

材料科学与技术丛书

R. W. 卡恩 P. 哈森 E. J. 克雷默 主编

(第1卷)

固体结构

(德) V. 杰罗德 主编

科学出版社



材料科学与技术丛书(第 1 卷)

R. W. 卡恩 P. 哈森 E. J. 克雷默 主编

固 体 结 构

[德]V. 杰罗德 主编

王佩璇 等 译
朱逢吾 校

科 学 出 版 社

1 9 9 8

图字:01-97-1610 号

图书在版编目(CIP)数据

固体结构 第1卷/[德] V. 杰罗德 (Gerold, V.) 主编, 王佩璇等译.-北京: 科学出版社, 1998.6
(材料科学与技术丛书: 第1卷)
书名原文: Structure of Solids
ISBN 7-03-006447-X

I. 固… I. ①杰… ②王… II. 固体-结构 IV.O481

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (97) 第 27767 号

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

北京双青印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1998年6月第 一 版 开本:787×1092 1/16
1998年6月第一次印刷 印张:36
印数:1—2500 字数:830 000

定价:80.00 元

Materials science and technology; a comprehensive treatment/ed. by R. W. Cahn ... -Weinheim; New York; Basel; Cambridge: VCH.

Structure of solids / Vol. ed. : Volkmar Gerold. -Weinheim; New York; Basel; Cambridge: VCH, 1993

(Materials science and technology; Vol. 1)

© VCH Verlagsgesellschaft mbH, D-6940 Weinheim (Federal Republic of Germany), 1993

《材料科学与技术》丛书 中文版编委会

主编

师昌绪 国家自然科学基金委员会
柯俊 北京科技大学
R. W. 卡恩 英国剑桥大学

成员 (以姓氏笔画为序)

丁道云 中南工业大学
干福熹 中国科学院上海光机研究所
叶恒强 中国科学院金属研究所
刘嘉禾 北京钢铁研究总院
朱逢吾 北京科技大学
朱鹤孙 北京理工大学
吴人洁 上海交通大学
闵乃本 南京大学
周邦新 中国核动力研究设计院
柯伟 中国科学院金属腐蚀与防护研究所
施良和 中国科学院化学研究所
郭景坤 中国科学院上海硅酸盐研究所
徐僊 四川大学
徐元森 中国科学院上海冶金研究所
黄勇 清华大学
屠海令 北京有色金属研究总院
雷廷权 哈尔滨工业大学
詹文山 中国科学院物理研究所
颜鸣皋 北京航空材料研究院

总 译 序

20 世纪 80 年代末,英国剑桥大学的 R. W. 卡恩教授、德国哥丁根大学的 P. 哈森教授和美国康乃尔大学的 E. J. 克雷默教授共同主编了《材料科学与技术》(Materials Science and Technology)丛书。该丛书是自美国麻省理工学院于 80 年代中期编写的《材料科学与工程百科全书》(Encyclopedia of Materials Science and Engineering)问世以来的又一部有关材料科学和技术方面的巨著。该丛书全面系统地论述了材料的形成机理、生产工艺及国际公认的科研成果,既深刻阐述了有关的基础理论,具有很高的学术水平,又密切结合生产实际,实用价值较强。

该丛书共 19 卷(23 分册),分三大部分:第 1~6 卷主要阐述材料科学的基础理论;第 7~14 卷重点介绍材料的基本性能及实际应用;第 15~19 卷则着重论述材料的最新加工方法和工艺。

该丛书覆盖了现代材料科学的各个领域,系统而深入地对材料科学和技术的各个方面进行了精辟的论述,并附以大量图表加以说明,使其内容更加全面、翔实,论述也比较严谨、简洁。

有 400 余名国际知名学者、相关领域的学术带头人主持或参加了该丛书的撰写工作,从而使该丛书具有很高的权威性和知名度。

该丛书各卷都附有大量参考文献,从而为科技工作者进一步深入探讨提供了便利。

随着我国科学技术的飞速发展,我国从事与材料有关研究的科技人员约占全部科技人员的 1/3,国内现有的有关材料科学方面的著作远远满足不了广大科技人员的需求。因此,把该丛书译成中文出版,不但适应我国国情,可以满足广大科技人员的需要,而且必将促进我国材料科学技术的发展。

