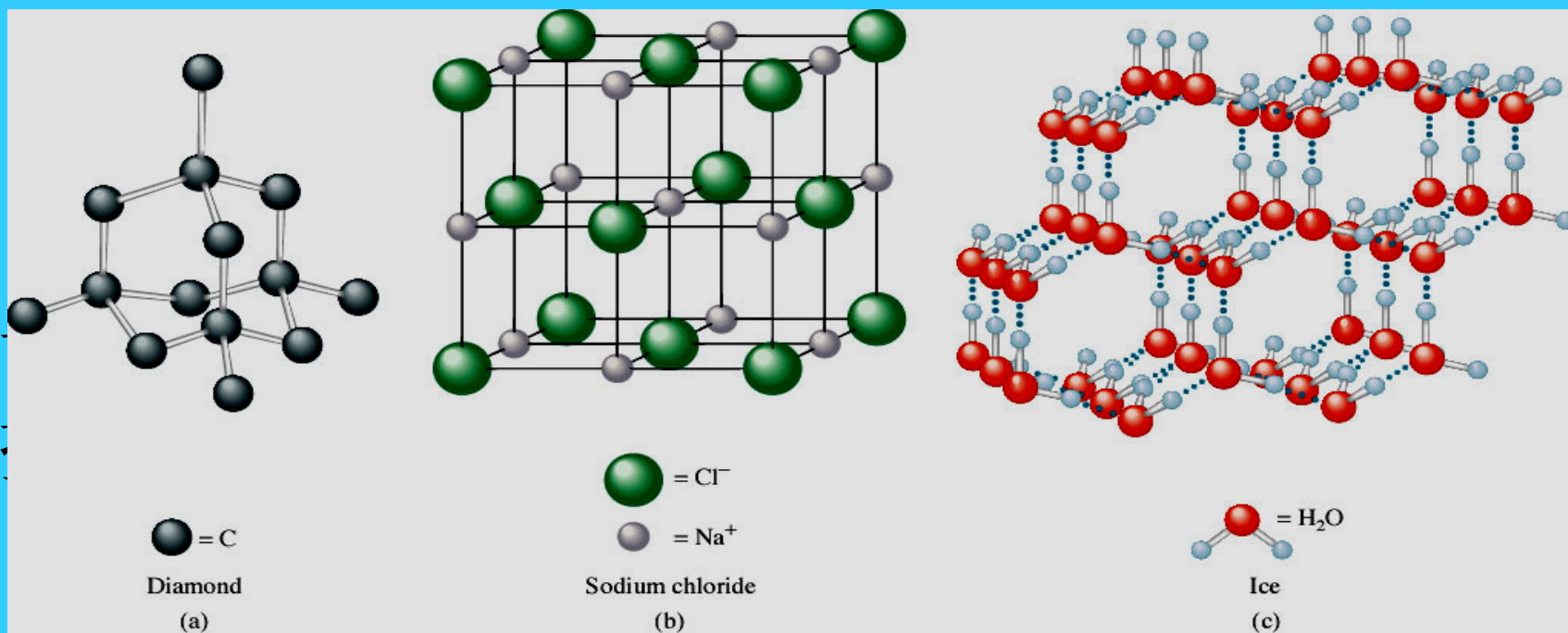


关于认识晶体完整版

一、晶体的特性

1. 晶体与非晶体



非晶体：内部原子或分子的排列呈现杂乱无章的分布状态。

2.晶体的特性

(1) 具有规则的几何外形。

(2) **自范性**：在适宜条件下，晶体能够自发地呈现封闭的、规则的多面体外形。

(3) **各向异性**：晶体在不同方向上表现出不同的物理性质。

(4) **对称性**：晶体的外形和内部结构都具有特有的对称性。

(5) **有固定的熔点**而非晶态没有。

3.晶体的种类

根据内部微粒的种类和微粒间的相互作用不同，将晶体分为离子晶体、金属晶体、原子晶体和分子晶体。

	离子晶体	金属晶体	原子晶体	分子晶体
内部微粒	阴、阳离子	金属原子	原子	分子
作用力	离子键	金属键	共价键	分子间作用力

二、晶体结构的堆积模型

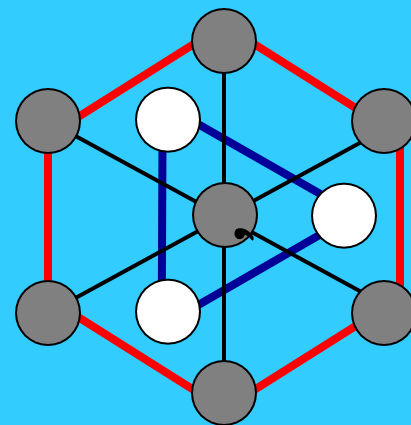
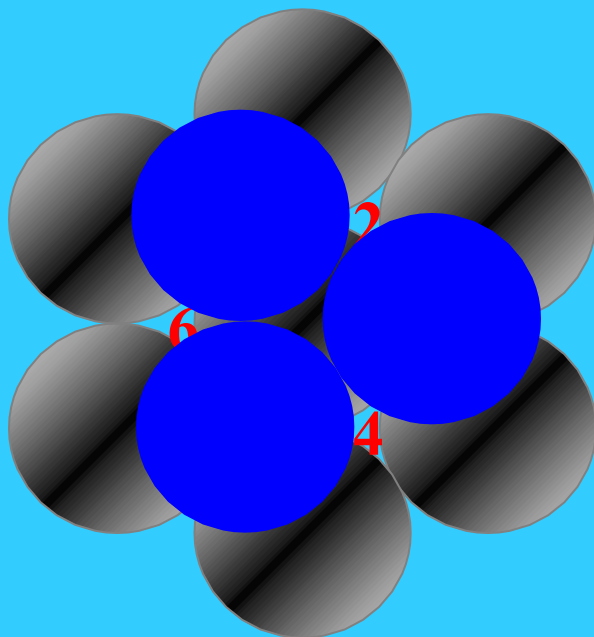
