



普通高等教育“十一五”国家级规划教材



北京市高等教育精品教材立项项目

中国石油和化学工业优秀出版物奖（教材奖）一等奖获奖教材

# 材料物理

第二版

李志林 编著



化学工业出版社



普通高等教育“十一五”国家级规划教材



北京市高等教育精品教材立项项目

中国石油和化学工业优秀出版物奖（教材奖）一等奖获奖教材

# 材料物理

（第二版）

李志林 编著



化学工业出版社

· 北京 ·

本书为普通高等教育“十一五”国家级规划教材，中国石油和化学工业优秀出版物奖（教材奖）一等奖获奖教材，北京市高等教育精品教材。本书主要描述材料中的物理现象及其本质机理和应用。本书分为10章，分别是材料的晶态结构、晶体缺陷、材料的固态相变、材料的固态扩散、材料的电子理论、材料的电学性能、材料的磁学性能、材料的热学性能、材料的力学性能、材料的光学性能。为便于学习使用，在每章后附有思考题和习题。

本书可作为材料科学与工程等工科专业材料物理课程的教材，也可作为相近专业研究生和本科生的教材和参考书以及材料科学工作者和材料工程技术人员的参考书。

#### 图书在版编目 (CIP) 数据

材料物理/李志林编著. —2版. —北京: 化学工业出版社, 2014. 11

普通高等教育“十一五”国家级规划教材 中国石油和化学工业优秀出版物奖（教材奖）一等奖获奖教材 北京市高等教育精品教材

ISBN 978-7-122-22030-1

I. ①材… II. ①李… III. ①材料科学-物理学-高等学校-教材 IV. ①TB303

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2014) 第 235787 号

责任编辑: 杨 菁

文字编辑: 王 琪

责任校对: 蒋 宇

装帧设计: 关 飞

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 装: 三河市延风印装有限公司

787mm×1092mm 1/16 印张 20¼ 字数 512 千字 2015 年 10 月北京第 2 版第 1 次印刷

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

定 价: 40.00 元

版权所有 违者必究

# 前 言

本书第一版出版以后，蒙众多院校选为材料物理课程的教材，获得了普遍的好评。使用本书的学生、任课教师，同行专家对本书贯通金属材料 and 无机非金属材料、紧密联系工程实际和知识体系的系统性等方面的特点给予充分肯定。

本书第一版出版之后，材料物理学科近年来相继出现了一些令人瞩目的新进展，笔者觉得有必要在本书中向读者介绍。另外，限于笔者的学识水平，本书第一版在使用过程中也发现了一些瑕疵和不当。基于此，在第一版的基础上进行了内容和阐述方式的增加和修订，主要体现在：第一，增加了材料物理学科中近年来的进展；第二，更正了第一版中的不当之处和某些问题的叙述方法，使之更容易为读者接受；第三，在部分章节增加了少量思考题或习题，便于读者通过思考练习理解本书内容；第四，在附录中增加了常用物理常量，便于读者计算时查找；第五，调整了部分章节的顺序，方便读者理解。

同样，本书注意保持第一版浅显实用的特色，使之适用于工科学生。除了作为工科的材料物理教材外，本书还可以作为相近专业研究生和本科生的教材和参考书。

囿于笔者的学识水平，书中难免还存在缺点、疏漏，希望读者给予批评指正。

编著者  
2014年9月

# 第一版前言

材料是人类文明发展的重要标志。可以说人类文明的进展一直是与材料的发展同步进行的。所以才有历史学家以某一时代占主导地位或代表文明水平的材料来划分历史时代，即所谓的石器时代、青铜时代、铁器时代。

尽管我们为中国以瓷器闻名于世而骄傲，为我们的祖先在商朝就创造了光辉灿烂的青铜文明而自豪，但我们对材料的使用和研究在大多数情况下是自发的、不系统的。整个人类也是如此。直到约 200 年前，由于大机器工业对新材料的追求，才逐渐出现了现代意义上的冶金工业。矿业、冶金、交通运输等近代工业的发展促进了冶金学、冶金物理化学、凝固和固态相变理论、晶体结构理论等的相继出现。近几十年来，随着物理学的进展，材料研究逐渐深入到了其电子理论的本质层次。量子力学与统计力学结合，从单原子体系到多原子体系，逐渐可以解决材料中的多体系问题。特别是能带理论对材料导电、导热等机理的成功揭示标志着材料科学的发展进入了一个新的阶段。

然而，这些理论的成功更多地体现在金属和合金中。尽管人类在几千年前就开始使用陶瓷材料，但对其进行系统研究的时间并不长。人们开始深入地研究特种陶瓷不过有几十年的历史。人们对有机高分子材料的认识则更晚。近几十年来，伴随着现代石油化学工业的蓬勃发展，人工合成的高分子材料才开始大行其道。意识到了不同材料的优点和不足，顺理成章地，人们开始有目的地将不同的材料用不同的方式组合在一起，这就是所谓的复合材料。

由于材料的发现和使用是分散的，人们对材料的研究也缺乏系统性。在近 20 年前，多数人仍然对无机材料和有机材料结构、性能等中的共同规律认识不足。所以我们的材料教育也一直是分割成若干部分。涉及材料的专业就有金相（金属材料及热处理）、铸造、锻压、焊接、冶金物理化学、金属腐蚀与防护、金属物理、粉末冶金、钢铁冶金、有色金属冶金、高温合金、精密合金、电子材料、硅酸盐、矿物岩石材料、建筑材料、耐火材料、无机非金属材料、高分子材料、生物医学材料、复合材料等。

