

目 录

第一章 晶体学基础

§ 1-1 晶体的对称和点群	(1)
一、对称 (宏观对称素)	(1)
二、点 群	(3)
§ 1-2 空间点阵	(7)
一、空间点阵的建立	(7)
二、布喇菲点阵	(7)
三、点阵方向和点阵平面指数	(10)
§ 1-3 空间群	(14)
一、晶体结构的微观对称素	(14)
二、点群和空间群的关系	(16)
三、空间群符号	(17)
§ 1-4 晶体结构和布喇菲点阵	(19)
一、平移算符	(20)
二、两种晶体布喇菲点阵	(21)

第二章 电子及X射线的性质

§ 2-1 电子的性质	(24)
一、电子的散射	(26)
二、电子与固体物质作用产生的信息	(27)
§ 2-2 X射线的性质	(31)
一、X射线的波粒二象性	(31)
二、X射线管	(33)
三、X射线谱	(34)
四、X射线与物质的相互作用	(40)

第三章 晶体的衍射效应及衍射几何

§ 3-1 可见光的光栅衍射现象	(50)
§ 3-2 X射线衍射的基本原理	(52)
一、X射线在晶体中的衍射	(52)
二、劳埃方程	(53)
三、布拉格方程	(57)
四、倒易点阵	(64)
五、衍射矢量方程及厄瓦尔德图解	(75)

§ 3-3 薄晶体的电子衍射.....	(79)
一、单晶体电子衍射花样.....	(80)
二、多晶体电子衍射花样.....	(80)

第四章 X射线和电子衍射的强度

§ 4-1 一个电子对X射线的散射.....	(83)
一、强度定义.....	(83)
二、一个电子对X射线的散射.....	(84)
§ 4-2 一个原子的散射.....	(85)
一、一个原子对X射线的散射.....	(85)
二、一个原子对电子波的散射.....	(86)
§ 4-3 一个晶胞的散射.....	(87)
§ 4-4 结构因素或结构振幅的计算.....	(90)
一、一些有用的关系.....	(91)
二、结构因数计算举例.....	(91)
§ 4-5 一个小晶体的衍射.....	(95)
一、偏离布拉格条件下的晶体衍射.....	(95)
二、一个小晶体衍射束强度的推导.....	(96)
三、倒易点的形状和大小.....	(99)
四、倒易杆与衍射束.....	(99)
§ 4-6 粉末衍射的积分强度.....	(100)
一、非理想条件下的衍射.....	(100)
二、粉末多晶体的衍射.....	(101)
三、衍射强度计算举例.....	(107)

第五章 X射线衍射分析设备

§ 5-1 X射线晶体分析仪.....	(112)
一、X射线管.....	(112)
二、供电系统.....	(114)
三、X射线相机.....	(115)
四、晶体单色器.....	(119)
§ 5-2 X射线衍射仪.....	(121)
一、X射线衍射仪的结构原理和光学系统.....	(121)
二、探测器.....	(124)
三、测量系统.....	(131)
§ 5-3 X射线设备的新进展.....	(133)
一、衍射仪的计算机控制.....	(133)
二、新的衍射仪附件.....	(133)
三、高强度X射线源.....	(134)

四、新型探测器	(134)
五、新型X射线衍射仪	(135)

第六章 电子显微镜

§ 6-1 电子光学基础	(138)
一、光学显微镜的局限性	(138)
二、电场对电子的作用 静电透镜	(139)
三、磁场对电子的作用 电磁透镜	(140)
四、电磁透镜的像差	(142)
五、电子光学系统的分辨率	(144)
六、场深和焦深	(146)
§ 6-2 透射电子显微镜	(147)
一、镜筒	(148)
二、真空系统	(152)
三、供电系统	(153)
§ 6-3 扫描电子显微镜	(153)
一、扫描电子显微镜的工作原理和结构	(153)
二、扫描电子显微镜在材料研究中的应用	(161)
§ 6-4 试样制备	(162)
一、透射电镜的试样制备	(162)
二、扫描电镜的试样制备	(168)
§ 6-5 电子显微镜的新发展	(168)

