

高等学校材料类专业基础课系列教材

无机材料

科学基础

WUJICAILIAO KEXUEJICHU

张其土 主编



华东理工大学出版社

EAST CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

高等学校材料类专业基础课系列教材

无机材料

科学基础

WUJICAILIAO KEXUEJICHU

张其土 主编



华东理工大学出版社

EAST CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

图书在版编目(CIP)数据

无机材料科学基础/张其土主编. —上海:华东理工大学出版社,2007.1
(高等学校材料类专业基础课系列教材)
ISBN 978-7-5628-2007-9

I. 无... II. 张... III. 无机材料-高等学校-教材 IV. TB321

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006)第 135165 号

高等学校材料类专业基础课系列教材

无机材料科学基础

.....

主 编 / 张其土

责任编辑 / 周永斌

封面设计 / 王晓迪

责任校对 / 金慧娟

出版发行 / 华东理工大学出版社

地 址:上海市梅陇路 130 号(200237)

电 话:(021)64250306(营销部)

传 真:(021)64252707

网 址:www.hdlgpress.com.cn

印 刷 / 常熟华顺印刷有限公司

开 本 / 787 mm×1092 mm 1/16

印 张 / 22.25

字 数 / 541 千字

版 次 / 2007 年 1 月第 1 版

印 次 / 2007 年 1 月第 1 次

印 数 / 1—5050 册

书 号 / ISBN 978-7-5628-2007-9/TB·14

定 价 / 36.00 元

(本书如有印装质量问题,请到出版社营销部调换)

内 容 提 要

本书主要介绍无机非金属材料方面的基础理论。全书共分九章,具体包括晶体结构基础、晶体结构缺陷、非晶态固体、材料的表面和界面、相图、扩散、固相反应、相变、材料的烧结。每章后附有习题。

本书为材料类专业基础课教材,也可作为相关专业的教学参考书。同时也适合从事非金属材料的研制和生产的科技工作者参考。

前 言

能源、信息和材料被认为是现代国民经济的三大支柱,其中材料更是各行各业的基础。可以说,没有先进的材料,就没有先进的工业、农业和科学技术。无怪乎历史学家将材料作为文明社会进步的标志,将历史划分为石器时代、陶器时代、青铜器时代、铁器时代,等等。从世界科技发展史看,重大的技术革新往往起始于材料的革新。反之,近代新技术的发展又促进了新材料的研制。材料的制造由简单到复杂,由以经验为主到以科学知识为基础的发展过程,逐渐形成了一门新兴的边缘学科——材料科学。

材料的基础理论实际上就是综合数学、物理、化学等各种基础知识来分析实际的材料问题。具体来说,它包括以下几部分:晶体学基础、晶体缺陷理论、固体材料的相图、固体的动力学理论(包括扩散和相变理论)、固体材料的烧结理论等。目前国内材料科学基础课程的内容根据金属材料工程、无机非金属材料工程、有机高分子材料与工程等专业不同,材料科学基础的内容也有很大的差别。本书的内容则偏重无机非金属材料方面的基础理论。基础理论是普遍的,是材料科学与工程专业的共性知识。随着材料科学与工程的发展,基础理论显得日益重要,对发展新材料、培养学生创新能力具有深远的意义。

无机材料科学基础是研究无机非金属材料的成分、结构与性能之间关系及其变化规律的一门应用基础科学,是材料科学与工程专业的一门重要基础理论课程。本书是在陆佩文教授主编的《无机材料科学基础》(1996年)教材基础上重新编写的,先形成校内讲义经过近三年的试用后最终修订完成。在原有内容的基础上,从材料的共性出发,保留了原有的特色,编写过程中坚持加强基础、拓宽专业面、更新教材内容的基本原则;内容取材上力求既能反映本学科的近代发展状况和水平,又能适合作为专业基础课教学的要求;坚持体现教材内容深广度适中,够用为原则,增强适用性,并适当留有可供不同院校教学选择和扩展的余地,能满足不同学时教学的要求;文字叙述上力求概念确切严谨,深入浅出,数据正确可靠,图、表、实例与内容叙述相吻合,使读者易于理解和便于自学。为加深学生对基本概念的理解和提高解决实际问题的能力,各章后附有习题。

