

高等学校规划教材

# 材料分析测试 技术与应用

• 马毅龙 主编 • 董季玲 丁皓 副主编

CAILIAO FENXI GESHI  
JISHU YU YINGYONG

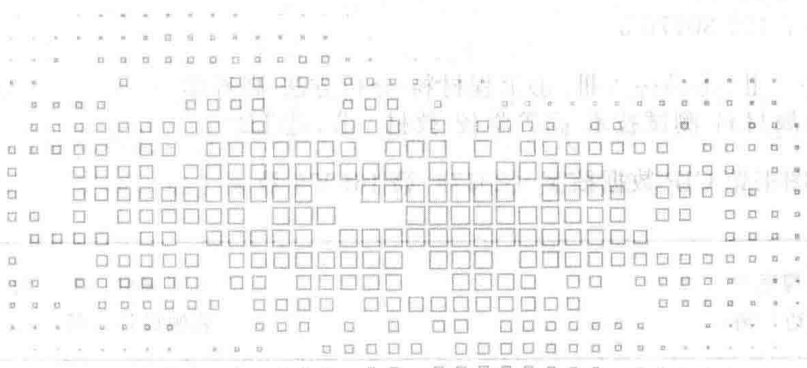


化学工业出版社

高等学校规划教材

# 材料分析测试 技术与应用

• 马毅龙 主编 • 董季玲 丁皓 副主编



 化学工业出版社

· 北京 ·

本书内容是材料相关学科的重要必修知识，书中内容包括材料现代测试技术基础、衍射技术、电子显微分析技术、热分析技术、常用物理及化学相关测试分析方法等。全书注重基本原理和实际应用，共分为7章，第1章为X射线衍射分析原理、方法及应用；第2章为扫描电子显微分析；第3章为透射电子显微分析；第4章为热分析技术；第5章为原子力显微镜；第6章为常用物性测试分析方法；第7章为常用光谱分析方法简介。

本书根据实际教学和应用需要，为适应材料学、材料科学与工程、金属材料工程、无机材料工程、纳米材料与技术等材料类相关专业的教学而编写，也可作为冶金、石油、机械、化工等专业的教材，并可供相关专业的工程技术人员参考。

材料分析测试技术与应用  
马毅龙主编

#### 图书在版编目 (CIP) 数据

材料分析测试技术与应用/马毅龙主编. —北京: 化学工业出版社, 2017.9

高等学校规划教材

ISBN 978-7-122-30176-5

I. ①材… II. ①马… III. ①工程材料-分析方法-高等学校-教材②金属材料-测试技术-高等学校-教材 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2017) 第 165375 号

责任编辑: 陶艳玲

责任校对: 边涛

文字编辑: 李玥

装帧设计: 韩飞

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)

印刷: 北京市振南印刷有限责任公司

装订: 北京国马印刷厂

787mm×1092mm 1/16 印张 12 字数 291 千字 2017 年 10 月北京第 1 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: 38.00 元

版权所有 违者必究

“材料分析测试技术与应用”是材料相关学科的重要必修课之一。编者根据多年的使用经验和体会，在参考国内外相关资料和书籍的基础上，结合国家教育部颁布的“国家中长期教育改革和发展规划纲要（2010—2020年）”，通过将课堂授课和实验教学相结合，使学生掌握材料分析的相关技术，编写了《材料分析测试技术与应用》一书。书中内容包括材料现代测试技术基础、衍射技术、电子显微分析技术、热分析技术、常用物理及化学相关测试分析方法等，从相关的基本原理出发，使学生逐步了解分析设备的操作过程及解决实际问题的具体应用。

全书共分7章，第1章为X射线衍射分析原理、方法及应用；第2章为扫描电子显微分析；第3章为透射电子显微分析；第4章为热分析技术；第5章为原子力显微镜；第6章为常用物性测试分析方法；第7章为常用光谱分析方法简介。鉴于材料分析工作的理论和实践性强，在编写过程中，编者着重于培养学生应用分析方法解决具体问题的能力，提供详细的应用实例，使学生在学完本书后能掌握具体的分析方法，同时配合大量插图、图表、实例，让概念更清晰化。此外，为了巩固所学知识，每章都有一定量的思考题。

参加本书编写的人员有：重庆科技学院马毅龙博士编写第1章，董季玲博士编写第2、3章，丁皓博士编写第4、7章，高荣礼博士编写第5章，高荣礼与郭东林博士共同编写第6章。全书由马毅龙博士统稿。在编写过程中参考了许多文献，主要参考文献列于各章后，在此谨向所有参考文献的作者致以诚挚的感谢。在本书的编写和出版过程中，得到了重庆科技学院冶金与材料工程学院的大力支持，在此表示衷心的感谢！