第七章 多晶体X射线衍射和单晶体电子衍射花样指数标定

§ 7-1 X射线粉末衍射花样指数标定和晶体结构测定原理	(171)
一、立方晶系衍射花样的指数标定	(172)
二、非立方晶系衍射花样的指数标定(图解法)	(174)
三、晶胞中原子位置的测定	(178)
四、相图与衍射花样	(179)
§ 7-2 电子衍射与电子衍射仪	(180)
§ 7-3 电子显微镜中的电子衍射	(182)
一、电子显微镜中的电子衍射	(182)
二、有效相机常数	(182)
三、选区电子衍射	(183)
四、选区误差	(185)
§ 7-4 多晶体和单晶体电子衍射花样	(187)
一、多晶体电子衍射花样	(187)
二、单晶体电子衍射花样	(187)
§ 7-5 简单电子衍射花样的指数标定	(190)

一、立方系单晶体已知物质的衍射指数标定	(191)
二、入射束方向	(195)
三、非立方系单晶体衍射花样指数标定	(195)
四、未知晶体衍射斑点的标定	(199)
五、 180° 不唯一性	(199)
§ 7-6 复杂电子衍射花样	(201)
一、基矢变换和指数变换(基础知识)	(201)
二、高阶劳埃带	(203)
三、双晶带电子衍射和应用	(209)
四、菊池线	(210)
五、二次电子衍射	(215)
六、孪晶电子衍射	(216)
第八章 物相分析	
§ 8-1 X射线物相定性分析	(221)
一、物相定性分析的原理和方法	(221)
二、卡片	(222)
三、索引	(223)
四、分析步骤	(224)
五、定性物相分析应注意的问题	(225)
六、定性物相分析应用举例	(226)
§ 8-2 X射线物相定量分析	(228)
一、基本原理	(228)
二、外标法	(229)
三、内标法	(230)
四、直接对比法	(232)
五、定量物相分析应注意的问题	(235)
§ 8-3 其他相分析法	(237)
一、化学相分析法	(237)
二、金相法	(239)
第九章 内应力的测量	
§ 9-1 引言	(242)
§ 9-2 X射线法宏观应力的测量	(242)
一、X射线法的特点	(242)
二、测量原理	(243)
三、测量方法	(247)
四、测量技术	(250)
§ 9-3 钻孔法宏观应力的测量	(257)

§ 9-4 微观应力和晶粒尺寸的测定	(259)
一、微观应力对X射线衍射线的影	(259)
二、晶粒尺寸对X射线衍射线的影	(260)
三、仪器宽度的扣除方法	(262)
四、微观应力和晶粒尺寸的测定	(266)
§ 9-5 宏观应力测定的新发展	(267)
一、三维应力的测量方法	(267)
二、织构材料中残余应力的测量方	(270)

第十章 劳埃法与单晶定向

§ 10-1 晶体投影	(273)
一、球面投影及极射赤面投影	(273)
二、吴氏网、极式网及其应用	(276)
三、晶带的极射赤面投影	(281)
四、标准极射赤面投影(标准投影)	(282)
§ 10-2 劳埃法	(285)
一、劳埃实验方法的一般介绍	(285)
二、劳埃斑点及分布规律	(286)
三、劳埃法的厄瓦尔德图解	(288)
§ 10-3 单晶体取向的测定	(290)
一、透射劳埃法测定单晶取向	(290)
二、背射劳埃法测定单晶取向	(295)
三、衍射仪法测定单晶取向	(297)

第十一章 多晶体范性形变后的衍射效应

§ 11-1 点阵应变效应	(301)
§ 11-2 回复和再结晶效应	(303)
§ 11-3 多晶体材料的择优取向	(306)
§ 11-4 线材织构(丝织构)——照相法	(309)
§ 11-5 板材织构	(312)
一、透射法测定板材织构极图	(313)
二、反射法测量极图	(315)
三、极图分析	(317)
四、反极图	(319)

第十二章 扫描电子显微镜和透射电子显微镜成像原理

§ 12-1 扫描电子显微镜成像原理	(321)
一、二次电子像	(321)
二、背散射电子像	(323)

三、吸收电子像·····	(324)
四、透射电子像·····	(325)
五、电子通道花样·····	(325)
§ 12-2 透射电子显微镜成像原理·····	(327)
一、复型试样成像原理·····	(327)
二、衍射衬度像·····	(329)
三、完整晶体中衍射像运动学理论·····	(331)
四、不完整晶体中衍射像运动学理论·····	(339)
五、衍射像动力学理论概要·····	(348)
六、多相合金的衍射和衬度效应·····	(355)