本书由六位教师共同编写,具体编写分工如下:第一章(李晓云副教授),第二章(刘军教授、李晓云副教授),第三章(郑翠红副教授、张华教授),第四章(张华教授),第五章(张其土教授、郑翠红副教授),第六章、第七章(徐玲玲教授),第八章(刘军教授、张其土教授),第九章(张其土教授)。全书由张其土教授担任主编,负责统稿工作。

限于编者水平,书中不当之处在所难免,殷切希望使用本书的教师、学生、读者给予批评与指正。

编 者

2006年9月

目 录

第一章 晶体结构基础	1
第一节 晶体的基本概念及性质	1
一、晶体的概念	1
二、晶体结构与空间点阵	1
三、晶体的基本性质	4
第二节 晶体的宏观对称性	5
一、晶体宏观对称的特点	5
二、宏观对称操作和对称要素	6
三、点群	7
四、晶族和晶系	7
第三节 布拉维点阵与晶系	9
一、平行六面体的选取	9
二、布拉维点阵	10
三、晶胞	13
第四节 点阵几何元素的表示法	13
一、结点位置表示法	14
二、晶向的表示法	15
三、晶面的表示法	16
第五节 微观对称和空间群	17
一、微观对称要素	17
二、空间群及符号	19
第六节 结晶化学基本原理	21
一、晶体中的化学键类型	21
二、球体最紧密堆积原理	25
三、配位数与配位多面体	27
四、键参数	27
五、鲍林规则	32
六、晶体场理论和配位场理论	35
第七节 典型结构类型	43
一、单质的晶体结构	43
二、二元化合物典型的晶体结构	46
三、 ABO_3 型化合物的结构	51

四、 AB_2O_4 型化合物的结构	53
五、氧化物结构的一般规律	54
六、键参数函数与无机化合物晶体结构关系	55
第八节 硅酸盐晶体结构	56
一、硅酸盐结构的一般特点及分类	56
二、岛状硅酸盐	57
三、链状硅酸盐	59
四、层状硅酸盐	60
五、骨架状硅酸盐	66
习题	67
第二章 晶体结构缺陷	71
第一节 点缺陷	71
一、点缺陷的类型	72
二、点缺陷化学反应表示法	73
三、热缺陷浓度的计算	76
四、点缺陷的化学平衡	78
五、固溶体	79
六、固溶体的研究方法	84
七、非化学计量化合物	86
第二节 线缺陷	88
一、位错的基本概念	88
二、位错的运动	92
三、位错的生成与增殖	95
习题	96
第三章 非晶态固体	98
第一节 玻璃的通性	98
第二节 玻璃的结构	100
一、晶子学说	100
二、无规则网络学说	102
第三节 玻璃的形成	105
一、玻璃态物质的形成方法	105
二、玻璃形成的热力学条件	106
三、玻璃形成的动力学条件	107
四、玻璃形成的结晶化学条件	109
第四节 常见玻璃类型	113
一、硅酸盐玻璃	113
二、硼酸盐玻璃	116
第五节 玻璃陶瓷及其他非晶态材料	118
一、玻璃陶瓷(微晶玻璃)	118

二、非晶态合金	119
三、非晶态半导体	121
习题	122
第四章 材料的表面与界面	124
第一节 固体的表面	124
一、固体表面力场	125
二、固体表面结构	126
三、固体的表面能	129
第二节 界面行为	131
一、弯曲表面效应	131
二、润湿与黏附	134
三、吸附与表面改性	137
四、固体内气孔表面的空位浓度	139
第三节 晶界	140
一、晶界结构与分类	141
二、多晶体的晶界构型	143
三、晶界应力	145
四、晶界偏聚	147
第四节 黏土-水系统胶体化学	149
一、黏土的荷电性	149
二、黏土的离子吸附与交换	151
三、黏土胶体的电动性质	153
四、黏土-水系统的胶体性质	156
五、瘠性料的悬浮与塑化	161
习题	163
第五章 相图	165
第一节 相图的基本知识	165
一、组分及独立组分	166
二、相	166
三、材料系统中的相律	167
第二节 单元系统相图	168
一、水型物质与硫型物质	168
二、可逆和不可逆多晶转变的单元相图	169
三、 SiO_2 系统	170
四、 ZrO_2 系统	172
第三节 二元相图的基本类型	173
一、具有一个低共熔点的简单二元相图	173
二、生成一个一致熔化合物的二元相图	175
三、生成一个不一致熔化合物的二元相图	176

