# 90．晶体与空间点阵有什么关系？

晶体，从宏观上说有三个主要特征：有规则的外形、各向异性、有确定的熔点；从微观上讲，它的微观粒子的排布有确定的结构，称为空间点阵。使这些微观粒子紧密结合起来的作用称为键。

一般说的固体，可以分为晶体和非晶体两类。非晶体可以说是黏稠的液体，晶体才是真正的固体。

## 一、晶体的宏观特性

①规则的外形。这是晶体最直观的特点。

②各向异性。这指的是晶体在不同的方向上可以有不同的物理性质。这里所说的物理性质是多方面的。其中的一个物理性质是晶体沿一定的平面容易断裂。例如，云母容易裂成薄片，这说明晶体在不同方向上的强度不同，这是其力学性质各向异性的一种表现。晶体的力学性质的各向异性还包括弹性（弹性模量）、硬度、屈服强度等多个方面。在云母片上涂一层薄薄的石蜡，用一根烧红的钢针接触云母片未涂石蜡的一面，会发现石蜡熔化的部分呈椭圆形，这说明它的传热性能各向并不相同。晶体的热学性质的各向异性还包括热膨胀系数等。晶体的电学性质和光学性质也呈现各向异性，例如电阻率和折射率在不同方向上也有所不同，等等。

③确定的熔点。晶体都有确定的熔点，即在一定的压强下，从外界吸热，必须到达一定的温度才会开始熔化，井且在熔化过程中温度保持不变，直到全部熔化完毕温度才继续升高，这个温度称为晶体的熔点。例如，冰在一个大气压下的熔点是 0 ℃。

以上三个特征对于单晶体而言是非常明显的。所谓单晶体，是指整块物质是一个完整的晶体。还有另外一种晶体，称为多晶体，它是由众多单晶体组成的大块物质，金属就是最常见的多晶体。在显微镜下观察磨光了的金属表面，发现金属是由众多细小的晶粒组合而成的，这些晶粒的线度一般为 10−4 ~ 10−3 cm，就是说每 1 cm3 的金属内至少有一千万（108）个晶粒。每个晶粒都具有规则的几何外形，也是各向异性的，但这众多晶粒的排列是无规则的，因此整体看金属不具有规则的外形，也不具有各向异性的特征。但多晶体同样具有确定的熔点。

## 二、晶体的微观结构——空间点阵

晶体宏观上的特性，源于其内部微粒的规则结构，称为空间点阵，最简单的空间点阵结构是立方结构。例如岩盐，即氯化钠（NaCl）晶体，它是由氯离子（Cl−）和钠（Na+）离子组成的，这两种离子间隔地分布在一个个立方体的顶点上，如图 1 所示，图中空心圆圈表示氯离子，实心圆圈表示钠离子。

图 1 岩盐的空间点阵结构

晶体的空间点阵的结构有多种，例如长方结构、三角结构、六角结构以及三斜结构等，它们的共同特点是沿某一方向上，微粒的排列呈现周期性，但沿不同的方向，其周期性往往不同，这就是晶体显现出各向异性的原因所在。

## 三、键

把晶体内部各微观粒子连接的作用称为键。以下是几种典型的键。

### （1）离子键

失去电子而形成的正离子与得到多余电子而形成的负离子间存在着相互吸引的静电力，这就是离子键，靠离子键结合起来的晶体称为离子晶体。岩盐（NaCl）晶体就是典型的离子晶体，可以说岩盐的单晶体整体就是一个大分子，相互间隔开来的正、负离子间的强大静电力使得它们紧密结合。由于离子键的作用强，因此离子晶体具有熔点高、挥发性低等特点。

### （2）共价键

原子之间共有电子对而产生的结合作用，称为共价键，由共价键形成的晶体称为原子晶体。两个氢原子组成一个氢分子、两个氧原子组合成一个氧分子，它们都是靠共价键而把两个原子结合成为一个分子。碳在元素周期表中是第 2 周期的元素，每个碳原子的外层有四个电子，即有四个价电子。金刚石就是由碳原子组成的原子晶体，每一个碳原子周围有四个碳原子，每两个碳原子间有一个共用的电子对，从而整块的金刚石就由共价键结合成一个大碳分子。共价键的结合力非常强，因此金刚石具有非常高的硬度，由于它内部没有自由电子，因此金刚石不导电。

