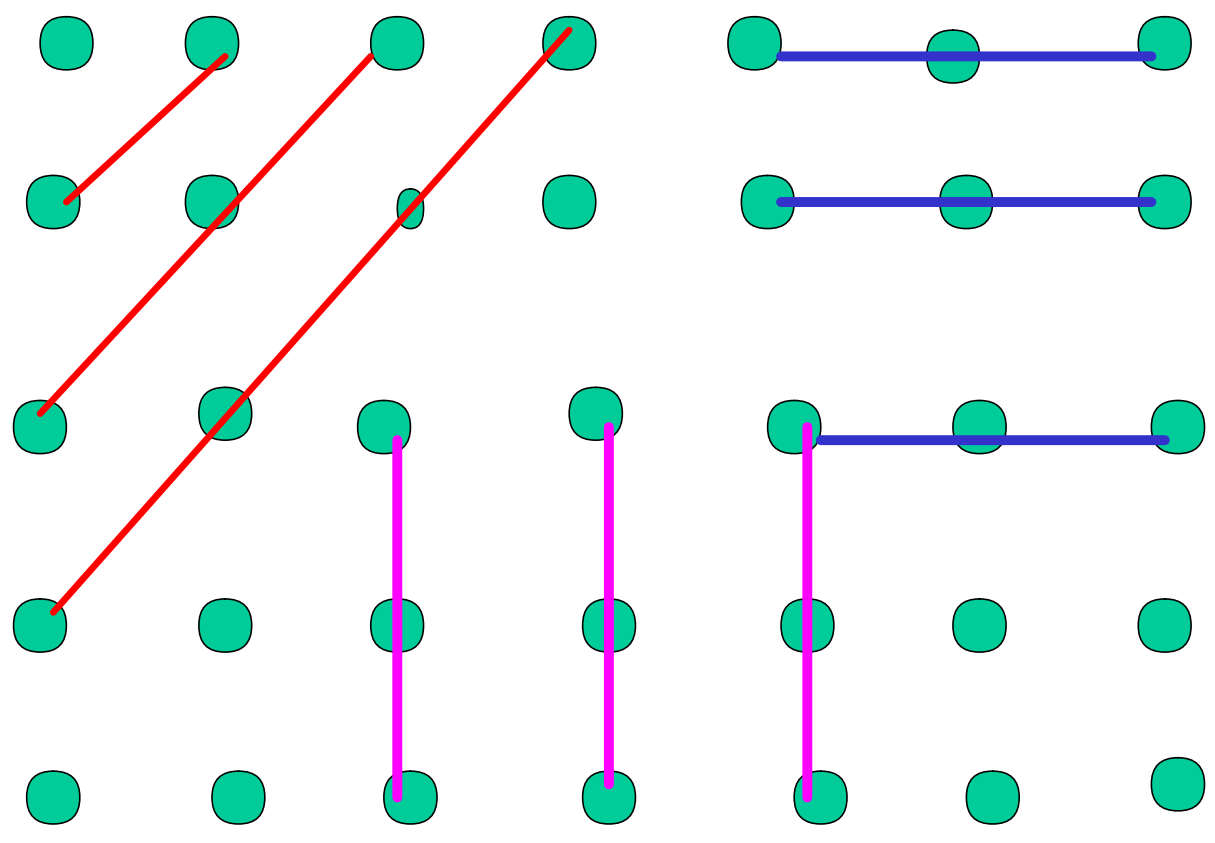


图1 晶胞的空间坐标表示法

# 第一章 晶体结构



晶格中的格点可以看成是分布在一族平行的晶列上。

一族晶列的方向相同，格点分布的规律也相同。

不同族晶列的方向不相同，格点分布的规律也不相同。

## 晶向(Crystal direction)—— 一族晶列的共同方向

确定晶向指数的具体步骤：

1) 过原点做平行于该晶向的直线

2) 求出该直线上任意一点的坐标（以 $a, b, c$ 为单位）



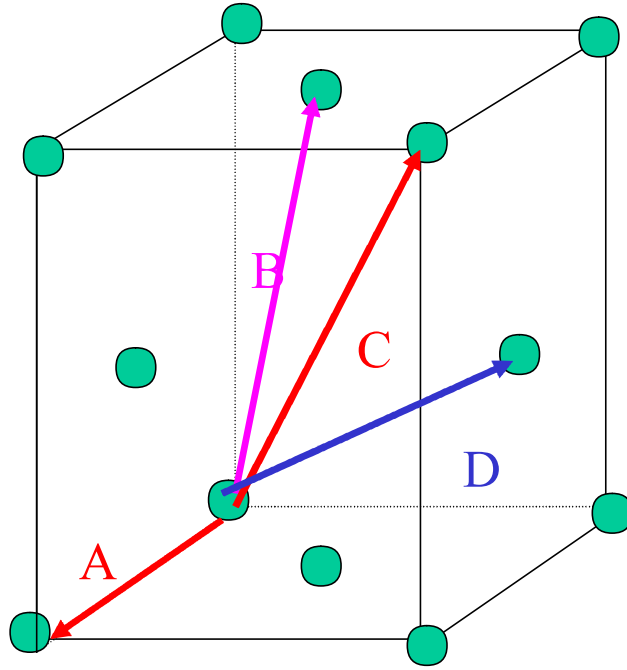
3)将这三个坐标值之比化简为最小整数比： $u:v:w$

4)将所得到的指数放入方括号 $[uvw]$ 中。

注意：

- (1) 如晶向垂直于某坐标轴，则在该轴上的指数为0
- (2) 如晶向与坐标轴相交在负端，则在相应指数上加“—”号
- (3) 晶向总是按照一定周期重复出现，故  $[uvw]$  代表相互平行的一组晶向

