

苏州大学研究生优秀教材建设资助项目

# 材料物理性能与检测

吴雪梅 主编  
诸葛兰剑 吴兆丰 叶春暖 葛水兵 编著



科学出版社

苏州大学研究生优秀教材建设资助项目

# 材料物理性能与检测

吴雪梅 主编

诸葛兰剑 吴兆丰 叶春暖 葛水兵 编著

科学出版社

北京

## 内 容 简 介

本书系统地介绍了材料物理性能的基本概念及其物理本质、影响材料物理性能的因素、提高材料物理性能的措施以及物理性能的检测原理和方法等。

全书共 9 章, 包括晶体学基础与晶体结构、材料的导电性能、材料的热学性能、材料的磁性能、材料的光学性能、材料的介电性能、纳米微粒材料的物理性能、薄膜材料的物理性能、纳米材料的测试与表征。在本书中, 将“固体电子论基础知识概述”作为附录列于书末, 以方便未学过这部分内容的同学参考。

本书可作为高等学校材料科学与工程及相关专业本科生及研究生的教材; 也可供从事材料物理性能领域研发和技术工作的专业人员参考阅读。

### 图书在版编目(CIP)数据

材料物理性能与检测/吴雪梅主编; 诸葛兰剑等编著. —北京: 科学出版社, 2012

ISBN 978-7-03-032951-6

I. ①材… II. ①吴… ②诸… III. ①工程材料-物理性能-性能检测  
IV. ①TB303

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2011) 第 252412 号

责任编辑: 刘凤娟 / 责任校对: 陈玉凤

责任印制: 钱玉芬 / 封面设计: 耕 者

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

新科印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2012 年 1 月第 一 版 开本: B5 (720×1000)

2012 年 1 月第一次印刷 印张: 26 3/4

字数: 522 000

定价: 78.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

# 前 言

近年来,以电子、生物、航天和能源为应用对象的材料科学的发展趋势已经从过去的单一性金属材料、无机非金属材料和高分子材料转向以功能材料、复合材料、纳米材料等高性能、多功能材料为主.因此,对材料的性能提出了更高的要求.随着包括金属材料、无机非金属材料和高分子材料及复合工程材料在内的大材料学科在各高等院校的建立,物理性能课程由原来的金属物理性能、无机材料物理性能等扩展为材料物理性能,本教材是以适应当前“厚基础、宽专业、多方向、强能力”的教育要求而编写的.

本书在编写上,注重简单明了地阐述材料物理性能的基本概念,尽量避免复杂的数学推导,并使用很多插图.本书共分9章,第1章简明地论述了晶体结构和晶体缺陷;第2~6章分别对材料的电学、热学、磁学、光学、介电性能的理论、性能、影响因素、性能测定方法 and 应用等进行介绍.为适应目前纳米科学技术的快速发展,书中增加了纳米微粒材料和薄膜材料的物理性能及纳米材料的测试与表征共3章内容.

材料的物理性能,离不开性能的检测,因此,在本书中,较多地介绍了物理性能的测试方法,如有条件,可安排这些性能的测试实验,有利于加强学习效果.作为教材,每章都有思考练习题,思考练习题可供学生复习和练习选用.

目前,许多学校的材料科学与工程学科本科专业开设了“固体物理学”之类的必修基础课程,或者将有关固体材料中的电子理论知识纳入了先期的必修课程之中.因此,在本书中,将“固体电子论基础知识概述”作为附录列于书末,而没有在书的正式内容中作详细介绍,以方便还没有学习过这部分内容的同学作为参考.

本书由吴雪梅主编统稿,诸葛兰剑编写第1、第2、第5、第7、第8、第9章、附录B;吴兆丰编写第4、第6章;叶春暖编写第3章;葛水兵编写附录A.

在本书出版过程中,得到“苏州大学研究生优秀教材建设资助项目”、苏州大学“低温等离子体物理及应用”创新团队建设项目、江苏省“青蓝工程”建设项目的支持和国家自然科学基金(No.10975106)的资助以及科学出版社的大力支持,在此表示感谢!