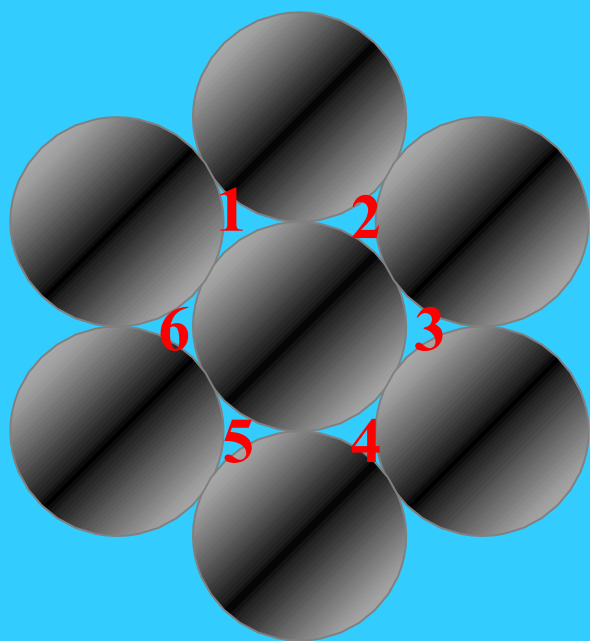
组成晶体的原子、离子或分子在没有其他因素（如氢键）影响时，在空间的排列大都服从紧密堆积原理，这是因为分别借助于没有方向性的金属键、离子键和分子间相互作用形成的金属晶体、离子晶体和分子晶体的结构中，都趋向于使原子或分子吸引尽可能多的原子或分子分布于周围，并以密堆积的方式降低体系的能量，使晶体变得比较稳定。

1.等径圆球的密堆积

由于金属键没有方向性，每个金属原子中的电子分布基本是球对称的，所以可以把金属晶体看成是由直径相等的圆球的三维空间堆积而成的。等径圆球的密堆积方式有 A_3 型最密堆积， A_1 型最密堆积。

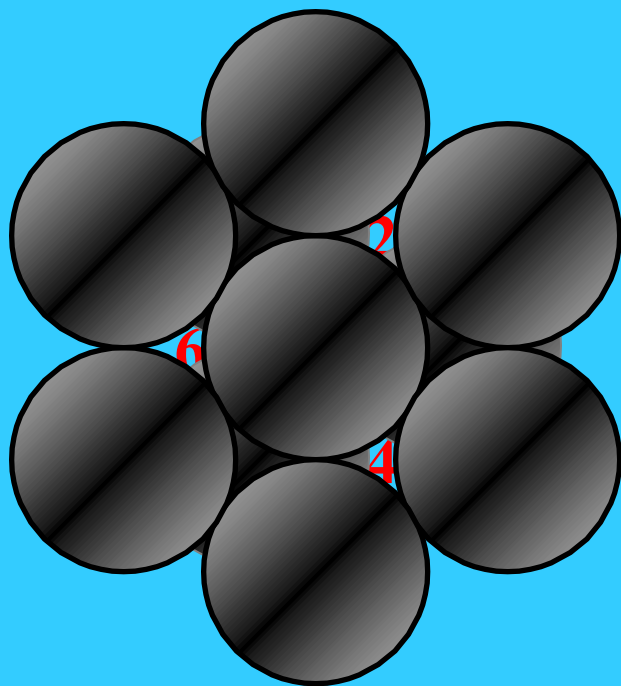
在一个层中，最紧密的堆积方式，是一个球与周围6个球相切，在中心的周围形成6个凹位，将其算为第一层。

第二层 对第一层来讲最紧密的堆积方式是将球对准
1, 3, 5 位。(或对准 2, 4, 6 位, 其情形是一样的)