例1：试求出A、B、C、D各晶向的晶向指数



解：

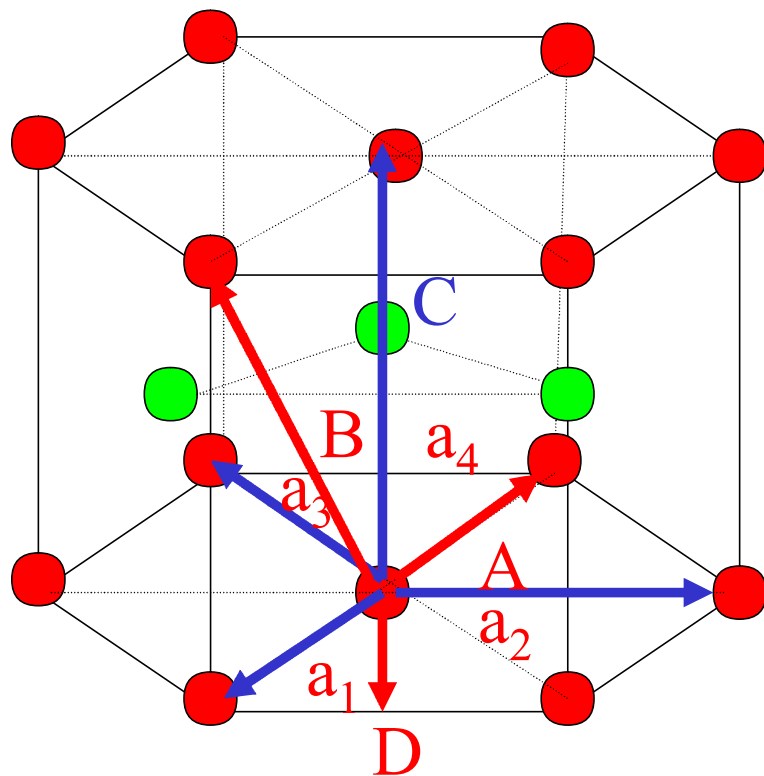
1) 对**A**晶向：过点  $(1,0,0)$   
则晶向为**[100]**

2) 对**B**晶向：过点  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1)$   
则晶向为**[112]**

3) 对C晶向：过点  $(1,1,1)$   
则晶向为 $[111]$

4) 对D晶向：过点  $(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$   
则晶向为 $[121]$

例2、六方密堆积的晶向指数



解：六方晶格一般建立四坐标系 $a_1$ 、 $a_2$ 、 $a_3$ 、 $a_4=c$ ，并满足 $a_1+a_2+a_3=0$ ，即有 $[uvtw]$  且 $u+v+t=0$