基于此,几年前我们就倡议购买该丛书的版权。科学出版社与德国 VCH 出版社经过谈判,于 1996 年 10 月达成协议,该丛书的中文版由科学出版社独家出版。

为使该丛书中文版尽快与广大读者见面,我们成立了以师昌绪、柯俊、R. W. 卡恩为主编,各分卷主编为编委的中文版编委会。为保证翻译质量,各卷均由国内在本领域学术造诣较深的教授或研究员主持有关内容的翻译与审核工作。

本丛书的出版与中国科学院郭传杰研究员的帮助和支持是分不开的,他作为长期从事材料科学研究的学者,十分理解出版本丛书的重大意义,购买本

丛书版权的经费问题就是在他的大力协助下解决的，特此对他表示感谢。另外，本丛书中文版的翻译稿酬由各卷主编自筹，或出自有关课题组和单位，我们对他们给予的支持和帮助表示衷心的感谢。

我们还要感谢中国科学院外籍院士、英国皇家学会会员 R. W. 卡恩教授，他以对中国人民的诚挚友谊和对我国材料科学发展的深切关怀，为达成版权协议做出了很大努力。

材料是国民经济发展、国力增强的重要基础，它关系着民族复兴的大业。最近几年，我国传统材料的技术改造，以及新型材料的研究正在蓬勃展开。为适应这一形势，国内科技界尽管编著出版了不少材料科学技术方面的丛书、工具书等，有的已具有较高水平，但由于这一领域的广泛性和迅速发展，这些努力还是不能满足科技工作者进一步提高的迫切要求，以及我国生产和研究工作的需要。他山之石，可以攻玉。在我国造诣较深的学者的共同努力下，众煦漂山，集腋成裘，将这套代表当代科技发展水平的大型丛书译成中文。我们相信，本丛书的出版，必将得到我国广大材料科技工作者的热烈欢迎。

为了使本丛书尽快问世，原著插图中的英文说明一律未译，各卷索引仍引用原著的页码，这些页码大致标注在与译文相应的位置上，以备核查。

由于本丛书内容丰富，涉及多门学科，加之受时间所限，故译文中难免存在疏漏及不足之处，请读者指正。

师昌绪

柯俊

1998年3月于北京

丛书序

材料是多种多样的,如金属、陶瓷、电子材料、塑料和复合材料,它们在制备和使用过程中的许多概念、现象和转变都惊人地相似。诸如相变机理、缺陷行为、平衡热力学、扩散、流动和断裂机理、界面的精细结构与行为、晶体和玻璃的结构以及它们之间的关系、不同类型材料中的电子的迁移与禁锢、原子聚集体的统计力学或磁自旋等的概念,不仅用来说明最早研究过的单个材料的行为,而且也用来说明初看起来毫不相干的其它材料的行为。

正是由于各材料之间相互有机联系而诞生的材料科学,现在已成为一门独立的学科以及各组成学科的聚集体。这本新的丛书就是企图阐明这一新学科的现状,定义它的性质和范围,以及对它的主要组成论题提供一个综合的概述。

材料技术(有时称材料工程)更注重实际。材料技术与材料科学相互补充,主要论及材料的工艺。目前,它已变成一门极复杂的技艺,特别是对新的学科诸如半导体、聚合物和先进陶瓷(事实上对古老的材料)也是如此。于是读者会发现,现代钢铁的冶炼与工艺已远超越古老的经验操作了。

当然,其它的书籍中也会论及这些题目,它们往往来自百科全书、年报、专题文章和期刊的个别评论之中。这些内容主要是供专家(或想成为专家的人)阅读。我们的目的并非是贬低同行们在材料科学与技术方面的这些资料,而是想创立自己的丛书,以便放在手边经常参考或系统阅读;同时我们尽力加快出版,以保证先出的几卷与后出的几卷在时效方面有所衔接。个别的章节是较之百科全书和综述文章讨论得更为详细,而较之专题文章为简略。

本丛书直接面向的广大读者,不仅包括材料科学工作者和工程师,而且也针对活跃在其它学科诸如固体物理、固体化学、冶金学、建筑工程、电气工程和电子学、能源技术、聚合物科学与工程的人们。

本丛书的分类主要基于材料的类型和工艺模式,有些卷着眼于应用(核材料、生物材料),有些卷则偏重于性能(相变、表征、塑性变形和断裂)。有些题材的不同方面有时会被安排在两卷或多卷中,而有些题材则集中于一专卷内(如有关腐蚀的论述就是编在第7卷的一章中,有关粘结的论述则是编在第12卷的一章中)。编者们特别注意到卷内与卷间的相互引证。作为一个整体,本丛书完成时将刊出一卷累积的索引,以便查阅。

