

西安交通大学“十一五”规划教材

# 材料的结构、组织与性能

孙占波 梁工英 编



西安交通大学出版社  
XI'AN JIAOTONG UNIVERSITY PRESS

西安交通大学“十一五”规划教材

# 材料的结构、组织与性能

孙占波 梁工英 编



西安交通大学出版社  
XI'AN JIAOTONG UNIVERSITY PRESS

版权所有 侵权必究

读者信箱: jtljy@xjtu.cn

编辑热线: (029)82661951

订购热线: (029)82662518 (029)82662519

读者购书、书店缺货、加购品种等问题,请与本社发行中心联系,谢谢。

定价: 32.00元

书号: 1284474 (029)82661959

开本: 32开

尺寸: 787mm×96mm

ISBN: (029)82661959

主编: 孙占波

副主编: (029)82661951

(029)82662518

(029)82661951

(029)82661951

(029)82662518 (029)82662519

本书编委会, 西安交通大学, 孙占波

地址: (029)82662518 (029)82662519

电话: (029)82661951

(029)82661951

(029)82662518

(029)82662518 (029)82662519

(029)82661951

地址: (029)82662518 (029)82662519

(029)82662518 (029)82662519

(029)82661951

---

**图书在版编目(CIP)数据**

材料的结构、组织与性能/孙占波等编. —西安:西安  
交通大学出版社,2010.6  
ISBN 978-7-5605-3539-5

I. ①材… II. ①孙… III. ①材料科学 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2010)第 083349 号

---

书 名 材料的结构、组织与性能  
编 者 孙占波 梁工英  
责任编辑 邹 林 田 华

---

出版发行 西安交通大学出版社  
(西安市兴庆南路10号 邮政编码 710049)  
网 址 <http://www.xjtupress.com>  
电 话 (029)82668357 82667874(发行中心)  
(029)82668315 82669096(总编办)  
传 真 (029)82668280  
印 刷 西安交通大学印刷厂

---

开 本 727mm×960mm 1/16 印张 18.625 字数 342千字  
版次印次 2010年6月第1版 2010年6月第1次印刷  
书 号 ISBN 978-7-5605-3539-5/TB·58  
定 价 29.60元

---

读者购书、书店添货,如发现印装质量问题,请与本社发行中心联系、调换。  
订购热线:(029)82665248 (029)82665249  
投稿热线:(029)82664954  
读者信箱:jdlgy@yahoo.cn

**版权所有 侵权必究**

# 前 言

材料是人类物质文明的基础,每一种新材料的出现总会引起新的技术革命。用石器时代、铜器时代和铁器时代来划分人类文明史的不同阶段,就表明了材料在人类文明进程中的决定性作用。当今层出不穷的高、精、尖技术都是以材料科学的发展作为前提。因此,材料科学在现代科技领域的重要作用无论如何强调都不过分。随着现代科技特别是电子科技的发展,人类越来越重视从原子尺度研究物质的结构、组成和性能。纳米材料的发展已促使现代科技产生了革命化的进步。材料科学已不局限于过去的冶金、铸造、加工、热处理等专业,更是近代物理、凝聚态物理、数学、化学、机械、电力、电子等理工科各专业必须掌握的基础知识,并逐渐向医学和农业各专业通识学科迈进。材料科学与其它学科的交叉、交融无论对材料科学还是其它学科的发展都有重大意义。本书就是基于上述目的而编写的。

本书从材料的原子排列出发,首先阐述各种材料的基本结构、相的分类与结构,各种材料的基本相组成,并重点阐述相图及相变的基本规律;其次介绍材料的力学、物理和化学基本性质及变化的基础理论;最后介绍金属材料、高分子材料及无机非金属材料的基本知识,使读者初步掌握材料的化学成分、相的组成和微观组织与宏观性能之间关系的基本理论、了解常用材料化学组成、特点、制备和加工技术,具备初级选材的能力。以上内容既强调了包括金属材料、陶瓷材料和高分子材料的结构、相变、性能表征等材料科学的基础知识,又包括了这些材料加工、材料分类与使用等工程应用,同时介绍了材料科学的最新进展以及纳米材料等最新材料。使读者全面、概括地掌握材料科学的基础以及材料学的概况,对相关学科起到补充和促进作用。