本书根据实际教学和应用需要，为适应材料类相关专业的教学而编写，也可作为冶金、石油、机械、化工等专业的教材，并可供相关专业的工程技术人员参考。由于材料测试技术发展日新月异，技术不断更新，加上编者水平所限，不足之处敬请读者批评指正。

编者

2017年7月

<b>第 1 章 X 射线衍射分析原理、方法及应用</b>	<b>1</b>
1.1 晶体结构简介	1
1.1.1 晶体结构的基本特点	1
1.1.2 点阵与点阵结构	2
1.1.3 晶体的宏观对称性	3
1.1.4 倒易点阵	6
1.1.5 晶带及晶带定理	8
1.2 X 射线基础	9
1.2.1 X 射线简介	9
1.2.2 连续 X 射线谱	10
1.2.3 特征 X 射线谱	11
1.3 晶体对 X 射线衍射	12
1.3.1 衍射方向	12
1.3.2 衍射强度	13
1.3.3 X 射线辐射防护	15
1.4 X 射线衍射仪	15
1.4.1 X 射线发生器	16
1.4.2 测角仪	17
1.4.3 X 射线探测仪	17
1.4.4 测量方式和实验参数的选择	18
1.5 粉末衍射方法应用	19
1.5.1 物相分析	19
1.5.2 晶胞参数的精确测定及其应用	20
1.5.3 薄膜分析中常用的 X 射线方法	21
1.6 实例	21
1.6.1 Jade 基本功能	21
1.6.2 Jade 的用户界面	22
1.6.3 查看 PDF 卡片	22
1.6.4 物相定性分析	25
1.6.5 物相定量分析	28

1.6.6 晶粒大小及微观应变的计算	30
思考题	33
参考文献	33

## 第2章 扫描电子显微分析

34

2.1 扫描电子显微镜简介	34
2.2 电子束与样品相互作用产生的信号	34
2.2.1 二次电子	34
2.2.2 背散射电子	35
2.2.3 特征 X 射线	36
2.2.4 俄歇电子	37
2.3 扫描电子显微镜的工作原理	38
2.4 扫描电子显微镜的基本结构	39
2.4.1 电子光学系统	40
2.4.2 信号收集处理、图像显示和记录系统	42
2.4.3 真空系统与电源系统	43
2.5 扫描电子显微镜的性能	43
2.5.1 放大倍数	43
2.5.2 分辨率	44
2.5.3 景深	44
2.6 扫描电子显微镜衬度原理	45
2.6.1 表面形貌衬度	45
2.6.2 成分衬度	47
2.6.3 电压衬度	48
2.6.4 磁衬度	48
2.7 电子探针显微分析	48
2.7.1 电子探针的发展	48
2.7.2 电子探针的基本原理及构造	48
2.7.3 电子探针分析方法	52
2.7.4 样品制备要求	53
2.7.5 电子探针的应用	53
2.8 电子背散射衍射及应用	54
2.8.1 EBSD 的结构及基本原理	54
2.8.2 EBSD 的分辨率	55
2.8.3 EBSD 样品的制备	56
2.8.4 EBSD 的应用	57
2.9 扫描电子显微镜样品的制备	58
2.10 常见典型断口	59

2.10.1 韧窝断口 .....	59
2.10.2 解理断口 .....	59
2.10.3 准解理断口 .....	60
2.10.4 脆性沿晶断口 .....	60
2.10.5 疲劳断口 .....	61
思考题 .....	61
参考文献 .....	62

### 第3章 透射电子显微分析 ..... 63

3.1 透射电子显微镜简介 .....	63
3.1.1 透射电子显微分析发展简史 .....	63
3.1.2 透射电子显微镜的分辨率 .....	64
3.2 电磁透镜的像差 .....	65
3.2.1 几何像差 .....	66
3.2.2 色差 .....	68
3.3 透射电子显微镜的结构与成像原理 .....	68
3.3.1 电子光学系统 .....	68
3.3.2 辅助系统 .....	74
3.3.3 透射电子显微镜成像原理 .....	75
3.4 电子衍射 .....	75
3.4.1 电子衍射基本原理 .....	76
3.4.2 选区电子衍射 .....	77
3.4.3 磁转角 .....	78
3.4.4 单晶体电子衍射花样标定 .....	78
3.4.5 多晶体电子衍射花样标定 .....	80
3.5 透射电子显微镜衬度原理 .....	80
3.5.1 质厚衬度 .....	80
3.5.2 衍射衬度 .....	81
3.5.3 相位衬度 .....	82
3.6 扫描透射电子显微镜 .....	83
3.6.1 扫描透射电子显微镜的工作原理 .....	83
3.6.2 扫描透射电子显微镜的特点 .....	83
3.7 透射电子显微镜样品制备 .....	85
3.7.1 表面复型技术 .....	85
3.7.2 薄膜制备技术 .....	86
3.7.3 粉末制备技术 .....	90
3.7.4 透射电子显微镜样品制备的其他方法 .....	91
3.8 透射电子显微镜的应用 .....	91