我们非常感谢VCH出版社的编辑和生产人员,他们为收集资料并最后出

书,对这样繁重的任务作出了大量而又高效的贡献。对编辑方的 Peter Gregory 博士和 Deborah Hollis 博士、生产方的 Hans-Jochen Schmitt 经济学工程师表示我们的特别谢意。我们亦感谢 VCH 出版社的经理们对我们的信任和坚定的支持。

R. W. 卡恩 (Cambridge)

P. 哈森 (Göttingen)

E. J. 克雷默 (Ithaca)

1992 年 11 月

前 言

顾名思义,本丛书书名表明这套书论述材料的性能。一种特殊材料的性能与其原子结构和显微组织密切相关。本卷论述固体材料结构的基本方面。大部分固体是晶态的,所以除一章外,其它各章均讨论晶态及其缺陷,它们对许多性能是重要的。单独有一章讨论快淬金属合金中发现的非晶态。本卷对没有涉及构成材料一大类的聚合物,第12卷对它们进行了广泛讨论。本卷如此安排重点,可能是因为材料科学最初起源于金属科学和物理冶金,而不是聚合物科学。

为描述固体的晶体结构,人们需要知道哪些量和参数是必须的,以及如何对分类晶体结构进行分类。这是第1章的主题,即关于晶体学方面的,它包括晶系的分类学,以及点群和空间群及其借助于晶面(即倒易点阵)的十分重要的描述。这对理解由波长和原子间距相近的辐射(如X射线、电子或中子)与晶体点阵相互作用形成的衍射花样是必不可少的。第2A卷对后一主题进行了详细的讨论。最近发现了物质的一种新状态——准晶,它们主要以快速淬火合金的方法产生,是一种亚稳态。它们具有5次或10次对称性,这在严格周期性晶体中是不允许的,因而引起了人们特殊的兴趣。对这些准晶的晶体学描述极为复杂,正如这一章最后一节所描述,它们可以被视为是 N 维点阵的三维投影。

第2章介绍晶体结构的电子理论,它提供必要的理论概念,以理解为什么存在不同类型的点阵。这一章用尽量少的方程和许多图表显示复杂计算的结果。令人惊奇的是,即使从相对简单的理论模型出发也能得到不少结论。第3章则试图对许多金属间化合物和中间相,包括某些陶瓷材料,进行系统的晶体学描述。这些相的数目极多,要在简单的一章中给出全面评述并指明不同结构种类之间的关系,是十分困难的任务。

非晶态变得越来越重要,因为快淬技术已开始在生产线中应用。金属熔体的快淬常常形成具有非晶原子结构的固态物质。由于它们与液态结构极为相似,因此第4章也讨论了液态结构。有关快速凝固的更多细节可参见第15卷第2章。

本卷其余5章描述晶态中各种缺陷的结构。最通常的“缺陷”是点阵振动,起源于固体的非零温度。该现象在第5章讨论,那里概括介绍为了得到有关各种材料振动谱信息所用的理论和实验方法。点缺陷对固体中的扩散过程十分重要。第6章讨论金属与离子晶体中的点缺陷,如空位、自间隙原子和杂质原

子,包括辐照损伤(即高能粒子辐照)引起的缺陷。有关共价晶体(半导体)点缺陷的细节,请读者参阅第4卷。另一种重要性能是塑性变形(见第6卷),在大多数情况下,它受线缺陷位错运动的支配。第7章讨论位错,其运动强烈依赖于其芯部,即畸变中心的原子结构,而它又主要取决于晶体结构。针对纯金属的三种晶体结构、有序合金以及离子和共价晶体,我们讨论了这一特殊问题。

最后两章介绍重要的二维缺陷,即晶体的表面和界面。第8章集中在表面的几何形貌,详细讨论清洁表面和被吸附原子覆盖的表面。由杂质引起的这些表面各种可能的弛豫和重构形成该章十分有趣的一节。众所周知,晶体中的界面或者是隔开相同晶体的同相界面(晶界),或者是隔开不同类型晶体的异相界面,第9章介绍界面的有关理论,即原子结构的计算模型以及实验结果,包括从X射线法和高分辨电子显微术(即点阵成像技术)得到的资料。这些实验方法的细节可参阅第2A卷第1章(那里也讨论有关堆垛层错结构的结果)和第8章。有关半导体中晶界结构的更详细情况见第4卷第7章。

