結構晶体学

H. B. 别洛夫著

科学出版社

結構晶体学

H. B. 別洛夫著
蕭 序 剛 譯

科 学 出 版 社
1956年10月

內容提要

本書介紹了苏联著名的晶体学家H. B. 別洛夫的重要著作"結構晶体学"簡要明确地論述了結構晶体学的基本概念和关鍵性問題，內容很丰富是一本有高度学術水平的著作。

書中共分四章，清晰地論述了結体狀态，格子結体学的基本定理，布拉格子以及格子誘導对称元素。

本書可供地質学家、結体学家、礦物学家之参考。

結構晶体学

Структурная кристаллография

Н. В. Белов, 1951

原著者	〔苏〕別洛夫（Н. В. Белов）
翻譯者	蕭序剛
校訂者	章元龍
出版者	科学出版社 北京朝陽門大街117号 北京市書刊出版業營業許可証出字第061号
原文出版者	苏联科学院出版社
印刷者	北京新華印刷厂
总經售	新華書店

1956年10月第一版　　書号：0557　印張：3 11/25

1956年10月第一次印刷　　开本：787×1092 1/25

（京）0001—5,843　　字数：68,000

定价：（10）0.50元

目　　錄

第一章　晶体狀态——格子狀态

晶体的經典定义認为晶体是一种均匀的各向异性物体。所謂均匀的，就是晶体的性質在它所有各点上都是同样的。自从物質的原子（由不連續微粒構成的）結構已不再是一个假說的那时起，晶体以及結晶物質的定义就需要加以修正。晶体不可能在一些安置着某一种原子的点上以及在一些安置着另外一种原子的点上，也即是不可能在原子不完全相同的許多点上，具有同样的性質。就大家熟悉的具体的氯化鈉結構來說，在安置 Na 原子的点上的晶体的性質，無疑地是与同一晶体中安置 Cl 原子的点上的性質不同的；同样此晶体的性質在把 Na 与 Cl 間最近距离分成 1:3的点上和把此距离分成1:80的点上，以及在無数多的其它的点上，也完全有差別。

下面是一个考慮到不連續結構的，由同一种或不同的各种微粒構成的晶体的定义，同时也是一个与經典定义極接近的定义。物体，特別是晶体，被称为是均匀的，如果对于在其內部所取的任意一点，能够找到这么一点，它在性質上完全与起始点相似并与起始点保持一个一定的有限距离 a——对于通常的無机物質來說，此距离常不大于 50 Å。这个小于 50 Å 的“用作度量單位的” (“метрическая”) 数値可由实驗測定出來[1]。

1）数学上把下面三个假定作为（从数学的观点）研究晶体物質的基礎：

1. 不是所有晶体空間的点皆是同样的。

2. 晶体物質称为是均匀的，乃是說存在有这样一个具有足够大的半徑 R 的球，使得無論把这球放置在何处总常常可在它的里面找到一个与預先給定的点同等的点（“均匀性的球”）。

3. 晶体物質称为是不連續的，乃是說至少存在着这样一点，圍繞此点可作一个具有一定的半徑 r 之球，在此球內不可能有与它同等的点（当然它本身要除外）（“不連續性的球”）〔Б. 杰龍列(Делоне)，Н. 巴杜罗夫(Падуров)，А. 亞歷山大罗夫(Александров)晶体結構分析的数学基礎 (математические основы структурного анализа кристаллов)。1934 年列寧格勒版，第 8 頁〕。

从这个簡單的定义立刻就可導出許多(对認識晶体的性質)甚为重要的結論。我們从晶体內由于某种緣故曾引起我們注意的任意一定点开始，——它可能是 Na 原子的中心或者是Cl 原子的中心，或者是它們兩者間最短距离的中点，或者是此距离的三分之一处的点，总之，晶体內的任何一点。此点無論怎样來定，当然都是適当的，例如在 NaCl 情况中，可以定 Na 与 Cl 間最短距离上的任何一点。我們把这点記为 00(圖 1)。按照定义，存在有在数值及方向上都是固定的这样一段最短的距离 a，在它上面有一个与起始点完全同等的点。我們把这点記为 10；設它位于起始点右边距离为 a 的地方。因为 10 点与 00 点同等，所以如果从 00 点往右边距离 a 处有一同等点，那末从 10 点往右边同样距离 a 处也应当有一同等点 20。同样的理由，从 20 点往右边距离 a 处应当有一同等点30，依此类推。若从点10开始并且已知道在它左边距离 $\bar{a}$ 处有一同等点 00，那末，很明顯地我們立刻得出，从 00 点往左边距离 $\bar{a}$ 处存在一点 $\bar{1}0$，再往左則有点 $\bar{2}0$，依此类推。此点列是一無限的点列，無論在何种情况下它总是从晶体的一端延伸到晶体的另一端。如果在晶体中已找到一点或者数个类似之点，那末它們中的每一点必定是具有相同参数 a 的同样的平行点列上的点。