第十三章 材料化学成分的物理分析方法

§ 13-1 电子探针X射线显微分析·····	(367)
一、仪器结构及工作原理·····	(367)
二、X射线谱仪·····	(369)
三、定量分析·····	(374)
四、分析方法及应用举例·····	(376)
§ 13-2 离子探针显微分析·····	(377)
§ 13-3 俄歇电子能谱分析·····	(379)
一、概 述·····	(379)
二、谱仪的结构原理·····	(380)
三、谱仪的应用·····	(382)
四、低能电子衍射·····	(382)
§ 13-4 X射线光电子能谱分析·····	(383)
§ 13-5 荧光X射线分析·····	(384)
一、概 述·····	(384)
二、谱仪结构·····	(385)
三、定性分析·····	(386)
四、定量分析·····	(386)
五、能谱分析·····	(390)

第十四章 分析电子显微术简介

§ 14-1 扫描透射电子显微术·····	(391)
一、扫描透射电子显微像·····	(391)
二、扫描透射显微术的特点·····	(393)
§ 14-2 薄膜晶体X射线显微分析原理·····	(393)
一、引 言·····	(393)
二、薄膜厚度判据·····	(394)
三、电子束展宽 空间分辨率·····	(395)

四、非试样散射.....	(396)
五、试验条件选择.....	(397)
六、应用举例——比值法.....	(398)
§ 14-3 电子能量损失谱(EELS).....	(399)
一、引言.....	(399)
二、EELS装置原理.....	(399)
三、能量损失谱.....	(404)
§ 14-4 微衍射.....	(405)
一、引言.....	(405)
二、会聚束衍射.....	(405)
三、聚焦电子束微衍射.....	(407)
四、聚焦光栅电子束微衍射.....	(408)
五、摇摆束微衍射.....	(408)
六、微衍射的应用.....	(409)

第十五章 原子核环境的研究方法

§ 15-1 原子核的电、磁行为.....	(411)
一、原子核的构成.....	(411)
二、原子核磁矩和电四极矩.....	(411)
三、原子核放射性衰变.....	(416)
§ 15-2 穆斯堡尔效应.....	(418)
一、基本原理.....	(419)
二、实验方法.....	(423)
三、穆斯堡尔谱提供的信息.....	(425)
四、穆斯堡尔谱在材料研究中的应用.....	(428)
§ 15-3 核磁共振.....	(431)
一、基本原理.....	(431)
二、弛豫过程.....	(433)
三、实验方法.....	(434)
四、核磁共振谱的主要参数和提供的信息.....	(436)
五、核磁共振在材料研究中的应用.....	(439)
六、穆斯堡尔效应和核磁共振方法比较.....	(441)

第十六章 非晶态的结构分析

§ 16-1 非晶态简介.....	(443)
§ 16-2 非晶态固体的结构模型.....	(444)
§ 16-3 非晶态结构的测定.....	(446)
一、X射线衍射法.....	(446)
二、扩展X射线吸收谱精细结构法.....	(451)

三、电子显微法.....	(453)
§ 16-4 非晶态的晶化研究方法.....	(454)
一、X射线衍射法 结晶度的测定.....	(455)
二、电子显微法 晶化相结构的测定.....	(458)

附 录

附录1 点阵几何.....	(460)
附录2 立方晶系晶面(或晶向)间的夹角.....	(462)
附录3 六个晶系的矩阵G和G ⁻¹	(466)
附录4 某些特征X射线的波长、能量及吸收限.....	(467)
附录5 质量吸收系数(μ/ρ)和密度(ρ).....	(469)
附录6 原子散射因数.....	(472)
附录7 原子散射因数在吸收限近旁的增量Δf.....	(474)
附录8 μ _r <5的圆柱粉末试样吸收因数A(θ).....	(475)
附录9 德拜-瓦洛温度因数.....	(476)
附录10 洛伦兹-偏振因数 ($\frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta}$).....	(477)
附录11 粉末照片的多重性因数.....	(479)
附录12 物理常数.....	(479)
附录13 电子的原子散射振幅f _e (Å).....	(480)
附录14 立方晶系和c/a=1.834六方晶体标准衍射图.....	(481)
附录15 消光距离.....	(489)
附录16 电镜试样减薄技术.....	(490)
附录17 标定电子衍射花样用表.....	(494)
附录18 元素的物理性质.....	(512)
参考文献.....	(514)

