

## 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)。

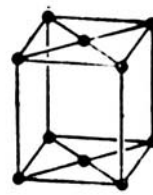
符合对称特点和选择原则的格子共有 7 种类型，共计 14 种不同型式的空间格子，即通常所称的十四种布拉维格子(the fourteen Bravais space lattices)，如图 5-1 所示。布拉维格子是空间格子的基本组成单位，只要知道了格子形式和单位平行六面体参数后，就能够确定整个空间格子的一切特征。



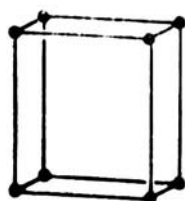
三斜原始格子(Z)



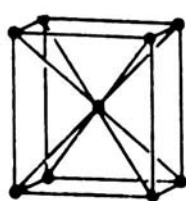
单斜原始格子(M)



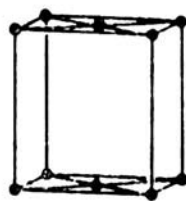
单斜底心格子(N)



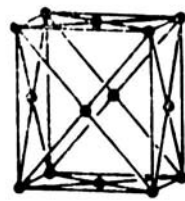
正交原始格子(O)



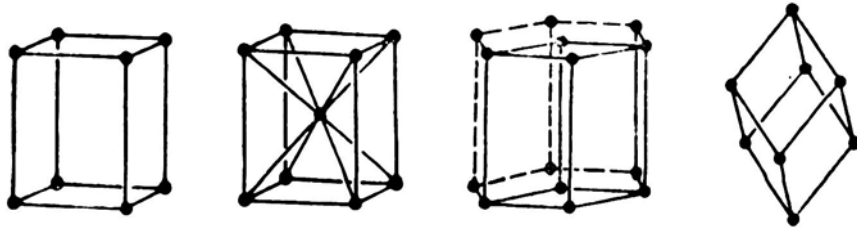
正交体心格子(P)



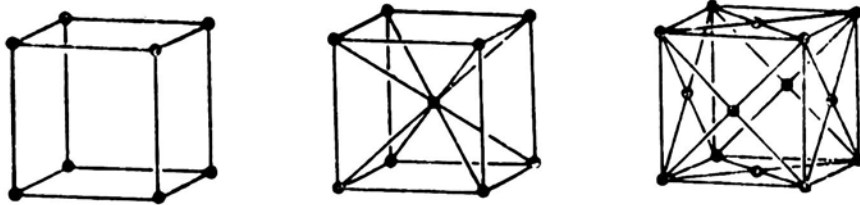
正交底心格子(Q)



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。