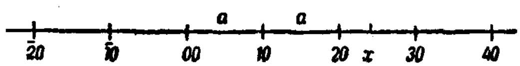


圖 1　結点直綫

在晶体物質中，所有引起我們同样注意的点，都是配置在若干平行的無限点列上（無論何种情况中，都是从單晶体的一端到另外一端)并且彼此間的距离都等于一个可能有的最短距离，或是等于所謂的最短平移 a。在这种点列上（或在每一平行点列上），除开配置在剛才所講到的 10, 20, 30 等等“結点”上的点外，决不可能有任何一个其它的同等点。假設有这样一点 x，它到点列上任何一鄰近的点的距离都比 a 近，那末，顯然这样的点是不可能存在的，因为 a 已經取为同等点間可能有的最短距离了。用平移互相連系起來并延伸成一

無限点列的許多同等点，我們称为結点。

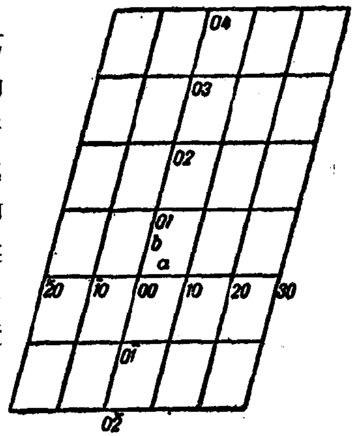


圖2 結点網

讓我們轉向到不在我們已引出的第一点列內的同等点。从（在已考察过的点列外的）最接近起始点 00 的同等点开始（圖 2）。它的距离 b 可能只有 a 長，或者要長些，一般說，$b\geqq a$。不难証明 a 和 b 間所成的銳角 γ 不可能小于 60°。实际上，在三角形 00－10－01（我們把 01 記为在已考察过的点列外与 00 点最近的点）中，如 γ 角＜60°，如圖 3 所示，則正对这角的边必定是或者小于 a 或者小于 b 的，但 a 和 b 已为我們取为由各点到 00 的最短的距离了。但是，假若距10点存在有一較 a（或者 b）为短的距离，那末按照均匀性的定义，距 00 点也必存在这样一段距离（如圖 3 虛綫所示），这与假定相矛盾。因此，若 $b\geqslant a$ 則角 $\gamma\geqslant 60°$。顯然，60° 的角对应于 $a=b$ 的情况，这时三角形 00—10—01 为一等边三角形。兩个最小平移的比値愈大，可能有的最小角 γ 也就愈大。不难看出（圖 3），此最小角 $\gamma=\arccos\frac{a}{2b}$。若 $b=2a$ 則角 $\gamma\approx 75°$，若 $b=4a$ 則角 $\gamma\approx 83°$。若比值 $b:a$ 十分大，則角 γ 就越來越接近于直角。

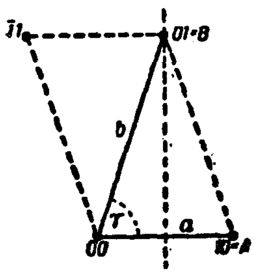


圖 3 用以証明在基本平行四边形中不可能有小于 60° 的角

于是，我們确定了与 a[1] 不共綫的次短的平移，幷得到点 01。重复一次与前面类似的討論。因为結点 01 决不应当与結点 00 有任何差别，又因为从結点 00 向下延伸到距离 b 处可遇到結点，那末从結点 01 向下延伸到（在数值及方向上）同样的距离 b 处，也应当遇到一結点，此結点我們記