第一章 晶体学基础

§ 1-1 晶体的对称和点群

一、对称 (宏观对称素)

对称,按字面讲,就是两个物体相对而又相称。因此,把这两个物体对换一下,还像没有动过一样。严格地说,如果一个物体经过某种操作之后能够完全恢复原状,即物体上某一点新位置与开始时另外一点在这个位置上的状态完全重合,我们称物体是对称的。使该物体回复原状的动作称为对称操作。在操作时,使用物体中某些轴、面或点作为参考中心,则这些轴、面或点都称为对称素。自然界中和日常生活中,人们都可以见到大量的不同程度对称的物体,其中特别是晶体具有高度的、明显的对称性。图1-1(a)为黄铜矿晶体,(b)为碘丁二酰亚胺晶体。不难看出,这两个晶体至少绕z轴是对称的。

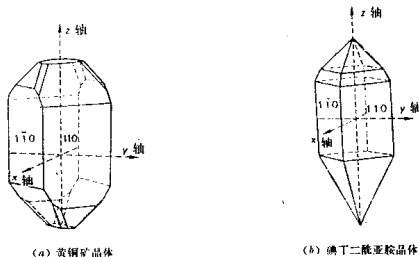


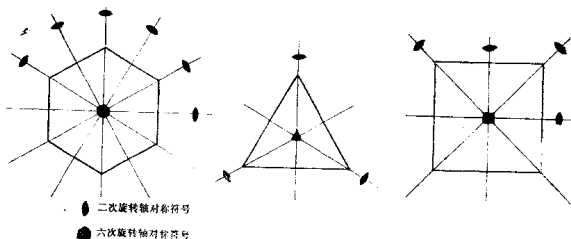
图1-1 两种实际晶体的对称外形

对大量晶体外形对称性的研究表明,任何晶体至少具有四种对称素中的一种,这四种对称素是:转动,反映,反演和转动-反演。

1. 转动

当一物体绕晶体中某根轴转动 $360^\circ/n$ 而能与其本身重合时,称该物体对该轴具有n次旋转对称,称该对称轴为n次轴。二次、三次、四次和六次轴分别用●、▲、■和◆符号表示。一块晶体可以同时具有几个对称轴,对称性越高对称轴数目也越多。图1-2(a)、(b)和(c)用3个平面图形来说明二、三、四和六次轴对称。3个图形中心的六次、三次和四次对称轴垂直于图面,而各个二次轴皆处于图面内。当 $n=1$ 时,我们说该物体具有一次旋转对称轴,实际上该物体并不表现出轴对称特性。

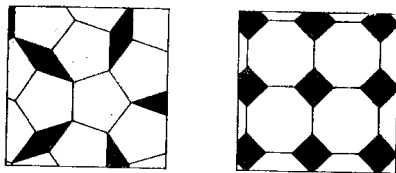
旋转对称轴没有五次和七次以上的。这是因为,当我们把旋转对称轴的概念应用到晶胞的对称时,具有五次和七次以上对称性的晶胞(如果它们存在的话)不能占有全部空间,



(a) 具有六次和二次旋转对称轴的二维图形；(b) 具有三次和二次旋转对称轴的二维图形；(c) 具有四次和二次旋转对称轴的二维图形

图1-2 平面图形对称轴

如图1-3(a)和(b)所示。这就是说，尽管人工制造的物体外形可以有任意次对称轴，但自然界生长的晶体对称轴是有限的。



(a) 五边形 (b) 八边形
图1-3 具有五次对称轴 (a) 和八次对称轴 (b) 的二维单胞的空间拼合

自然界生长的晶体对称轴是有限的。

2. 反映

反映对称实际上是镜面对称。图1-4(a)的晶体形状只具有一个反映对称面。对称面所

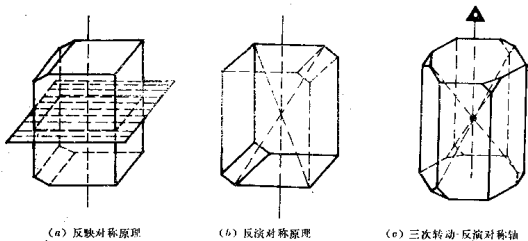


图 1-4

切的一半物体上每一点，通过反映平面的映像都对映着物体另一半的相应各点。与旋转不同，反映操作是一种非运动操作，以符号 m 表示。从常识的角度，接受旋转和反映对称都不是一件困难的事。