3.8.1	形貌分析	91
3.8.2	晶体缺陷分析	92
3.8.3	晶体结构分析	93
3.9	透射电子显微镜的基本操作	95
	思考题	96
	参考文献	97

## 第4章 热分析技术 98

4.1	热分析技术简介	98
4.2	热重分析法	99
4.2.1	系统组成	99
4.2.2	基本原理	99
4.2.3	影响因素	101
4.2.4	测试技术	102
4.3	差热分析法	103
4.3.1	系统组成	103
4.3.2	基本原理	104
4.3.3	影响因素	105
4.3.4	测试技术	106
4.4	差示扫描量热法	106
4.4.1	系统组成与原理	106
4.4.2	影响因素	107
4.4.3	测试方法	108
4.5	热分析的应用	108
4.5.1	差热分析及差示扫描量热分析法的应用	108
4.5.2	热重分析法的应用	111
4.5.3	热分析技术的发展趋势	111
	思考题	112
	参考文献	112

## 第5章 原子力显微镜 113

5.1	原子力显微镜的基本知识	113
5.1.1	显微技术简介	113
5.1.2	原子力显微镜工作原理	114
5.1.3	原子力显微镜的功能技术	118
5.2	原子力显微镜的应用	122



5.2.1 在材料科学方面中的应用 .....	122
5.2.2 在其他有关方面中的应用 .....	127
5.3 原子力显微镜的表面分析 .....	129
5.4 原子力显微镜与其他显微分析技术 .....	130
5.4.1 原子力显微镜与其他显微分析技术的比较 .....	130
5.4.2 原子力显微镜与扫描电子显微镜 .....	132
思考题 .....	133
参考文献 .....	133

## 第6章 常用物性测试分析方法 ..... 135

6.1 磁性测量系统 .....	135
6.1.1 设计原理 .....	135
6.1.2 测量选项 .....	137
6.1.3 MPMS 设备的应用和需要注意的问题 .....	138
6.2 物理性质测量系统 .....	140
6.2.1 设计简介 .....	141
6.2.2 基本系统 .....	141
6.2.3 测量原理和方法 .....	143
6.2.4 PPMS 的主要应用 .....	146
6.2.5 PPMS 需要注意的问题 .....	147
6.3 电滞回线测试系统 .....	147
6.3.1 铁电体的概念 .....	147
6.3.2 铁电体的特点 .....	148
6.3.3 测量仪简介 .....	149
6.3.4 测量结果 .....	150
6.4 太阳能电池测试系统 .....	151
6.4.1 太阳能电池的基本原理 .....	151
6.4.2 太阳能电池参数的定义 .....	151
6.4.3 太阳光模拟器 .....	152
6.4.4 太阳光模拟器的主要指标 .....	152
6.4.5 测试方法 .....	154
6.4.6 测试结果 .....	154
思考题 .....	159
参考文献 .....	159

## 第7章 常用光谱分析方法简介 ..... 160

7.1	光谱分析方法 .....	160
7.2	紫外-可见光谱 .....	161
7.2.1	简介 .....	161
7.2.2	基本原理和系统组成 .....	161
7.3	红外吸收光谱 .....	166
7.3.1	简介 .....	166
7.3.2	基本原理和系统组成 .....	166
7.3.3	样品制备 .....	169
7.3.4	应用举例 .....	170
7.4	拉曼光谱 .....	170
7.4.1	简介 .....	170
7.4.2	激光拉曼光谱与红外光谱比较 .....	172
7.4.3	试验设备和实验技术 .....	172
	思考题 .....	173
	参考文献 .....	174