1）这說明 b 可能大于 $2a$ 或大于 a 的任何倍数，但在所有不平行于具有參数 a 的点列的平移中，仍然是最小的。

为02。用类似的討論可以得到03，04等結点，因而也可得到$0\bar{1}$，$0\bar{2}$等結点。平移b把通过結点00的無限点列上的所有結点联系起來。因为結点01与結点00同等，所以通过01，02等結点也应当引出許多条無限点列，这些無限点列均平行于我們已構成的第一条点列并具有同样的平移a。在a和b这兩个平移所成的平面上是一个完整的結点網，它具有許多个由平移a和b構成的綫圈(平行四边形)。

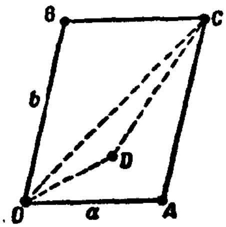


圖4 用以証明基本平行四边形的中空性

位于同样平面上而不在已構成的網的頂点上的結点是不可能有的。任何一个这样的(頂点外的)附加結点总应当置放到許多綫圈中的一个里面，因此不难看出，它到最近頂点的距离必然要較已为我們取为最短距离的“單位平行四边形”的一边要短些。

假定有这样的一个結点D(圖4)存在。在一般情况中它应当位于單位平行四边形$OACB$被对角綫OC所分成的兩个三角形中的一个里面。兩个“新的”平移OD及DC形成一个凸出的折綫$OD+DC$，此折綫跨于綫段OC上并位于其它一个跨于同样綫段OC上的凸出的折綫$OA+AC=a+b$里面。因为$OD+DC$小于$a+b$，所以至少有一个新的平移小于a或小于b，这是与原先的假定相抵触的。

不管在哪一条对角綫上，均不可能置放此附加結点D，因为此附加結点与其它結点間可能有的最大距离——半对角綫常小于單位平行四边形的一边：$d<a+b$；$d<2b$；$\frac{1}{2}d<b$[1)]。

讓我們轉向到另一結点——001，此結点不位于我們已構成的(从00点开始用兩个最短平移構成的)網上，亦即与此網不共面，但却是最靠近00点的一結点(圖5)。倘若从不共面这一条件出發，那

1) 布拉維的証明：取基本銳角三角形OAB(参看圖3)的每一边作直徑，在三角形OAB外側作半圓，在任何一个这样的半圓內均不可能存在有(銳角)結点，因此結点决不存在于三角形OAB內，也不会存在于以OAB作为它的一半的平行四边形內。

末，它的距离 c 就是第三等短的距离（但一般地說，在已討論过的網上，它可能比第三等和第四等短的距离長，甚或是更長的一段距离），在較少数情况下，它等于次短的距离，在更加稀少的情况下这第三种距离可能与最短的和次短的距离一样。在特殊情况下，$a \leqslant b = c$ 或 $a = b = c$ 中，兩个平移間角度可能是 60°，在其余情况中，此角都大于 60°。

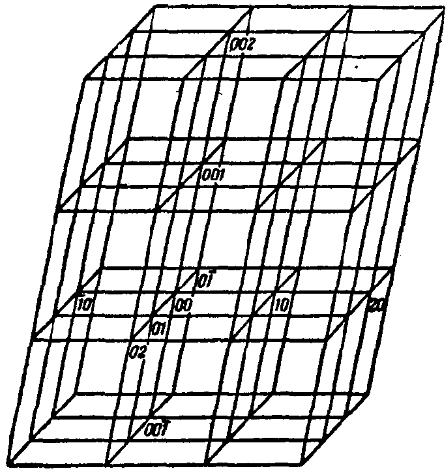


圖 5　結点格子

重复一次类似前面的討論，首先我們得到一个通过 00 点并具有平移 c 的新的無限点列，進而得到通过 001，002 等等点且与过 000 点的網同样的許多个無限網，并且所有这些新的網都是与起初考察过的那个網平行的，同时通过从起始結点 00 开始構成的第一个網上的每一結点，我們得到許多具有平移 c 的無限点列（圖 5）。

这些平行網与平行于第三平移 c 的無限点列共同構成一个三維的格子，此格子籠罩着整个空間，籠罩着从晶体的一边到对边的整个“晶体空間”（晶体綫度的大小約为 $\frac{1}{2}$cm，平移則 ~10Å，这表示在此点列上大約有 5 百万个結点）。如果把晶体的單晶体集团的大小認为大約是 10^{-4}cm（有許多关于此种大小的实驗数据），那末，一点列仍旧有 1000 个結点。此种格子的綫圈或它的單位晶胞都是些平行六面体，而且在一般情况下是斜角平行六面体。