3. 反演

反演对称涉及通过一点的反映，即物体表面上任一点与物体中心一点的连线，延长至物体另一端表面并相交于相同状态点，把这种对称操作称为反演。这表明，当一晶体具有反演中心时，我们通过中心点作一平面将晶体分为两部分，则另一部分表面上的每一点可以通过这部分的反演操作而得到，如图1-4(b)所示。该物体只有一个反演中心，没有其他任何对称素。所以，反演对称的对称素是对称中心，用 Z 表示。但是，在晶体学中，当讨论晶体对称性时，很少单独使用反演对称素，符号 Z 也少见，反演大部与转动联合表示，称转动-反演对称。

4. 转动-反演

转动-反演不是独立的对称操作，而是转动和反演的联合。因此，一些书上并不把这个操作列入独立的对称操作，但该对称广泛应用于晶体的对称之中。

物体绕一定的轴转动 $360^\circ/n$ 之后，再经反演直至 n 次转动再反演的操作完成后，物体恢复原状的对称叫做转动-反演对称。这是一种复合的对称操作，其对称素为转动-反演对称轴，又称反演轴。转动-反演对称轴的表示方法为 $\bar{1}$ 、 $\bar{2}$ 、 $\bar{3}$ 、 $\bar{4}$ 和 $\bar{6}$ ，其中 $\bar{1}$ 实际上就是对称中心，如图1-4(b)。图1-4(a)对称素也是二次转动-反演轴 $\bar{2}$ ，所以二次转动-反演轴相当于一个对称面，也可以写成 $\bar{2} = m$ 。图1-4(c)是三次转动-反演对称，即 $\bar{3}$ 。

二、点群

晶体几何外形是一种有限的对称图象。它是按照一定规律排列的若干个等同部分组成。欲使其等同部分有规律地重合，必须凭借晶体的宏观对称素，通过一定的对称操作才能完成。这些对称素可以单独地存在于晶体几何外形中，也可以彼此相互组合而共存于一个晶体几何外形中。既然晶体几何外形是一个有限的对称图象，那么对称元素相互组合就可以保证相交一点。因此，至少保持晶体中一点不动而进行对称操作的组合称为点群。实际上，前面讲过的转动-反演对称就是点群的一种。研究表明，总共有32种点群，它们可描述晶体几何外形的对称性。因此，自然界中任何晶体都属于这32种点群之一。

32种点群中的每一种都采用一定的符号加以表示。目前通用的符号有两种，可同时使用，即熊夫利符号和国际符号。由于篇幅的原因，本书对熊夫利符号不作解释，只说明国际符号。但在表1-2中仍列出每个国际符号所对应的熊夫利符号，以便比较。

国际符号是当前应用最广的符号，点群的国际符号中所使用的对称元素为对称轴、对称面和转动-反演轴。对称轴用 n ($n=1, 2, 3, 4, 6$) 代表， n 为轴次；对称面用 m 代表；转动-反演轴用 \bar{n} 来代表，按轴次大小，分别用 $\bar{1}$ 、 $\bar{2}$ 、 $\bar{3}$ 、 $\bar{4}$ 和 $\bar{6}$ 代表。

点群的国际符号一般由3个位序组成，如 $4mm$ ，但菱方晶系由2个位序(如 $3m$ ，或 $3\frac{2}{m}$)，单斜和三斜由1个位序表示(如 $\frac{2}{m}$ ， $\bar{1}$ 等)。在国际符号中，每一个位序都代表一个与特征对称元素取向有一定联系的方向。符号的每1个位序在每个晶系中代表的方向平行基矢

a , b , c , 或由基矢合成的矢量方向, 见表1-1。譬如正方晶系点群 $4mm$ 表示: 在 c 轴方向有1个四次对称轴, 而在 a 和 $a+b$ 方向上是两个对称面的法线方向。国际符号的位序关系有

表1-1 晶类的国际符号的位序的代表方向

晶系	符号位序	位序所代表的基矢方向
立方	1	a
	2	$c+b+c$
	3	$a+b$
六方	1	c
	2	a
	3	$2a+b$
菱方	1	$c+b+c$
	2	$a-b$
正方	1	c
	2	a
	3	$a+b$
斜方	1	a
	2	b
	3	c
单斜	1	b
三斜	1	-

