

实验一 14种布拉维格子和球体紧密堆积

一、实验目的:

加深对 14 种布拉维格子和球体紧密堆积原理的理解。

二、实验原理

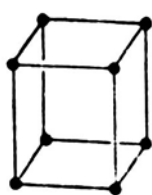
1. 布拉维格子

只在单位平行六面体的八个角顶上分布有结点的空间格子，称为原始格子(Primitive lattice, 符号 P)，在单位平行六面体的体中心还有一个结点时，则构成体心格子(Body-centered lattice, 符号 I)。如果在某一对面的中心各有一个结点时，称为单面心格子(One-face-centered lattice)，(001)面上有心的格子为底心格子或称 C 心格子(End-centered lattice, Base-centered lattice or C-centered lattice, 符号 C)，当(100)面或(010)面上有心时，分别称为 A 心格子(A-centered lattice, 符号 A)和 B 心格子(B-centered lattice, 符号 B)。如果在所有三对面的中心都有结点时，称为面心格子或全面心格子(Face-centered lattice or All-face-centered lattice, 符号 F)。

符合对称特点和选择原则的格子共有 7 种类型，共计 14 种不同型式的空间格子，即通常所称的十四种布拉维格子(the fourteen Bravais space lattices)，如图 5-1 所示。布拉维格子是空间格子的基本组成单位，只要知道了格子形式和单位平行六面体参数后，就能够确定整个空间格子的一切特征。



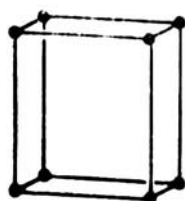
三斜原始格子(Z)



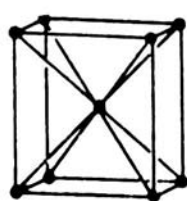
单斜原始格子(M)



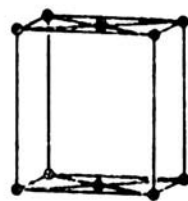
单斜底心格子(N)



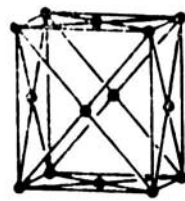
正交原始格子(O)



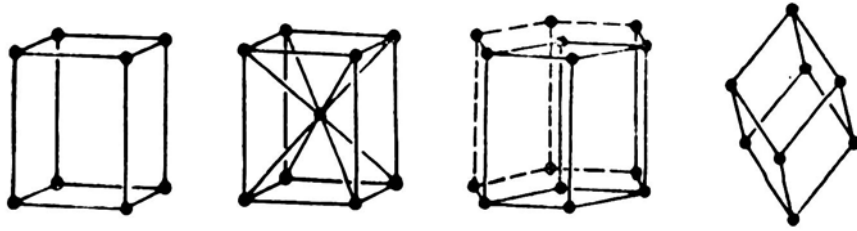
正交体心格子(P)



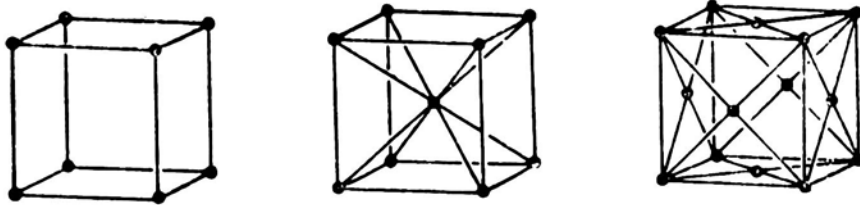
正交底心格子(Q)



正交面心格子(S)



四方原始格子(T) 四方体心格子(U) 六方和三方原始格子(H) 三方菱面体格子(R)



立方原始格子(C)

立方体心格子(B)

立方面心格子(F)

图 1 14 种布拉维格子

2. 球体紧密堆积

原子和离子都具有一定的有效半径，可以看作是具有一定大小的球体。金属晶体和离子晶体中的金属键和离子键没有方向性和饱和性，因此金属原子之间或离子之间的相互结合，在形式上可看成是球体间的相互堆积。由于晶体具有最小的内能性，原子和离子相互结合时，彼此间的引力和斥力达到平衡状态，相当于要求球体间作紧密堆积。

最紧密堆积的方式有两种，一是六方最紧密堆积(Cubic closest packing，缩写为 CCP)，最紧密排列层平行于 $\{001\}$ ，可以用 ABABAB.....顺序来表示(图 2)。另一种是立方最紧密堆积(Hexagonal closest packing，缩写为 HCP)，最紧密排列层平行于 $\{111\}$ ，可以用 ABCABCABC.....顺序来表示(图 3)。自然铜、自然金、自然铂等矿物的晶体结构属立方最紧密堆积方式，而钼铌矿以及金属锌等晶体的结构属六方最紧密堆积方式。

在等大球体的最紧密堆积中，球体间的空隙视空隙周围球体的分布情况有两种：四面体空隙(Tetrahedral void)和八面体空隙(Octahedral void)。



图 2 六方紧密堆积



图 3 立方紧密堆积

三、实验仪器设备及流程

乒乓球以及空间格子用的球及棒等。

四、实验操作步骤

1. 制作 14 种布拉维格子并认识其特征。
2. 观察等大球体紧密堆积模型，搞清其配位关系及其中的八面体和四面体两种空隙的分布，找出面心立方紧密堆积的 ABCABC……密堆方向及紧密堆积的 ABAB……密堆方向。
3. 动手试制面心立方密堆、六方密堆的模型，并制作四面体空隙和八面体空隙，以及认识球数与空隙的关系。
4. 用大小不等的球练习制作不等大球体的密堆，了解大球的堆积方式和小球的填充形式。

五、数据处理

请在试验过程中完成下表

球体紧密堆积

类型	配位数	排步方式	每个球周围空隙数目		空隙的数目		空隙利用率
			四面体	八面体	四面体	八面体	

六、分析讨论题

1. 什么是布拉维格子？试指出 14 种布拉维格子的特征。
2. 等大球体的紧密堆积有几种形式？并指出相应的空隙情况。