随着材料科学与工程的发展，人们越来越意识到了材料中的结构、性能等方面共性的东西。材料学（materialurgy）这一名词的出现标志着材料科学开始成为一门统一的科学。教育部 1998 年公布新的专业目录时，在材料科学与工程一级学科下设置材料学、材料加工工程、材料物理化学三个专业，这一方面是为了适应培养通才、拓宽专业口径的教学改革思想，另一方面也反映了材料科学发展的进程。同时，各校在该专业目录之外还保留了一些材料类的特色专业，如高分子材料、生物医学材料等。

但是，新的材料专业的教学体系的构建远非一个专业目录就可以完成的。专业名称改革之前，在不同的专业中，有关材料中的物理问题分散于固体物理、金属物理、金属学、热处

理原理、陶瓷学、无机非金属材料工程学、高分子物理、金属物理性能、金属力学性能等课程中。新的专业教学体系迫切需要将金属材料、无机非金属材料、有机高分子材料乃至复合材料中的物理问题融合为统一整体的材料物理教材。

教育部新的专业目录公布后，1999年国内就有同时涉及这些材料的材料物理教材问世，满足了一时之急需。但短时间的仓促成书也显出一些弊病，一是未经实际教学检验，二是虽将不同材料的问题编写在一起，但缺乏有机的融合。之后也有相应教材的成熟之作问世，但就我们所见的教材是适用于理科的本科生和研究生的，学习该类教材的学生必须有较好的数理基础，对工科的材料学、材料加工工程等专业的本科生来讲有一定的难度。所以，工科类材料科学与工程专业的材料物理课程教学中一直难于找到合适的教材，这是笔者编写本教材的初衷。同时，本教材力求适应工科材料学及相关专业学生的数理基础，较全面地反映材料中共有的物理现象及其本质。教材编写过程中注意从材料中的物理现象出发，在一定的模型、假设的基础上，用一定的理论结果对现象进行形象的定性描述。当然，用方程式来描述材料中的物理现象是比任何语言都更准确的，但在有限的学时中能否使学生完全掌握则存在问题。因此本书对现象的说明尽量略去繁复的推导，使初学者逐步了解和掌握材料中的物理现象及其本质原因。如果使用后发现本书确实具有上述特色，笔者将感到十分欣慰。

除了作为工科的材料物理教材外，本书还可以作为相近专业研究生和本科生的教材和参考书。

由于笔者的学识水平有限，书中可能存在一些疏漏和错误，希望读者给予批评指正。你的指正必然有助于本书的完善，笔者对此不胜感激。

编著者  
2008. 12

# 目 录

## 第 1 章 材料的晶态结构 / 1

1.1 晶体学基础 .....	1	1.3 陶瓷材料的结构 .....	26
1.1.1 点阵和晶胞 .....	1	1.3.1 特种陶瓷的结构 .....	27
1.1.2 晶向指数和晶面指数 .....	6	1.3.2 硅酸盐的晶体结构 .....	29
1.1.3 晶面间距 .....	8	1.3.3 玻璃的结构 .....	32
1.1.4 非晶态材料的结构 .....	10	1.4 低维材料的结构 .....	34
1.1.5 准晶体的结构 .....	11	1.4.1 薄膜的形成过程 .....	34
1.2 金属材料的结构 .....	12	1.4.2 薄膜的结构 .....	37
1.2.1 纯金属的典型晶体结构 .....	13	思考题和习题 .....	40
1.2.2 合金相结构 .....	17		

## 第 2 章 晶体缺陷 / 42

2.1 晶体缺陷概述 .....	42	2.3.2 位错的概念和柏氏矢量 .....	48
2.2 点 缺 陷 .....	43	2.3.3 位错的运动 .....	52
2.2.1 肖特基缺陷和弗兰克尔缺陷 .....	43	2.3.4 位错对晶体性能的影响 .....	55
2.2.2 点缺陷的特点 .....	43	2.4 面 缺 陷 .....	56
2.2.3 点缺陷的平衡浓度 .....	44	2.4.1 晶界 .....	56
2.2.4 空位形成能 .....	45	2.4.2 堆垛层错 .....	61
2.2.5 点缺陷对性能的影响 .....	45	2.4.3 孪晶界 .....	62
2.2.6 过饱和点缺陷 .....	46	2.4.4 外表面 .....	63
2.3 位 错 .....	46	2.4.5 相界面 .....	64
2.3.1 位错的发现 .....	46	思考题和习题 .....	65

## 第 3 章 材料的固态相变 / 67

3.1 固态相变的概念及分类 .....	67	3.1.3 固态相变的分类 .....	70
3.1.1 相变的基本概念 .....	67	3.2 多晶型性转变 .....	73
3.1.2 固态相变的一般特点 .....	68	3.2.1 多晶型性转变的相变驱动力 .....	74

3.2.2 多晶型性转变的相变过程	74	3.4.7 热弹性马氏体与形状记忆效应	90
3.3 共析转变	75	3.5 贝氏体转变	94
3.3.1 共析转变的热力学	75	3.5.1 贝氏体的组织形态	94
3.3.2 共析转变的过程	76	3.5.2 贝氏体转变的动力学	96
3.3.3 共析转变的动力学	78	3.5.3 贝氏体转变的特点	96
3.4 马氏体转变	79	3.5.4 贝氏体转变的机制	97
3.4.1 马氏体的概念	79	3.5.5 贝氏体的定义	98
3.4.2 马氏体转变的特点	80	3.6 玻璃态转变和非晶态合金	98
3.4.3 马氏体转变的动力学	81	3.6.1 非晶态转变和玻璃化温度	98
3.4.4 马氏体转变的热力学	84	3.6.2 非晶态合金的形成	99
3.4.5 马氏体的组织形态	86	思考题和习题	101
3.4.6 马氏体的转变机制	87		