本书第1~4章、第6章由孙占波编写,第7~10章由梁工英编写,第5章由祝要民编写,第11章由杨志懋编写,郭永利担任全书图片的绘制和整理工作。全书由孙占波、梁工英主编,王亚平教授主审。本教材的内容可根据课时灵活选择,适用于理工科各(非材料)专业本科生以及专科生作为专业基础知识和相关课程使用。

编者感谢西安交通大学教务处给予的经费支持,感谢参与本书大纲制定和稿件审查的专家学者,感谢西安交大理工学院给予的高度重视和各方面的支持。

编者

2009年11月

# 目 录

<b>第 1 章 材料中的原子排列</b> .....	(1)
1.1 原子键合 .....	(1)
1.1.1 离子键 .....	(1)
1.1.2 共价键 .....	(2)
1.1.3 金属键 .....	(2)
1.1.4 分子键 .....	(3)
1.1.5 氢键 .....	(4)
1.2 晶体与晶体结构 .....	(6)
1.2.1 晶体学基础 .....	(7)
1.2.2 晶体结构.....	(13)
1.2.3 晶体特性.....	(19)
1.3 晶体缺陷.....	(19)
1.3.1 点缺陷.....	(20)
1.3.2 线缺陷.....	(22)
1.3.3 面缺陷.....	(24)
习题 1 .....	(27)
<b>第 2 章 材料中的相与相结构</b> .....	(28)
2.1 合金相及其分类.....	(28)
2.1.1 合金相的分类.....	(29)
2.1.2 影响相结构的因素.....	(29)
2.2 合金的相结构.....	(30)
2.2.1 固溶体.....	(30)
2.2.2 金属化合物.....	(35)
2.3 陶瓷中的相.....	(38)
2.3.1 陶瓷材料的特点和相的分类.....	(38)
2.3.2 晶体相的类型及其结构.....	(38)
2.4 分子相.....	(42)

2.4.1	高分子及其构成	(42)
2.4.2	单元结构的键接方式和构型	(43)
2.4.3	高聚物的聚集态结构	(45)
习题 2		(46)
<b>第 3 章</b>	<b>凝固与结晶</b>	(47)
3.1	金属结晶的宏观和微观现象	(47)
3.1.1	结晶过程的宏观与微观现象	(47)
3.1.2	过冷度与结晶潜热	(49)
3.2	金属结晶的基本条件	(49)
3.2.1	金属结晶的热力学条件	(49)
3.2.2	金属熔体的性质	(50)
3.3	晶核的形成	(52)
3.3.1	均匀形核	(52)
3.3.2	非均匀形核	(56)
3.4	晶体的长大	(59)
3.4.1	晶体长大的基本条件	(59)
3.4.2	液固两相界面的微观结构	(59)
3.4.3	晶体的长大微观机制	(60)
3.4.4	固相界面前的温度梯度与晶体长大方式	(62)
习题 3		(65)
<b>第 4 章</b>	<b>合金相图</b>	(66)
4.1	相平衡及相图制作	(66)
4.1.1	材料的成分及表示方法	(66)
4.1.2	相平衡	(67)
4.1.3	相图的表示、意义与测定	(69)
4.2	二元匀晶相图	(70)
4.2.1	相图分析	(70)
4.2.2	固溶体的平衡凝固	(71)
4.3	二元共晶相图	(73)
4.3.1	相图分析	(73)
4.3.2	共晶系合金的平衡凝固和组织	(74)
4.4	二元包晶相图	(78)