設若起始的几个平移都取成最小的和不共面的，那末与第一点同等而又不在已構成的三維格子的頂点上的点是不可能存在的。实际上，任何这样不在頂点上的附加点应当落到任何一个平行六面体內，或者它的面上，或者它的棱边上。若用平移重复这种結点，我們

將在起始晶胞內或者它的面上（棱上）遇到同样的附加結点。在棱上或在面上的情况，根据前面已証明的兩个定理，这是不可能的。設有一附加結点位于單位平行六面体內坐标为$\frac{q}{m}$，$\frac{r}{n}$，$\frac{s}{p}$的某一点 E 上，此处 m，n 及 p 均为整数，而且設 m 是其中最小的数，那末在 OE 本來的方向上把平移 OE 重复 m 次，顯然我們將在某一个平行于 yz 平面的平面網上引出位于單位平行四边形內某处的一点，可是根据前面所証这样的結点是不可能存在的。

当（不在已構成格子的頂点上的）附加結点的坐标，在各坐标平移上分别用三个帶有公分母的不可公約的有理分数$\frac{q}{m}$，$\frac{r}{m}$，$\frac{s}{m}$來表示时，我們遇到了最大的困难。在这种情况中，將坐标原点到附加結点間的平移重复 m 次，就可引導出起始格子的一結点，因而幷未產生任何与附加結点有关的矛盾。但是从原点开始，重复上述平移某有限数 x 次后，总可使得第一个坐标成为$y+\frac{1}{m}$的形式，此处 y 为一整数。实际上，方程式$\frac{xq}{m}=y+\frac{1}{m}$可化成 $qx-my=1$。从不定方程式的一个最簡單的定理，大家都知道，在 q 和 m 互質（即不可約的分数$\frac{q}{m}$）情况中，此不定方程式往往有正整数解。同样由$\frac{xq}{m}=y+\frac{2}{m}$而得的方程式 $qx-my=2$，由$\frac{xq}{m}=y+\frac{3}{m}$而得的方程式 $qx-my=3$ 以及依此类推而得的許多方程式往往都有正整数解。于是，常可找到这么一个晶胞，在它里面附加結点位于平行于單位平行六面体的 bc 面的平面上，幷且它距原点的距离，如果沿着 a 軸度量，则等于$\frac{1a}{m}$。类似于此，也可找到这末一个晶胞，其中附加結点是在$\frac{2a}{m}$平面上，依此类推。若按照平移的原則，將这些結点轉移到起始晶胞中去，就可在其中得到許多位于距原点为$\frac{1a}{m}$，$\frac{2a}{m}$等处的平面上的附加結点。这些結点的第二个和第三个坐标必須是帶有同样分母 m 的分数（即 b 和 c 的分数倍）。当然，在$\frac{na}{m}$平面上的結点，也可能从結点$\frac{1a}{m}$起，單純用連結平行六面体原点与$\frac{1a}{m}$平面上新結点的新平移重复而得。

于是，在基本晶胞中如存在有一个具有有理坐标$\frac{q}{m}$，$\frac{r}{m}$，$\frac{s}{m}$的附加結点，就必引出另外 $m-1$ 个結点。但是在証明由三个不共面的最短平移（照数学上術語就是三个有順序的極小）構成的平行六面体

的中空性时，只消假定存在有結点$\frac{q'}{m},\frac{r'}{m},\frac{1}{m}$即够。我們將把$c$認为是三个平移$a,b,c$中最長的一个（至少，不是最短的一个）。

設m为$\geqslant 3$的奇数。我們用兩个平行于側面并过体中心的平面將基本平行六面体划分为四个彼此相等的平行六面体。結点$\frac{q'}{m},\frac{r'}{m},\frac{1}{m}$应当位于四个不平行六面体的一个里面；不但如此，它还应当位于另外一个棱边为$\frac{a}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right),\frac{b}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right),\frac{c}{m}$的，更小的平行六面体的頂面上（圖 6）。此附加的（不在格子的頂点上的）結点如果落到小平行六面体的頂点上，那末它的最不合適的位置就是落到斜对着起始平行六面体的置有基本結点的頂点的那个頂点上。若以起始平行六面体的这一頂点为原点，附加結点的各个坐标便等于各个棱边，即$\frac{a}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right),\frac{b}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right),\frac{c}{m}$（圖 6）。