1) 对A晶向：过点 $(1,0,0,0)$

则晶向应为 $[1000]$ ，按照要求，实际为 $[1, -1/2, -1/2, 0]$ ，故为 $[2\bar{1}\bar{1}0]$

2) 对B晶向：过点 $(1,0,0,1)$

则晶向应为 $[1001]$ ，实际为 $[1, -1/2, -1/2, 1]$ ，故为 $[2\bar{1}\bar{1}2]$

3) 对C晶向：过点  $(0,0,0,1)$

则晶向应为  $[0001]$ 。

4) 对D晶向：过点  $(1,0,-1,0)$

则晶向应为  $[10\bar{1}0]$ ，满足要求，故为

$[10\bar{1}0]$



但四轴指数体系比较复杂，很难保证 $[uvw]$ 既是晶格上一点，又满足 $u+v+t=0$

一般用解析法从三轴指数求出四轴指数：

先从 $a_1$ 、 $a_2$ 、 $c$ 轴系定出格点的三轴指数 $[UVW]$ ，再进行计算：

$$u = \frac{1}{3}(2U - V)$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U)$$

$$t = -(u + v)$$

$$w = W$$

或:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix}$$

或:

$$\begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

例：对六方晶胞的三轴体系的[100]晶向

解：∵  $U=1; V=0; W=0$

∴

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$u = \frac{2}{3}; v = -\frac{1}{3}; t = -\frac{1}{3}; w = 0$$

$$\therefore \left[ \frac{2}{3} \frac{\bar{1}}{3} \frac{\bar{1}}{3} 0 \right] = \frac{1}{3} [2\bar{1}\bar{1}0]$$

等效晶向族—由对称性联系的一组等同晶向方向不同，但周期相同，原子排列方式相同。

以 $\langle uvw \rangle$ 表示等效晶向族

如 $\langle 100 \rangle$ 共有6个晶向

$[100]$ ,  $[010]$ ,  $[001]$ ,  $[\bar{1}00]$ ,  $[0\bar{1}0]$ ,  $[00\bar{1}]$

## 1.6.2 晶面指数及晶面间距

**W.H.Miller(1939)**提出确定晶面指数的方法，称为**Miller Indices**。

具体步骤：

- 1)以各晶轴的点阵常数为单位，求出晶面与三晶轴的截距 $m, n, p$
- 2)取截距的倒数 $1/m, 1/n, 1/p$



3)将这三个数化简为比值相同的三个最简单整数:

即 $(1/m): (1/n): (1/p)=h: k: l$

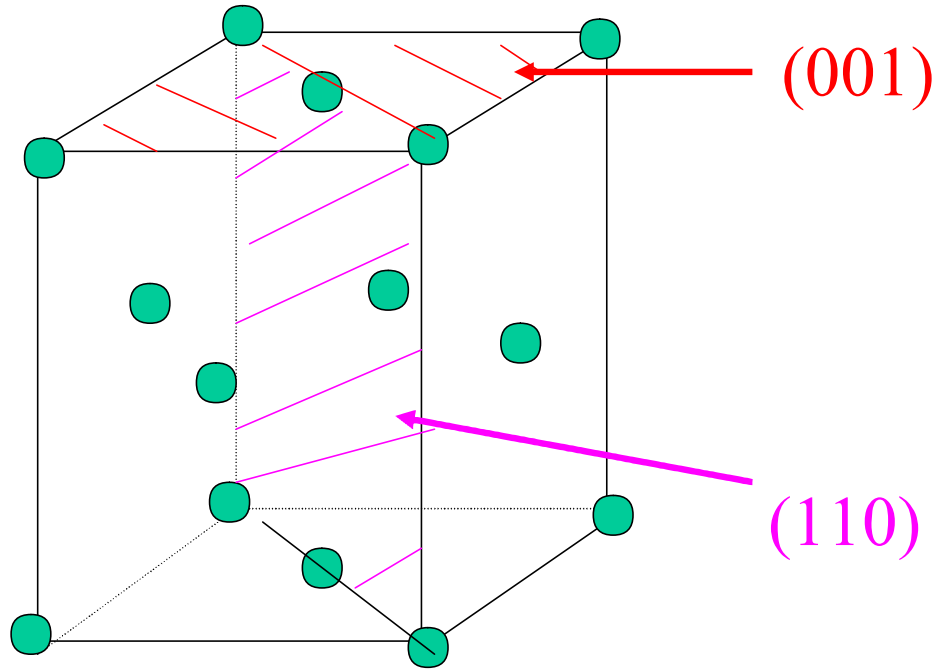
H, k, l为简单整数

4)将hkl放入圆括号内, 即(hkl)