## 第4章 材料的固态扩散 / 103

4.1 扩散动力学	103	4.4 影响扩散的因素	115
4.1.1 扩散第一定律	103	4.4.1 温度	116
4.1.2 扩散第二定律	104	4.4.2 固溶体类型	116
4.2 扩散机制	109	4.4.3 晶体结构	116
4.2.1 间隙扩散	109	4.4.4 溶质浓度	117
4.2.2 置换扩散	111	4.4.5 第三组元	117
4.2.3 晶界扩散和位错扩散	113	4.4.6 晶体缺陷	118
4.3 上坡扩散	114	思考题和习题	119

## 第5章 材料的电子理论 / 120

5.1 波函数和薛定格方程	120	5.4 能带理论	133
5.1.1 微观粒子的波粒二象性	120	5.4.1 近(准)自由电子近似和能带	134
5.1.2 波函数和薛定格方程	121	5.4.2 布里渊区	137
5.2 经典统计和量子统计	124	5.4.3 近自由电子近似下的状态密度	140
5.3 自由电子假设	126	5.4.4 能带理论对材料导电性的解释	140
5.3.1 经典自由电子理论	126	思考题和习题	142
5.3.2 量子自由电子理论	126		

## 第6章 材料的电学性能 / 144

6.1 金属导体的导电性	144	6.2 半导体的导电性	150
6.1.1 自由电子近似下的导电性	144	6.2.1 本征半导体	150
6.1.2 能带理论下的导电性	145	6.2.2 杂质半导体	152
6.1.3 导电性与温度的关系	146	6.2.3 霍尔效应	156
6.1.4 电导功能材料	148	6.3 离子晶体的导电性	157



6.3.1 离子导电的理论	158	6.5.1 热电势	171
6.3.2 离子导电的影响因素	161	6.5.2 塞贝克效应	172
6.3.3 快离子导体	162	6.5.3 珀耳帖效应	173
6.4 超导电性	163	6.6 材料的介电性能	174
6.4.1 超导现象	163	6.6.1 电介质的极化	174
6.4.2 超导理论	166	6.6.2 介电损耗	178
6.4.3 超导研究的进展及其应用	169	6.6.3 介电体击穿	181
6.5 热电效应	171	思考题和习题	183

## 第 7 章 材料的磁学性能 / 186

7.1 材料磁性能的代表参量和材料磁化的分类	186	7.4 铁磁性	194
7.1.1 材料磁性能的代表参量	186	7.4.1 铁磁体磁化的现象	194
7.1.2 材料磁化的分类	187	7.4.2 铁磁体的自发磁化	198
7.2 孤立原子的磁矩	188	7.4.3 铁磁体的技术磁化	204
7.2.1 电子和原子核的磁矩	188	7.5 强磁材料	209
7.2.2 原子的磁矩	190	7.5.1 软磁材料	209
7.3 抗磁性和顺磁性	191	7.5.2 硬磁材料	210
7.3.1 抗磁性	192	7.5.3 磁记录材料	210
7.3.2 顺磁性	193	思考题和习题	211

## 第 8 章 材料的热学性能 / 213

8.1 材料的热容	213	8.3.2 热膨胀的微观机理	226
8.1.1 杜隆-珀替定律	213	8.3.3 热膨胀系数与其他物理量的关系	228
8.1.2 热容的量子理论	214	8.3.4 实际材料的热膨胀	230
8.1.3 实际材料的热容	217	8.3.5 膨胀分析和膨胀合金	231
8.1.4 热分析法	219	8.4 材料的热稳定性	233
8.2 材料的热传导	220	8.4.1 热应力	233
8.2.1 热传导的宏观现象	220	8.4.2 抗热冲击断裂性能	234
8.2.2 热传导的机理	221	8.4.3 实际材料热稳定性的表征	238
8.2.3 实际材料的导热	222	思考题和习题	239
8.3 材料的热膨胀	225		
8.3.1 热膨胀的宏观现象	225		

## 第 9 章 材料的力学性能 / 241

9.1 材料的力学性能指标	241	9.1.3 硬度	245
9.1.1 应力和应变	241	9.2 材料的变形	247
9.1.2 材料的静载力学性能指标	242	9.2.1 晶体的弹性变形	247

9.2.2 晶体的塑性变形	254	9.4.2 裂纹尖端应力的塑性变形区修正	275
9.2.3 晶体的蠕变	259	9.4.3 陶瓷材料的强韧化方法	278
9.2.4 材料的黏性流动和黏弹性	261	9.5 材料的疲劳	280
9.3 材料的断裂	263	9.5.1 疲劳现象和疲劳极限	281
9.3.1 理论断裂强度	263	9.5.2 疲劳破坏的微观机制	282
9.3.2 格里菲斯断裂强度理论	264	9.6 材料的抗冲击性能	284
9.3.3 材料断裂的过程	267	9.6.1 冲击韧性试验	284
9.4 材料的断裂韧性	273	9.6.2 金属材料的冷脆	285
9.4.1 裂纹尖端应力场强度因子 $K_I$ 及断裂韧性 $K_{Ic}$	273	思考题和习题	286

## 第 10 章 材料的光学性能 / 289

10.1 光与材料的作用	289	10.2.2 激光的产生	303
10.1.1 光的物理本质	289	10.3 光学材料	306
10.1.2 光与材料作用的一般规律	290	10.3.1 发光材料	306
10.1.3 金属材料对光的吸收和反射	291	10.3.2 固体激光工作物质	307
10.1.4 非金属材料对光的反应	292	10.3.3 光导纤维	307
10.2 材料的发光和激光	302	思考题和习题	309
10.2.1 发光和热辐射	302		