如下规律:

在国际符号的某一个位序上所标出的对称元素, 代表在该位序相应的方向上所出现的对称元素。譬如: 在某一位序上标出的对称轴, 是指与此位序相应方向平行的对称轴或转动-反演轴; 在某一位序上所标出的对称面, 就代表相应方向是对称面的法线方向。当在某一位序上同时存在对称轴以及与其垂直的对称面时, 则用 a/m 表示, 例如 $2/m$, $4/m$ 等。

通常是借用极射赤面投影图形来表达32种点群的。本书为了使读者不必花费更多的精力去弄清“投影”, 特意列出32种点群中的立方晶系空间对称图形作为例子, 以供学习参考, 见图1-5。这些图形面上的花样是各种立方系晶体面上的蚀坑图形, 借以体现各种晶体的对称群。不过, 为了便于理解各种点群的含义, 不妨将每个蚀坑花样当作表达点群对称的人为花样。

图1-1是黄铜矿和碘丁二酰亚胺晶体, 图1-6是锆(英)石的晶体外貌, 它们分别属于 $\bar{4}2m$, $4mm$ 和 $\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ 点群。读者可以根据前面讨论的原则, 对图1-8和这3种晶体各自所属的点群进行分析, 以增强对点群的概念和点群符号的意义的了解。表1-2详细记录了每种晶系所具有的点群和各种点群符号对照表, 以供学习参考。

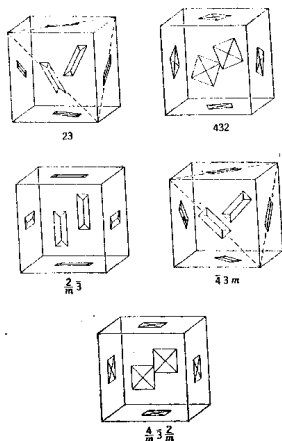


图1-5 立方晶系的典型惯习花样

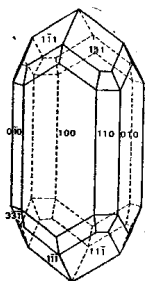


图1-6 铀(英)石晶体外形

表1-2 32种点群对照表

晶系	晶类符号			对称素	对称素数目	对称运用次数
	熊夫利符号	国际符号(全写)	国际符号(简写)			
三斜	C_1	1	1	—	—	1
	$C_2, (S_2)$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	1	2
单斜	$C_2, (C_2, \sigma_h)$	$m(=2)$	m	$2 = m$	1	2
	C_s	2	2	2	1	2
	C_{2v}	$2/m$	$2/m$	$2 = m$ 2 1	1 1 1	4
斜方 (正交)	C_{2v}	$2mm$	mm	2 $2 = m$	1 2	4
	$D_{2v}, (V)$	222	222	2	3	
	$D_{2h}, (V_h)$	$2/m2/m2/m$	mmm	2 $2 = m$ 1	3 3 1	8

续表 1-2

晶系	品 类 符 号			对 称 素	对 称 素 数 目	对 称 运 用 次 数
	施夫利符号	国际符号 (全写)	国际符号 (简写)			
正 方 (四方)	S_4	4	4	4	1	4
	C_4	4	4	4	1	4
	C_{4h}	4/m	4/m	$\frac{4}{2}$ 1	1 1	8
	$D_{2d}(V_4)$	42m	42m	4 2 $2=m$	1 2 2	8
	C_{4v}	4mm	4mm	4 $2=m$	1 4	8
	D_2	422	42	4 2	1 4	8
	D_{2d}	4/m2/m2/m	4/mmm	4, 2=m 2, 1	1, 5 4, 1	16
菱 方 (三角)	C_3	3	3	3	1	3
	$C_{3v}(S_6)$	$\bar{3}$	$\bar{3}$	$\bar{3}=3+1$	1	6
	C_{3h}	3m	3m	3 $2=m$	1 3	6
	D_3	32	32	3 2	1 3	6
	D_{3d}	32/m	$\bar{3}m$	$\bar{3}=3+1$ 2 $2=m$	1 3 3	12
六 方 (六角)	C_{12}	6	6	$\bar{6}=3+2$	1	6
	C_6	6	6	6	1	6
	C_{6h}	6/m	6/m	6 $2=m$ 1	1 1 1	12
	C_{3h}	$\bar{6}2m$	$\bar{6}2m$	$\bar{6}=3+m$ 2 $2=m$	1 3 3	12
	C_{3v}	6mm	6mm	6 $2=m$	1 6	12
	D_3	622	62	6 2	1 6	12
	D_{3h}	6/m2/m2/m	6/mmm	6, 2=m 2, 1	1, 7 6, 1	24
立 方	T	23	23	3 2	4 3	12
	T_h	2/m3	m3	$3^2, 2=m$ 2, 1	4, 3 3, 1	24
	T_d	$\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$	4 3 $2=m$	3 4 6	24
	O	432	43	3 2 4	4 6 3	24
	O_h	4/m32/m	m3m	$3^2, 2=m$ 4, 1 2	4, 9 3, 1 6	48