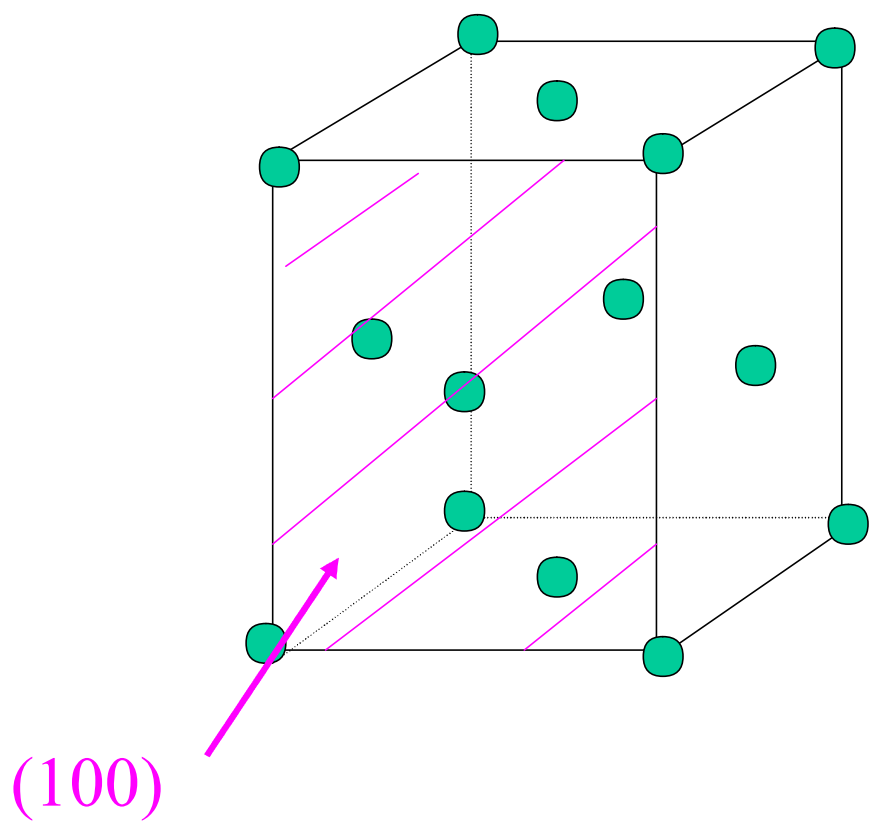
注意：

- (1) 如晶面平行于某坐标轴，则在该轴上的指数为0
- (2) 如晶面与坐标轴相交在负端，则在相应指数上加“—”号
- (3) 晶面总是按照一定周期重复出现，故  $(hkl)$  代表相互平行的一组晶面