## 附录 物理常量表 / 311

## 参考文献 / 312

# 第1章 材料的晶态结构

材料的性能从本质上说是由其电子结构决定的。然而同样的元素在原子（分子）按不同的方式排列成固体时，由于原子（分子）所处的环境不同，原子（分子）间距不同，使它们之间的键合强弱不同。实际上，材料的力学性能更强烈地依赖于其原子和分子的排列方式。如同样是含碳量（质量分数，以下余同）为 1.0% 的铁碳合金，在加热到 1200℃ 时塑性很好，可以进行锻造和轧制等成形加工。加热后缓慢冷却（如随炉冷却或在空气中冷却）后硬度较低，可对其进行切削加工，将其制成一定形状的零件。而加热后快速冷却（如直接淬入水中）则硬度很高，可以作为金属低速切削的刀具，实现所谓“用钢切钢”。性能如此明显的差异源于不同的加热或冷却处理使其中的原子排列方式产生了明显的不同。

材料中的原子（或分子）在三维空间的排列可能是有规则的，也可能是无规则的。对材料中的原子（分子）排列是否有规则、是何种排列规则的描述即材料的晶态结构。按原子（分子）空间的排列方式可将材料分成三类。原子（或分子）在三维空间作有规则的周期性重复排列的材料称为晶体，即其中的排列方式为长程有序。如果材料中的原子（或分子）不规则地排列则称为非晶体。准晶体是一种介于晶体和非晶体之间的有序结构。

## 1.1 晶体学基础

### 1.1.1 点阵和晶胞

人们对材料晶态结构的认识始于对天然晶体，如食盐、水晶、宝石等规则外形的认识。可以说，人们对晶体结构本质上的认识始于 1912 年索末菲等用 X 射线照射晶体发现了衍射现象和布拉格父子提出了布拉格定律。这是一箭双雕的伟大发现，不仅证实了此前劳厄等提出的 X 射线是电磁波的假设，也证明了晶体排列的规律性。用现代的分析测试方法可以非常直观地看到晶体中原子排列的规律性。图 1-1 就是用透射电子显微镜（transmission electron microscope, TEM）拍摄的金（200）晶面的晶格照片。可以看到，在箭头的方向上，每隔 0.204nm 就有一个原子，这就是原子排列的一种规律性。不同的晶体具有不同的规律，晶体中原子（分子）的排列规律如何描述呢？

#### 1.1.1.1 点阵（晶格）

为研究原子或分子在空间的排列情况，将周围环境相同，彼此等同的原子、分子或原子群、分子群的中心抽象为规则排列于空间的无数个几何点，这种几何点的空间排列称为空间点阵，简称点阵（crystal lattice）。点阵中的点子称为阵点或结点。

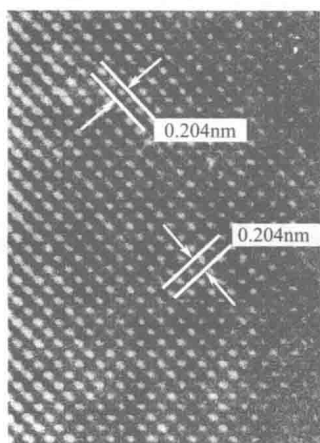


图 1-1 金 (200) 晶面的透射电镜显微照片

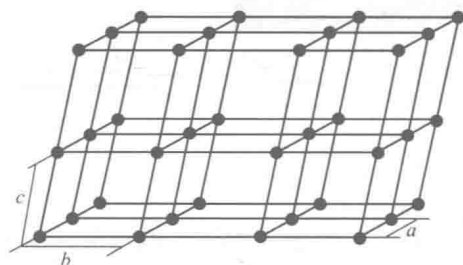


图 1-2 点阵示意图

进行了抽象之后，点阵中的原子、分子等都成为彼此等同的点。不同晶体的区别就在于点的排列方式不同。为观察方便，用许多平行直线把阵点连接起来，就是点阵的几何图像，如图 1-2 所示。对于这一点阵，如果确定某一阵点为原点，沿不同的方向，分别平移  $a$ 、 $b$ 、 $c$ ，即可再找到一个阵点。而沿其他方向，则可能每平移  $\sqrt{a^2+b^2}$ 、 $\sqrt{a^2+b^2+c^2}$ ……，又可找到一个阵点。晶体排列的周期性得到了体现。

从理论上讲，理想晶体的点阵应该一直排列到晶体的边界。在边界上向外平移不再能找到阵点。也就是说，晶体排列的周期性在晶体的边界被破坏。然而，实际晶体的原子数目是非常大的。原子的尺度在  $10^{-10}$  m 的数量级，因此，即使是  $1\text{cm}^3$  的晶体，所含的原子数也有  $(10^7 \sim 10^8)^3$  的数量级，所以考虑其阵点的排列时，可以不考虑边界的作用，而将点阵看成是无穷大的。我们在研究阵点的排列方式时，当然不可能画出无穷大的点阵，那么，点阵应该画成多大呢？

### 1.1.1.2 晶胞

由于各阵点的周围环境相同，空间点阵具有周期重复性，在研究不同的点阵时只研究三个不平行方向的一个周期即可。所以，为说明点阵排列的规律和特点，在点阵中取出一个具有代表性的基本单元作为点阵的组成单元，称为晶胞 (crystal cell)。图 1-3 是晶胞示意图。点阵实际上可由晶胞在不同的方向上复制得到。

