

自学之友

晶体学 14 种空间点阵型式 的对称性分析与导出

齐兴义

(北京航空航天大学化学与环境学院 北京 100191)

摘要 依据 7 个晶系的特征对称元素和正当点阵单位的划分规则,分析了各晶系空间点阵型式的生成过程,从而确定晶体学 14 种空间点阵型式(简立方 (cP)、体心立方 (cI)、面心立方 (cF)、简六方 (hP)、简四方 (tP)、体心四方 (tI)、 R 心六方 (hR)、简正交 (oP)、 C 心正交 (oC)、体心正交 (oI)、面心正交 (oF)、简单斜 (mP)、 C 心单斜 (mC) 和简三斜 (aP)) 是合理的逻辑演绎结果。

晶体是由微观粒子(原子、离子或分子)在三维空间周期性地重复排列而形成的固体物质,与晶体结构周期性对应的一个重要数学概念为点阵。依据特征对称元素,晶体分为 7 个晶系(立方、六方、四方、三方、正交、单斜和三斜),依据特征对称元素和正当点阵单位的划分规则,晶体的点阵分为 14 种空间点阵型式(简立方 (cP)、体心立方 (cI)、面心立方 (cF)、简六方 (hP)、简四方 (tP)、体心四方 (tI)、 R 心六方 (hR)、简正交 (oP)、 C 心正交 (oC)、体心正交 (oI)、面心正交 (oF)、简单斜 (mP)、 C 心单斜 (mC) 和简三斜 (aP))。法国科学家 Bravais 于 1866 年推导出上述 14 种空间点阵型式,故 14 种空间点阵型式又称为 Bravais 点阵型式。然而,14 种空间点阵型式的严格数学推导过程繁杂冗长,致使国内外许多有关晶体学、固体化学和结构化学的教材只是列举 14 种空间点阵型式,而对其来龙去脉或是只做部分说明,或无任何解释^[128]。

正当点阵单位的划分规则共有 4 条,分别是: 选择最高轴次的对称轴方向为晶轴矢量(正当点阵单位的棱边矢量)方向; 正当点阵单位应能反映点阵的点对称性; 尽可能使晶轴矢量相互交成直角; 在满足以上 3 个规则的前题下,正当点阵单位的平行六面体单元所含的点阵点应为最少或平行六面体单元的体积为最小。

本文以 7 个晶系的特征对称元素和正当点阵单位的划分规则为逻辑分析的基础,全面阐述各晶系的合理空间点阵型式。(系为教学总结,作者希望

W

www.cn.net

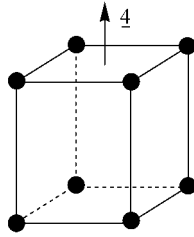


图 7 四方晶系的 hP 和 1×4

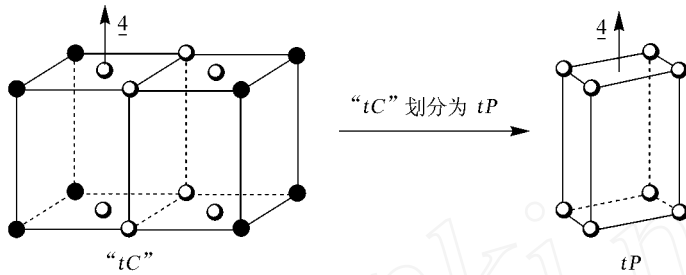


图 8 “C 心四方 (tC) 和简四方 (tP)

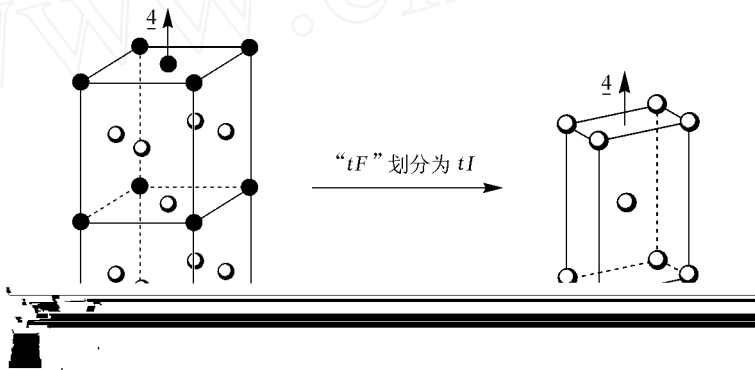


图 9 “面心四方 (tF) 和体心四方 (tI)