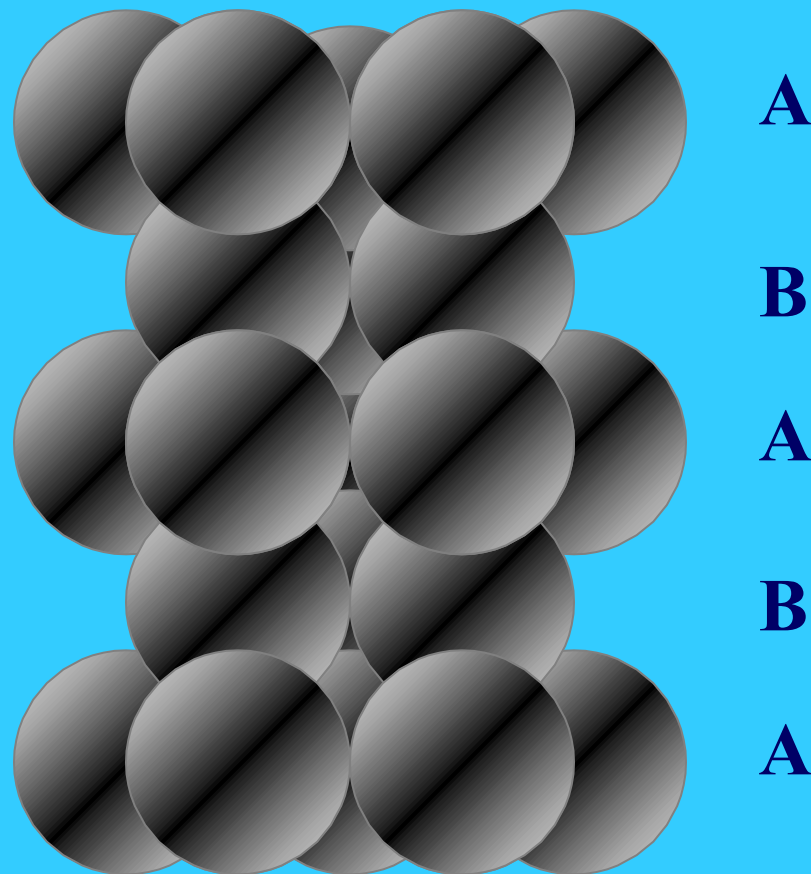


关键是第三层, 对第一、二层来说, 第三层可以有两种最紧密的堆积方式。

第一种是将球对准第一层的球。



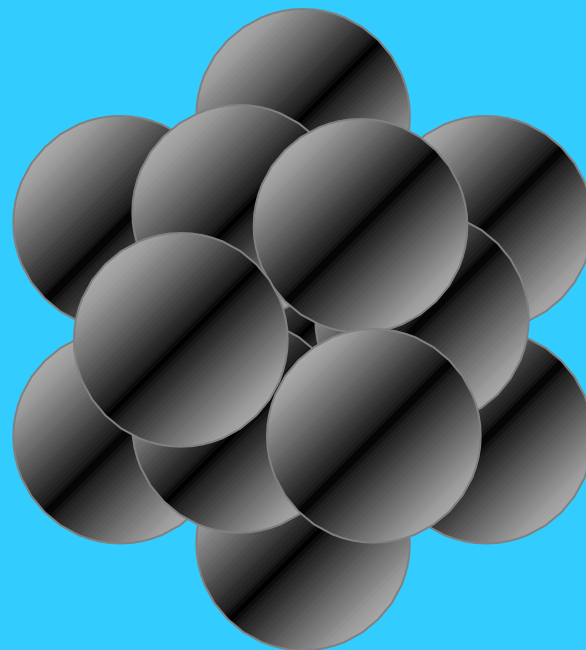
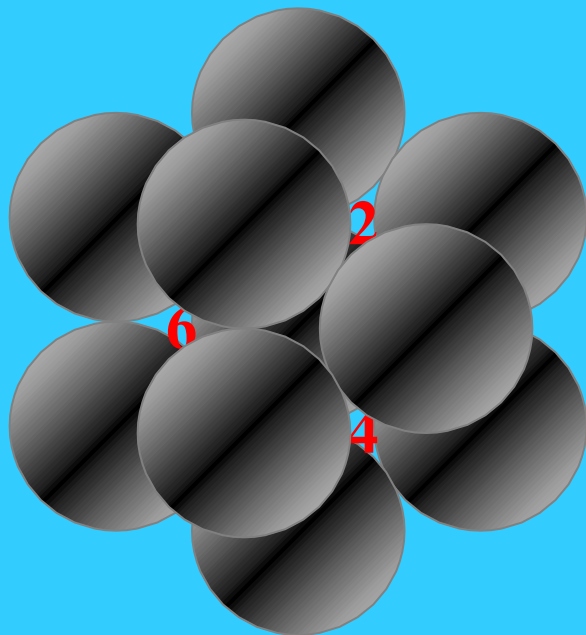
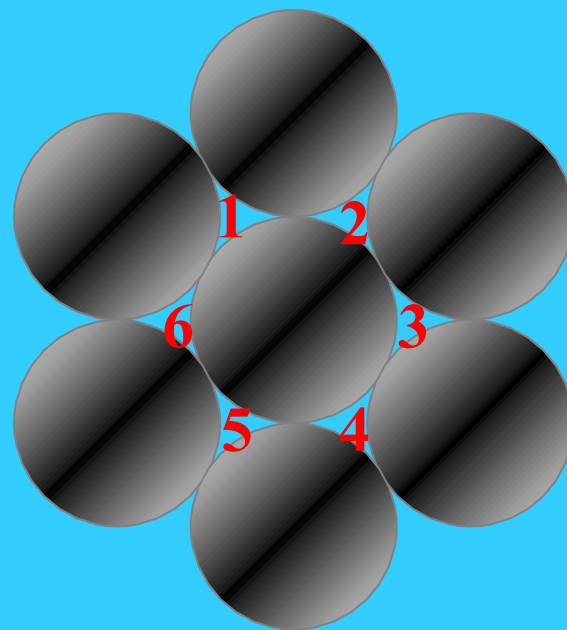
下图是 A_3 型六方紧密堆积的前视图



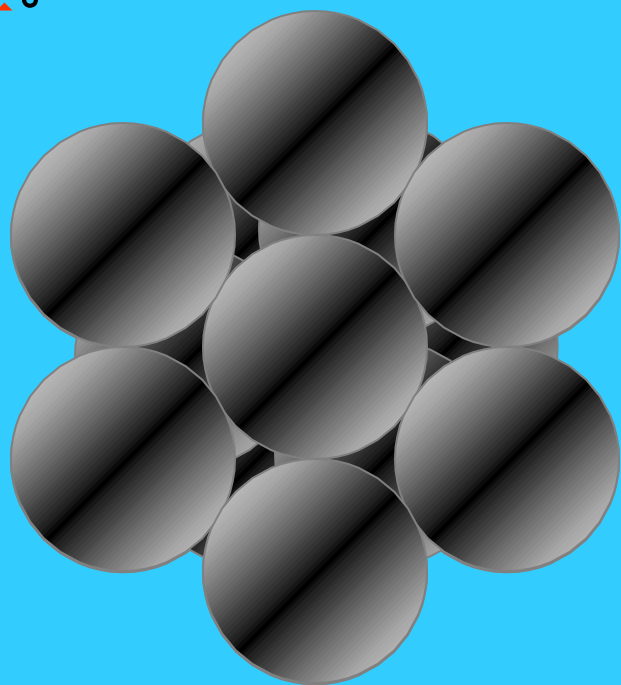
于是每两层形成一个周期，
即 AB AB 堆积方式，形成六
方紧密堆积--- A_3 型。