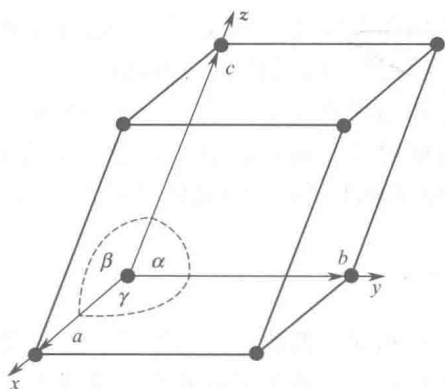


图 1-3 晶胞示意图

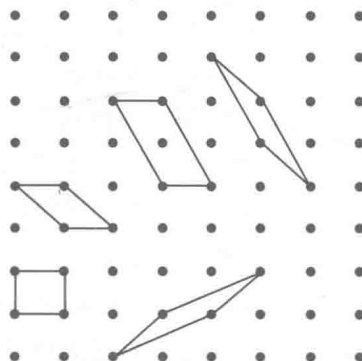


图 1-4 二维晶胞的不同取法

对同一点阵，晶胞也可以有不同的取法。图 1-4 示意地表示出二维点阵中晶胞的不同取法。为研究方便，一般选取只在每个角上有一个阵点的平行六面体作为晶胞，称为初级晶胞或简单晶胞。有时为更好地表现点阵的对称性，也可不取简单晶胞而使晶胞的中心或表面的中心（全部或部分表面）也有阵点，如体心（六面体几何中心）、面心（每个表面的中心）或底心（上下底面的中心）也有阵点的晶胞。

晶胞的形状由其三个棱边长  $a$ 、 $b$ 、 $c$  和晶轴  $x$ 、 $y$ 、 $z$  之间的夹角  $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$  限定。将这六个参数称为晶胞参数（点阵常数，晶格常数，lattice constant, lattice parameter）。实际上，用点阵矢量  $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{b}$ 、 $\mathbf{c}$  可更方便地描述晶胞。这三个矢量不仅确定了晶胞的形状和大小，而且可完全确定空间点阵。任选一原点，就可以确定点阵中任一阵点的位置：

$$\mathbf{r}_{uvw} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c} \quad (1-1)$$

式中， $u$ 、 $v$ 、 $w$  为该点的坐标，或从原点起沿点阵矢量  $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{b}$ 、 $\mathbf{c}$  平移的单位数。

图 1-5 形象地表示出了从原子排布到点阵、晶胞的抽象过程。

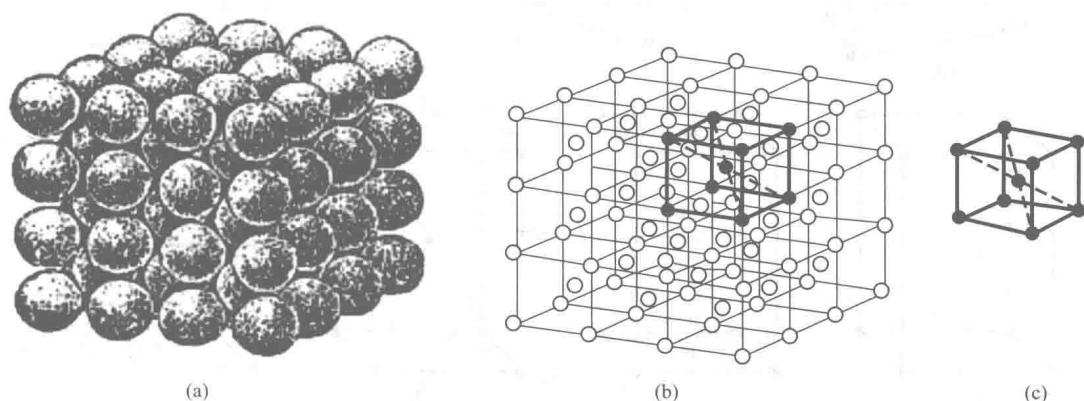


图 1-5 从原子排布到点阵、晶胞的抽象过程

(a) 原子排布；(b) 点阵；(c) 晶胞

### 1.1.1.3 晶系

为描述不同点阵中的阵点的排列特点，在晶体学中，常按晶系（crystal system）对晶体进行分类，其分类依据是点阵常数和它们之间的关系，即晶胞的三个棱边长  $a$ 、 $b$ 、 $c$  是否相等，晶轴的夹角  $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$  是否相等及是否有直角。在此情况下，晶系只有 7 种类型，如表 1-1 所示。所有的晶体点阵都可以归于这 7 种晶系之中。

表 1-1 晶系

晶 系	棱边长度和夹角关系	举 例
三斜	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$\text{K}_2\text{CrO}_7$
单斜	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	$\beta\text{-S}, \text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
正交	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\alpha\text{-S}, \text{Ga}, \text{Fe}_3\text{C}$
六方	$a_1 = a_2 = a_3 \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$\text{Zn}, \text{Cd}, \text{Mg}, \text{NiAs}$
菱方	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$\text{As}, \text{Sb}, \text{Bi}$
四方(正方)	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\beta\text{-Sn}, \text{TiO}_2$
立方	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\text{Fe}, \text{Cr}, \text{Cu}, \text{Ag}, \text{Au}$

### 1.1.1.4 布拉菲点阵

布拉菲 (A. Bravais) 首先用数学的方法确定, 按“每个阵点周围环境相同”的要求, 空间点阵只能有 14 种形式, 称为布拉菲 (Bravais) 点阵, 即三斜晶系的简单三斜, 单斜晶系的简单单斜、底心单斜, 正交晶系的简单正交、底心正交、体心正交、面心正交, 六方晶系的简单六方, 菱方晶系的菱形 (三角), 四方晶系的简单四方、体心四方, 立方晶系的简单立方、体心立方、面心立方。这 14 种布拉菲点阵的晶胞如图 1-6 所示。