本书在编写过程中参考了相关教材、专著和论文.在此,作者向被引用参考文

献的作者表示衷心感谢!

由于作者学识所限, 加上时间又紧, 内容难免有不妥之处, 敬请读者批评指正.

作 者

2011 年 5 月于苏州

# 目 录

## 前言

|                     |    |
|---------------------|----|
| 第 1 章 晶体学基础与晶体结构    | 1  |
| 1.1 晶体学基础           | 1  |
| 1.1.1 晶体与非晶体        | 1  |
| 1.1.2 空间点阵和晶胞       | 2  |
| 1.1.3 七大晶系与十四种布拉维点阵 | 4  |
| 1.1.4 晶向指数与晶面指数     | 6  |
| 1.1.5 晶体的对称性        | 12 |
| 1.2 三种典型的金属晶体结构     | 15 |
| 1.2.1 面心立方结构        | 15 |
| 1.2.2 体心立方结构        | 16 |
| 1.2.3 密排六方结构        | 17 |
| 1.2.4 晶体结构中的间隙      | 18 |
| 1.3 晶体的缺陷           | 20 |
| 1.3.1 点缺陷           | 21 |
| 1.3.2 线缺陷 (位错)      | 24 |
| 1.3.3 面缺陷           | 27 |
| 1.3.4 晶界能           | 33 |
| 1.3.5 缺陷对材料物理性能的影响  | 35 |
| 参考文献                | 36 |
| 思考练习题               | 36 |
| 第 2 章 材料的导电性能       | 38 |
| 2.1 材料导电性概述         | 38 |
| 2.1.1 电阻率和电导率       | 38 |
| 2.1.2 电导率的一般表达式     | 39 |
| 2.2 材料的导电理论         | 40 |
| 2.2.1 金属及半导体的导电机理   | 40 |
| 2.2.2 无机非金属材料的导电机理  | 44 |
| 2.3 金属材料的电学性能       | 50 |
| 2.3.1 金属电阻率的马西森定则   | 51 |

|                             |     |
|-----------------------------|-----|
| 2.3.2 影响金属导电性的因素 .....      | 51  |
| 2.4 半导体材料的电学性能 .....        | 60  |
| 2.4.1 半导体材料概述 .....         | 60  |
| 2.4.2 本征半导体的电学性能 .....      | 61  |
| 2.4.3 杂质半导体的电学性能 .....      | 64  |
| 2.4.4 pn 结 .....            | 69  |
| 2.4.5 半导体与化学结构的关系 .....     | 71  |
| 2.4.6 半导体的霍尔效应 .....        | 73  |
| 2.5 材料的超导电性 .....           | 75  |
| 2.5.1 超导体的三个基本特性 .....      | 77  |
| 2.5.2 超导体的三个临界条件 .....      | 78  |
| 2.5.3 两类超导体 .....           | 80  |
| 2.5.4 超导的 BCS 理论 .....      | 81  |
| 2.6 材料导电性的测量 .....          | 82  |
| 2.6.1 双臂电桥法 .....           | 83  |
| 2.6.2 直流电势差计测量法 .....       | 84  |
| 2.6.3 直流四探针法 .....          | 85  |
| 2.6.4 绝缘体电阻的测量 .....        | 87  |
| 2.7 电阻分析的应用 .....           | 88  |
| 2.7.1 研究合金的时效过程 .....       | 88  |
| 2.7.2 测定固溶体的溶解度曲线 .....     | 90  |
| 2.7.3 材料疲劳过程的研究 .....       | 91  |
| 2.7.4 马氏体相变的研究 .....        | 91  |
| 参考文献 .....                  | 92  |
| 思考练习题 .....                 | 92  |
| 第 3 章 材料的热学性能 .....         | 93  |
| 3.1 晶格的热振动 .....            | 93  |
| 3.2 材料的热容 .....             | 96  |
| 3.2.1 热容及其与温度的关系 .....      | 96  |
| 3.2.2 经典热容理论 .....          | 97  |
| 3.2.3 热容的量子理论 .....         | 98  |
| 3.2.4 材料与热容的关系 .....        | 101 |
| 3.2.5 热容的测量 .....           | 103 |
| 3.2.6 热分析法及其在材料研究中的应用 ..... | 105 |
| 3.3 材料的热膨胀 .....            | 114 |