**附 录** ..... **175**

附录 1	常见晶体的标准电子衍射花样 .....	175
附录 2	立方晶体和六方晶体可能出现的反射 .....	181

材料在人类社会进步中起着非常重要的作用，材料科学与工程研究的是有关材料的制备、组成、组织结构与材料性能和用途之间的关系，如不同制备工艺可能得到不同的材料性能，相同制备工艺而成分不同的材料性能也会不同；同时材料性能的好坏与其组织结构有着密切联系，因此我们说在材料研究中材料的化学组成和材料结构分析是非常重要的。对材料的分析需要借助各种材料测试方法，从材料结构研究的主要方面来说有三个，即成分分析、结构测定和形貌观察，其中衍射分析方法是材料结构测定的主要方法。

X射线衍射技术是研究材料晶体结构及其变化规律的主要手段。作为一种物质晶体结构的表征手段，其应用遍及地质、矿产、冶金、材料、物理、化学、医药、农林等各个与物质晶体结构或非晶结构相关的领域。

X射线衍射仪分为单晶衍射仪和多晶衍射仪两种。单晶衍射仪的被测对象为单晶体试样，主要用于确定未知晶体材料的晶体结构。多晶X射线衍射仪也称为粉末衍射仪，被测对象通常为粉末，也可为块体和薄膜，材料种类可为金属、无机非金属和高分子材料。

多晶X射线衍射分析法是一种重要的物理化学实验方法，有着广泛的应用和很多独特的优点，特别适用于物相分析，它可测定晶态物质的晶体结构参数以及一些与晶体结构参数有关的物理常数或物理量（如晶体的密度、热膨胀系数，金属材料中的宏观应力等），它也是结构分析的主要方法。

## 1.1 晶体结构简介

任何物质均是由原子、离子或分子组成的。晶体有别于非晶体物质，晶体是指内部原子、离子或分子具有严格的周期性有序排列。虽然不同物质晶体中的原子、离子或分子的排列方式各不相同、千差万别，呈现出各种不同的性质，但晶体具有一些基本属性，这些基本属性是一切晶体所共有的。

### 1.1.1 晶体结构的基本特点

- (1) 自限性：指晶体在适当的条件下可以自发地形成几何多面体的性质。
- (2) 均一性：指同一晶体内部不同的部分具有相同的性质。
- (3) 异向性：晶体的性质在不同方向上有差异的特性。因为同一晶体在不同方向上质点的排列一般是不一样的，因此晶体的性质也随晶体方向不同而有差异。
- (4) 对称性：指晶体中相等的晶面、晶棱和顶角，以及晶体物理化学性质在不同方向上或位置上有规律地重复出现。晶体的宏观对称性是由晶体内部格子构造的对称性所决定的。
- (5) 最小内能性：在相同的热力学条件下，晶体与同组成的气体、液体及非晶态固体相

比内能最小。

## 1.1.2 点阵与点阵结构

为准确描述晶体的空间结构，将晶体中无限个相同的点构成的集合称为点阵；空间点阵只是一个几何图形，它不等于晶体内部具体质点的格子构造，它是从实际晶体内部结构中抽象出来的无限个几何图形，如图 1.1 所示。虽然对于实际晶体来说，不论晶体多小，它们所占空间总是有限的，但在微观上，可以将晶体想象成等同点在三维空间是无限排列的。



图 1.1 晶体的某一平面结构及空间格子

空间点阵有下列几种要素：

(1) 结点：结点指空间点阵中的点，它们代表晶体结构中的等同点。在实际晶体中，在结点的位置上为同种质点所占据。但是，就结点本身而言，它们并不代表任何质点，它们是只有几何意义的几何点。

(2) 行列：行列指结点在直线上的排列（见图 1.2）。空间点阵中任意两结点连接起来就是一条行列方向。行列中相邻结点间的距离称为该行列的结点间距（如图 1.2 中的  $a$ ）。在同一行列中结点间距是相等的，在平行的行列上结点间距也是相等的。不同方向的行列，其结点间距一般是不等的，行列结点在某些方向上分布较密，而在另一些方向上则较稀。

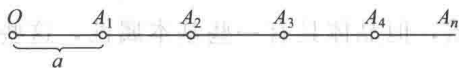


图 1.2 空间格子的行列

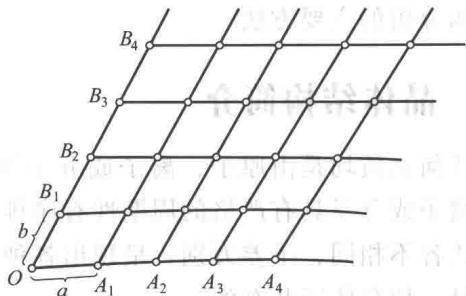


图 1.3 空间格子的面网

(3) 面网：结点在平面上分布即构成面网，见图 1.3。空间点阵中不在同一行列上的任意三个结点就可连成一个面网。面网上单位面积内结点的数目称为面网密度。任意两个相邻面网的垂直距离称为面网间距（也称晶面间距）。相互平行的面网，它们的面网密度和面网间距相等；互不平行的面网，它们的面网密度和面网间距一般不等。而且面网密度大的其面网间距也大，反之，面网间距就越小，如图 1.4 所示。