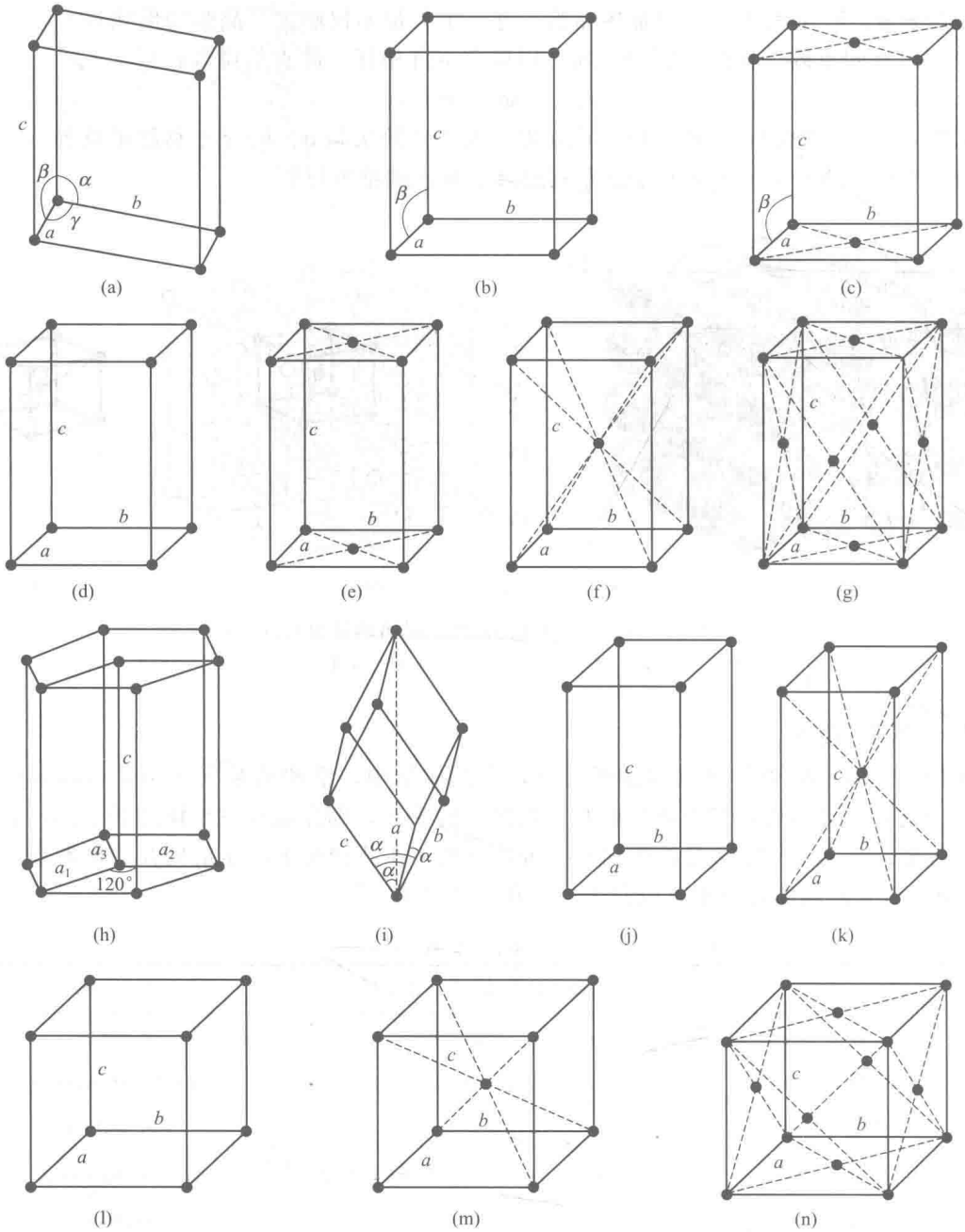


图 1-6 14 种布拉菲点阵的晶胞

(a) 简单三斜; (b) 简单单斜; (c) 底心单斜; (d) 简单正交; (e) 底心正交; (f) 体心正交; (g) 面心正交;  
 h) 简单六方; (i) 菱形 (三角); (j) 简单四方; (k) 体心四方; (l) 简单立方; (m) 体心立方; (n) 面心立方

前已述及，同一点阵的晶胞可以有不同的取法。例如，14种布拉菲点阵中的底心、面心、体心晶胞都可以取成简单晶胞。上述14种布拉菲点阵是根据阵点在三维空间的排列方式，考虑更好地反映点阵的对称性等因素选取的。例如，简单六方点阵的晶胞也可以取成平行六面体的形式，如图1-7所示。但这种取法对这一点阵的对称性显示得不明显，不如取成六棱柱的形式为好。又如，体心立方晶胞的点阵也可用三斜晶胞表示，如图1-8所示。再如，面心立方晶胞的点阵也可用菱形晶胞表示，如图1-9所示。但这样的取法都不能充分地反映这些点阵的高度对称性，故一般不采用这样的取法。