|                               |            |
|-------------------------------|------------|
| 3.3.1 热膨胀的物理本质及热膨胀系数 .....    | 115        |
| 3.3.2 膨胀系数与其他物理性能的关系 .....    | 117        |
| 3.3.3 影响热膨胀性能的因素 .....        | 118        |
| 3.3.4 热膨胀系数的测量 .....          | 122        |
| 3.3.5 热膨胀分析的应用 .....          | 124        |
| 3.4 材料的热传导 .....              | 127        |
| 3.4.1 材料的热导率和热扩散率 .....       | 127        |
| 3.4.2 热传导的物理机制 .....          | 128        |
| 3.4.3 影响材料导热性能的因素 .....       | 130        |
| 3.4.4 热导率的测量和应用 .....         | 137        |
| 3.5 材料的热稳定性 .....             | 140        |
| 3.5.1 热稳定性的表示方法 .....         | 140        |
| 3.5.2 热应力 .....               | 141        |
| 3.5.3 抗热冲击断裂性能 .....          | 143        |
| 3.5.4 抗热冲击损伤性能 .....          | 146        |
| 3.5.5 提高材料抗热冲击性能的措施 .....     | 147        |
| 参考文献 .....                    | 148        |
| 思考练习题 .....                   | 149        |
| <b>第 4 章 材料的磁性能</b> .....     | <b>150</b> |
| 4.1 基本磁学量 .....               | 150        |
| 4.1.1 基本磁现象 .....             | 150        |
| 4.1.2 磁化强度 $M$ .....          | 151        |
| 4.1.3 磁化率 $\chi$ .....        | 151        |
| 4.1.4 磁导率 .....               | 151        |
| 4.1.5 磁学单位制 .....             | 152        |
| 4.2 物质的磁性 .....               | 153        |
| 4.2.1 原子磁矩 .....              | 153        |
| 4.2.2 材料按磁性分类 .....           | 157        |
| 4.3 铁磁性基本理论 .....             | 161        |
| 4.3.1 自发磁化现象 .....            | 161        |
| 4.3.2 铁磁材料的分子场理论 .....        | 161        |
| 4.3.3 海森伯铁磁性理论 .....          | 162        |
| 4.3.4 亚铁磁性和反铁磁性理论 .....       | 163        |
| 4.4 磁各向异性、退磁场、磁致伸缩和磁弹性能 ..... | 165        |
| 4.4.1 磁晶各向异性 .....            | 165        |

|                        |     |
|------------------------|-----|
| 4.4.2 退磁场能和铁磁体的形状各向异性  | 167 |
| 4.4.3 磁致伸缩             | 168 |
| 4.4.4 磁弹性能             | 170 |
| 4.5 磁畴                 | 170 |
| 4.5.1 磁畴成因             | 171 |
| 4.5.2 畴壁               | 172 |
| 4.5.3 多晶体和非均匀铁磁体中的磁畴结构 | 175 |
| 4.5.4 单畴颗粒             | 177 |
| 4.5.5 磁泡畴              | 177 |
| 4.6 磁性材料的磁化特性          | 178 |
| 4.6.1 技术磁化             | 178 |
| 4.6.2 壁移阻力的来源          | 180 |
| 4.6.3 磁性材料的磁化特性        | 181 |
| 4.7 磁性材料的分类及其性能指标      | 184 |
| 4.7.1 磁性材料的分类          | 184 |
| 4.7.2 磁性材料的性能指标        | 184 |
| 4.7.3 稀磁半导体            | 187 |
| 4.8 材料磁性能测量方法          | 192 |
| 4.8.1 材料静态磁性能的测量       | 192 |
| 4.8.2 材料动态(交流)磁性能的测量   | 198 |
| 4.9 磁性分析的应用            | 200 |
| 4.9.1 残余奥氏体量的测定        | 200 |
| 4.9.2 测定合金固溶度曲线        | 201 |
| 4.9.3 研究铝合金的分解         | 202 |
| 参考文献                   | 203 |
| 思考练习题                  | 204 |
| 第 5 章 材料的光学性能          | 205 |
| 5.1 概述                 | 205 |
| 5.2 光的基本性质             | 206 |
| 5.2.1 波粒二象性            | 206 |
| 5.2.2 光的电磁性            | 207 |
| 5.2.3 光与固体的相互作用        | 208 |
| 5.3 光通过介质的现象           | 209 |
| 5.3.1 折射率              | 210 |
| 5.3.2 光的反射和透射          | 212 |