4.4.1	相图分析	(78)
4.4.2	包晶合金的平衡凝固	(79)
4.5	其它类型的二元相图	(82)
4.5.1	形成化合物的二元相图	(82)
4.5.2	具有三相平衡恒温转变的其它二元相图	(83)
4.6	二元相图的分析方法	(86)
4.6.1	相区接触法则	(86)
4.6.2	复杂二元相图的分析方法	(87)
4.6.3	相图的局限型	(87)
4.6.4	二元相图分析实例——Fe-Fe <sub>3</sub> C 相图	(87)
习题 4		(96)
<b>第 5 章</b>	<b>材料的性能</b>	(98)
5.1	材料的力学性能	(98)
5.1.1	应力与应变	(98)
5.1.2	金属材料的静态拉伸性能	(99)
5.1.3	多晶体的塑性变形	(108)
5.1.4	合金的塑性变形	(109)
5.1.5	材料的其它性能	(112)
5.1.6	陶瓷与高分子材料的拉伸性能	(115)
5.2	材料的物理性质	(118)
5.2.1	材料的导电性	(118)
5.2.2	材料的磁学性质	(127)
5.2.3	材料的光学性质	(135)
5.2.4	材料的热膨胀	(136)
5.3	材料的化学性质	(137)
5.3.1	金属材料的腐蚀与耐蚀性	(137)
5.3.2	腐蚀的分类	(138)
习题 5		(139)
<b>第 6 章</b>	<b>材料的固态相变与热处理</b>	(140)
6.1	固态中的扩散	(140)
6.1.1	扩散机制	(140)
6.1.2	扩散类型	(142)

6.1.3	Fick's 定律 .....	(143)
6.1.4	扩散驱动力与阻力 .....	(146)
6.1.5	扩散的影响因素 .....	(147)
6.1.6	扩散的应用 .....	(148)
6.2	固态相变及其特点 .....	(148)
6.2.1	固态相变的特点 .....	(149)
6.2.2	固态相变的驱动力和阻力 .....	(149)
6.2.3	固态相变的分类 .....	(150)
6.3	固态相变的基本过程 .....	(151)
6.3.1	固态相变的形核 .....	(151)
6.3.2	新相的长大 .....	(154)
6.3.3	相变速率(相变动力学) .....	(157)
6.4	材料的热处理 .....	(158)
6.4.1	固溶处理 .....	(159)
6.4.2	退火 .....	(159)
6.4.3	正火 .....	(159)
6.4.4	淬火 .....	(160)
6.4.5	回火 .....	(160)
6.4.6	时效 .....	(161)
习题 6	.....	(161)
<b>第 7 章</b>	<b>金属材料</b> .....	<b>(163)</b>
7.1	铁基金属材料 .....	(163)
7.1.1	碳钢 .....	(163)
7.1.2	合金钢 .....	(167)
7.1.3	铸铁 .....	(182)
7.2	非铁金属材料 .....	(189)
7.2.1	铝及铝合金 .....	(189)
7.2.2	铜及铜合金 .....	(199)
7.2.3	镁合金 .....	(206)
7.2.4	锌合金 .....	(208)
7.2.5	钛合金 .....	(209)
习题 7	.....	(210)



<b>第 8 章 高分子材料</b> .....	(213)
8.1 高分子材料的分类与结构特点 .....	(213)
8.1.1 高分子材料的分类 .....	(213)
8.1.2 大分子链的构象及柔性 .....	(214)
8.1.3 高聚物的聚集态和物理状态 .....	(215)
8.2 高分子材料的性能特点 .....	(217)
8.2.1 高分子材料的力学性能特点 .....	(217)
8.2.2 高分子材料的物理与化学性能特点 .....	(218)
8.2.3 高分子材料的老化及其预防 .....	(219)
8.3 常见高分子材料 .....	(219)
8.3.1 塑料 .....	(220)
8.3.2 橡胶 .....	(227)
8.3.3 合成纤维 .....	(229)
习题 8 .....	(230)
<b>第 9 章 陶瓷材料</b> .....	(232)
9.1 陶瓷的结构与组织 .....	(232)
9.1.1 陶瓷材料的分类 .....	(232)
9.1.2 陶瓷的组织特点 .....	(233)
9.2 陶瓷的性能 .....	(237)
9.2.1 陶瓷的力学性能 .....	(237)
9.2.2 陶瓷的物理和化学性能 .....	(239)
9.3 常用特种陶瓷材料 .....	(239)
9.3.1 特种工程结构陶瓷 .....	(240)
9.3.2 金属陶瓷 .....	(241)
9.3.3 功能陶瓷 .....	(242)
习题 9 .....	(248)
<b>第 10 章 功能材料</b> .....	(249)
10.1 导体与导电材料.....	(249)
10.1.1 精密电阻合金.....	(249)
10.1.2 电热材料.....	(250)
10.1.3 热电材料.....	(251)
10.1.4 超导体.....	(251)