因为平行六面体的对角綫小于它的三个不等的棱边之和，所以若設从大平行六面体的保留下來的頂点到附加結点間的距离为d，則可得到：

$$d<\frac{a}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right)+\frac{b}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right)+\frac{c}{m}.$$

以較大的（不小的）c代替参数a和b即得到：

$$d<\frac{c}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right)+\frac{c}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right)+\frac{c}{m}\text{或}d<c.$$

这就是所要証明的。从早先确定了的格子的結点到附加結点間的距离竟比三个已取为最小的平移中的一个还要小了。

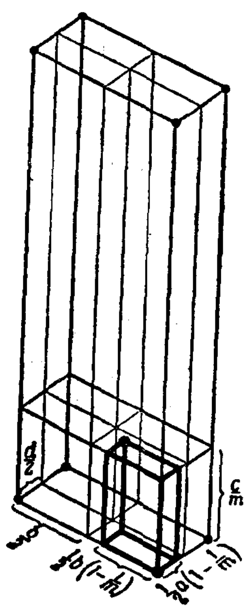


圖 6　用以証明格子的基本平行六面体的中空性

第一种情况

在$m=2$的情况中，附加的（不在頂点上的）結点落到基本平行六面体的体中心上，因而已導出的証明就不再適合。此附加結点到原点之距离，应等于半对角綫（即$\frac{1}{2}d$——譯者），并由$d^2=a^2+b^2+$

$c^2+2bc\cos\alpha+2ca\cos\beta+2ab\cos\gamma$ 决定。

如果此平行六面体是一个鈍角平行六面体，那末上式中帶有余弦的三項都是負的，于是$d^2<a^2+b^2+c^2$；$d^2<3c^2$，而半对角綫$\frac{1}{2}d<\frac{1}{2}c\sqrt{3}$；$\frac{1}{2}d<0.867c$。这个不等式对于直角平行六面体也保持不变，此时上式中后面帶余弦的三項都等于零。

在銳角平行六面体中[1)]，其較大的一个半对角綫可能比任何一棱边还要長些。例如，在 $a=b=c$, $\alpha=\beta=\gamma=60°$（上面曾指出，在格子的基本平行六面体中 60° 乃是可能有的最小的平面角）中，則$d^2=3c^2+3c^2=6c^2$；$d=c\sqrt{6}$；$\frac{1}{2}d=\frac{1}{2}c\sqrt{6}=1.22c$。

但是在任何一个銳角平行六面体的四个半对角綫中总有一个要比所有棱边中的一个棱边短一些。实际上，如果較大对角綫的向量表达式为 $\mathfrak{d}=\mathfrak{a}+\mathfrak{b}+\mathfrak{c}$，那末較小的几个对角綫分別是：$\mathfrak{d}'=-\mathfrak{a}+\mathfrak{b}+\mathfrak{c}$；$\mathfrak{d}''=\mathfrak{a}-\mathfrak{b}+\mathfrak{c}$；$\mathfrak{d}'''=\mathfrak{a}+\mathfrak{b}-\mathfrak{c}$。这些向量的数量値由 $d'^2=a^2+b^2+c^2+2bc\cos\alpha-2ca\cos\beta-2ab\cos\gamma$ 及另外兩个类似式子决定之，在此兩式中一式的第二个具有余弦的項为正，另一式的第三个具有余弦的項为正，但在这三个总和式的每一式中对应各項的絕对値都相等。后面三个表示 d^2 的式中，必有一式所表示的 d^2 是最小的或不大于另二式所表示的 d^2，于是，对于对应于此最小 d^2 的对角綫來說：$d^2<a^2+b^2+c^2$；$d^2<3c^2$；$\frac{1}{2}d<\frac{1}{2}c\sqrt{3}=0.866c$，因而定理得証。

在有一个或兩个直角平面角的情况中此証明仍还生效。

如果 m 是一个大于 2 的偶数，那末水平面$\frac{1}{m}$上附加結点的最不合適的位置是在平行于 c 軸的中綫上且其坐标为$\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, \frac{c}{m}$(1)。我們轉向到水平面$\frac{2}{m}$上的第二个附加結点，在此处最不合適的位置也是在中綫上且其坐标为$\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, \frac{2c}{m}$(2)。可是这兩个位置(1)和(2)不可能同时被占据，因为如其不然，就要得到一个比已經选为最短平移