|                                 |            |
|---------------------------------|------------|
| 5.3.3 光的色散 .....                | 214        |
| 5.3.4 光的吸收 .....                | 215        |
| 5.3.5 光的散射 .....                | 219        |
| 5.3.6 无机材料的透光性 .....            | 223        |
| 5.4 材料的光发射 .....                | 226        |
| 5.4.1 激励方式 .....                | 226        |
| 5.4.2 材料发光的基本性质 .....           | 227        |
| 5.4.3 发光的物理机制 .....             | 229        |
| 5.5 材料的受激辐射和激光 .....            | 230        |
| 5.5.1 受激辐射 .....                | 231        |
| 5.5.2 激光产生的基本条件 .....           | 232        |
| 5.5.3 激光器的种类 .....              | 235        |
| 5.6 光纤、光电效应和非线性光学 .....         | 236        |
| 5.6.1 光导纤维 .....                | 236        |
| 5.6.2 光电效应与太阳能电池 .....          | 239        |
| 5.6.3 非线性光学 .....               | 243        |
| 5.7 几种常用的光谱分析方法 .....           | 247        |
| 5.7.1 紫外-可见分光光度计法 .....         | 247        |
| 5.7.2 拉曼光谱 .....                | 250        |
| 5.7.3 荧光分析法 .....               | 255        |
| 参考文献 .....                      | 258        |
| 思考练习题 .....                     | 259        |
| <b>第 6 章 材料的介电性能 .....</b>      | <b>260</b> |
| 6.1 介质的极化 .....                 | 260        |
| 6.1.1 介质极化的基本概念和相关物理量 .....     | 260        |
| 6.1.2 电介质的极化类型 .....            | 263        |
| 6.1.3 电介质中的有效场和克劳修斯-莫索提方程 ..... | 268        |
| 6.2 交变电场中的电介质 .....             | 270        |
| 6.2.1 介电弛豫 .....                | 270        |
| 6.2.2 交变电场下的介质损耗和复介电常数 .....    | 271        |
| 6.2.3 介质损耗和介电常数与外加电场频率的关系 ..... | 274        |

|                      |     |
|----------------------|-----|
| 6.3 电介质的击穿           | 275 |
| 6.3.1 击穿电场强度         | 275 |
| 6.3.2 固体电介质的击穿       | 276 |
| 6.3.3 影响材料击穿强度的因素    | 279 |
| 6.4 压电材料             | 281 |
| 6.4.1 压电效应           | 281 |
| 6.4.2 压电材料主要的表征参数    | 283 |
| 6.4.3 压电材料的应用        | 285 |
| 6.5 铁电材料             | 287 |
| 6.5.1 铁电体、电畴         | 287 |
| 6.5.2 铁电性的起源与晶体结构    | 290 |
| 6.5.3 铁电材料及其应用       | 291 |
| 6.6 介电性能的测试          | 294 |
| 6.6.1 绝缘电阻率测试        | 294 |
| 6.6.2 介电常数和损耗的测量     | 295 |
| 6.6.3 介电强度的测定        | 298 |
| 6.6.4 压电性的测量         | 299 |
| 6.6.5 铁电体电滞回线的测量     | 299 |
| 参考文献                 | 300 |
| 思考练习题                | 300 |
| 第 7 章 纳米微粒材料的物理性能    | 301 |
| 7.1 概述               | 301 |
| 7.1.1 纳米材料的分类        | 301 |
| 7.1.2 纳米材料的性能        | 302 |
| 7.2 纳米材料的基本理论        | 302 |
| 7.2.1 Kubo 理论与量子尺寸效应 | 302 |
| 7.2.2 小尺寸效应          | 305 |
| 7.2.3 表面效应           | 306 |
| 7.2.4 宏观量子隧道效应       | 307 |
| 7.2.5 介电限域效应         | 307 |
| 7.2.6 库仑阻塞与量子隧穿      | 308 |
| 7.3 纳米微粒的物理性能        | 309 |
| 7.3.1 热学性能           | 309 |