配位数 12。（同层 6，上下层各 3）

第三层的另一种排列方式，是将球对准第一层的 2, 4, 6 位，不同于 AB 两层的位置，这是 C 层。

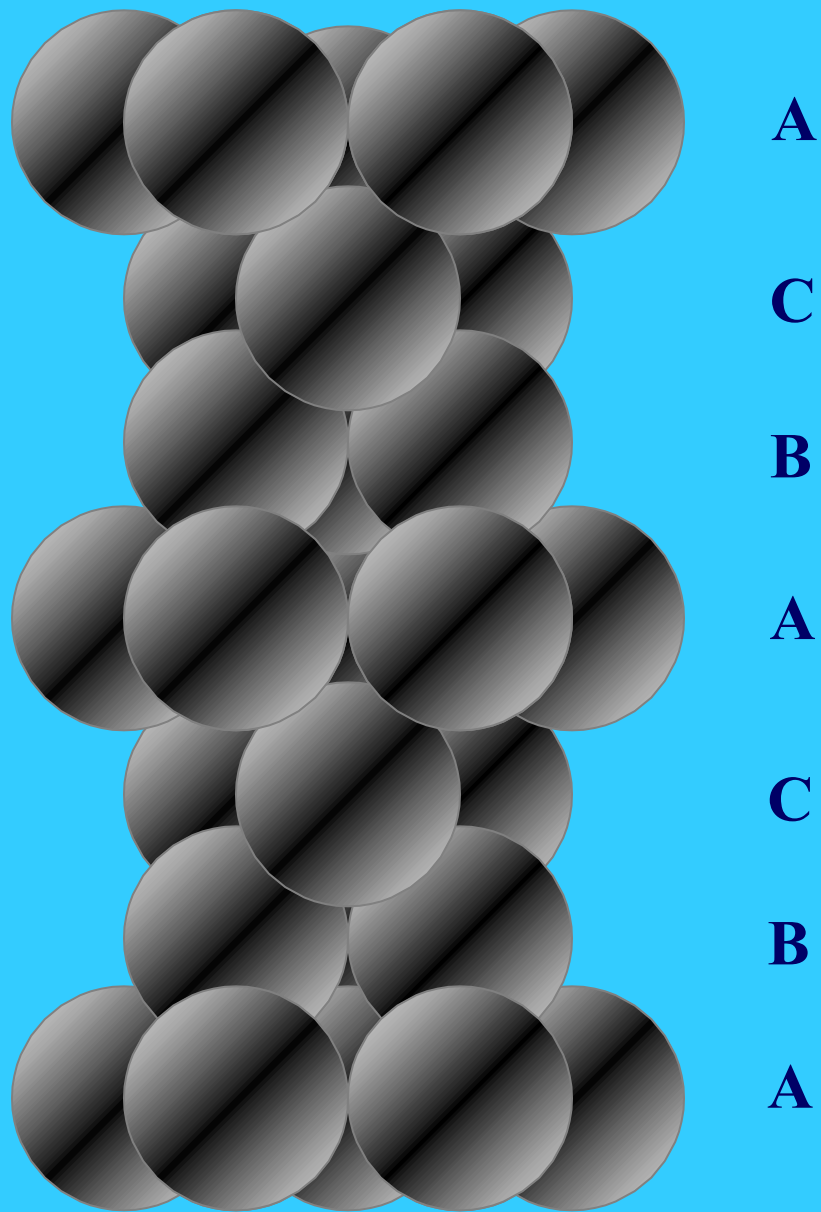


第四层再排 A，于是形成 ABC ABC 三层一个周期。得到面心立方堆积— A_1 型。



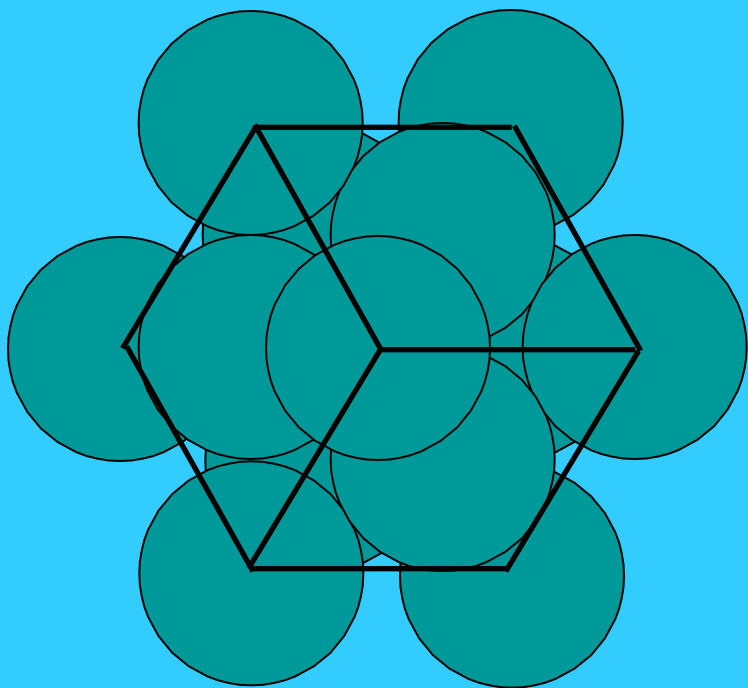
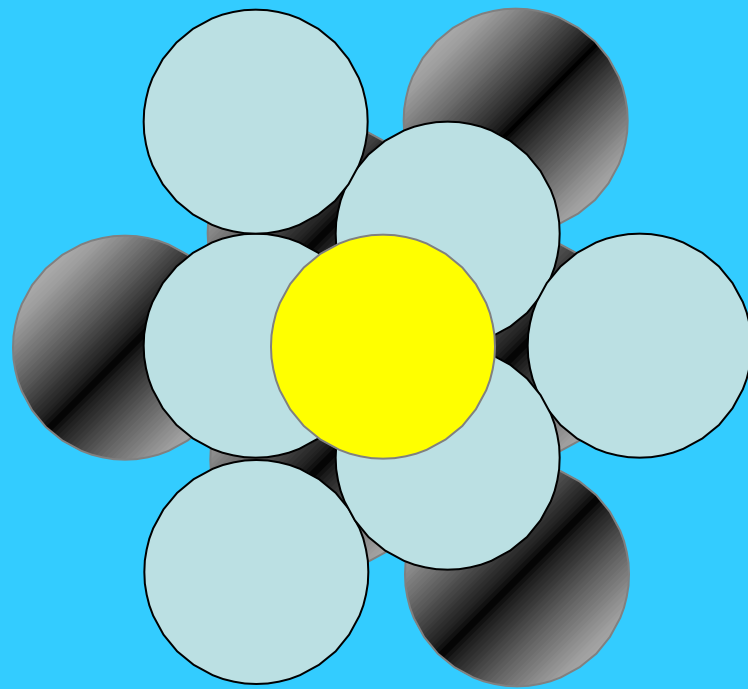
配位数 12。

(同层 6，上下层各 3)



面心立方紧密堆积的前视图

