第一节 晶体学基础

一、晶体学分类及晶体的概念和特征

晶体学（Crystallography）：以晶体为研究对象的自然科学。

- 晶体学
  - 晶体生成学(Crystallogeny)
  - 几何结晶学(Geometrical Crystallography)
  - 晶体结构学 (Crystallogy)
  - 晶体化学(Crystallochemistry)
  - 晶体物理学(Crystallophysics)
- 晶体学
  - 经典晶体学
  - 近代晶体学
- 晶体、非晶体、液晶、准晶的概念及其基本特征

二、晶体结构与空间点阵

后退 下页

- **晶体结构**

　　指晶体中的原子、离子或分子的具体排列。它们能组成各种类型的排列，即不同的原子即使排列相同仍属不同的晶体结构，相同原子的不同排列方式晶体结构是不同的，因此，存在的晶体结构可能是无限多种的。

注意

后退 下页

●空间点阵

由几何点在三维空间作周期性的规则排列所形成的三维阵列。为了便于研究晶

中原子在空间分布的几何规律，先不去考虑具体的原子或分子，而把它们抽象为一个几何点，称为结点或阵点 。并不是晶体中的每一个质点都必定与空间点阵

- 空间点阵的基本特征

每一个阵点的周围空间均具有等同的环境。等同环境——当我们对每一个阵点从相同方向观察时，均呈现完全同样的景象，如果把连接任意两个近邻阵点的矢量起点放到第三个阵点上来，则此矢量的终点必落在第四个阵点上。

三、晶胞

将阵点用一系列相互平行的直线连接起来形成空间格架，即为晶格。构成晶格的最基本单元称为晶胞(简单晶胞和复杂晶胞)。选择晶胞应满足一定的原则：

(1)要能充分反应整个空间点阵的对阵性.

后退

下页

(2)在满足(1)的基础上，晶胞要具有尽可能多的直角.

(3)在满足(1) (2)的基础上.所选取的晶胞体积最小.

晶胞的选取是综合考虑了以下三点：

（1）晶胞中相等的边和直角最多。
（2）体积尽可能小。
（3）最能反映该点阵的对称特征。

注：

在所有实际晶体物质中，原子和分子在空间中作规则排列的。其排列方式都可以被归于某种布拉

非空间点阵类型。只是把阵点换成一定的原子或分子或原子团。对纯金属而言，最为简单，金属的原子（或正离子）中心占据着阵点的位置，对于化合物则比较复杂。因此晶体结构与空间点阵的联系，但又是两个不同的概念。

•晶胞的表示方法：

后退 下页

晶胞的形状由 $\alpha\beta\gamma$ 决定，晶胞的大小由**a,b,c**决定

$$\overrightarrow{OA}=\overrightarrow{r}_{uvw}=u\overrightarrow{a}+v\overrightarrow{b}+w\overrightarrow{c}$$

$\overrightarrow{r}$:从原点到某一阵点的矢量

uvw :表示阵点A的坐标

$\overrightarrow{a}, \overrightarrow{b}, \overrightarrow{c}$, :三个点阵矢量(基矢)