|                              |            |
|------------------------------|------------|
| 7.3.2 磁学性能 .....             | 311        |
| 7.3.3 导电性能 .....             | 313        |
| 7.3.4 光学性能 .....             | 315        |
| 参考文献 .....                   | 321        |
| 思考练习题 .....                  | 321        |
| <b>第 8 章 薄膜材料的物理性能</b> ..... | <b>322</b> |
| 8.1 薄膜材料的特殊性 .....           | 322        |
| 8.2 薄膜材料的分类 .....            | 324        |
| 8.3 薄膜的成核长大理论 .....          | 325        |
| 8.3.1 体相中均匀成核 .....          | 326        |
| 8.3.2 衬底上的非均匀成核 .....        | 327        |
| 8.4 薄膜的形成与生长 .....           | 329        |
| 8.5 薄膜的结构 .....              | 332        |
| 8.5.1 组织结构 .....             | 332        |
| 8.5.2 薄膜的晶体结构 .....          | 335        |
| 8.5.3 表面结构 .....             | 336        |
| 8.6 薄膜中的缺陷 .....             | 337        |
| 8.6.1 点缺陷 .....              | 337        |
| 8.6.2 位错 .....               | 338        |
| 8.6.3 晶界 .....               | 339        |
| 8.6.4 层错缺陷 .....             | 340        |
| 8.7 金属薄膜电导性能 .....           | 340        |
| 8.8 半导体氧化物薄膜的光学性能 .....      | 343        |
| 8.8.1 薄膜厚度的影响 .....          | 343        |
| 8.8.2 掺杂量的影响 .....           | 345        |
| 8.8.3 基片温度的影响 .....          | 347        |
| 8.9 薄膜的磁性 .....              | 348        |
| 8.9.1 饱和磁化强度 .....           | 348        |
| 8.9.2 磁各向异性 .....            | 349        |
| 8.9.3 磁畴结构和磁畴壁 .....         | 350        |
| 8.9.4 多层膜的矫顽力 .....          | 351        |
| 8.10 薄膜的介电性能 .....           | 352        |
| 8.10.1 薄膜的介电常数 .....         | 352        |
| 8.10.2 薄膜的损耗 .....           | 354        |