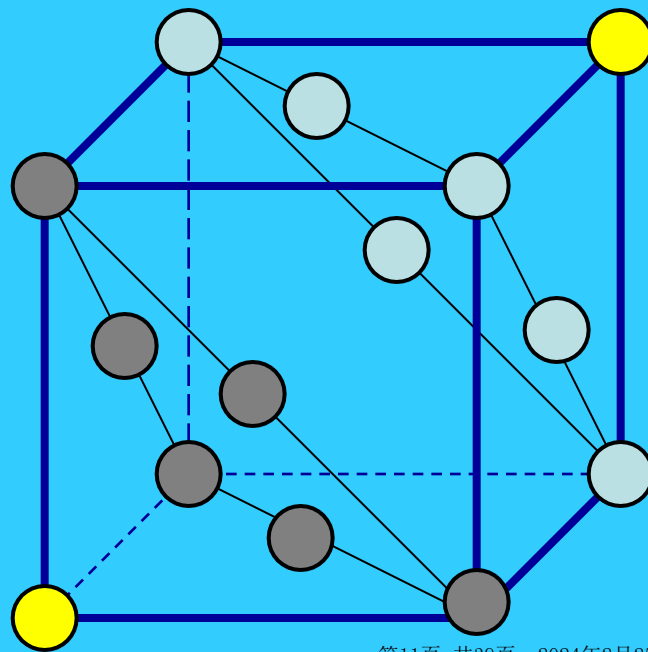
ABC ABC 形式的堆积，
为什么是面心立方堆积？
我们来加以说明。



C

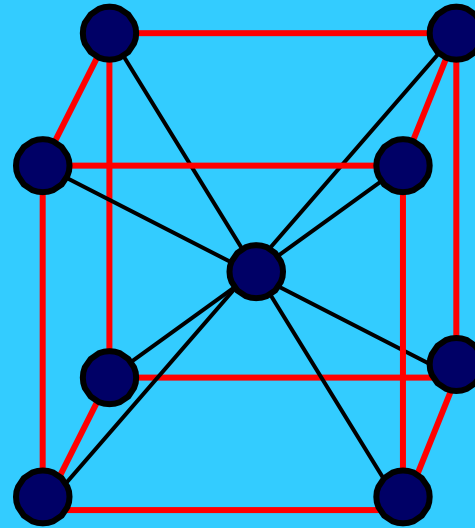
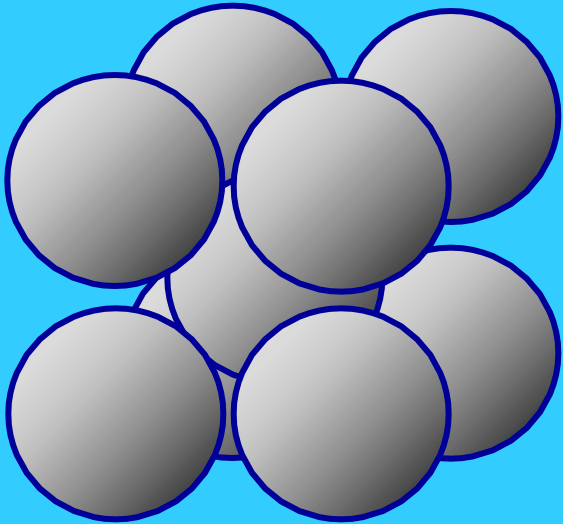
B

A



这两种堆积都是最紧密堆积，空间利用率为 74.05%。

还有一种空间利用率稍低的堆积方式—**A₂型**---立方体心堆积：
立方体 8 个顶点上的球互不相切，但均与体心位置上的球相切。
配位数 8，空间利用率为 68.02%。