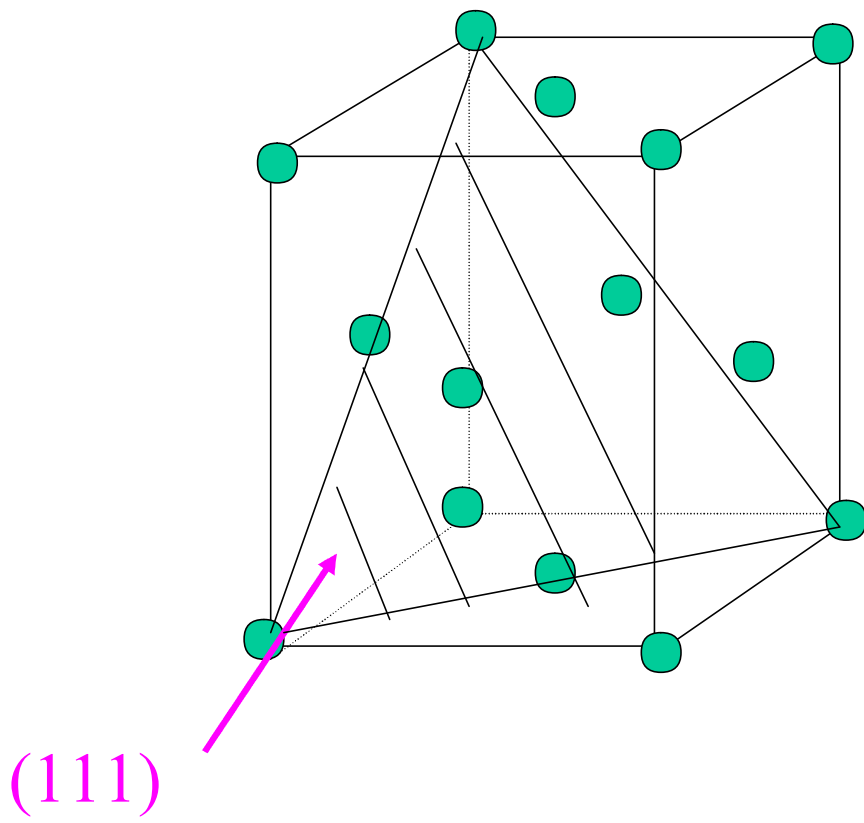
例：FCC的晶面指数



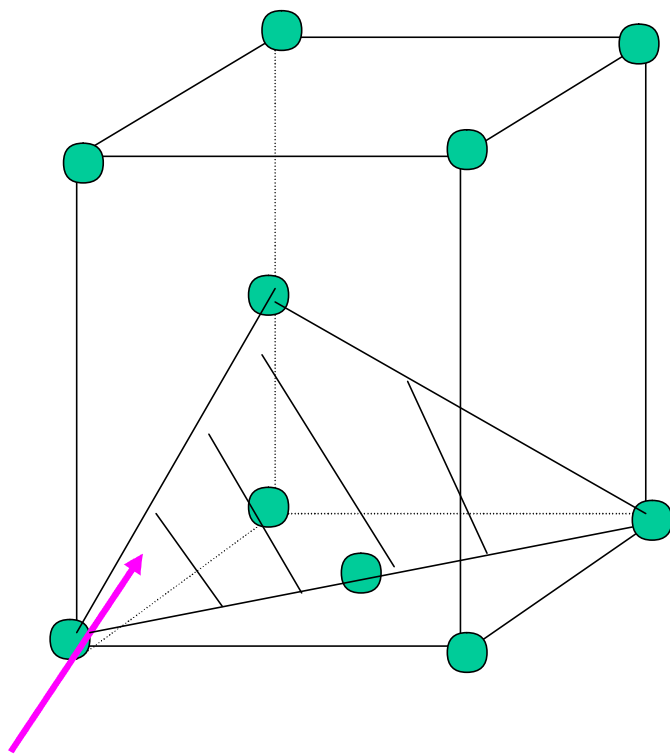
# 第一章 晶体结构



# 第一章 晶体结构



# 第一章 晶体结构



(221)

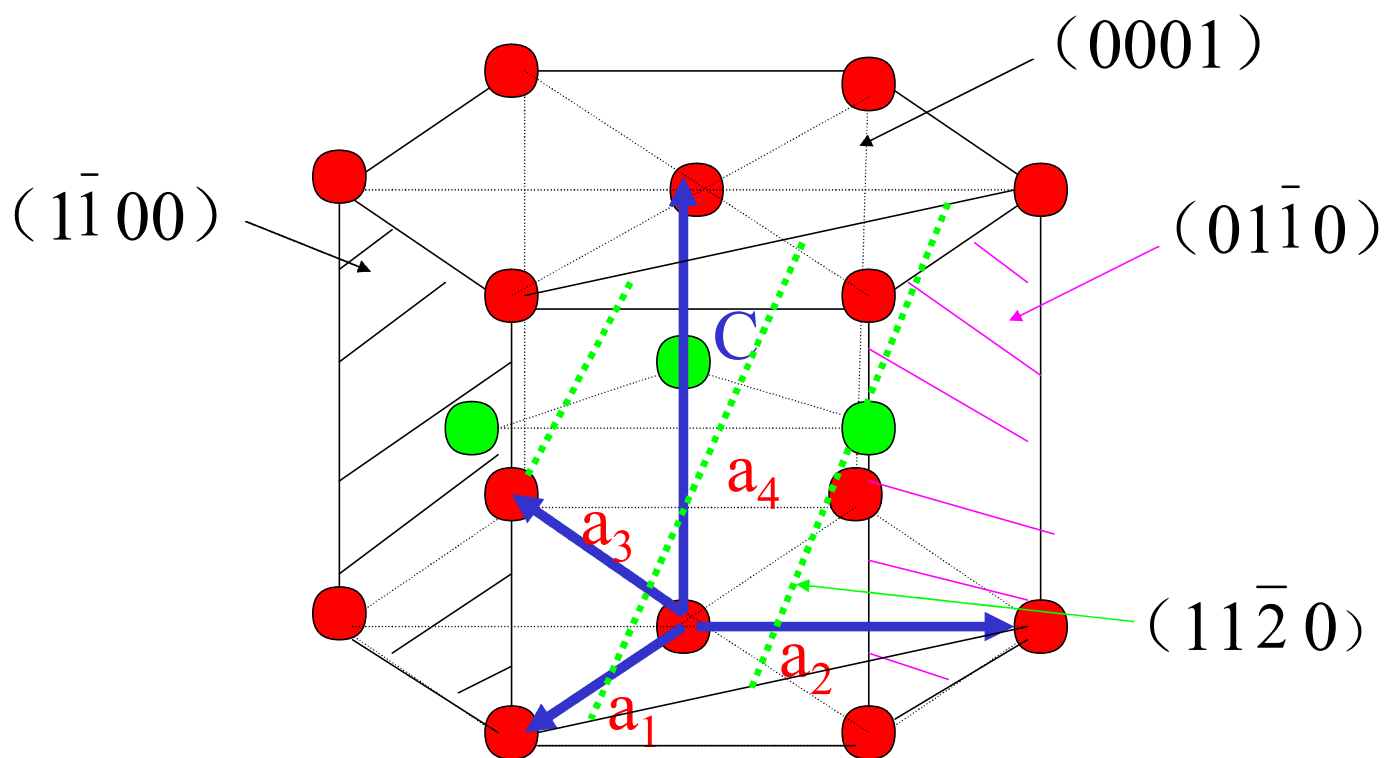
截距:

$$X=1$$

$$Y=1$$

$$Z=1/2$$

例2、六方密堆积的晶面指数



## 等效晶面族

以 $\{hkl\}$ 表示由对称性联系的一组等同晶面——原子排列、分布规律、晶面间距相同，只是空间位向不同。

如 $\{110\}$ 共有  
12个等效晶面：

$$\begin{aligned} \{110\} = & (110) + (101) + (011) \\ & + (\bar{1}10) + (\bar{1}01) + (0\bar{1}1) \\ & + (\bar{\bar{1}}10) + (\bar{\bar{1}}0\bar{1}) + (0\bar{\bar{1}}\bar{1}) \\ & + (1\bar{1}0) + (10\bar{1}) + (01\bar{1}) \end{aligned}$$



晶面间距 $d$ —晶面 $(hkl)$ 中相邻两个平面间的距离。

可以证明：

$$d = V [h^2 b^2 c^2 \sin \alpha + k^2 a^2 c^2 \sin \beta + l^2 a^2 b^2 \sin \gamma + 2hkabc^2(\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) + 2kla^2bc(\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) + 2hlab^2c(\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta)]^{-1/2}$$

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

对称性高的晶系，计算公式可以简化：

如立方晶系：

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

正交晶系:

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ \quad V = abc$$

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

六方晶系:

$$\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ \quad V = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$$

$$\frac{1}{d} = \sqrt{\frac{4}{3} \left( \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \frac{l^2}{c^2}}$$

## 1.7 晶体结构的对称性

对称 (**Symmetry**)

物体相同部分作有规律的重复

对称操作(**Symmetry operation**)—

不改变物体内部任意两点间距，使物体各等同部分调换位置后恢复原状的操作

一个几何图形的对称性的高低可以由它所具有的对称操作的数量多少来决定。

对称性高，则具有的对称操作的数量多；

对称性低，则具有的对称操作的数量少；

## 对称元素 (**Symmetry element**)

对称操作中保持不动的点、线、面等几何元素

### 1.7.2 基本对称操作

平移 (**Translation**)

反演 (**Inversion**) —具有对称中心;

旋转 (**Rotation**)—具有对称轴;