x, y, z :晶轴

不同晶体的晶胞，其大小和形状可能不同。

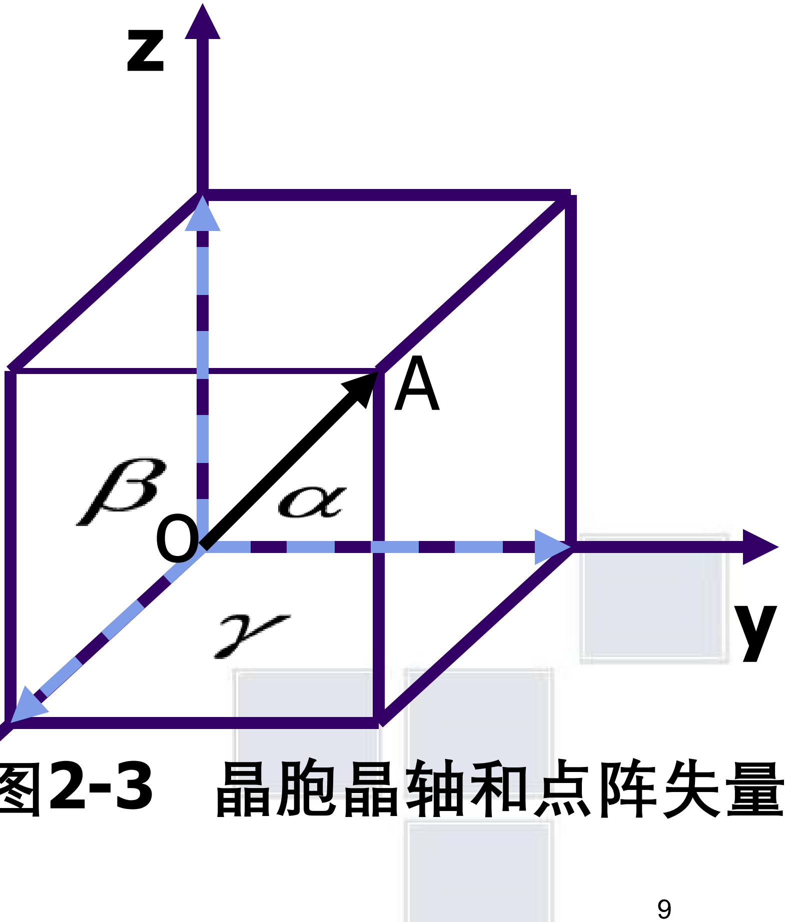

图2-3 晶胞晶轴和点阵矢量

四、晶系和布拉菲点阵

布拉菲点阵	晶系	棱边长度与夹角关系
简单立方 体心立方 面心立方	立方	$a=b=c$，$\alpha=\beta=\gamma=90°$
简单四方 体心四方	四方	$a=b\neq c$，$\alpha=\beta=\gamma=90°$
简单菱方	菱方	$a=b=c$，$\alpha=\beta=\gamma\neq 90°$
简单六方	六方	$a=b$，$\alpha=\beta=90°$，$\gamma=120°$
简单正交 底心正交 体心正交 面心正交	正交	$a\neq b\neq c$，$\alpha=\beta=\gamma=90°$
简单单斜 底心单斜	单斜	$a\neq b\neq c$，$\alpha=\beta=90°\neq\gamma$
简单三斜	三斜	$a\neq b\neq c$，$\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq 90°$

精彩动画

后退

下页

返回

总结

（1）在反应对称性的前提下，有且仅有**14**种空间点阵

（2）空间点阵与晶体结构的区别在于空间点阵各阵点的周围环境相同

（3）不同晶体结构可属同一点阵，而相似的晶体结构又可能属于不同的空间点阵

（4）晶系的分类只考虑晶胞的形状与大小，而空间点阵的分类考虑晶胞的形状与大小，以及阵点的具体排列

后退　下页

五、晶向及晶面指数

晶向——连接晶体中任意原子列的直线方向

晶面——晶体中原子组成的平面。

- 晶向指数确定的步骤

1.建立坐标系，令坐标原点在待标晶向上

2.找出该晶向上除原点以外的任意一点的坐标x,y,z

3.将x,y,z化成互质整数u,v,w.要求

$$u:v:w=x:y:z$$

4.将三数置于中括号内，就得到晶向指数$[uvw]$

后退　下页

●确定晶向指数时，坐标原点不一定非选在晶向上，若原点不在待标晶向上，那就需要找出该晶向上 (x_1, y_1, z_1) 和 (x_2, y_2, z_2) 两点的坐标 $(x_1 - x_2)$ $(y_1 - y_2)$ $(z_1 - z_2)$，然后将三个数化成互质整数 uvw，并使之满足：

$$u:v:w = (x_1 - x_2):(y_1 - y_2):(z_1 - z_2)$$

后退　下页

晶向指数

注意

（1）一个晶向指数 $[uvw]$ 代表着相互平行、方向一致的所有晶向

（2）晶体中原子排列情况相同但空间位向不同的一组晶向称为晶向族，用 $\langle uvw \rangle$ 表示。

（3）如果不是立方晶系，改变晶向指数的顺序所表示的晶向可能不是等同的。例如：

$$\langle 111 \rangle = [111] + [\bar{1}\bar{1}\bar{1}] + [11\bar{1}] + [\bar{1}\bar{1}1] + [\bar{1}11] + [1\bar{1}\bar{1}] + [1\bar{1}1] + [\bar{1}1\bar{1}]$$

后退 下页

•晶面指数的确定步骤：

晶面指数是表示晶体中点阵平面的指数，由晶面与三个坐标轴的截距值所决定。

（1）建坐标　图2-6所示，以晶胞的某一阵点为原点，以过原点的晶轴为坐标轴，以点阵常数a、b、c为三个坐标轴的长度单位，建立坐标系。应注意坐标原点的选取应便于确定截距，且不应选在待定晶面上。

后退　下页

（2）求截距　求出待定晶面在三个坐标轴上的截距。若该晶面与某坐标轴平行，则截距为∞。

（3）取倒数　取三个截距值的倒数。

（4）化整并加圆括号　将上述三个截距的倒数化为最小整数h、k、l，并加圆括号，即得待定晶面的晶面指数（hkl）。如果晶面在坐标轴上的截距为负值，则将

负号标注在相应指数的上方。

注：对于晶面指数需作如下说明：①晶面指数（hkl）不是一个晶面，而是代表着一组相互平行的晶面；②平行晶面的晶面指数相同，或数字相同而正负号相反，如（hkl）与（hkl）；③晶体中具有等同条件而只是空间位向不同的各组晶面称为晶面族，用$\{hkl\}$表示。

