第八章　晶体结构

第一节　14 种布拉维空间格子

1. 1 空间格子的划分原则:

平行六面体是空间格子中的最小重复单位，整个晶体结构可视为这种平行六面体在三维空间平行的、毫无间隙的重复堆砌而成。

在格子点阵中选择平行六面体需遵循以下原则：

a. 所选取的平行六面体应能反映结点分布整体所固有的对称性；

b. 在上述前提下，所选取的平行六面体中棱与棱之间的直角关系力求最多；

c. 在满足以上二条件的基础上，所选取的平行六面体的体积力求最小。

1. 2 各晶系空间格子的特征（晶胞参数）:

等轴晶系：$a=b=c$；$\alpha=\beta=\gamma=90^0$

四方晶系：$a=b\neq c$；$\alpha=\beta=\gamma=90^0$

六方晶系及三方晶系：$a=b\neq c$；$\alpha=\beta=90^0$，$\gamma=120^0$

三方晶系：$a=b=c$；$\alpha=\beta=\gamma\neq90^0$，$60^0$，$109^028'16''$

斜方晶系：$a\neq b\neq c$；$\alpha=\beta=\gamma=90^0$

单斜晶系：$a\neq b\neq c$；$\alpha=\gamma=90^0$，$\beta\neq90^0$

三斜晶系：$a\neq b\neq c$；$\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq90^0$

1. 3　4 种基本格子类型和 14 种布拉维格子。

4 种基本格子类型

（1）原始格子（P）：结点分布于平行六面体的 8 个角顶上。

（2）底心格子：结点分布于平行六面体的角顶及某一对面的中心。其中，根据面中心点的位置特点又可细分为：

①C 心格子（C）；结点分布于平行六面体的角顶和平行（001）一对面的中心。

②A 心格子（A）：结点分布于平行六面体的角顶和平行（100）一对面的中心。

③B 心格子（B）：结点分布于平行六面体的角顶和平行（010）一对面的中心。

一般情况下称谓的底心格子指的是 C 心格子。

（3）体心格子（I）：结点分布于平行六面体的角顶和体中心。

（4）面心格子（F）：结点分布于平行六面休的角顶和三对面的中心。

14 种布拉维空间格子

中国地质大学（北京）岩石矿物教研室

综合考虑平行六面体的形状及结点的分布情况，在晶体结构中只可能出现 14 种不同形式的空间格子。这是由布拉维（A．Bravals）于 1848 年最先推导出来的，故称为 14 种布拉维格子。分别是：

三斜晶系原始格子；

单斜晶系原始格子；单斜晶系底心格子；

斜方晶系原始格子；斜方晶系底心格子；斜方晶系体心格子；斜方晶系面心格子；

四方晶系原始格子；四方晶系体心格子；

三方晶系原始格子；

六方晶系原始格子；

等轴晶系原始格子；等轴晶系体心格子；等轴晶系面心格子。

第二节　晶体结构的对称性

2．1 晶体结构对称与外部对称的联系与区别：

晶体的宏观对称是由其内部结构上的对称性所决定的，两者有着密切的联系。由于晶体的外形是有限图形，它的宏观对称是有限图形的对称，而晶体内部质点的周期性平移重复从微观角度来看是无限的，故晶体内部结构的对称属于微观无限图形的对称，晶体外部对称与结构对称之间既有联系又有区别。

2．2 晶体结构特有的对称要素和对称操作：

1）.平移轴与平移操作

2）.螺旋轴与旋转加平移操作

3）. 滑移面与反映加平移操作

2．3　空间群与等效点系概念：

空间群（space group）是晶体内部结构所有对称要素的组合。

等效点系（equipoints）是指晶体结构中由一原始点经空间群中所有对称要素的作用所推导出来的规则点系。

2．4 空间群国际符号的书写规律：

空间群的国际符号由格子类型＋内部对称要素组合两个部分组成，格子类型用大写英文字母 P、C（A、B）、I、F 表示；内部对称要素组合在对称型国际符号基础上，将其中某些宏观对称要素的符号换成相应的内部结构对称要素的符号即可。

2．5 晶体结构类型典型结构分析：

在晶体化学中，常根据最强化学键在结构空间的分布和原子或配位多面体联结的形式，将晶体结构划分为如下几种类型：

1）岛状（island）

2）环状 (cycle)

3）链状 (chain)

4）层状 (sheet)

5）架状 (framwork)

中国地质大学（北京）岩石矿物教研室

6）配位型 (coordinate)

7）分子型 (molecular)

不同晶体的结构，若其对应质点的排列方式相同，则称它们的结构是等型的。结构型常以某一种晶体为代表而命名，这些作为代表的晶体结构称之为典型结构。

晶体结构分析应注意以下内容：

(1) 格子类型分析；

(2) 堆积形式及配位数、配位多面体分析；

(3) “Z”值分析：此处“Z”是指单位晶胞中所含的相当于化学式的“分子数”。

第三节　晶格缺陷

在实际晶体中，由于内部质点的热振动以及受到辐射、应力作用等原因，而普遍存在着晶格缺陷。它是一种在晶体结构中的局部范围内，质点排列偏离了格子构造规律的现象。

晶格缺陷按其在晶体结构中分布的几何特点可分为点缺陷、线缺陷、面缺陷、体缺陷 4 种类型。

点缺陷（point defect）是发生在一个或若干个质点范围内所形成的晶格缺陷。最常见的点缺陷表现形式有下列几种。

1）空位

2）填隙

3）替位

线缺陷(line defect)是指：在晶体内部结构中沿某条线（行列）方向上的周围局部范围内所产生的晶格缺陷。它的表现形式主要是位错。

有二维空间的缺陷称**面缺陷**(plane defect)，它们是指沿晶格内或晶粒间某些面的两侧局部范围内所出现的晶格缺陷。面缺陷包括平移表面、堆垛层错、界面（晶界、畴界）、相界面等。

中国地质大学（北京）岩石矿物教研室