反映 (**Reflection**)—具有对称面。

平移是一切晶体的内部结构都含有的对称性。

## 1、**n**次旋转轴—

晶体绕其旋转  $\theta = 2\pi / n$  角后可以使晶体与其自身重和

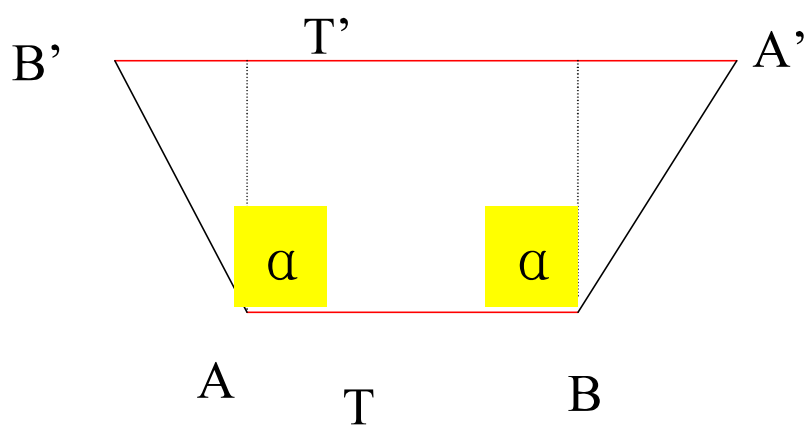


晶体学对称轴的轴次定理：

晶体中只可能存在**1,2,3,4,6**重对称轴，不存在**5重**和**6重**以上的对称轴

证明：  $\because$  **AB**与**B'A'**属于同一方向的点阵  
 $\therefore$  **T'=mT** **m**为整数

# 第一章 晶体结构



$$\text{又} \because T' = -2T \cos(\alpha) + T$$

$$\therefore \cos(\alpha) = (1-m)/2$$

$$m = -1, 0, 1, 2, 3$$

$$\therefore \alpha = 0 \text{ 或 } \alpha = 2\pi/1;$$

$$2\pi/6;$$

$$2\pi/4;$$

$$2\pi/3;$$

$$2\pi/2$$

即 $\alpha=2\pi/n$

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

表明晶体中不存在5重对称轴。在现实中不可能用五边形不留空隙地填满一个平面

## 2、 n次旋转—反演轴

同理可以证明： $\bar{n} = \bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$

## 3、反演中心

如晶体中存在一固定点O，当以O为原点时，可以将晶体中任一点(x,y,z)变为(-x,-y,-z)时，则该点称为反演中心，用 **i** 表示

n次旋转—反演轴并不都是独立元素：

1次旋转—反演轴就是反演中心

2次旋转—反演轴等价于垂直于该轴的反映面  $\bar{2} = m$

3次旋转—反演轴  $\bar{3} = 3 + i$

4次旋转—反演轴是独立的对称元素

$\bar{4}$

6次旋转—反演轴  $\bar{6} = 3 + m$

故只有八种基本对称元素：

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

## 1.7.3、晶体的32种点群（Point Group）

群——一组对称元素或对称操作的集合

点——所有对称元素有一个公共点，始终不动

已经证明，8种对称元素或对称操作只有32种集合，即32种点群。可以分为七大晶系



点群的表达方式：

两套符号：

国际符号（**Hermann-Mauguin Symbols**）：

熊夫利符号（**Schoenflies Symbols**）：

国际符号：“AAA”

一般用三个符号表示三个轴向的对称元素  
旋转轴用 $n$ ,反演轴用  $\bar{n}$ ,镜面用 $m$ 表示。

同一轴向又有旋转轴又有镜面，用 $n/m$ 表示。

如 $4/m$ 等。

优点：对各轴的对称元素一目了然

缺点：比较复杂

熊夫利符号：

$C_n$ —有一个n次旋转轴，C表示旋转

$C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$ 、 $C_4$ 、 $C_6$  共5个

$C_{nh}$ —有一个n次旋转轴及垂直于该轴的水平镜面  
 $C_{2h}$ 、 $C_{3h}$ 、 $C_{4h}$ 、 $C_{6h}$  共4个

$C_{nv}$ —有一个n次旋转轴及含有此轴的垂直  
镜面

$C_{2v}$ 、 $C_{3v}$ 、 $C_{4v}$ 、 $C_{6v}$  共4个

$C_i=C_1$ +中心反演，共1个

$C_s=C_1$ +反映面，共1个

$D_n$ —有一个n次轴及n个垂直于该轴的二次轴： $D_2$ 、 $D_3$ 、 $D_4$ 、 $D_6$  共4个

$D_{nh}$ —有一个n次轴及与该轴垂直的反映面：

$D_{2h}$ 、 $D_{3h}$ 、 $D_{4h}$ 、 $D_{6h}$  共4个

$D_{nd}$ — $D_n$ +通过n次轴及两个二次轴平分线的反映面： $D_{2d}$ 、 $D_{3d}$ ，共2个

$S_n$ —有一个n次旋转反映轴，S表示反映  
但 $S_1=C_i$ ， $S_2=C_s$ ， $S_3=C_{3h}$ ，故只有 $S_4, S_6$  共2个