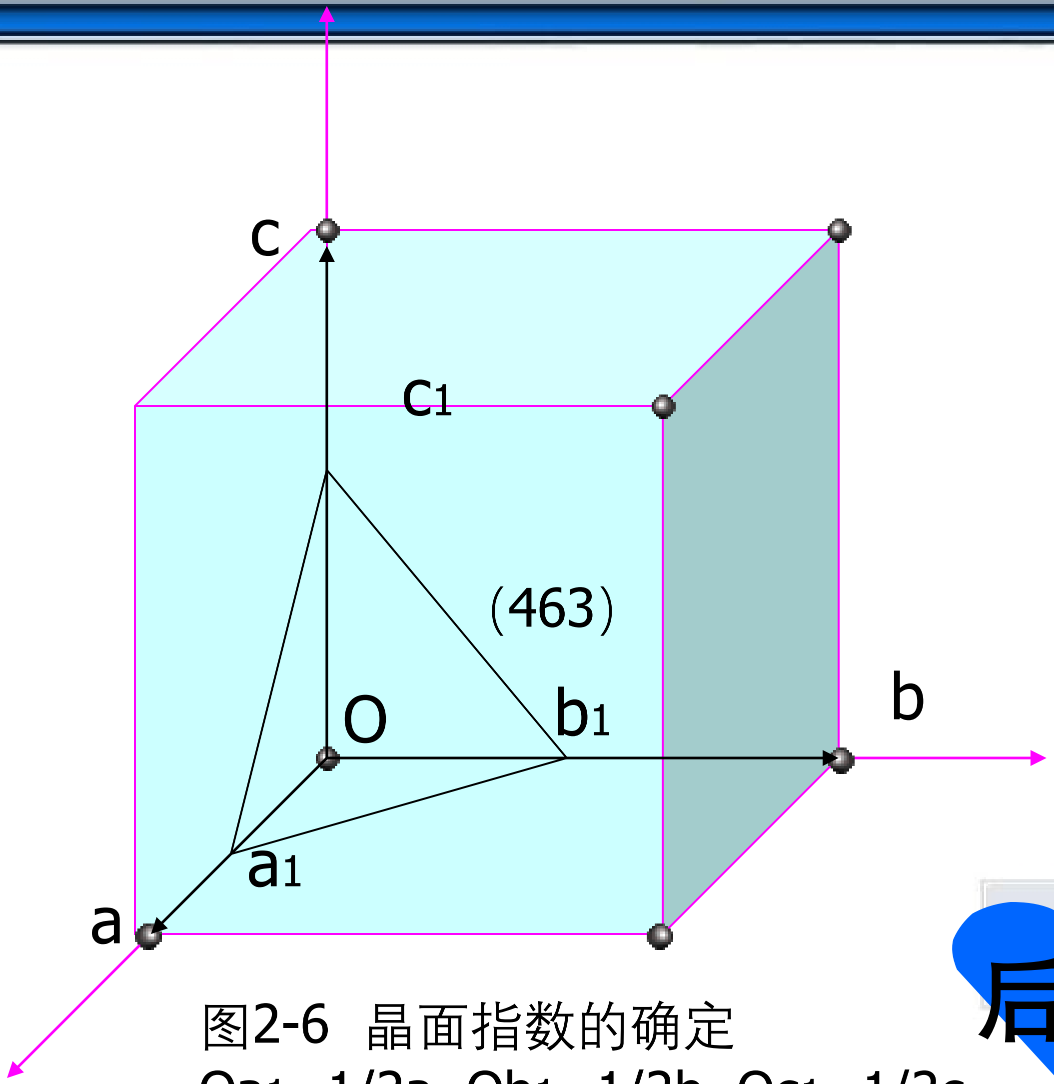

图2-6 晶面指数的确定

$Oa_1=1/2a$ $Ob_1=1/2b$ $Oc_1=1/2c$

后退 下页

在确定密勒指数时，还需规定几点：

（1）该晶面不能通过原点，因为这时截距为零，其倒数是无意义的，这时应选择与该晶面平行但不过原点的面来确定晶面指数或把坐标原点移到该面之外；

（2）当晶面与某晶轴平行时，规定其截距为∞，则截距的倒数为零；

(3)当晶面与坐标轴的负方向相交时，截距为负，该指数的负号最后标在数字的上方。

（4）由于任一晶面平移一个位置后仍然是等同的晶面，因此指数相同而符号相反的晶面指数是可以通用的。

后退　　下页

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/948112051025006037