1×3 轴。如图 10 所示, hR 可凭借正六棱柱划分出只含有 1 个点阵点的菱面体素单位 (Rhombohedral P)。因此, hR 的加心即转化为 Rhombohedral P 的加心。

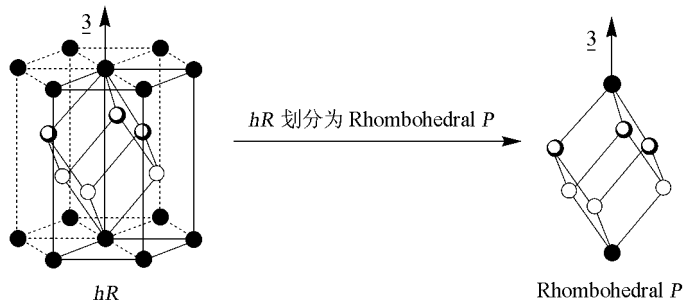


图 10 R 心六方和菱面体素单位

www.e

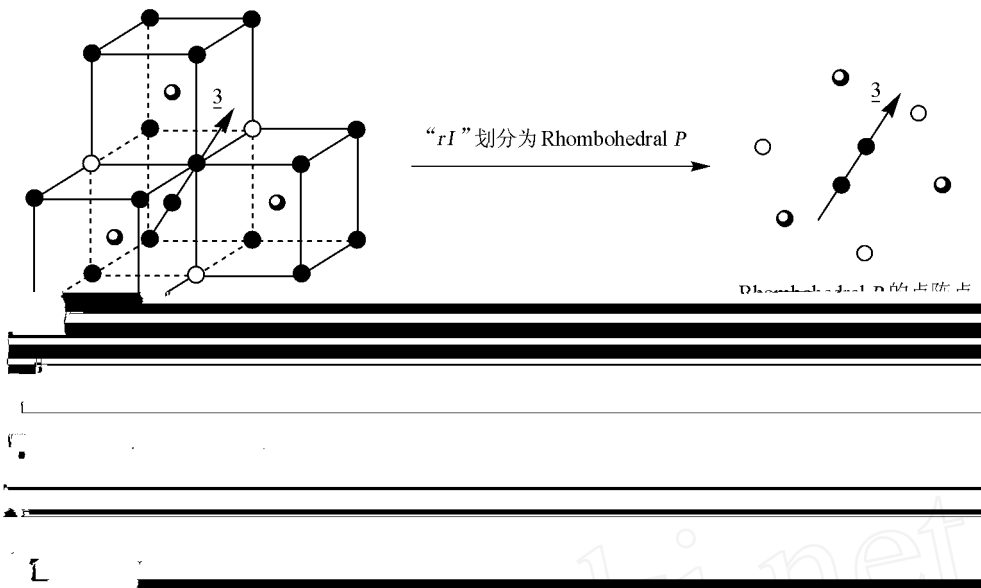


图 13 “体心菱面体 (rI) 和菱面体素单位

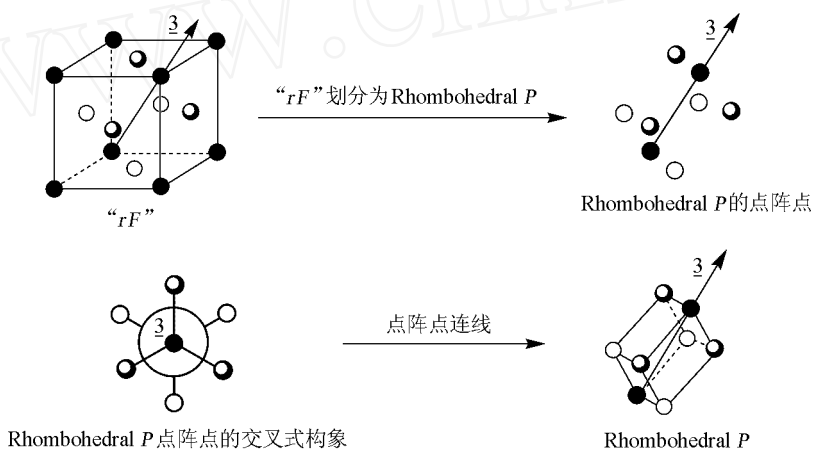


图 14 “面心菱面体 (rF) 和菱面体素单位

系的特征对称元素只能是 2 平行于 y 轴, m 垂直于 y 轴(图 15 仅示出 2)。

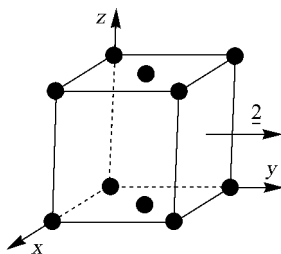


图 15 单斜晶系的 mC 和 1×2

单斜晶系的 2 允许加 I 心或 F 心于 mP , 加心后得到的“体心单斜 (mI)”和“面心单斜 (mF)”所含的点阵点分别为 2 和 4 , 所属点群为 C_{2h} 。与四方晶系和三方晶系相同, 因对称性不变, “ mI ”和“ mF ”必为单斜晶系两种空间点阵型式之一, 或是 mP 或是 mC 。如图 16和图 17

所示,“ mI ”和“ mF ”可转变成单斜晶系的同一种空间点型式—— mC 。需说明的是:为了能从“ mI ”划分出满足晶体学规定的 C 心单斜,在选定的平行六面单元中,需按图 16 中的 mC 所示,重新配置坐标系;“ mF ”划分为 mC 可由两步实现,先将“ mF ”划分为“ mI ”(图 17),再将“ mI ”经图 16 所示的划分转变成 mC 。