$O_h$ —立方对称的个对称操作 共1个

$O$ — $O_h$ 中24个纯转动操作 共1个

$T_d$ —正四面体的24个对称操作 共1个

$T$ — $T_d$ 中12个纯转动操作 共1个

$T_h=T$ +中心反演 共1个

总共32个点群, 如表1.3所示

# 第一章 晶体结构

晶 系	对称元素	熊夫利符号	国际符号
三方 (rhombohedral)  $a=b=c;$ $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	$3$ $\bar{3}$ $3, 3 \times m$ $3, 3 \times 2, 3 \times m, i$  $3, 3 \times 2$	$C_3$ $C_{3i}$ $C_{3v}$ $D_{3d}$  $D_3$	$3$ $\bar{3}$ $3m$ $3\frac{2}{m}$  $32$
四方 (tetragonal)  $a=b \neq c;$ $\alpha=\beta=\gamma = 90^\circ$	$4$  $4, m, i$  $4, 4 \times m$ $4, 2 \times 2, 2 \times m$	$C_4$ $S_4$ $C_{4h}$  $C_{4v}$ $D_{2d}$	$4$ $\bar{4}$ $4$ $\frac{4}{m}$  $4mm$ $\bar{4}2m$



# 第一章 晶体结构

晶 系	对称元素	熊夫利符号	国际符号
四方 (tetragonal)	$4, 4 \times 2$  $4, 4 \times 2, 5 \times m, i$	$D_4$  $D_{4h}$	$422$  $\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$
六方 (hexagonal)  $a=b \neq c;$ $\alpha=\beta=90^\circ$ $\gamma=120^\circ$	$6$ $\bar{6}$ $6, m, i$  $6, 6 \times m$ $6, 3 \times 2, 4 \times m$	$C_6$ $C_{3h}$ $C_{6h}$  $C_{6v}$ $D_{3h}$	$6$ $\bar{6}$ $\frac{6}{m}$  $6mm$ $\bar{6}m2$

# 第一章 晶体结构

晶 系	对称元素	熊夫利符号	国际符号
六方 (hexagonal)	$6, 6 \times 2$ $6, 6 \times 2, 7 \times m, i$	$D_6$ $D_{6h}$	$622$ $\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$
立方 (cubic) $a=b=c;$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	$4 \times 3, 3 \times 2$ $4 \times 3, 3 \times 2, 3 \times m, i$ $4 \times 3, 3 \times 4, 6 \times m$ $4 \times 3, 3 \times 4, 6 \times 2$ $4 \times 3, 3 \times 4, 6 \times 2,$ $9 \times m, i$	$T$ $T_h$ $T_d$ $O$ $O_h$	$23$ $\frac{2}{m} \bar{3}$ $\bar{4}3m$ $432$ $\frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$

## 1.7.4 晶系与布喇菲原胞

法国晶体学家**Bravais**（1811~1863）在考虑了对称性的情况下，用数学方法证明空间点阵只有**14种**：7种初基点阵和7种有心点阵。

根据对称性，这**14种布喇菲晶格（Bravais Lattice）**可以分为七大类或七大晶系（**crystal system**）、三十二种点群。

# 第一章 晶体结构

对称性	晶系	布喇菲晶胞类型	符号
低级	三斜 ( <b>triclinic</b> ) $a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma$	简单三斜	<b>P</b>
	单斜( <b>monoclinic</b> ) $a \neq b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	简单单斜 底心单斜	<b>P</b> <b>C</b>
中级	正交 ( <b>orthorhombic</b> ) $a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单正交 底心正交 体心正交 面心正交	<b>P</b> <b>C</b> <b>I</b> <b>F</b>

# 第一章 晶体结构

对称性	晶系	布喇菲晶胞类型	符号
中级	四方 ( <b>tetragonal</b> )	简单四方 体心四方	<b>P</b> <b>I</b>
	$a=b \neq c; \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 六方( <b>hexagonal</b> ) $a=b \neq c;$ $\alpha=\beta=90^\circ \gamma=120^\circ$	简单六方	<b>P</b>
	三方 ( <b>rhombohedral</b> ) $a=b=c; \alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	简单三方	<b>R</b>

# 第一章 晶体结构

对称性	晶系	布喇菲晶胞类型	符号
高级	立方 ( <b>cubic</b> ) $a=b=c; \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单立方 体心立方 面心立方	<b>P</b> <b>I</b> <b>F</b>

作业：

一、教材P.35 1.3; 1.6; 1.9; 1.10

二、绘出金刚石结构的两个面心立方子晶格的套购情况。

二、绘出立方晶胞里的晶向与晶面：

$[101]$ ;  $[12-2]$ ;  $[301]$

$(002)$ ;  $(1-30)$ ;  $(3-1-2)$

三、绘出六方晶胞里的晶向与晶面：

$[01-10]$ ;  $[11-20]$ ;  $[-1011]$

$(0003)$ ;  $(-1010)$ ;  $(01-11)$