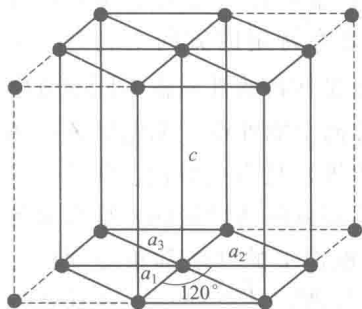


图 1-7 六方晶系晶胞的不同取法

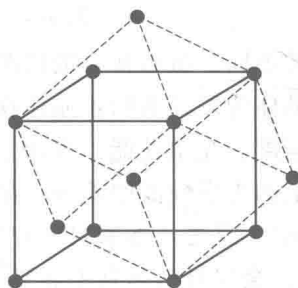


图 1-8 体心立方晶胞的点阵所取的简单晶胞

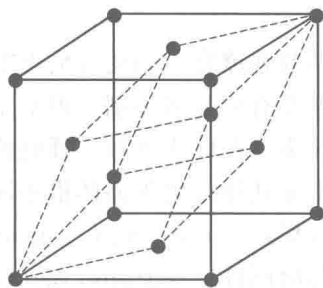


图 1-9 面心立方晶胞的点阵所取的简单晶胞

### 1.1.1.5 晶体结构和空间点阵

晶体结构和空间点阵既有区别又有联系。空间点阵是晶体中阵点（抽象的几何点）的排列方式的抽象，用于表示晶体结构的周期性和对称性。由于阵点彼此等同，周围环境相同，所以空间点阵只有14种。晶体结构则是晶体中原子或分子的具体排列情况，其中的原子可以是同类的，也可以是异类的。即使原子的相对位置、原子排列的对称性完全相同，其中的原子类型不同，也属于不同的晶体结构。因此可能存在的晶体结构种类是无限的。但所有的晶体结构经抽象后都可以归入14种布拉菲点阵中。

不同的晶体结构可以属于同一点阵，相似的晶体结构可以属于不同的点阵。图1-10给出了铜、氯化钠和氟化钙的晶体结构。这三种结构显然有很大的差异，属于不同的晶体结构类型。然而，分别以每个铜原子作为阵点，将相邻的一个钠原子和一个氯原子抽象成一个个周围环境相同的阵点，将相邻的一个钙原子和两个氟原子抽象成一个个周围环境相同的阵点，就可以看出这三种晶体结构都属于面心立方点阵。图1-11给出了铬和氯化铯的晶体结构。可以看出这两种晶体结构是相似的，都属于体心立方结构。但以每个铬原子作为阵点，

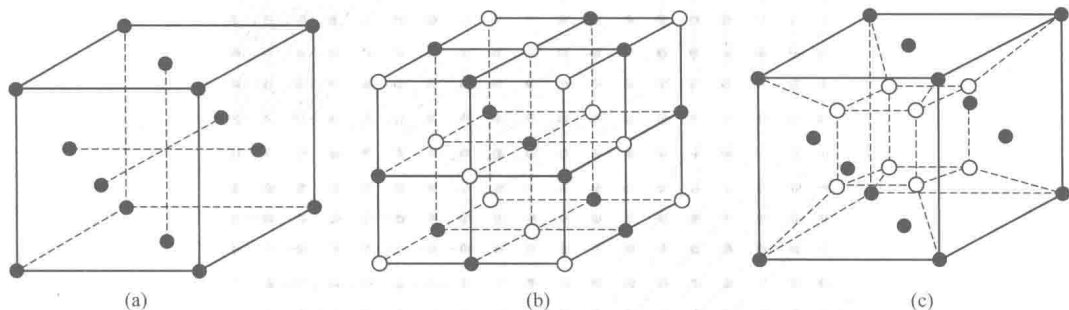


图 1-10 铜、氯化钠和氟化钙的晶体结构

(a) 铜；(b) 氯化钠；(c) 氟化钙

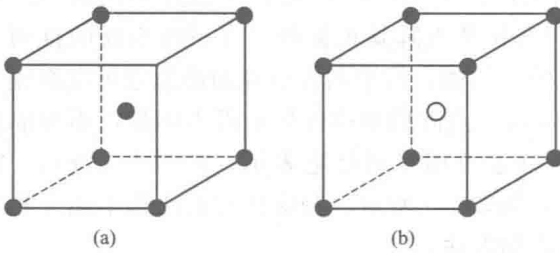


图 1-11 铬和氯化铯的晶体结构  
(a) 铬; (b) 氯化铯

则可看出铬属于体心立方点阵; 而将相邻的一个氯原子和一个铯原子抽象成一个个周围环境相同的阵点, 则可看出氯化铯属于简单立方点阵。

### 1.1.2 晶向指数和晶面指数

某些材料的性质在不同方向上有明显的差别。如岩石常常在一定的平面上解理断裂, 云母总是在特定的方向上剥开, 说明其强度在不同的方向上有明显的不同。

虽然在一般情况下, 金属材料的性质在不同的方向上没有明显的差别, 但对金属单晶体的测试表明, 晶体在不同方向上的性能(如电导率、热导率、热膨胀系数、弹性模量、强度、光学性能、表面化学性质等)是有差异的。表 1-2 给出了几种金属单晶体沿不同方向上的力学性能的差异。晶体沿不同方向的性能的差异称为各向异性(anisotropy, anisotropism)。反之, 如果材料在所有的取向上的性能都相同则称为各向同性(isotropy, isotropism)。金属材料通常不表现出各向异性, 是由于它们通常是由许多取向不同的小单晶体(称为晶粒, grain)组成的, 其性能是各取向的小单晶的平均, 这种情况称为假(伪)等向性。

表 1-2 几种金属单晶体的各向异性

金属	弹性模量/GPa		抗拉强度/MPa		延伸率/%	
	最大	最小	最大	最小	最大	最小
Cu	191	66.7	346	128	55	10
$\alpha$ -Fe	293	125	225	158	80	20
Mg	50.6	42.9	840	294	220	20

晶体各向异性源于其微观结构在不同方向上的差异。图 1-12 是沿  $z$  轴方向观察到的简单立方晶体中的阵点排列。可见在不同方向的直线上阵点的间距是不同的, 在不同取向上具有阵点的一组平行平面的间距也不同。为了描述这种差异, 将晶体中的特定方向, 一般是连