10.2	磁性材料	(252)
10.2.1	软磁材料	(252)
10.2.2	永磁材料	(255)
10.3	功能高分子材料	(258)
10.3.1	导电高分子材料	(258)
10.3.2	电致发光高分子材料	(260)
10.3.3	液晶高分子材料	(261)
10.4	医用生物材料	(264)
10.4.1	医用生物材料的基本特征及其分类	(264)
10.4.2	常用医用生物材料	(265)
习题 10		(268)
<b>第 11 章</b>	<b>纳米材料</b>	<b>(270)</b>
11.1	纳米材料的奇异特性	(271)
11.2	纳米材料的合成与制备	(273)
11.3	纳米材料的特异性能	(279)
习题 11		(286)
<b>主要参考文献</b>		<b>(287)</b>

# 第 1 章

## 材料中的原子排列

构成物质的基本粒子是原子,材料也不例外。绝大部分材料是在固态下使用的,已经证明,材料中原子间的结合以及排列方式在很大程度上决定了材料所表现出的宏观性质。因此,我们应该首先了解和熟悉固体中原子间的结合、排列方式和分布规律。

### 1.1 原子键合

通常把材料的液态和固态统称为凝聚态。在凝聚态下,由于原子间的距离十分微小而产生了原子间的作用力,即原子键。大量的原子间依靠原子键结合就成为一般意义上的材料。按照原子间的结合性质,可以将原子键分为离子键、共价键、金属键、Van Der Waals 键和氢键。

#### 1.1.1 离子键

在凝聚态时,负电性很小的原子,如金属原子全部或部分给出最外层或次外层(过渡族金属、稀土元素)电子而变成正离子,负电性很大的原子如 O、Cl 等得到电子而变成负离子,正负离子间靠静电引力结合在一起而形成离子键。

典型的离子键材料有 NaCl、 $Al_2O_3$  和  $ZrO_2$  等。图 1-1 是 NaCl 离子键示意图,由于键的性质,其原子排列的特点是与正离子相邻的必然是负离子,与负离子相邻的必然是正离子。离子键的结合力很大,任何破坏这种排列方式的企图都需

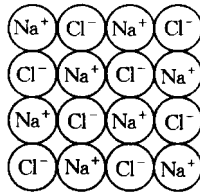


图 1-1 NaCl 离子键示意图

很大的外力。因此,离子键材料硬度极高、热膨胀系数小。当离子键被破坏后会直接导致材料的断裂,所以离子键材料的脆性较大。

### 1.1.2 共价键

一些材料中的原子间相互贡献出部分最外层电子形成公用电子对,使相邻原子最外层电子都达到满壳层,两个原子间靠共用电子对结合在一起,原子间的这种键合称为共价键。一般两个相邻原子只能共用一对电子。但根据原子最外层电子数量的不同,一个原子可以和相邻几个原子形成多个共价键。不过,一个原子的共价键数只能小于或等于  $8-N$  ( $N$  为该原子最外层的电子数),这个现象称为共价键的饱和性。

图 1-2 是硅共价键示意图。在共价晶体中,由于共用电子对的关系,相邻的原子间的键角或相邻原子键的几何关系必定是固定的,即共价键具有强烈的方向性。因此共价键结合力很大,共价晶体熔点高、硬度高、结构和化学性质稳定,但塑性低、脆性大。典型的共价键材料有 Si、金刚石、高分子化合物等。