	四、生成一个在固相分解的化合物的二元相图	177
	五、具有多晶转变的二元相图	177
	六、形成连续固溶体的二元相图	178
	七、形成有限固溶体的二元相图	179
	八、具有液相分层的二元相图	180
第四节	二元相图的应用举例	180
	一、CaO-SiO ₂ 系统二元相图	180
	二、Al ₂ O ₃ -SiO ₂ 系统二元相图	182
	三、MgO-SiO ₂ 系统二元相图	183
	四、铁-碳系统二元相图	184
第五节	三元相图的基本知识	185
	一、三元相图的组成表示方法	186
	二、杠杆规则	187
	三、重心原理	188
	四、三元立体相图与平面投影图	188
第六节	三元相图的基本类型	190
	一、具有一个低共熔点的简单三元相图	190
	二、生成一个一致熔二元化合物的三元相图	191
	三、生成一个不一致熔二元化合物的三元相图	192
	四、生成一个固相分解的二元化合物的三元相图	197
	五、具有一个一致熔三元化合物的三元相图	197
	六、具有一个不一致熔三元化合物的三元相图	198
	七、具有多晶转变的三元相图	198
	八、形成一个二元连续固溶体的三元相图	199
	九、具有液相分层的三元相图	199
	十、分析复杂相图的主要步骤	199
第七节	三元相图的应用举例	200
	一、CaO-Al ₂ O ₃ -SiO ₂ 系统三元相图	200
	二、K ₂ O-Al ₂ O ₃ -SiO ₂ 系统三元相图	203
	三、MgO-Al ₂ O ₃ -SiO ₂ 系统三元相图	205
	四、Na ₂ O-CaO-SiO ₂ 系统三元相图	207
第八节	交互三元系统相图	209
	一、组成表示方法	209
	二、三元交互系统相图	210
	习题	211
第六章	扩散	214
第一节	固体中扩散的基本特点	214
第二节	菲克定律	215
	一、稳定扩散	216

二、不稳定扩散	218
第三节 扩散系数	221
一、扩散系数的物理意义	221
二、扩散过程的推动力	222
第四节 扩散的微观机制	224
一、空位扩散机制	224
二、杂质离子固溶引起的空位扩散	225
三、非化学计量氧化物中的扩散	226
四、间隙扩散机制	228
五、互扩散系数	229
第五节 影响扩散的因素	230
一、温度的影响	231
二、组成的影响	232
三、化学键的影响	232
四、晶体结构的影响	233
五、杂质的影响	234
习题	235
第七章 固相反应	236
第一节 固相反应过程	237
第二节 固相反应动力学方程	238
一、固相反应的一般动力学关系	238
二、化学反应动力学范围	240
三、扩散动力学范围	241
第三节 影响固相反应的因素	246
一、反应物化学组成与结构的影响	246
二、反应物颗粒尺寸及分布的影响	247
三、反应温度、压力与气氛的影响	248
四、矿化剂及其他影响因素	249
第四节 固相反应的某些研究实例	249
第五节 固相反应热力学	252
一、热力学应用计算方法	252
二、纯固相参与的固相反应	254
三、伴有气相参与的固相反应	258
四、伴有熔体参与的固相反应	260
五、反应热平衡计算	262
六、金属氧化物的高温稳定性	263
习题	266
第八章 相变	268
第一节 相变的分类	268