1）如所周知，任何一个斜角平行六面体或者是一个鈍角平行六面体，或者是一个銳角平行六面体。在第一种情况中，它的兩个三面角旁的所有的平面角都是鈍角，在第二种情况中，它的兩个三面角旁的所有的平面角都是銳角。一个平行六面体不可能同时是鈍角的又是銳角的。

的c短得很多的豎直平移$\frac{c}{m}$。另外一种最不合適的情况是，这些附加結点中有一个結点不在平行于c軸的中垂綫上，且若以四个小平行六面体中一个小平行六面体的結点为原点，則此附加結点的坐标为$\frac{a}{2}\left(1-\frac{2}{m}\right)$, $\frac{b}{2}\left(1-\frac{2}{m}\right)$, $\frac{c}{m}$(圖 7)。我們又得到：$d<\frac{a}{2}\left(1-\frac{2}{m}\right)+\frac{b}{2}\left(1-\frac{2}{m}\right)+\frac{2c}{m}$; $d<\frac{2c}{2}\left(1-\frac{2}{m}\right)+\frac{2c}{m}$; $d<c$, 于是定理得証。

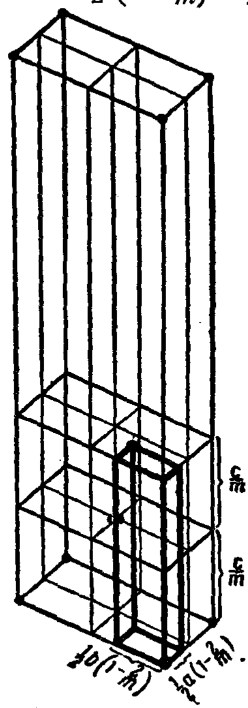


圖 7　用以証明晶体格子基本平行六面体的中空性
第二种情况

在上面已導出的所有的不等式中，虽然所有的差数都已假定为有限的数，但具有無理坐标的結点是可以和具有有理坐标的結点毫無限制地接近的[1]。

基本平行六面体中空性的其它証明原則上是注意到引入沃罗諾依区域(область Вороного)或者弗多洛夫的平行面体(федоровский параллелоэдр)的概念。

首先導出与二維的或面網上的基本平行四边形相当的証明。在这种情况中，中空性的定理断言：設若从起始結点 00 起作一条帶有最短平移a的点列，并將次短的平移$b \geqslant a$，从結点 00 放置，那末此次短的平移就將終止于这样一个結点上，此結点位于一条平行于最初構成的点列的最近点列上。顯然，这样就保証了基本平行四边形的中空性。

把綫段$OA=00-10$和$OA'=00-\overline{1}0$平

1) 基本的——簡化的(приведенный)平行六面体的中空性的証明，对于維数大于 3 的晶胞來說，当$m \geqslant 3$时顯然是完全適合的。但是在$m=2$时这个証明便不適合，因为就 4 維空間的立方体而言，其半对角綫$\frac{1}{2}d=\frac{1}{2}\sqrt{4a^2}=a$，而在 5 維的格子中$\frac{1}{2}d=\frac{1}{2}a\sqrt{5}=1.118a$。从此可得出，在 4 維空間中基本晶胞的非原始性就可归結为体積中心置点性，而在維数大于 4 的空間中則可归結为各种其它的可能有的中心置点性。

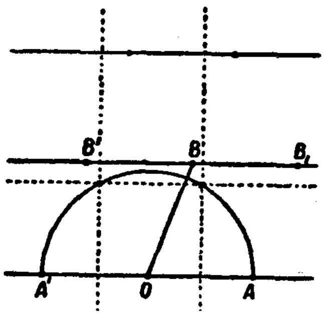
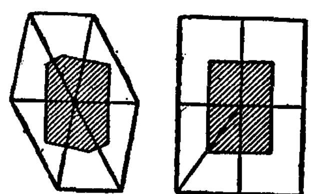


圖 8 用沃罗諾依区域的方法來証明基本平行四边形的中空性

分为兩半，幷从此二綫段的中点引出兩条垂直于点列直綫的垂綫。此等垂綫在平面上划出了一个無限長的条帶，此即所有接近于（不远于）結点00甚于接近于点列上任何其它結点之点所在之区域。再者，在最初構成的点列外的任何一点，均不可能置放在以結点00为中心，a为半徑的圓周內（圖 8）。