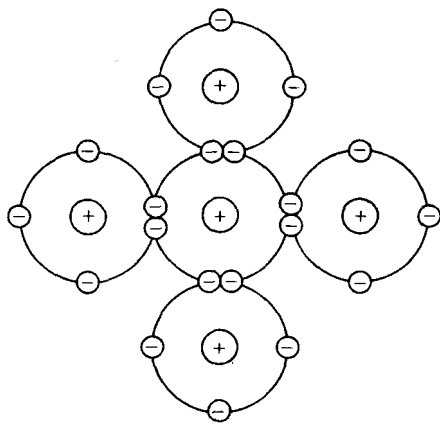


图 1-2 硅共价键示意图

### 1.1.3 金属键

金属原子失去或部分失去最外层或次外层(过渡族金属)电子而变成正离子,失去的电子成为自由电子。大量的自由电子归所有金属离子所共有,形成“电子海洋”、“电子气”或“电子云”。每个正离子都与电子云产生强大的静电引力,大量的金属正离子靠这种静电引力结合在一起。热力学稳定态下,固态的金属阳离子在空间常常排列整齐,组成金属晶体。金属键材料常简称为金属材料,包括 Fe、Al、

Cu、Au、Ag、Pt、Ni 等所有纯金属和它们的合金。

显然,金属正离子间的位移、错位或交换位置并不改变金属键的性质,金属键也不会因此而破坏,因此,金属键材料一般都具有良好的可塑性。按经典的导电理论,在电场作用下,电子云产生定向移动——电流,因此金属一般具有良好的导电性。同时,金属离子在平衡位置可产生较大振幅的热振动,所以金属键材料也具有好的导热性。图 1-3 给出了金属键示意图。

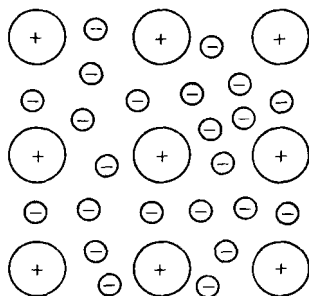


图 1-3 金属键示意图

#### 1.1.4 分子键

有些物质在分子团或离子团内的原子间是共价键或离子键结合,理想条件下这些分子或离子团对外不显电性。但实际的分子或离子团往往具有极性,即离子或分子团的一部分带有正电,另一部分带有负电。不同分子团或离子团之间,带有正电的部分和带有负电的部分存在弱的静电引力。这种引力称为范德瓦尔斯 (Van der Waals) 力。存在于中性分子或离子团间的这种结合键称为分子键或范德瓦尔斯键。分子或离子团间靠这种静电引力结合在一起。例如,高分子材料聚氯乙烯中,C、H、Cl 构成的大分子的内部,主链中 C—C 原子间是共价键,主链两侧的 H 原子带正电,而 Cl 原子带负电。两个分子链间带正电的部分和带负电的部分相互存在静电引力。靠这种静电引力分子链间结合在一起。范德瓦尔斯键能很小,在外力作用下易产生滑动而产生很大变形。因此分子晶体的熔点低、硬度低。这种键在其它化学键类型的晶体中也可以存在,但由于其键能很小而常常被忽视。图 1-4 给出了分子键模型示意图。

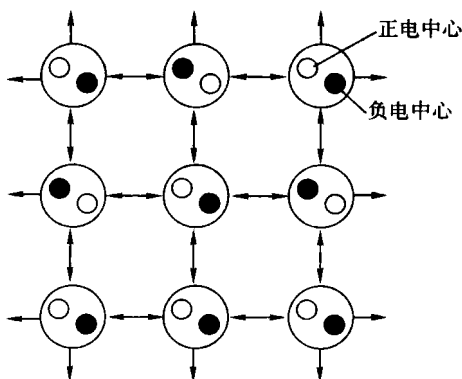


图 1-4 分子键模型示意图

### 1.1.5 氢键

含氢的物质,例如  $H_2O$ (冰)中,氢原子某一原子形成共价键时,共用电子向这个原子强烈偏移,使氢原子几乎变成了一个半径很小且带有正电的核,而与其形成共价键的另一个原子则带有负电。这种极性分子间,带正电的部分核带负电的部分靠静电引力结合在一起。这种键称为氢键。氢键是一种弱键,并带有明显的方向性。