一、按热力学分类	268
二、按相变方式分类	270
三、按质点迁移特征分类	270
四、按动力学分类	270
第二节 固态相变	270
一、固态相变的特点	270
二、马氏体转变	271
三、扩散型固态相变	274
第三节 液-固相变过程热力学	276
一、相变过程的不平衡状态及亚稳区	276
二、相变过程推动力	276
三、晶核形成条件	278
第四节 液-固相变过程动力学	280
一、晶核形成过程动力学	280
二、晶体生长过程动力学	282
三、总的结晶速率	283
四、析晶过程	285
五、影响析晶能力的因素	286
第五节 液-液相变过程	287
一、液相的不混溶现象	287
二、分相的结晶化学观点	290
习题	292
第九章 材料的烧结	294
第一节 烧结的基本概念	294
一、烧结的特点	294
二、烧结过程推动力	296
三、烧结模型	296
第二节 固相烧结	298
一、蒸发-凝聚传质	298
二、扩散传质	300
第三节 液相烧结	306
一、液相烧结的特点	306
二、流动传质	306
三、溶解-沉淀传质	309
四、各种传质机理分析比较	311
第四节 热压烧结	312
第五节 晶粒生长与二次再结晶	315
一、晶粒生长	315
二、二次再结晶	319

三、晶界在烧结中的作用	321
第六节 影响烧结的因素	321
一、原始粉料的粒度	321
二、外加剂的作用	322
三、烧结温度和保温时间	323
四、盐类的选择及其煅烧条件	323
五、气氛的影响	324
六、成型压力的影响	325
第七节 烧结方法的发展	325
一、无压烧结方法	326
二、压力烧结	326
三、等离子体烧结	327
四、微波烧结	329
五、爆炸烧结	330
习题	331
附录	333
附录 1 晶体结构的 32 种点群和 230 种空间群	333
附录 2 有效离子半径(据 shannon, 1976)	336
附录 3 国际单位制(SI)中基本常数的值	341
参考文献	342

第一章 晶体结构基础

不同材料具有不同的物理、化学性质,这些性质主要是由材料的化学组成及结构状况(原子在固体中的排列方式、化学键的种类、固体中的电子态、实际晶体中的缺陷及显微结构状况等)所决定的。影响材料性能的结构层次及类别是十分丰富多样的,从尺度上讲,运动范围从只有 10^{-10} m 级的核外电子结构到 10^{-6} m 级的晶粒以至尺度更大的孔隙、裂纹等均对材料的不同性质起着不同的影响。值得指出的是,原子、离子的理想排列状况即晶体结构对材料性质有决定性的影响,所以掌握晶体结构方面的知识是非常重要的。

第一节 晶体的基本概念及性质

一、晶体的概念

人们对晶体的认识,是从石英开始的。古代人把外形上具有规则的几何多面体形态的石英(即水晶)称为晶体。后来,人们把凡是天然的具有几何多面体形态的固体,如食盐、方解石等,都称为晶体。

随着社会的发展及科学技术的进步,人们对晶体的认识不断深化。20 世纪初,应用 X 射线衍射分析的方法研究了晶体的内部结构以后,发现一切晶体不论其外形如何,它的内部质点(原子、离子或分子)都是按一定规律排列的,即晶体内部相同质点在二维空间均成周期性重复,构成了格子构造。所以,晶体是内部质点在三维空间成周期性重复排列的固体,或者说晶体是具有格子构造的固体。

二、晶体结构与空间点阵

任何一种晶体,不管它有多少种质点,也不管它们在二维空间排布的具体形式如何复杂,其晶体内部结构的最基本的特征都是质点在三维空间作有规律的周期重复。空间点阵是表示晶体结构中质点周期性重复规律的几何图形。

现以 NaNO_2 晶体结构为例进行说明。图 1-1(a)是 NaNO_2 晶体结构的二维图形,其中单位矢量长度:

$$|b| = 0.556 \text{ nm} \quad |c| = 0.538 \text{ nm} \quad |a| = 0.355 \text{ nm}$$