(4) 平行六面体：它由六个两两平行且相等的面组成，见图 1.5。空间点阵可以看成是无数个平行六面体在三维空间毫无间隙地重复堆叠而成。

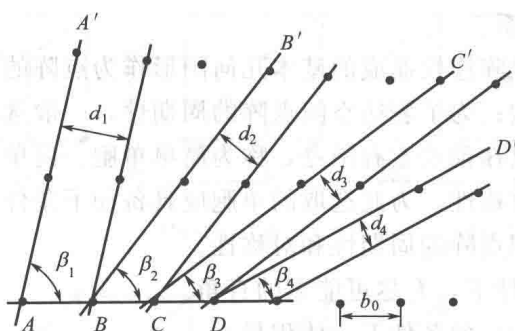


图 1.4 面网密度与面网间距的关系

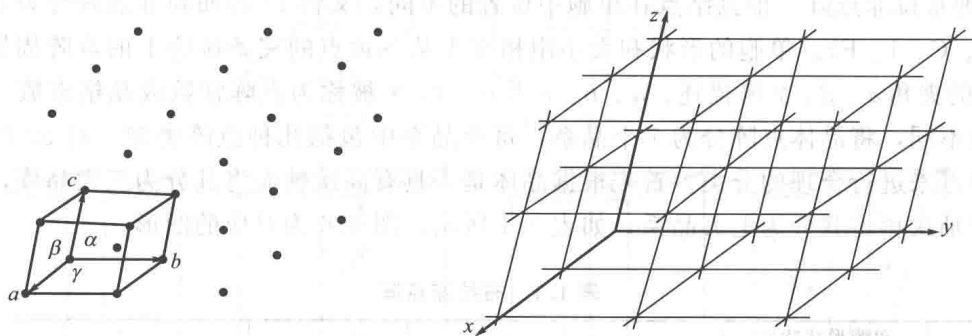


图 1.5 空间点阵及空间格子

因为空间点阵是从实际晶体结构中等同点抽象出来的，单位平行六面体能够代表晶体结构在空间排列的几何特征。与单位平行六面体相对应的这一部分晶体结构称为晶胞。单位平行六面体的大小及形状与晶胞完全一样，点阵常数值也就是晶胞常数值。

### 1.1.3 晶体的宏观对称性

晶体在外形及内部构造上都表现出很多对称的特点。晶体的对称性与晶体的物理性质有很大关系。晶体的宏观对称性来源于点阵结构的对称性，因此对晶体宏观对称性的研究有助于了解晶体的内部结构。

#### 1.1.3.1 晶体宏观对称的特点

(1) 由于空间点阵是晶体内部质点排列规则的反映，所以晶体的宏观对称性还必须满足相应空间点阵的对称性。

(2) 晶体的外形是一个封闭有限的几何体。晶体的宏观对称性必须反映这个晶体的几何外形的对称性，主要是指外表面晶面（法线）方向的对称性。

#### 1.1.3.2 点群

在晶体形态中，全部对称要素的组合称为该晶体形态的对称型或点群。一般来说，当强调对称要素时称对称型，强调对称操作时称点群。对称变换的集合称为对称变换群，相应的对称要素的集合称为对称要素群，两者统称为对称群。

用来表示点群的国际符号由三个主要晶向上的对称要素组成。例如六方晶系的三个主要晶向依次为  $c$ 、 $a$ 、 $2a+b$ 。沿  $c$  方向的对称要素有 1 个六次轴、1 个对称面；沿  $a$  方向有 1 个二次轴、1 个对称面；沿  $2a+b$  方向也有 1 个二次轴、1 个对称面，故记作  $\frac{6-2-2}{m m m}$ 。

### 1.1.3.3 布拉菲点阵与晶系

在点阵中选择一个由点阵连接而成的基本几何图形作为点阵的基本单元来表达晶体结构的周期性，称为晶胞或单胞；为了表达空间点阵的周期性，一般选取体积最小的平行六面体作为单位单胞，这种单胞只在顶点上有结点，称为简单单胞。简单单胞仅反映出晶体的周期性，不能反映晶体结构的对称性，为此选取的单胞应具备如下条件：