为了便于比较,将五种结合键的主要特征列于表 1-1 之中,五种结合键的键能按离子键、共价键、金属键、范德瓦尔斯键和氢键的顺序依次递减。在实际材料中,除了一些如纯金属、单质化合物等绝对纯的材料之外,许多材料都是几种结合键共存。例如, Si、Ge 等半导体材料中,原子间应该是以共价结合,但这些元素也往往会失去一些电子,因此晶体中往往有自由电子存在,失去电子的离子间形成金属键。这些半导体材料往往是共价键和金属键共存。

表 1-1 五种结合键的键能和特征

键的类型	实例	结合能 / $kcal \cdot mol^{-1}$	主要特点
离子键	NaCl	183	无方向性、高配位数、高温时离子导电
	KCl	166	
	RbCl	159	

续表 1-1

键的类型	实例	结合能 /kcal · mol <sup>-1</sup>	主要特点
共价键	C <sup>①</sup>	170	空间方向键、低配位数、常温及低温下导电率极低
	Si	108	
	Ge	89	
金属键	Li	37.7	非方向键、配位数及密度极高、高导电率、高延展性
	Na	25.7	
	K	21.5	
分子键	Ne	0.46	低熔点、低沸点、压缩系数很大
	Ar	1.79	
	Kr	2.67	
氢键	H <sub>2</sub> O <sup>②</sup>	12	与无氢键的相似分子相比结合力较高
	HF	7	

① 指金刚石晶体 ② 指固态水(冰)

材料尤其是固体材料中的原子之间是靠结合键结合起来的。下面以金属键双原子模型为例,简单解释原子间结合力的产生和原子间的平衡间距。设 A、B 是金属键中的两个正离子,离子 A 保持静止,B 原子是 A 附近的另一个原子。当 A、B 无穷远时,A、B 间不存在相互作用;当 A、B 两离子相互靠近时,显然,两离子间随即产生相互作用。其中引力来自于 A、B 两原子间之间电子云,引力大小为

$$f_a = -\frac{a}{R^m} \quad (1-1)$$

而斥力来自正离子间的静电交互作用,大小为

$$f_b = \frac{b}{R^n} \quad (1-2)$$

合力为

$$f = f_a + f_b = -\frac{a}{R^m} + \frac{b}{R^n} \quad (1-3)$$

式中: $R$  为两离子间的间距,其它符号为与原子性质有关的常数,并且有  $m < n$ 。图 1-5 给出了两原子间的相互作用示意图。显然,当  $R < R_0$  时,合力为斥力; $R > R_0$  时合力为引力;只有当  $R = R_0$  时,合力为 0, $R_0$  则为正离子之间的平衡距离。

虽然其它结合键的情况与金属键有所不同,但如果将图 1-5 中的 A、B 二离子当成共价键中原子或分子键中的分子或分子团,则其作用情况大同小异。显然,从双原子模型,至少可以解释材料中的以下几个基本问题。

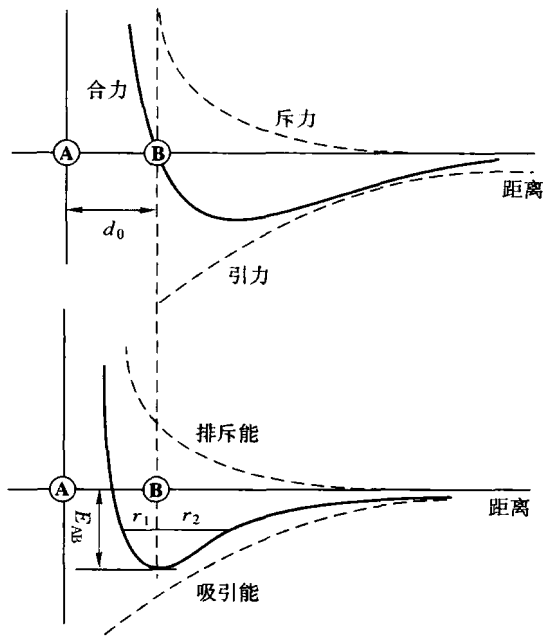


图 1-5 双原子作用模型

(1) 当大量的原子、分子或分子团结合成固体时,为使系统具有最低能量状态,大量的原子、分子或分子团间趋近于保持相同的平衡距离,这就需要原子或分子团间保持规则排列,即形成晶体。