平行于起始点列的最近的点列無論通过何处，結点 $B=01$ 与起始結点間可能有的最大距离將等于 $\sqrt{d^2+\frac{a^2}{4}}$，此处 d 为此最近的点列与起始点列間的最短距离。从起始結点到次近的点列上的可能有的最近結点01間之距离为 $2d$。最小的可能有的d为$a\sin 60^\circ=\frac{a\sqrt{3}}{2}$，此时起始結点到最近点列的結点間的最大距离，顯然为 a。因为 $2d$ 等于 $a\sqrt{3}$，所以定理得証。若 a 的值一定則比值 $2d$: $\sqrt{d^2+\frac{a^2}{4}}$將随 d 的加長而增大。

我們轉向到由三个有順序的最小平移構成的三維平行六面体上，幷証明它的中空性。在兩个最短平移 a 和 b 所成平面上，划出所有接近于 00 甚于接近于面網上任何其它結点之点所在的区域（沃罗諾依区域）。



a б

圖 9 晶体網的沃罗諾依区域

a——一般情況

б——退化情況

結点 00 是六个由結点連成的銳角三角形的公共頂点（圖 9）。每一个三角形的外接圓心都是与三个相应的結点等距离之点。連結这些中心的直綫，顯然是由与兩結点等距离之点組成的。顯然（按照外接圓的作圖法），这些直綫是垂直于平移 $00-10, 00-01$及$00-\bar{1}1$ 的。整个六角形就是所求的圖形，即沃罗諾依区域。

六个(一)同样会聚于結点 00 的鈍角三角形的中心用不着去尋找。因为这些三角形的中心都位于三角形本身之外，虽然它們同样也与鈍角三角形的三頂点等距离，但是顯然是与平行四边形的四个頂点接近的。

如果这些三角形是直角三角形，亦即如果單位平行四边形是一个矩形，那末外接圓不是通过三結点，而是通过平行四边形所有的四个結点。这时六边形就退化成一个矩形了。矩形沃罗諾依区域的每一頂点都是与四个結点等距的。此种圖形在数学上的退化在于，其中不存在有不与所有頂点重合并只与三个点等距之点，但是在矩形边上的点却都是与兩个結点等距的。

若把此六角形（有时退化为矩形）——結点 00 的沃罗諾依区域——作为一直角柱之底面，我們就可把所有接近于結点 00 甚于接近于面網上任何其它結点的点包含在此直角柱內。若以点 00 为中心，b 为半徑作一球面，顯然我們就可确定，置放在这个已構成的角柱內的不共面的最近結点，祇能在球体之外(圖 10)[1]。

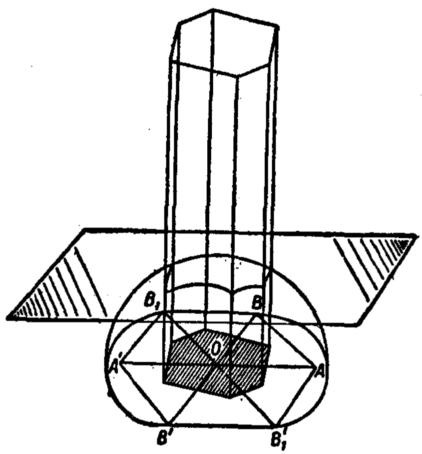


圖 10　用沃罗諾依区域的方法証明基本平行六面体的中空性

如果第三个結点 001 位于与起始網的距离为次近的面網上，那末从 00 到此結点的可能有的最短距离等于 $2d$，而 d 是兩个平行面網間最近的距离。从 00 到最近面網上的結点 001 的最長的距离等于 $\sqrt{d^2+r^2}$，此处 r 为六个銳角三角形中每一个三角形的外接圓的半徑。顯然，此 r 就是六边形（沃罗諾依区域）的外接圓半徑。从前

1) 圖 10 采自 Б. Н. 杰隆列：数学科学的成就，第四集，第 121 頁(1938)。

面把具有公共頂点00的六个同样三角形的外接圓心作为沃罗諾依区域的頂点这种作圖法，顯然可得出，此区域的六个頂点共圓的結論。当 $a\leqslant b$ 时圓的半徑不可能大于 $\frac{b}{\sqrt{3}}$，于是最小的 $d=\sqrt{b^2-\frac{b^2}{3}}$，而 $2d=2b\sqrt{\frac{2}{3}}=1.6b$。从結点 00 到次近網上的可能的最近的 001 結点之最小距离，就是 $2d$，同时到距离为 d 的最近面網上的可能的 001 結点間的最大距离則等于 b。因为常量 $r\leqslant\frac{b}{\sqrt{3}}$ 小于最小的 $d=b\sqrt{\frac{2}{3}}$，所以 $2d$ 和 $\sqrt{d^2+r^2}$ 比值的大小是随 d 的加高而增大的。