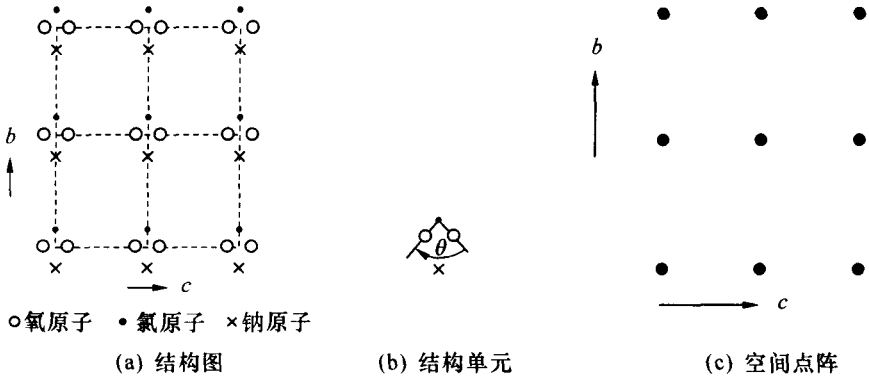


图 1-1 NaNO₂ 晶体的二维结构

这个图形告诉我们，在晶体结构中有如图 1-1(b)所示的一个基本单元，如果把整个晶体结构图形比喻成一块花布，这个基本单元就是花布中的一朵花。在晶体结构中，这个由质点(原子或离子)组成的基本单元称为**结构单元**(或称为**基元**)。结构单元可以由一个原子(或离子，下同)或一个包含着几个原子的分子组成，也可以由几个同种类的原子或包含着几个分子的复杂原子团组成。在任何理想的晶体内，结构单元中所包含的质点间的相互关系，在整个晶体中都是一样的。NaNO₂ 的结构单元就是由包含着两个氧原子、一个氮原子及一个钠原子四个质点的亚硝酸钠分子组成的。结构单元应该包括这个晶体中所有的不等价的原子，但又不应该包括完全等价的原子。这里所说的等同，不仅是指属于同一种元素的原子，还包括其周围的物理化学环境及几何环境也应该相同。例如图 1-1(b)有两个氧原子，但在 NaNO₂ 晶体中它们所处的几何环境就不一样，一个氧原子在左上角有氮原子，但在右上角则没有氮原子与其相邻，而另一个氧原子的环境正好相反。因此这两个氧原子在晶体结构中是不等价的，所以应该把这两个氧原子都包括在同一个结构单元中。另一方面我们不应该把这个结构单元再扩大了，因为晶体中任何其他原子都与图 1-1(b)中的某一个原子是等价的。

这个结构单元在空间是以一定周期重复出现的。如图 1-1(a)所示，在 *b* 轴及 *c* 轴方向上，各以 0.556 nm 及 0.538 nm 为间隔作周期重复。这个重复周期的尺度与实际晶体尺寸比较是如此之小，如对于边长为 1 cm 尺度的晶体来说，这种重复达 10⁷~10⁸ 数量级，因此把它看成是无限多次重复是可以的。因此在 NaNO₂ 晶体中，若把整个图形沿着 *b* 方向移动 0.556 nm 或其整数倍，图形就和没有移动过一样；同样在 *c* 方向移动 0.538 nm 或其整数倍，整个图形也可以复原；在垂直纸面的 *a* 方向，如以 0.355 nm 或其整数倍移动也同样可以复原。按以上周期依次在两个或三个方向平移，当然也可以把图形复原。晶体中的这个特点称之为**周期重复性**，或者说具有**平移对称性**。

可以用数学矢量形式来表达这个周期重复的性质，即对整个图形作

$$T = ma + nb + pc \quad (m, n, p = 0, \pm 1, \pm 2 \dots) \quad (1-1)$$

的平移，图形可以复原，*T* 称为**平移矢量**。*T* 可以有一系列无限多的大小及方向不同的值。在晶体中一定有这样的性质：

(1) 从晶体结构中任何一个原子(或其他任何点)出发，以矢量 *T* 进行平移，一定会重合

在另一个等同的原子上(或相应的等同点上);