(2) 欲将 B 原子、分子或分子团从平衡位置拉开一个小的位移时,需要一定的力;当外力撤除时,原子会自动回到平衡位置。即固体材料都有一定的弹性。

(3) 当将 B 拉开到无穷远处时,则需要更大的力。这个力所做的功即结合能  $E_{AB}$ 。因此固体材料都有一定的强度。

(4) 原子、分子或分子团 B 可在平衡位置附近作热振动,振幅为  $r_1 + r_2$ ,振幅越大能量越高。但由于结合能曲线(图 1-5)不是一条对称曲线,即  $r_1 \neq r_2$ ,原子热振动时,随着振幅的加大,平衡位置附近  $R > R_0$  一侧的振幅( $r_2$ )大于  $R < R_0$  一侧( $r_1$ )。这样,温度升高,固体(晶体)的体积会增加,即材料具有热胀冷缩的特性。

## 1.2 晶体与晶体结构

物质中的原子排列可分为三种形式,一是原子间完全无规则排列,例如惰性气体;二是原子团、分子或分子团内部的原子规则排列,而原子团、分子或分子团之间



无规则排列,例如液态水、金属熔体等;三是在大尺寸范围内,原子、原子团、分子或分子团之间规则排列,例如 NaCl、 $\text{Al}_2\text{O}_3$  固体等。第一种称为完全无序,第二种称为短程有序,第三种则称为长程有序或晶体。

传统意义上,原子、原子团、分子或分子团在三维空间有规则、周期性重复排列的固体称为晶体。前文已知,在离子键或共价键材料中,原子在分子内是规则排列的,因此,晶体可简单地理解为原子在三维空间有规则、周期性重复排列的固体。新材料中,有些分子或分子团在液态也可以是长程有序,这些材料称为液晶。

### 1.2.1 晶体学基础

#### 1. 晶体中的原子排列

既然晶体中原子是规格排列的,原子的排布规律在很大程度上决定了晶体的性能。作为材料科学的一部分,就应详细研究各种材料中的原子排布规律。为研究方便,一般采用以下的几种方法描述原子的排布规律。

**钢球模型:**将原子、原子团、分子或分子团抽象成为一个个不可压缩的刚性球,并将其堆垛起来,用以描述晶体内的原子排列规律,如图 1-6(a)所示。其特点是比较接近实际晶体的情况,但由于不能观察到晶体内部的情况,因此使用极为不便。

**空间点阵:**为了描述大尺寸晶体中原子的排布规律,将晶体中几何环境和化学环境都相同的位置抽象为一系列的几何点,这些点称为节点或阵点。这些点可以是原子、原子团、分子或分子团所占据的几何位置,也可以是一般意义上的点。为讨论方便,可将这些几何点理解成晶体中的原子。几何环境相同意味着所有这些几何点周围的相同性质的几何点(如果将几何点理解成原子的话,不同原子周围其它原子)的排布规律相同。化学环境相同是指所有几何点或原子周围几何点或原子的化学性质相同。将这些点用直线连接起来,构成三维空间格架,这个格架称为空间点阵。晶体学上,这个用于描述晶体中原子、原子团、分子或分子团排布规律的空间格架称为晶格或晶体结构,如图 1-6(b)所示。注意,无论晶体结构多么复杂,任何节点或阵点的地位都是相同的。

**晶胞:**在图 1-6(b)中,空间点阵或晶体结构可以反映晶体中原子排布的全貌。事实上,由于原子排布具有周期性和重复性,只要从晶格中选取如图 1-6(c)那样的一个结构单元,即可反映晶体结构全貌。整个晶体可以看作由这个结构单元堆砌而成。这个能够完全反映晶格特征的最小几何单元称为晶胞。通常,为讨论方便,在晶格中选取一个最小的平行六面体作为晶胞,见图 1-6(c)。

为了表达晶胞或晶体结构的特性,可通过晶胞中的某一阵点(一般为六面体的顶点)为坐标中心,沿三个棱边按一般坐标规则作  $x$ 、 $y$  和  $z$  轴,三个棱边长度  $a$ 、 $b$