* 与轴3同时存在的还有轴6。

§1-2 空间点阵

一、空间点阵的建立

晶体中原子或原子团在三维空间有规律的周期排列构成了晶体结构。为了研究方便，人们忽略了那些种类繁多的原子和原子团，而把晶体看成是一些几何点在空间有规律的周期排列；同时，这些点与实际晶体中的原子又具有某种固定的空间位置关系。

设想在空间有一组平行的等距离平面，与另外一组等距离平面相交，然后，它们又与第三组等距离的平行平面相交。结果，两两面相交的交线便构成了空间分布的格子，而交线的相交点便是空间分布的点，这些空间周期分布的点构成空间点阵，见图1-7。其中每个阵点的周围环境都相同，这就是说，每个阵点周围的阵点数以及各阵点相对参考点的取向相同。

点阵中的平行六面体称为阵胞。图1-7中只用粗线画出了4种。实际上，可以有多种方式取平行六面体作为阵胞。描述阵胞的形状和大小采用3个矢量，即若以阵胞某角点为原点，沿3个棱边作3个矢量：通常面对我们的为 a ，向右为 b ，向上为 c 。它们之间的夹角分别为 α 、 β 和 γ ，称 a 、 b 、 c 和 α 、 β 、 γ 为阵胞的点阵参数，如图1-8。阵胞是点阵的基本单元，借阵胞的无限平移可以得到整个点阵。

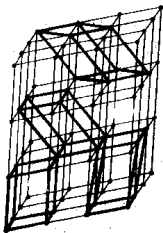


图1-7 空间点阵

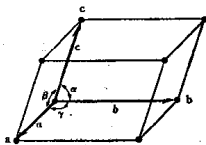


图1-8 单位阵胞

二、布喇菲点阵

阵胞的形状和大小取决于三组平行等距离平面的相交方式。在特殊情况下，当三组平面相互垂直时，则可以得到一个立方体的单位阵胞，此时 $|a| = |b| = |c|$ ， $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 。经过晶体学家们长期研究证实，当考虑到三组平面的各种相交角度和不同的面间距时，它们所形成的阵胞只有7种类型。这7种阵胞的点阵参数列入表1-3的第二列中。

晶体学家们最初只对晶体的规则外形感兴趣。他们在研究了大量的晶体外形的基础上，将晶体归纳为7个晶系，见表1-3第一列。这7个晶系与他们在研究了空间点阵理论后所推导的7个类型的阵胞一一对应。这说明，从晶体宏观研究所归纳的规律是正确的；同时也

表1-3 晶系和布喇菲点阵

晶系	晶轴的长度和夹角	布喇菲点阵	点阵符号
立方系	三根轴互相相等而呈直角。 $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单 体心 面心	P I F
正方系 (四方系)	三根轴互呈直角, 其中有两根相等。 $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单 体心	P I
斜方系 (正交系)	三根轴互呈直角, 但互不相等。 $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单 体心 面心 底心	P I O F
菱方系 (三角系)	三根轴互相相等, 并相等地相交。 $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	简单	R
六方系	两根共平面的轴相等, 并相交呈 120° , 第三根轴相交呈直角。 $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	简单	P
单斜系	三根轴互不相等, 一对轴不呈直角 $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	简单 底心	P C
三斜系	三根轴互不相等, 夹角互不相等, 并且其中没有一个是直角。 $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	简单	P