- (1) 能同时反映出空间点阵的周期性和对称性。
- (2) 在满足 (1) 的条件下，有尽可能多的直角。
- (3) 在满足 (1) 和 (2) 的条件下，体积最小。

法国晶体学家布拉菲经长期的研究发现，符合上述三个原则选取的单胞只能有 14 种，称为 14 种布拉菲点阵。根据结点在单胞中位置的不同，又将 14 种布拉菲点阵分为 4 种点阵类型 (P、C、I、F)。单胞的形状和大小用相交于某一顶点的三条棱边上的点阵周期  $a$ 、 $b$ 、 $c$  及其间的夹角  $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$  来描述。 $a$ 、 $b$ 、 $c$  及  $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$  被称为点阵常数或晶格常数。根据点阵常数的不同，将晶体点阵分为 7 个晶系，每个晶系中包括几种点阵类型。对 32 种点群按其对称特点来进行合理的分类。首先根据晶体是否具有高次轴而将其分为三大晶族，然后根据主轴的轴次再将其分为七大晶系，如表 1.1 所示，图 1.6 为对应的图形。

表 1.1 布拉菲点阵

晶系	单胞形状特征 (点阵参数)	布拉菲点阵	点阵符号	单胞内阵点数	阵点坐标
立方(等轴)	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单立方	P	1	000
		体心立方	I	2	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
		面心立方	F	4	$000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
正方(四方)	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单正方	P	1	000
		体心正方	I	2	$000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
斜方(正交)	$a \neq b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单斜方	I	1	000
		体心斜方	P	2	$000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
		底心斜方	C	2	$000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
		面心斜方	F	4	$000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
菱方(三方)	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	简单菱方	R	1	000
六方	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$	简单六方	P	1	000
单斜	$a \neq b \neq c$ $\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$	简单单斜	P	1	000
		底心单斜	C	2	$000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
三斜	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	简单三斜	P	1	000