### （3）金属键

属于元素周期表中第 2、第 3 等周期的金属元素，它们都容易失去最外层电子而成为正离子。在金属晶体内部，正离子按一定规律排列成空间点阵，而脱离了原子核束缚的缚的最外层电子为所有正离子共有，可以在金属内自由移动，称为自由电子，正离子与自由电子的结合作用称为金属键。金属键的结合作用也很强，因此金属晶体一般具有较高的熔点、较大的硬度，并且由于自由电子的存在，使得它们都是良好的导电体。汞是一个例外，它在常温下是液体。

### （4）范德瓦尔斯键

由稳定的分子结合而成的晶体称为分子晶体，这些中性分子间的相互作用称为范德瓦尔斯键。由原子结合成的分子虽然整体是中性的，但可能每个分子都是极性的，即一端显正电性而另一端显负电性。当两个极性分子靠近时，由于静电力的作用会发生转向，使它们相反的极性相对，从而产生相互吸引的力，称为取向力。对于非极性分子，它位于极性分子的附近时，会受到极性分子的“诱导”而被极化，成为极性分子，这样的分子间的相互吸引的力称为诱导力。还有一种相互作用，发生在两个非极性分子之间，由于分子内的外层电子总是在运动着，有时两个靠近的分子间的作用是相互吸引，而另外的时候它们又相互排斥，但根据量子力学的理论，对时间的平均效果是引力作用，这种力称为色散力。上面的取向力、诱导力、色散力这三种结合作用统称为范德瓦尔斯键，由范德瓦尔斯键结合的晶体称为分子晶体。由于范德瓦尔斯键相对前面的几种键的强度都低得多，因此分子晶体的熔点较低，容易挥发，硬度较小。

### （5）氢键

水分子由一个氧原子和两个氢原子组成，水分子是电中性的，但其中的两个氢原子位于氧原子的一端，成 105° 角，水分子是极性分子，氧原子一端呈负电性，氢原子一端呈正电性。水结冰时，某个水分子的正电性一端的两个氢原子分别与另外两个水分子的负电性一端的氧原子相互吸引，这种结合作用称为氢键。这样，每个氢原子都与两个氧原子连接：一个是与它组成同一个 H2O 分子的氧原子，另一个则是另外一个 H2O 分子的氧原子，它们之间靠氢键连接。而每一个氧原子则与 4 个氢原子连接，其中两个与它属于同一个 H2O 分子，另两个则属于另外两个不同的 H2O 分子，是氢键连接。这样组成的冰晶体，内部比较空旷，因此水结冰后体积不但不缩小反而要增大约 1/9。

我们前面所举的例子中的晶体，其空间点阵是靠某一种键维持的，例如岩盐晶体就完全是靠离子键、金刚石则完全是靠共价键、金属则完全是靠金属键，但实际上很多晶体内部结构复杂，内部的连接往往不止一种键。例如石墨晶体，它与金刚石一样都是由四价的碳原子组成的单质，但内部碳原子的连接却有共价键、金属键和范德瓦尔斯键三种形式：每个碳原子的四个价电子中有三个是与位于同一层中相邻的碳原子中的一个电子组成共价键；另一个价电子为该层中所有碳原子共有，形成金属键；层与层之间的结合则是通过较弱的范德瓦尔斯键连接。正是由于石墨的这种结构特点，它的硬度远低于金刚石，并且具有较好的导电性，它的各向异性非常明显，各层间容易滑动，可以用作润滑剂，并且容易裂成细小片状，适于制作铅笔。

离子键、共价键、金属键这三种是常见的化学键，都是比较强的键。范德瓦尔斯键是分子键，其强度比前三者要弱得多。氢键其实也可以说是分子键，但它比较特殊，其强度也比一般的范德瓦尔斯键要强。