证明, 晶体的宏观形状是微观原子规则排列的表现。

如上所述, 虽然在空间点阵中有无限多个选取平行六面体(阵胞)的方式, 但是, 如果你想使你所选取的阵胞既能描述实际晶体结构基元^①排列的周期性, 又能尽量使阵胞有高的对称性。这样, 选取方法就变得很有限。法国晶体学家布喇菲从这一点出发, 规定了选取阵胞的三条原则:

(1) 所选取的六面体单位必须能充分反映出空间点阵的点群与平移(见§1-3)对称群;

(2) 在满足(1)的条件下, 应该使所选取的平行六面体单位的棱与棱之间的角度关系尽可能为直角;

(3) 在满足(1)和(2)两个条件下, 应使所选取的平行六面体的单位体积最小。

根据上述原则, 布喇菲提出14种点阵, 通称布喇菲点阵, 如图1-9。这14种布喇菲点阵和17种晶系的对应关系已列在表1-3中。

14种布喇菲点阵分属以下4种情况:

(1) 初基点阵(P)。这种阵点只分布在阵胞的8个角点的位置上, 每1个阵点又为8个阵胞所共有。因此, 每个阵胞只包含1个阵点。

(2) 底心阵(C , A 或 B)。这种阵阵除在每个阵胞的角点位置各有1个阵点之外, 还在一对面中心各有1个阵点, 此面中心的阵点为2个阵胞所共有。因此, 每个阵胞均占有2个阵点;

^① 结构基元表示阵点或其附近的实际原子构成。

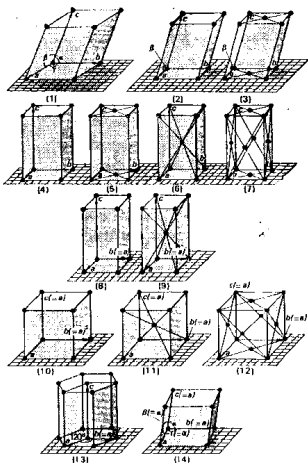


图1-9 14种布喇菲点阵，其中没有标出轴夹角的角为 90° (1) 三斜(P)，(2)简单单斜(P)，(3)底心单斜(C)，(4)简单正方(P)，(5)底心正方(C)，(6)体心正方(I)，(7)面心正方(P)，(8)简单斜方(P)，(9)体心斜方(I)，(10)简单立方(P)，(11)体心立方(I)，(12)面心立方(F)，(13)六方(P)，(14)菱方(R)。在(13)分图中画出了三个P六方单胞。

基点阵P，如图1-10。依此类推，面心正方点阵F可以转换为体心立方点阵I。因此，在正方晶系中只存在P点阵与I点阵两种型式。正方初基点阵P完全符合选取阵胞三原则。但在体心正方点阵中，所选取的最小体积不是一个正方初基点阵P的阵胞，而是带有体心点阵的复合阵胞。这是因为在体心正方点阵I中，选取初基阵胞P不是一个正方单位的缘故。因此，在正方晶系中，正方点阵P和正方点阵I是两种截然不同的点阵。

同样原理可以说明，何以在立方晶系中只能有三种点阵型式，即初基立方点阵P、体心立方点阵I和面心立方点阵F。对于六方晶系来说，仅有六方点阵P。考虑到六次对称性，而又不违反空间点

(3) 体心点阵(I)。这种点阵除了在阵胞8个角上各有1个阵点之外，在阵胞的中心还有1个阵点。因此，体心阵胞含有2个阵点；

(4) 面心点阵(F)。这种阵胞除了阵胞的8个角上各有1个阵点之外，在每个面心处均有1个阵点，每个面心上的阵点为2个阵胞所共有。因此，面心阵胞共含有4个阵点。

在空间点阵中，之所以能归纳出14种布喇菲点阵的理由是：

(1) 对于平行六面体的阵胞来说，所附加的阵点只在阵胞的面中心或体中心的位置上，不然就会破坏了点阵的周期性。

(2) 从表1-3第三列中可以看到，并不是所有点阵类型都能属于某个晶系中，否则就破坏了该晶系点阵的对称性。例如，在立方晶系中，不可能存在立方底心阵胞的点阵。

(3) 如果所选取的平行六面体的单位不是最小的话，则会出现重复。例如，在正方晶系中，底心正方点阵C可以转换到正方初

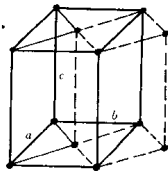


图1-10 正方O点阵(实线)可以转换为正方P点阵(虚线)