(2) 任何两个等同原子(或其他等同点)的连线一定也是一个 T 矢量。

不符合这两条原则的固体结构就不属于晶体,或者把平移的单位矢量选错了。所以也可以说晶体就是有 T 矢量的固体材料。

为了研究各种千变万化的晶体结构中的一些共同规律,可以把晶体结构进行几何抽象,抽象的方法就是把晶体结构中的任一套等同点化成一个个没有质量及尺度的几何点,这些几何点称为结点。例如,可以把 NaNO_2 晶体中所有氮原子的中心位置抽象成几何结点,这些结点在空间排列的几何图形就称为这个晶体的空间点阵。它体现了晶体中质点排列的周期性重复规律。图 1-1(c) 就是 NaNO_2 的空间点阵图形(二维的)。

若取钠原子或其他等同点,也可抽象出同样的空间点阵来,所以任何实际晶体必有也只能有一种空间点阵。如图 1-2 所示,无论是氯离子还是钠离子在空间都是以(b)的图形排列的。晶体结构与空间点阵是既有区别又有联系的两个不同的概念,不能把它们混淆起来。晶体结构是客观存在的,具有具体物质内容的,它的基本单元是结构单元。空间点阵则是人为的、抽象的几何图形,组成空间点阵的结点是没有物质内容的几何点。但是结构单元与结点在空间排列的周期是一致的,或者说它们具有同样的 T 矢量。抽象的空间点阵不能脱离具体的晶体结构而单独存在,所以它不是一个无物质基础的纯粹几何图形。这种抽象能更深入地反映事物的本质及规律,因此是一种科学的抽象。

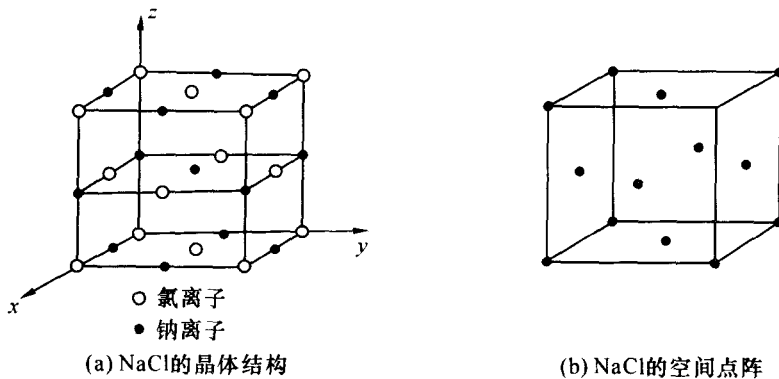


图 1-2 NaCl 晶体的三维结构

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的几何图形,虽然对于实际晶体来说,不论晶体多小,它们所占的空间总是有限的,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。例如 1 mm^3 的氯化钠晶体内,就有大约 2.25×10^{19} 个氯离子和相同数量的钠离子,因而,晶体内部的格子构造与空间点阵的无限图形是一致的。

空间点阵有下列几种要素。

(1) 结点 空间点阵中的点,它们代表晶体结构中的等同点(或相当点)。在实际晶体中,在结点的位置上可为同种质点所占据。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 结点在直线上的排列。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。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，行列间距越大，结点在行列上的密度越大。

(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联成一个面网，或者说，任意两个相交的行列就可决定一个面网。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。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亦大，反之，面网间距亦小。

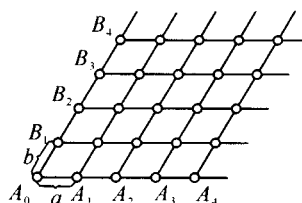


图 1-3 面网

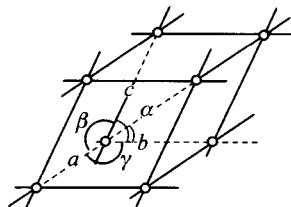


图 1-4 平行六面体

(4) 平行六面体 它由三对两两平行且相等的面组成，见图 1-4。空间点阵可以看成是由无数个平行六面体在三维空间毫无间隙地重复堆叠而成。

三、晶体的基本性质

如果不考虑材料的结构缺陷，原子排列的有序度可分为三个等级：无序、短程有序和长程有序(图 1-5)。晶体中原子的排列是长程有序，而非晶体则相反。非晶体在整体上是无序的，但原子间也靠化学键结合在一起，所以在有限的范围内观察还有一定的规律，它的内部结构只具有统计均一性。晶体与非晶体中原子排列有序度不同，导致性能上出现较大差异：①在外形上，非晶体都不能自发地长成有规则的几何多面体外形，而是一种无规则形状的无定形体；②晶体具有固定熔点，而非晶体没有；③一般情况下，非晶体不同方向上物理、化学性质是相同的，即各向同性，而大多数晶体却是各向异性的。