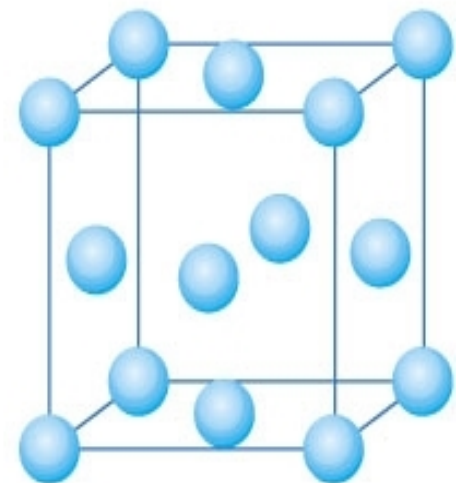
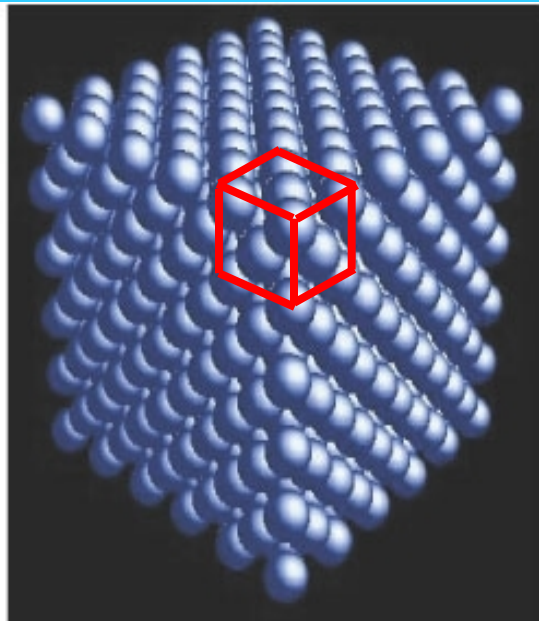
金属钾 K 的
立方体心堆积

金属的
堆积方式



六方紧密堆积
面心立方紧密堆积
立方体心堆积

晶体结构的基本单元——晶胞



蜂巢与蜂室

铜晶体

铜晶胞

三、晶体结构的基本单元----晶胞

1.晶胞

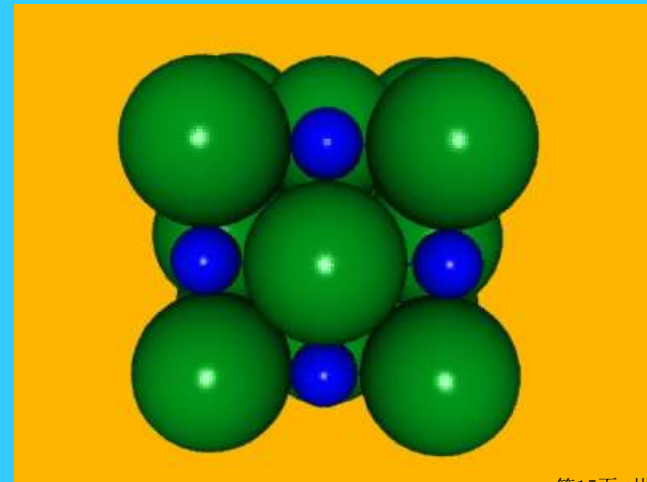
(1) 晶胞：从晶体中“截取”出来具有代表性的最小部分，是能够反映晶体结构特征的基本重复单位。代表晶体的化学组成。

(2) 晶胞一定是一个平行六面体。

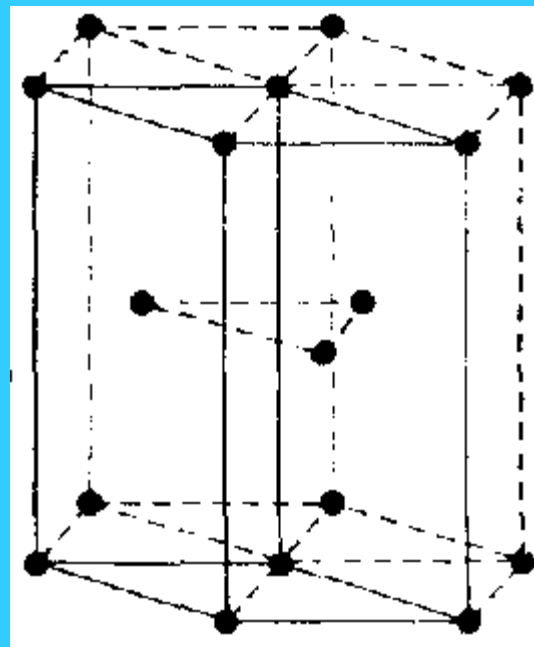
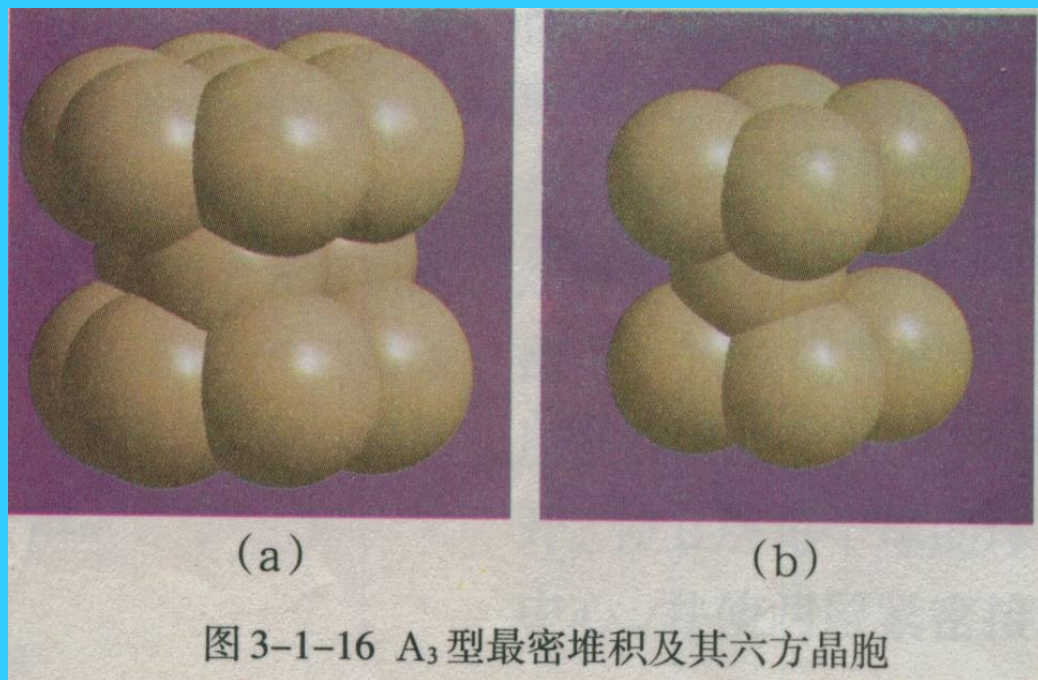
2.非等径圆球的密堆积