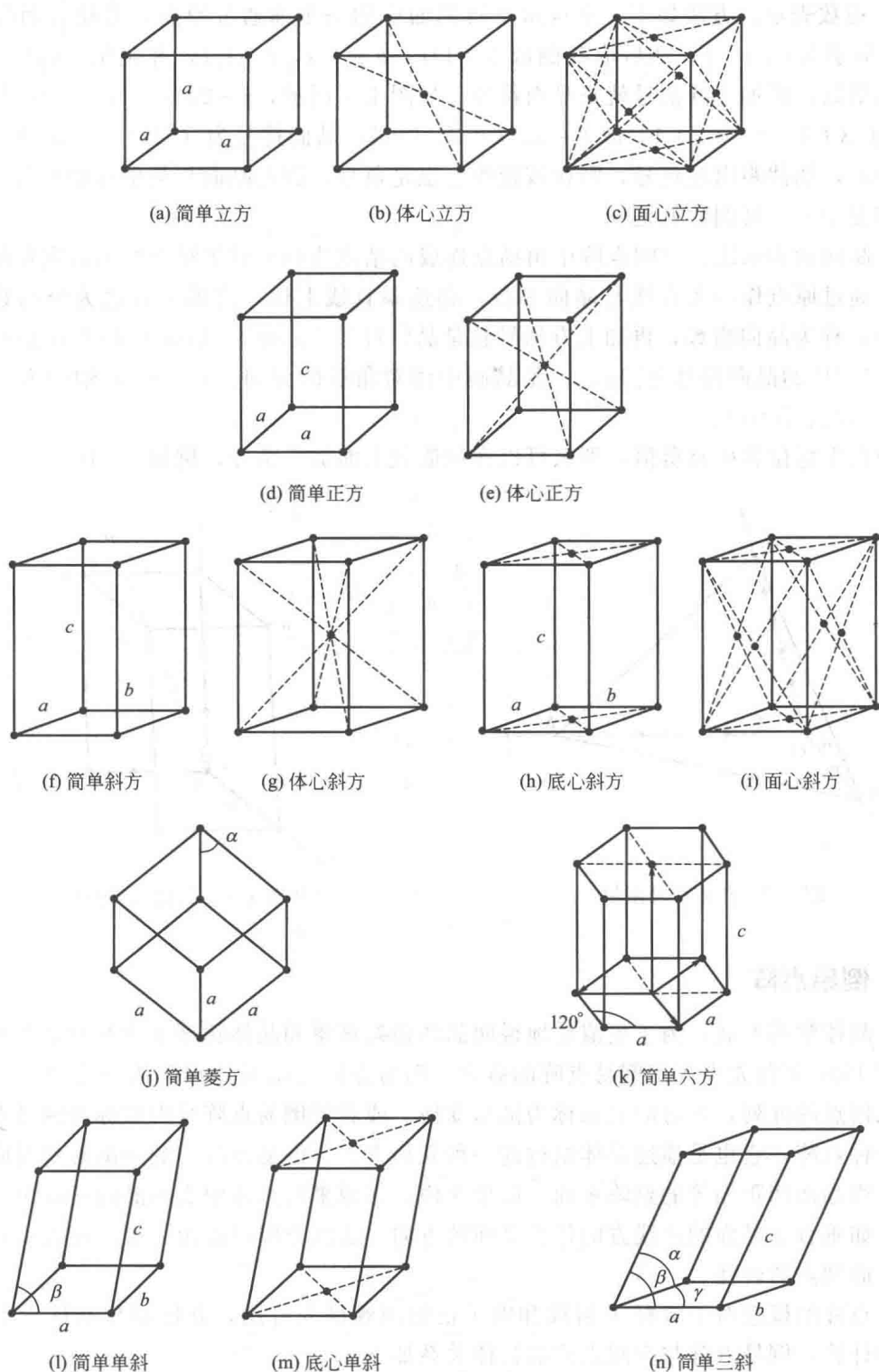


图 1.6 14 种布拉菲点阵

#### 1.1.3.4 晶面和晶向的表示法

(1) 晶面的表示法。把点阵中的结点全部分列在一系列平行等距离的平面上，这样的平面称为晶面。点阵中的平面可以有无数多组。对于一组平行的等距离晶面，可用密勒

(Miller) 指数表示。方法如下：令这组平行晶面中的一个面通过原点，其相邻面与  $x$ 、 $y$ 、 $z$  轴面距分别为  $r$ 、 $s$ 、 $t$ ，然后取其倒数  $h=1/r$ ， $k=1/s$ ， $l=1/t$ ，并化整。 $hkl$  就是该晶面的密勒指数，再加上圆括号就是晶面符号。如图 1.7 所示， $r=2$ ， $s=3$ ， $t=6$ ，其倒数比为  $1/2:1/3:1/6=3:2:1$ ，故  $h=3$ ， $k=2$ ， $l=1$ ，晶面符号为  $(321)$ 。晶面符号也必须用整数表示，如截距出现负号，则在该指数上也是负号。假若晶面与某坐标轴平行，那么它与该轴相交于  $\infty$ ，其倒数就是 0。

(2) 晶向的表示法。空间点阵中由结点连成的结点线和平行于结点线的方向在晶体中称为晶向。通过原点作一条直线与晶向平行，将这条直线上任一点的坐标化为公约数的整数  $u$ 、 $v$ 、 $w$ ，称为晶向指数，再加上方括号就是晶向符号  $[uvw]$ 。如图 1.8 中  $M$  点的坐标为  $111$ ，所以  $OP$  的晶向符号为  $[111]$ ，是晶胞中体对角线的方向。 $x$ 、 $y$ 、 $z$  轴的方向分别为  $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 。