|                                |     |
|--------------------------------|-----|
| 8.10.3 薄膜的击穿 .....             | 355 |
| 参考文献 .....                     | 358 |
| 思考练习题 .....                    | 358 |
| <b>第 9 章 纳米材料的测试与表征</b> .....  | 359 |
| 9.1 纳米材料的形貌分析 .....            | 359 |
| 9.1.1 扫描电子显微镜 .....            | 360 |
| 9.1.2 透射电子显微镜 .....            | 361 |
| 9.1.3 扫描隧道显微镜 .....            | 364 |
| 9.1.4 原子力显微镜 .....             | 366 |
| 9.2 纳米材料的粒度分析 .....            | 368 |
| 9.2.1 粒度分析的概念 .....            | 368 |
| 9.2.2 粒度分析方法 .....             | 368 |
| 9.3 纳米材料的结构分析 .....            | 370 |
| 9.3.1 X 射线衍射 .....             | 370 |
| 9.3.2 电子衍射分析 .....             | 371 |
| 9.4 纳米材料的成分分析 .....            | 374 |
| 9.4.1 体相元素成分分析 .....           | 374 |
| 9.4.2 表面与微区成分分析 .....          | 377 |
| 参考文献 .....                     | 387 |
| 思考练习题 .....                    | 387 |
| <b>附录 A 固体电子论基础知识概述</b> .....  | 388 |
| A.1 电子的波动性与量子自由电子理论 .....      | 388 |
| A.1.1 电子的波粒二象性 .....           | 388 |
| A.1.2 量子自由电子理论 .....           | 389 |
| A.2 晶体能带理论 .....               | 397 |
| A.2.1 引言 .....                 | 397 |
| A.2.2 布洛赫定理 .....              | 398 |
| A.2.3 潘纳-克龙尼克模型 .....          | 399 |
| A.2.4 一维周期场中电子运动的近自由电子近似 ..... | 401 |
| A.2.5 晶体的布里渊区 .....            | 406 |
| A.2.6 导体、绝缘体和半导体的能带模型 .....    | 407 |
| <b>附录 B</b> .....              | 412 |

# 第 1 章 晶体学基础与晶体结构

虽然材料的物理性能受到许多方面因素的影响, 是一个十分复杂的问题, 但长期的实践和探索研究表明: 决定材料物理性能的基本因素是它们内部的微观构造, 这就促使人们致力于材料内部构造的研究。

要了解材料内部的微观构造, 首先必须掌握其晶体构造情况, 包括晶体中原子是如何相互作用和结合起来的、原子的聚集状态和分布规律、各种晶体的特点和彼此之间的差异等。因此, 研究分析材料晶体的内部结构已成为研究材料的一个重要方面, 许多问题的认识 and 解决都与它密切相关。故要掌握材料的物理性能, 首先必须掌握好晶体结构方面的知识, 作为进一步学习其他内容的重要基础。

## 1.1 晶体学基础

### 1.1.1 晶体与非晶体

固态物质按其原子 (或分子) 的聚集状态可分为两大类: 晶体或非晶体。虽然我们看到自然界的许多晶体具有规则的外形 (如天然金刚石、结晶盐、水晶等), 但是晶体的外形不一定是规则的, 这与晶体的形成条件有关, 如果形成条件不具备, 其外形也就变得不规则。所以, 区分晶体还是非晶体, 不能根据它们的外观, 而应从其内部的原子排列情况来确定。在晶体中, 原子 (或分子) 在三维空间具有规则的周期性重复排列, 而非晶体就不具有这一特点, 这是二者的根本区别。应用 X 射线衍射、电子衍射等实验方法不仅可以证实这个区别, 还能确定各种晶体中原子排列的具体方式 (即晶体结构的类型)、原子间距等关于晶体的许多重要信息。

显然, 气体和液体都是非晶体。在液体中, 原子也处于紧密聚集的状态, 但不存在长程的周期性排列。固态的非晶体实际上是一种过冷状态的液体, 只是其物理性质不同于平常的液体而已。玻璃就是一个典型的例子, 故往往将非晶态的固体称为玻璃体。从液态到非晶态固体的转变是逐渐过渡的, 没有明显的凝固点 (反之亦然, 也无明显的熔点), 而液体转变为晶体则是突变的, 有一定的凝固点和熔点。非晶体的另一特点是沿任何方向测定其性能, 其结果都是一致的, 不因方向而异, 称为各向同性或等向性。晶体就不是这样, 沿着晶体的不同方向所测得的性能并不相同 (如导电性、导热性、热膨胀性、弹性、强度、光学数据以及外表面的化学性质等), 称为各向异性或异向性。晶体的异向性是其原子的规则排列而造成的。