V. 杰罗德

Stuttgart'1992年10月

目 录

1	周期点阵和准晶中的对称元素	(1)
2	晶体结构的电子理论	(54)
3	金属间化合物及中间相的结构	(110)
4	非晶态和熔融态合金的结构	(192)
5	点阵动力学	(253)
6	晶体中的点缺陷	(312)
7	晶体中的位错	(359)
8	晶体表面	(422)
9	晶态固体中界面的结构	(465)
索 引		(526)

1 周期点阵和准晶中的对称元素

Walter Steurer

Institut für Kristallographie und Mineralogie,
Universität München, München, Federal Republic of Germany

(王蓉译 朱逢吾校)

目录

1.1 引言	4
1.2 晶体的对称性	7
1.2.1 形态	7
1.2.2 晶体轴向	9
1.2.3 晶面 米勒指数	10
1.2.4 晶带与晶形	12
1.2.5 对称元素	14
1.2.6 外部形状与内部结构	17
1.3 晶体点阵对称性	18
1.3.1 晶体图案,矢量和点阵	18
1.3.2 7个晶系	19
1.3.3 14种 Bravais 点阵	19
1.3.4 倒易点阵	22
1.3.5 点阵的拓扑性质	24
1.3.6 点阵变换:轴、指数和坐标	25
1.4 晶体学点群对称	25
1.4.1 群论术语	25
1.4.2 对称操作	27
1.4.3 32种晶体学点群	28
1.5 晶体学空间群对称	31
1.5.1 对称操作	31
1.5.2 230种空间群	34
1.5.3 Wyckoff 位置和位置对称	36
1.5.4 晶体学轨道和点阵丛	36
1.5.5 空间群的子群与超群	40
1.5.6 《国际晶体学表》中空间群对称的表示	40
1.6 准晶	42
1.6.1 形态学	43

1.6.2 准周期拼砌·····	43
1.6.2.1 Fibonacci 链·····	45
1.6.2.2 Penrose 拼砌·····	46
1.6.3 拼砌的装饰·····	47
1.6.4 非晶体学点群对称·····	48
1.6.5 n 维晶体学·····	48
1.6.5.1 对称操作·····	51
1.6.5.2 一些二十面体结构的空間群·····	52
1.7 感谢·····	52
1.8 参考文献·····	53

符号与缩语表

a, b, c	Wyckoff 位置
a, b, c, n, d	平移分量分别为 $a/2, b/2, c/2, (a+b)/2 \cdots, (a+b+c)/2 \cdots$ 的滑移面
a, m, o, t, h, c	晶系(族)的符号
a, b, c , 或 a_i	正点阵基矢, $i=1, 2, 3$
a, b, c 或 a_i	正点阵基矢的长度, 单胞参数, $i=1, 2, 3$
a_n	Fibonacci 数
D	对角矩阵
d_{hkl}	晶面间距
e	群的单位元素
G	度规张量
G	一般群符号
g_E, g_I	六维空間群元素
g_k, h_k	群元素
$g_{i,k}$	G 的元素
H	倒易点阵矢量
(hkl)	晶面的米勒指数或倒易点阵矢量 H 的分量
$\{hkl\}$	晶形指数
$(hkil)$	六角点阵晶面的 Bravais-Miller 指数
$\{hkil\}$	六角点阵晶形的 Bravais-Miller 指数
k	群的阶
K	阶为 k 的点群
L, S	长间隔, 短间隔
m	反映(镜)面
M	基矢为 a, b, c 的矢量点阵
m_{xy}	垂直于 x, y 的反映面
(mno)	晶面的 Weiss 指数