总之，三个最短平移不共面这一条件使得 001 結点祗能位于这样一个網上，此網与置放着格子的起始兩个挨次相接的極小的網最接近，于是基本平行六面体中空性的定理得到証明。

把棱边等于最短平移的單位平行六面体認为是格子的基本平行六面体[1)]是極其自然的。根据在內部或表面上除頂点以外在任何一点上均無附加結点这种性質，这样的平行六面体叫做原始晶胞或原始的單位晶胞。但是基本平行六面体的这种原始性是無数多个其它的平行六面体所共同有的。

不难了解，旣然原始平行六面体在它自己的頂点外沒有附加結点，因而它的特征就可能这样表示：在單位平行六面体体積內总共只占有格子的一个結点。实际上，頂点上的一个結点是同时屬于会聚在此頂点的八个平行六面体的。因此，这个結点只以 $\frac{1}{8}$ 屬于每一个平行六面体。对这种平行六面体來說，从八个这样的頂点，就可得到 $8\times\frac{1}{8}=1$ 个結点。所有其它的平行六面体虽然都不是由最短平移構成，但都是与基本平行六面体等体積的，因此它們都是原始平行六面体。这样的平行六面体有無数多个。我們仍从在第 3 頁上所構成的第一个面網开始，且不把从原点到 001 点間的距离取为第三个平移，而是把从原点到平行于基始面網并过 001 結点的一个面網上的任意点間的距离，当作第三平移——平行六面体的第三棱边。顯然，任何一个

1) Б. Н. 杰龍列曾經給出一种数字算法用以推導任何其它原始格子的这种基本平行六面体，并把它叫做簡化的基本平行六面体（основный приведенный параллелепипед）。

这样構成的平行六面体，当然多半是一个斜角平行六面体；它們的体積总是等于基本平行六面体的体積的，因为所有这些新的平行六面体都具有与基本平行六面体同样的高度，即这些高度都等于过 000 的基始網与平行于此基始網并过 001 的網間之最短距离。

可是，在由兩个最短平移構成其基本平行四边形的基始網中，同样也可以把不由最短平移 a 及 b 而由一个平移 a 及基本平行四边形的短对角綫，或者由 a 及同一基本平行四边形的長对角綫構成的平行四边形，取为原始平行六面体的底面。可以取平行于 a 并过 01 点的点列上的任意一点作为基本平行四边形的第三頂点。所有这样的平行四边形都具有与基本平行四边形同样的面積，因而都可能是一个原始平行六面体的底面，此原始平行六面体的第三棱边或者等于最短平移 c，或者等于一个另外的平移：此另外的平移的一端为 000 点，另一端为平行于基始網并过 001 点的網上任一結点。(圖 11)。

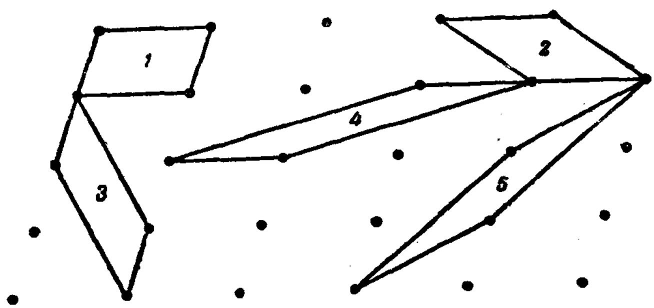


圖 11　晶体網的各种不同的原始(中空)平行四边形

总而言之，我們可以选擇三个从任何一点，特别是从原点 000，开始的任意平移，作为單位平行六面体的边。所得到的平行六面体，如果与基本平行六面体等体積，或者換句話說，如果只含有一个結点，則是一个原始平行六面体。如果在新的定向中軸長及軸間角为已知，那末借助于已給出的三个新的軸向量端点的坐标，就不难用数学公式將平行六面体的原始性的条件表示出來，即：