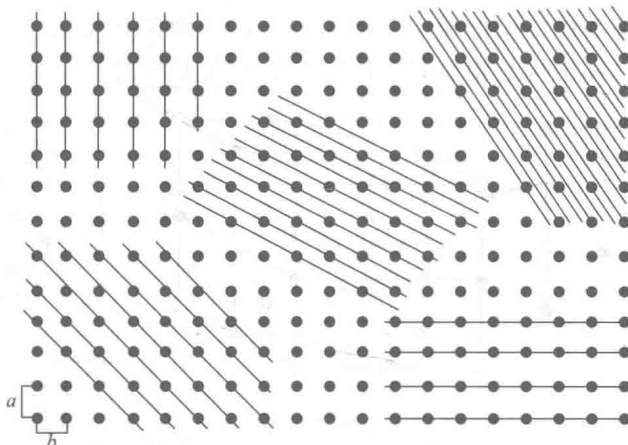


图 1-12 沿  $z$  轴方向观察到的简单立方晶体中不同方向阵点排列的差异



接特定方向的阵点列的直线称为晶向；将晶体中特定取向的平面，一般是阵点所构成的平面称为晶面。为表示不同晶向和晶面的取向，需要一种统一的标号，国际上通用的为密勒指数 (Miller indices)，包括晶向指数和晶面指数。

### 1.1.2.1 晶向指数

如图 1-13 所示，任意晶向  $\overline{OP}$  可以用点阵矢量  $a$ 、 $b$ 、 $c$  表示：

$$\overline{OP} = ua + vb + wc \quad (1-2)$$

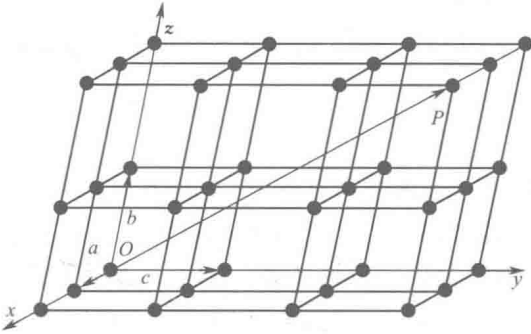


图 1-13 晶体中的矢量

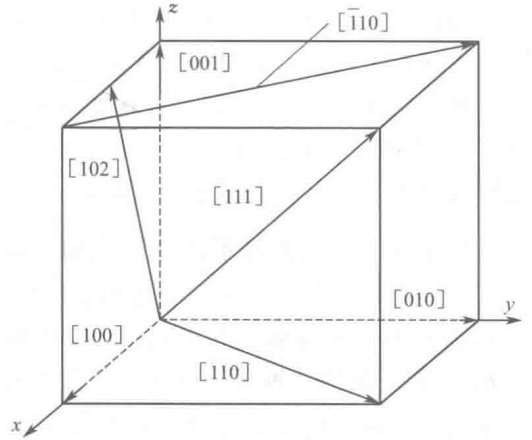


图 1-14 立方晶系中一些晶向的指数

不同的晶向只是  $u$ 、 $v$ 、 $w$  数值不同。故可以用  $[uvw]$  表示晶向指数 (orientation index)。

晶向指数的确定方法为：以晶胞的晶轴为坐标轴  $x$ 、 $y$ 、 $z$ ，以点阵矢量  $a$ 、 $b$ 、 $c$  的长度 (晶胞边长) 为坐标轴的长度单位。从晶轴坐标系的原点沿所指方向的直线取最近的一个阵点的坐标  $u$ 、 $v$ 、 $w$ ，将其化为最小整数，并加上方括号。如果坐标为负，将负号标于数字上方。图 1-14 给出了立方晶系中一些晶向的指数。

晶体中因对称关系而等同的各组晶向可归并为一个晶向族，用  $\langle uvw \rangle$  表示。例如对立方晶系， $[111]$ 、 $[\bar{1}11]$ 、 $[1\bar{1}1]$ 、 $[11\bar{1}]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 、 $[1\bar{1}\bar{1}]$  和  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$  这八个晶向是完全等同的，因此它们都属于  $\langle 111 \rangle$  晶向族。不同晶系的对称性不同，因此其晶向族中所包含的晶向个数也不一定相同。例如对立方晶系， $\langle 100 \rangle$  晶向族包括  $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 、 $[\bar{1}00]$ 、 $[0\bar{1}0]$  和  $[00\bar{1}]$  六个晶向，而对于正交晶系， $[100]$ 、 $[010]$  和  $[001]$  不是等同的晶向，不能归于一个晶向族。

### 1.1.2.2 晶面指数

晶面指数 (index of crystal plane) 的确定方法为：以晶胞的晶轴为坐标轴  $x$ 、 $y$ 、 $z$ ，以点阵矢量  $a$ 、 $b$ 、 $c$  的长度 (晶胞边长) 为坐标轴的长度单位。取该晶面在三个坐标轴的截距的倒数，化为最小的简单整数，并加上圆括号。如果截距为负，得到的晶面指数将负号标于数字上方。如果晶面平行于某晶轴，则该晶面在该晶轴上的截距为  $\infty$ 。

图 1-15 给出了立方晶系中一些晶面的指数。

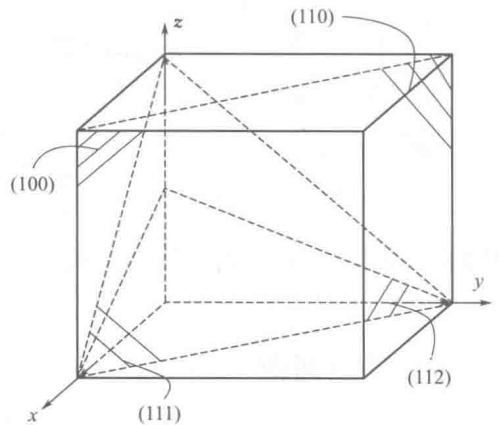


图 1-15 立方晶系中一些晶面的指数