P	转换矩阵
P, A, B, C, I, F, R	单胞有心类型的符号 (Bravais 点阵类型)
r, r	位置矢量和它的长度
R	旋转矩阵
R_E, R_I	旋转矩阵的外禀和内禀空间分量
t	平移矢量
T	无限阶的平移群
u, v, w	点阵矢量的整数坐标
$[uvw]$	方向(带轴)指数
V	单胞体积
V_E, V_I	n 维空间的外禀和内禀分量
x, y, z 或 x_i	点的坐标, $i=1, 2, 3$
$[xyz]$	正空间的矢量分量
z	带轴矢量
α, β, γ 或 α_i	轴间角, 单胞参数, $i=1, 2, 3$
$\Gamma(g_k)$	群元素 g_k 的矩阵表示
δ_{ij}	Kronecker 符号
$\rho(r)$	电子密度分布
τ	黄金分割值
$\varphi_{x,y,z}$	表征单位面(111)的角度
$\varphi(N)$	欧拉数
χ	特征符
$\psi_{x,y,z}$	面(mno)的法线与晶体坐标轴间夹角
$1, 2, 3, \dots, N$	N 次旋转轴
$2_1, \dots, N_m$	N 次螺旋轴
$\bar{1}$	对称中心, 反演中心
$\bar{3}, \bar{4}, \dots, \bar{N}$	旋转反演轴
$*$	表示倒易点阵的符号, 例如用 $*$ 标在基矢上
GDM	推广的双栅法
HRTEM	高分辨透射电子显微术
k	同晶类(klassengleich)(空间群子群的表征)
MI	形态学重要性
PBC	周期键合链
SHG	二次谐波发生
t	同平移(translationengleich)(空间群子群的表征)

1.1 引言

规则的晶体多面体一直都以其美丽、晶莹和完美的表面形状(图 1-1)令观察者着迷。它们的完美程度超过了一个熟练工匠的工作。巴比伦人和埃及人对于矿物和宝石的魔力和治疗作用的信仰一直延续到其它的文明时代,如文艺复兴时代。事实上,著名的学者、主教、“博学家”Albertus Magnus(1193—1280)在其 1276 年出版的著作“De Mineralibus et Rebus Metallicis Libri V”中已经提到了晶体的医疗特性。古代人们对于矿物的形成和组成的认识也日趋理性化。这反映在单词 $\chi\rho\upsilon\sigma\tau\alpha\lambda\lambda\omicron\varsigma$ 的使用上,它的意思类似于“凝固”。这个词最早仅用于冰,直到柏拉图(Platon, 公元前 428—348)时代才用于岩石晶体(石英)。

Georgius Agricola(1494—1555)是继古代观念之后克服中世纪时代神秘设想的学者



图 1-1 岩石晶体(石英, SiO_2). 单晶显示了晶面和三次对称(Hochleitner, 1981)

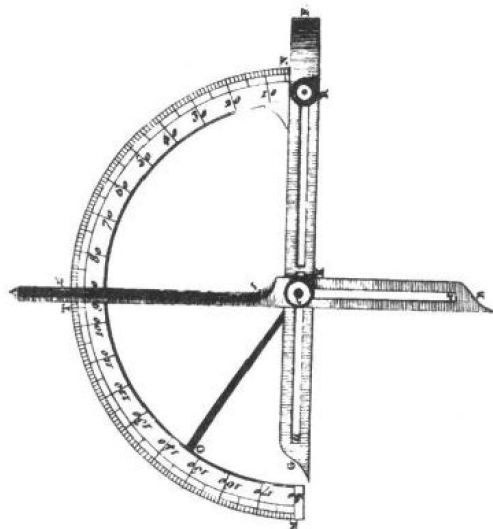


图 1-2 测量晶体面间角的古老的接触测角仪(Haüy, 1801)

之一。他的著作不仅仅收集了当时有关矿物的开采经验,还提出了许多晶体生长和特性的假说。再后来,晶体的外部形状和它们的形态越来越引起了人们的兴趣。因而, Niels Stensen(1636—1686)通过对结晶的研究发现晶体的生长与其形状之间存在某种关系,即晶体形态并非偶然。1669 年 Stensen 注意到像石英和赤铁矿这类晶体等价晶面之间存在晶面角守恒定律。然而,直到 1783 年该定律才由 Jean-Baptiste Rome'de l'Isle(1736—1790)给出明确的、普遍适用的公式表达。他使用一种接触式测角仪(图 1-2)测量角度验证了该假说。这种测角仪是由他的助手 Maurice Carangeot 于 1780 年制成的,并由此开拓了定量晶体形态学方法。1820 年 William Hyde