由离子构成的晶体可视为不等径圆球的密堆积，即将不同半径的圆球的堆积看成是**大球先按一定方式做等径圆球的密堆积。小球再填充在大球所形成的空隙中。**

配位数：一个原子或离子周围所邻接的原子或离子的数目。如**NaCl**配位数为**6**，即每个**Na⁺**离子周围直接连有**6**个**Cl⁻**，反之亦然。

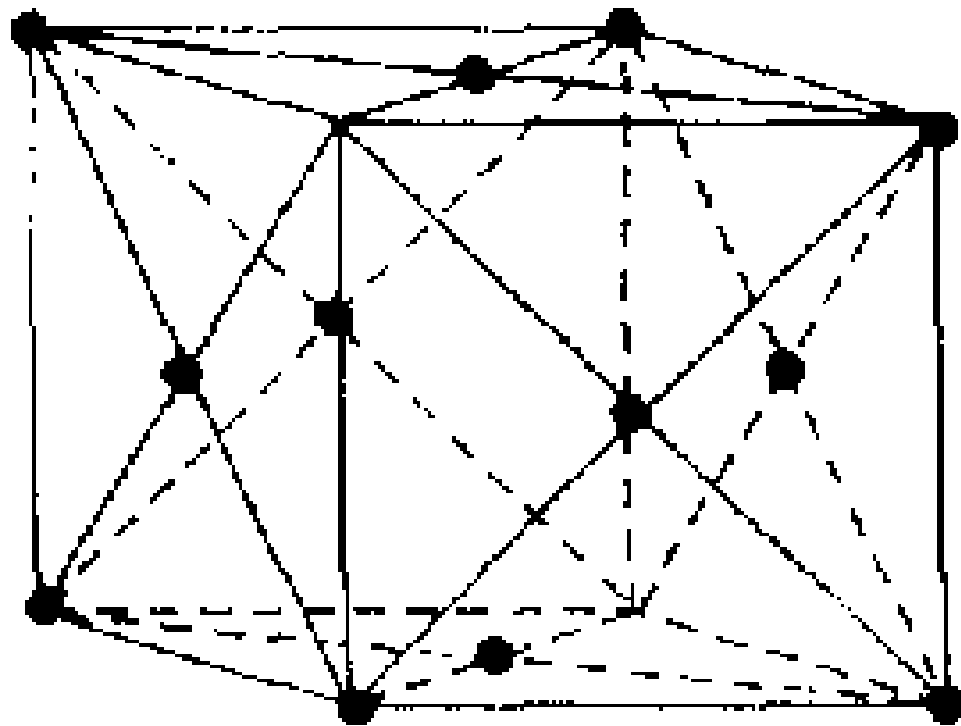
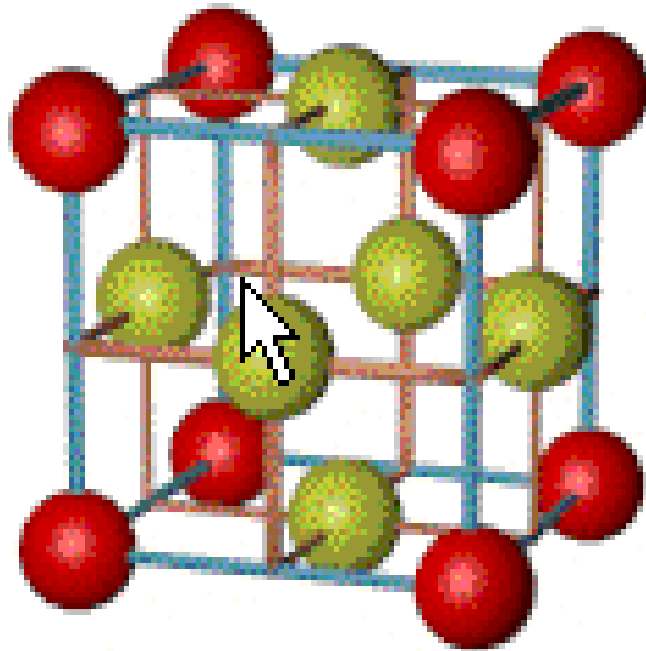