假如在坐标位置中有负值，那么可以在该值数上面加一负号，例如  $[1\bar{1}0]$ 。

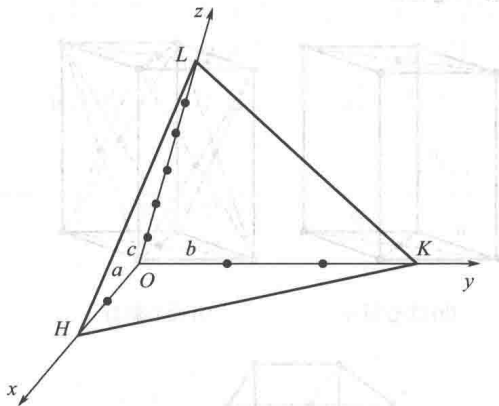


图 1.7 晶面符号图解

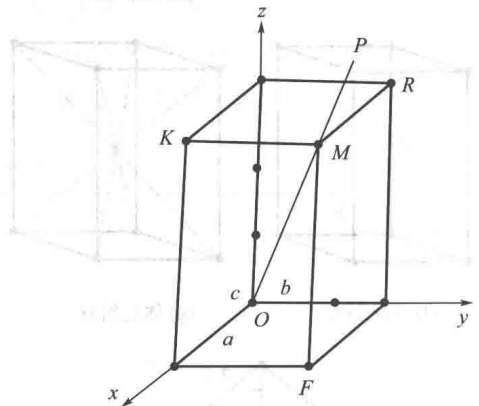


图 1.8 晶向符号图解

### 1.1.4 倒易点阵

随着晶体学的发展，为了更清楚地说明晶体衍射现象和晶体物理学方面的某些问题，厄瓦尔德在 1920 年首先引入了倒易点阵的概念。倒易点阵是由晶体点阵按一定对应关系建立的空间几何点的阵列，该对应关系称为倒易变换。或者说倒易点阵是由被称为倒易点的点所构成的一种点阵，它也是描述晶体结构的一种几何方法。倒易点阵中的一倒易点对应于空间点阵中一组晶面间距相等的点阵平面。简单来说，在原来的点阵中表示晶面可以用更为简洁的方法，如垂直于晶面的法线方向作为晶面的方向，法线方向可以用一个坐标表示，这样就完成了由面到点的转变。

倒易点阵的概念对于解释 X 射线和电子衍射问题极为有用，并能简化晶体学中一些重要参数的计算，倒易点阵与空间点阵的具体关系如下。

设有一空间点阵（正点阵），由  $a$ 、 $b$ 、 $c$  三个基本矢量定义，另有一个由  $a^*$ 、 $b^*$ 、 $c^*$  基本矢量定义的点阵满足以下关系：

$$a^* \times b = a^* \times c = b^* \times a = b^* \times c = c^* \times a = c^* \times b = 0 \quad (1.1)$$

$$a^* \times a = b^* \times b = c^* \times c = K \quad (K \text{ 等于 } 1 \text{ 或 } \lambda)$$

则称由  $a^*$ 、 $b^*$ 、 $c^*$  定义的点阵为倒易点阵。式中， $a$ 、 $b$ 、 $c$  和  $a^*$ 、 $b^*$ 、 $c^*$  是对称



的, 故由它们定义的点阵互为对方的倒易点阵。

由  $a^* \times b = a^* \times c = 0$  可知:  $a^* \perp b$  和  $a^* \perp c$ , 故可将  $a^*$  表达为:

$$a^* = \alpha_1 [b \times c] \quad (1.2)$$

又因为  $a^* \times a = K$ , 则有:

$$a \times a^* = K = \alpha_1 a \times [b \times c] \quad (1.3)$$

或

$$\alpha_1 = \frac{K}{a \times [b \times c]} \quad (1.4)$$

将式 (1.4) 代入式 (1.3), 并同理可得:

$$\left. \begin{aligned} a^* &= K \frac{b \times c}{a [b \times c]} \\ b^* &= K \frac{c \times a}{a [b \times c]} \\ c^* &= K \frac{a \times b}{a [b \times c]} \end{aligned} \right\} \quad (1.5)$$

式中, 如果  $K$  取 1, 并利用空间点阵单位晶胞体积  $V = a \times [b \times c]$  代入, 有:

$$\left. \begin{aligned} a^* &= [b \times c] / V \\ b^* &= [c \times a] / V \\ c^* &= [a \times b] / V \end{aligned} \right\} \quad (1.6)$$

同理:

$$\left. \begin{aligned} a &= [b^* \times c^*] / V^* \\ b &= [c^* \times a^*] / V^* \\ c &= [a^* \times b^*] / V^* \end{aligned} \right\} \quad (1.7)$$

式中,  $V^* = a^* \times [b^* \times c^*]$  是倒易点阵中单位晶胞体积。图 1.9 为空间点阵和其对

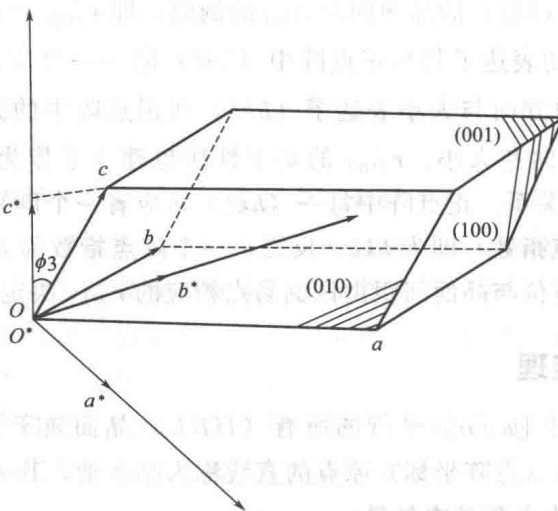


图 1.9 空间点阵和其对应的倒易点阵