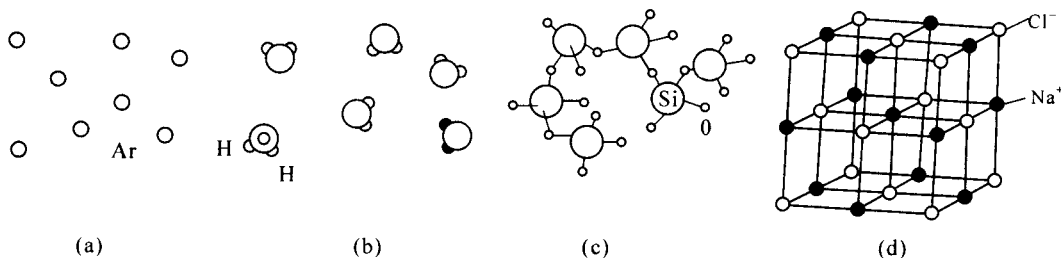


图 1-5 材料中原子的排列

(a) 惰性气体无规则排列；(b)、(c) 短程有序如水蒸气和玻璃；(d) 晶体如 NaCl

晶体与非晶体在一定条件下是可以转换的。例如，石英玻璃灯管长久使用后，就会失透，成朦胧状，实际上是因为玻璃向结晶态转变，形成了微晶。这种由非晶体向晶体转化的

作用称为晶化或脱玻化；相反，晶体内部质点规则排列受到破坏而向非晶态转变的作用，称为非晶化或玻璃化。

晶体的基本性质是一切晶体所共有的，而与其他状态的物体相区别的性质，主要有以下五项。

(1) 结晶均一性 同一晶体的内部不同部分具有相同的性质。例如，任意在晶体的不同部位取下两小块测定其密度，它们都是完全相同的。同样，它们在相应方向上的光学、电学、热学等性能也完全相同。

(2) 各向异性 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，因而晶体的性质也随方向不同而有差异。例如，蓝晶石的硬度随方向不同有显著差别，平行晶体在延长方向上小刀能刻动，但在其垂直晶体延长方向上小刀刻不动。

(3) 自限性 晶体在适当的条件下可以自发地形成几何多面体外形的性质。晶体上的平面为晶面，晶面的交棱为晶棱，晶棱会聚形成晶体多面体的顶角。晶体的多面体形态，是其格子构造在外形上的反映。

(4) 对称性 晶体中相等的晶面、晶棱和角顶，以及晶体物理化学性质在不同方向上或位置上作有规律的重复出现。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、液体及非晶质固体相比其内能最小，因此是最稳定的。

第二节 晶体的宏观对称性

对称性是指将图形进行某种变换，变换前后图形保持不变。这种变换就称为对称操作。自然界有大量的对称物体，这方面大家感性认识很多，从六角形的雪花到翩翩起舞的蝴蝶都是自然对称的。晶体无论在外形及内部构造上都表现出很多对称的特点。晶体的分类最早主要是根据晶体外形的宏观对称性来进行的。晶体的对称性与晶体的物理性质有很大关系。例如，压电效应只能发生在不具有对称中心的晶体中；双折射则是中、低级晶族晶体所固有的特点等等。

晶体的宏观对称性就是晶体外形所包围的点阵结构的对称性。晶体的宏观对称性来源于点阵结构的对称性，故对晶体宏观对称性的研究有助于了解晶体的内部结构。

一、晶体宏观对称的特点

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(法线)方向的对称性。

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。