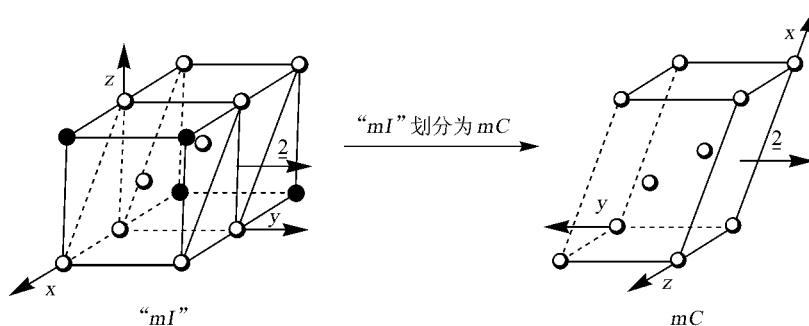


图 16 “体心单斜 (mI) 和 C 心单斜 (mC)

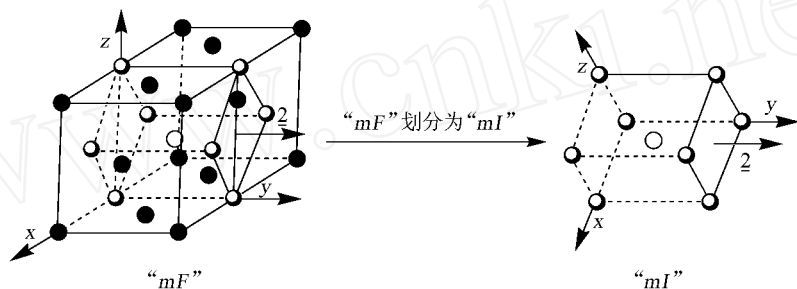


图 17 “面心单斜 (mF) 和“体心单斜 (mI) ”

7 三斜晶系

三斜晶系无轴对称性,特征对称元素为对称中心 (i),空间点阵型式只有简三斜 (aP),所属点群为 C_i 。因无轴对称性的限制,三斜晶系的 3 种复格子 (C 心、 I 心和 F 心)均可拆分成只含有一个点阵点的素格子—— aP 。

综上所述,满足点阵定义、晶系特征对称性和正当点阵单位划分规则的晶体学空间点阵型式只有 14 种。关于以各晶系的素格子为基础,加 A 心或 B 心及任意加点的分析与讨论不在此赘述。

本文得到北京航空航天大学首届研究生精品课程 (固体化学) 建设项目资助,特此致谢。

参 考 文 献

- [1] Atkins P.W. Physical Chemistry. Oxford: Oxford University Press, 1978
- [2] 俞文海. 晶体结构的对称群. 合肥:中国科学技术大学出版社, 1991
- [3] 崔秀山. 固体化学. 北京:北京理工大学出版社, 1991
- [4] 郭用猷. 物质结构基本原理. 北京:高等教育出版社, 1988
- [5] 周公度,段连运. 结构化学基础. 第 3 版. 北京:北京大学出版社, 2002