非晶体在一定条件下可转化为晶体。例如, 玻璃经高温长时间加热后能形成晶态玻璃, 而如果将通常呈晶体的物质从液态快速冷却下来也可能得到非晶体。原子按同一取向排列, 由一个核心 (称为晶核) 生长而成的晶体称为单晶体。一些天然晶体, 如金刚石、水晶等; 半导体工业用的单晶硅、锗等都是单晶体。多晶体则是由许多不同位向的小晶体 (晶粒) 所组成, 晶粒与晶粒之间的界面称为晶界, 图 1.1 是多晶体各晶粒的位向示意图。多晶材料通常不显示出各向异性, 这是因为它包含大量的彼此位向不同的晶粒, 虽然每个晶粒有异向性, 但整块材料的性能则是它们性能的平均值, 故表现为各向同性, 这种情况称为假等向性。在某些特定条件下, 如定向凝固等, 使各晶粒的位向趋于一致, 则其异向性又会显示出来。

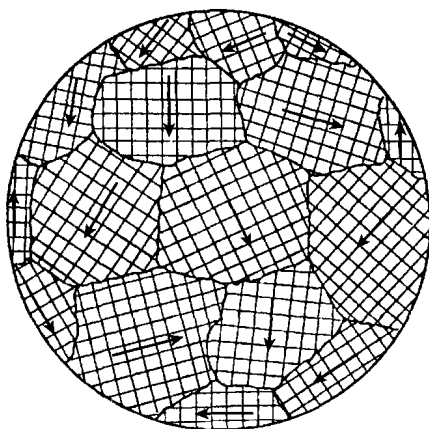


图 1.1 多晶体各晶粒的位向示意图

### 1.1.2 空间点阵和晶胞

材料的许多特性都与晶体中原子 (分子或离子) 的排列方式有关, 因此分析材料的晶体结构是研究材料的一个重要方面。为了便于研究和描述晶体内原子 (分子或离子) 的排列规律, 通常把原子 (分子或离子) 视为刚性小球, 并把不停热振动的原子 (分子或离子) 看成在其平衡位置上静止不动, 且处在振动中心, 如图 1.2(a) 所示。把晶体中的原子 (分子或离子) 抽象为规则排列于空间的几何点, 这些阵点可以是原子 (分子或离子) 的中心, 也可以是彼此等同的原子群或分子群的中心, 但各阵点的周围环境都必须相同。这些由无数几何点在三维空间排列成规整的阵列, 称为空间点阵, 点阵中的点子称为阵点或结点。为了观察方便, 可用一系列平行直线将阵点连接起来, 形成一个三维的空间格架, 称为晶格 (crystalline lattice) 或空间格子, 如图 1.2(b) 所示。显然, 某一空间点阵中, 各阵点在空间的位置是一定的, 阵点是构成空间点阵的基本要素。

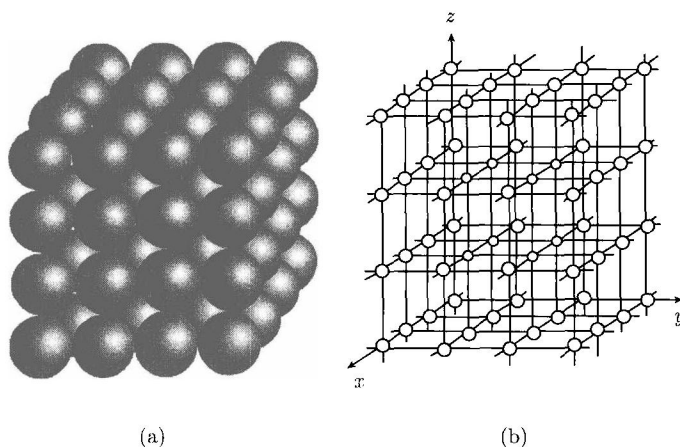


图 1.2 晶体中原子排列示意图

(a) 原子排列模型; (b) 晶格

从图 1.2 可以看出, 位于同一直线上的阵点, 每隔一个相等的距离就重复出现; 同样, 位于同一平面上的阵点构成了二维的点阵平面, 将点阵平面沿一定方向平移一定距离, 其阵点也具有重复性. 总之, 由于各阵点的周围环境相同, 空间点阵具有周期重复性. 因此, 为了说明点阵排列的规律和特点, 可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 (通常是取一个最小的平行六面体), 称为晶胞. 可见, 将晶胞作三维的重复堆砌就构成了空间点阵. 同一空间点阵可因选取方式不同而得到不同的晶胞, 图 1.3 表示出在一个二维点阵中取出的不同晶胞. 为此, 要求在选取晶胞时应能尽量反映出该点阵的对称性, 一般是选取只在每个角上有一阵点的最小平行六面体作为晶胞, 称为初级晶胞或单位晶胞,