常见三种密堆积的晶胞



六方晶胞---- A_3 型

可看成由3个晶胞构成



面心立方晶胞---- A_1 型

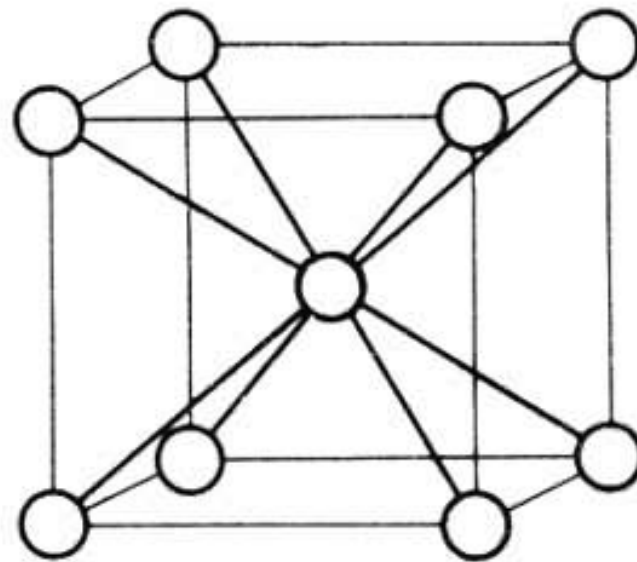
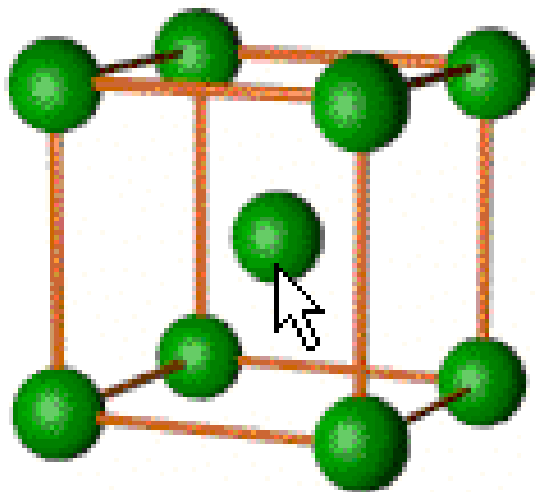
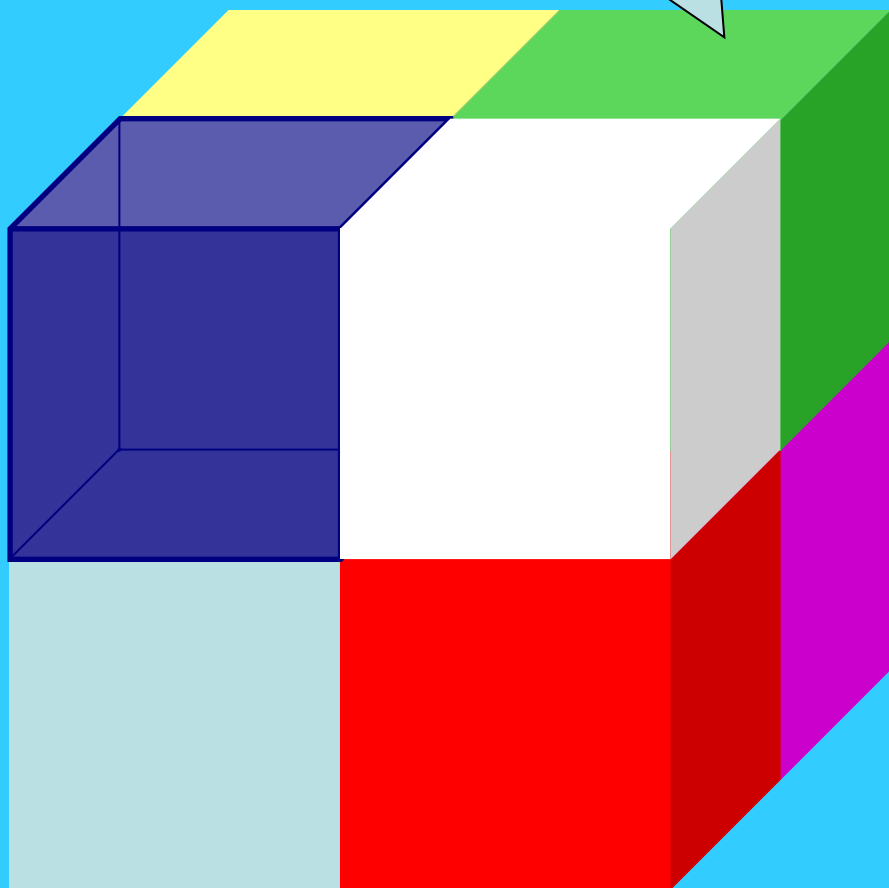


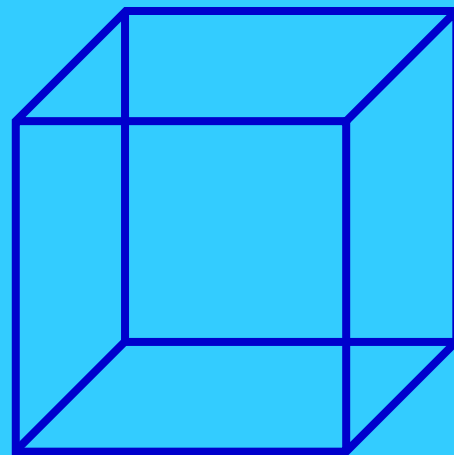
图 2 体心立方结构

体心立方晶胞---- A_2 型

无隙并置



平行六面体



以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/087122165052006060>