1) 为原著页码,仅供参考,下同。——译者注

Wollaston(1766—1829)使用光学测角仪大大提高了测量可能的精确度(从 1° 到 $1'$)。

• p. 6 •

Abbe' Rene' Just Haüy(1743—1822)的工作翻开了晶体学的新篇章,即他将晶体的内

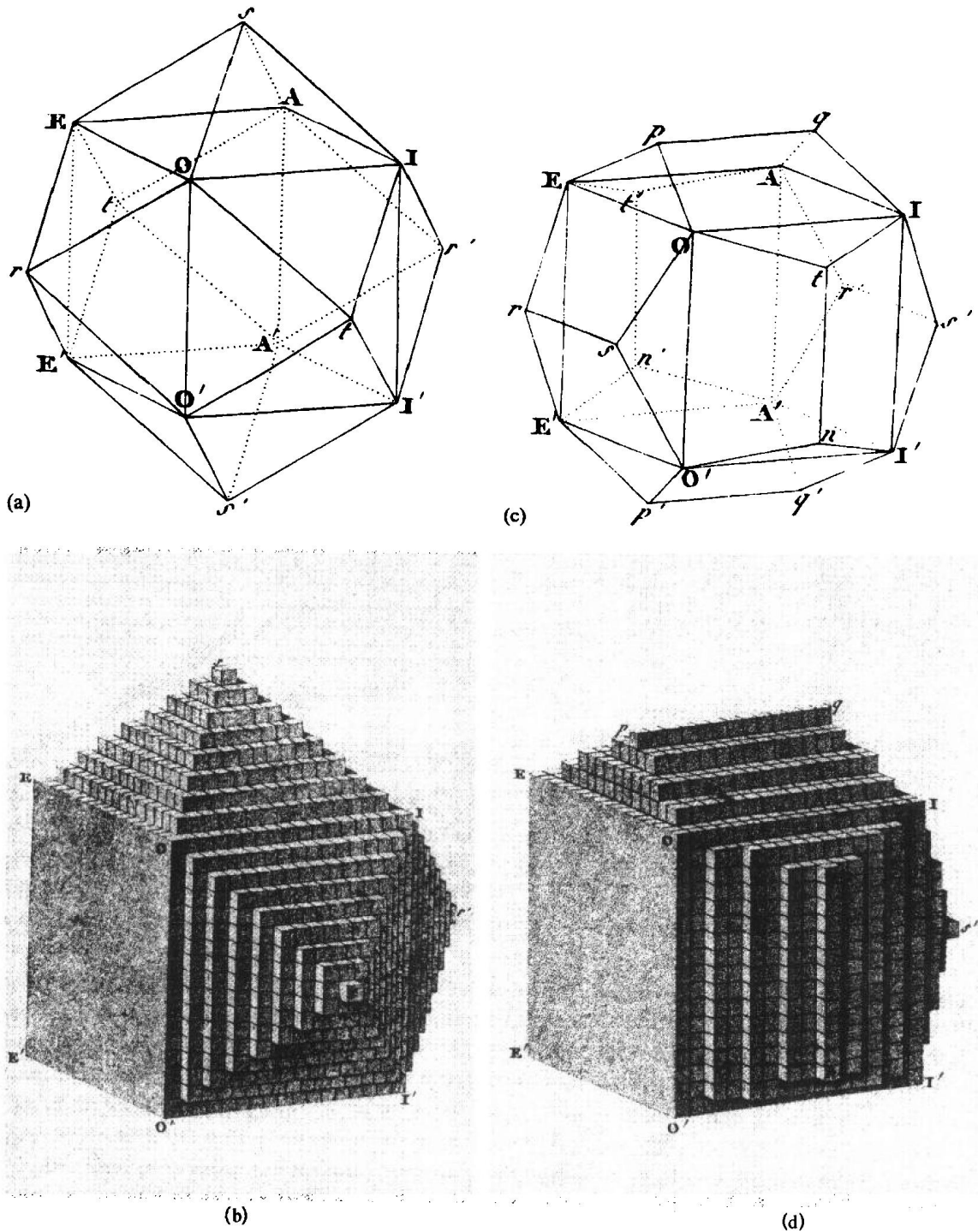


图 1-3 晶体生长的 Haüy 缩变理论:由相同的基本平行六面体(分子构造块)来构造的相同化学成分不同惯态面的晶体。晶体形状和用立方基本单元构造晶体的示意图:有内接立方体的(a)和(b)菱面十二面体;(c)和(d)五边形十二面体(Haüy, 1801)