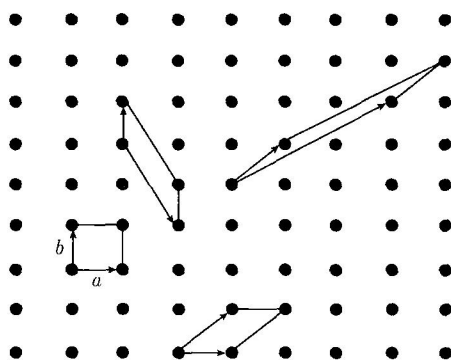


图 1.3 在点阵中选取晶胞

如图 1.4 所示. 有时为了更好地表现出点阵的对称性, 也可不取简单晶胞而使晶胞中心或面的中心也存在有阵点, 如体心 (在六面体的中心有一阵点)、面心 (在六面体的每个面中心有一阵点) 或底心 (在上、下底面中心各有一阵点) 的晶胞.

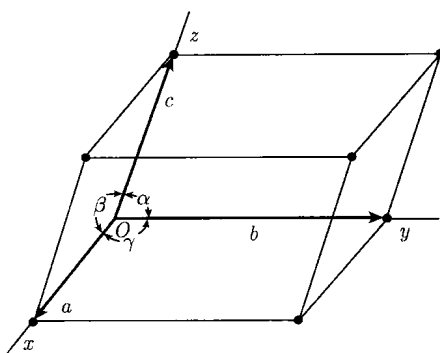


图 1.4 晶胞、晶轴和点阵矢量

为了描述单位晶胞的大小和形状, 以单位晶胞角上的某一阵点为原点, 以该单位晶胞上过原点的三个棱边作为坐标轴  $x$ 、 $y$ 、 $z$  (称为晶轴), 则单位晶胞的大小和形状就由这三条棱边的边长  $a$ 、 $b$ 、 $c$  (称为晶格常数或点阵常数) 及晶轴之间的夹角  $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$  这六个参数完全表达出来. 事实上, 采用三个点阵矢量  $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{b}$ 、 $\mathbf{c}$  来描述晶胞将更为方便. 这三个矢量不仅确定了晶胞的形状和大小, 而且完全确定了此空间点阵. 只要任选一个阵点为原点, 以这三个矢量作平移 (即平移的方向和单位距离由点阵矢量所规定), 就可确定空间点阵中任何一个阵点的位置

$$\mathbf{r}_{uvw} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c} \quad (1.1)$$

式中,  $\mathbf{r}_{uvw}$  为从原点到某一阵点的矢量;  $u$ 、 $v$ 、 $w$  分别为沿三个点阵矢量的平移量, 即该点阵的坐标.

### 1.1.3 七大晶系与十四种布拉维点阵

在晶体学中, 常按单位晶胞中的六个参数 ( $a$ 、 $b$ 、 $c$ 、 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ ) 将晶体进行分类, 分类时只考虑  $a$ 、 $b$ 、 $c$  是否相等,  $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$  是否相等以及它们是否成直角等方面的特征, 而不涉及单位晶胞内原子的具体排列情况, 这样就将晶体划分成七种类型即七个晶系, 所有的晶体均可归纳在这七个晶系中.

布拉维 (A.Bravais) 在 1948 年根据 “每个阵点具有相同的周围环境” 的要求, 用数学分析方法证明晶体中的阵点排列方式只有 14 种, 这 14 种空间点阵就称为布拉维点阵, 它们分别属于七个晶系, 如表 1.1 所示, 它们的晶胞如图 1.5 所示.