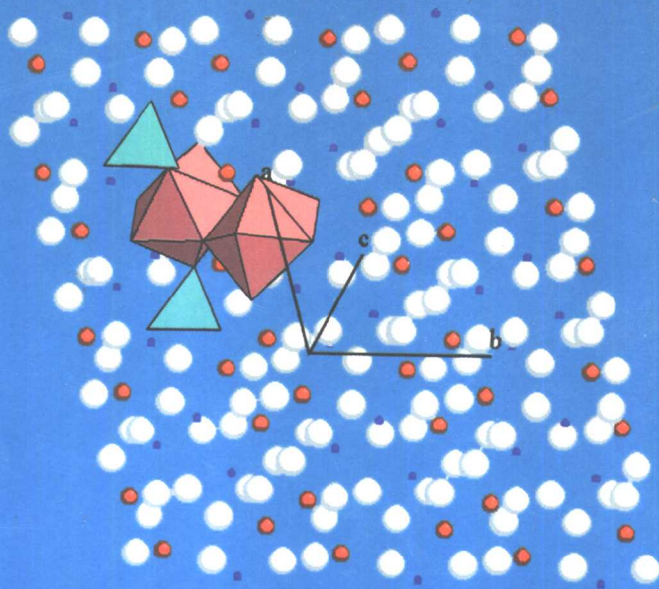


材料的结构

余永宁 毛卫民 编著

CAILIAO DE JIEGOU



冶金工业出版社

材 料 的 结 构

余永宁 毛卫民 编著

北 京
冶 金 工 业 出 版 社
2001

图书在版编目(CIP)数据

材料的结构/余永宁,毛卫民编著. —北京:冶金工业出版社,2001.10

ISBN 7-5024-2837-2

I. 材… II. ①余… ②毛… III. 工程材料—结构性能 IV. TB303

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 046102 号

材料的结构

出 版 人 曹胜利(北京市东城区沙滩嵩祝院北巷 39 号,邮编 100009)

著 者 余永宁 毛卫民 编著

责任编辑 张 卫(联系电话:010-64027930;E-mail:bull.zw@sina.com.cn)

李 梅(联系电话:010-64027928;E-mail:lee.m@263.net)

特邀编辑 黄淦祥

美术编辑 李 心

责任校对 侯 朋

责任印制 牛晓波

版式设计 宋京萍

出 版 冶金工业出版社(网址:www.cnmp.com)

发 行 冶金工业出版社发行部 电话:010-64044283;传真:010-64027893

冶金书店 地址:北京东四西大街 46 号 100711;电话:010-65289081

经 销 全国各地新华书店

印 刷 北京源海印刷厂

开 本 787mm×1092mm 1/16

印 张 25 印张

字 数 603 千字

页 数 383 页

版 次 2001 年 10 月第 1 版

印 次 2001 年 10 月第 1 次印刷

印 数 1~3000 册

书 号 ISBN 7-5024-2837-2/TC·292

定 价 49.00 元

(本社图书如有印装质量问题,本社发行部负责退换)

前 言

从广义上讲,用以制造有用物件的物质称为材料。世界上大多数材料均是晶体材料,我们每个人都与晶体材料密切相关。与晶体结构相关的知识是材料学科及相关学科重要的基础知识。近年来,晶体材料作为工程材料得到了突飞猛进的发展,各种新型材料及相关技术不断涌现,促使人们需要不断地提高对晶体材料的认识水平。

讨论材料的晶体结构一般分为晶体结构的完整性及晶体结构的非完整性两个部分,前者讨论完整晶体结构的基本规律,后者是在前者的基础上讨论晶体中出现的缺陷。从晶体结构的角度看,晶体的规则完整排列是主要的,非完整性(缺陷)是次要的;但是对于晶体的很多结构敏感性能来说,起主要作用的却是晶体的非完整性,其完整性居于次要地位。这时,晶体的完整性退居为舞台的背景,扮演主角的却是晶体缺陷。

对于完整晶体结构,在很多材料学的现有教科书或专业著作中,通常都有与材料相关的晶体学方面的介绍。由于重点在于材料学方面的内容,一些著作所介绍的晶体学知识往往比较简单,有时只注重或满足于为著作主体部分的引用服务。在这种情况下,如果读者的认识水平有限则难免会对材料晶体结构产生片面的理解或误解。目前在一些公开发表的文献上也时常看到对材料晶体结构比较含糊的描述,因而更容易引起认识上的混乱。对于晶体缺陷,同样在材料学及固体物理的教科书都有论述,也有不少的专著。教科书上对晶体缺陷的论述往往比较分散,并且各种教科书的侧重点不同。国内外现有的有关材料晶体结构及晶体缺陷的专著往往从纯晶体学或物理学的角度论述,一些著作过分偏重经典理论和数学描述,离工程实践较远,不大适合从事工程材料专业人员阅读。目前晶体材料已经在新的基础上得到了很大的发展,进而使人们对先进晶体材料也有了一些新的观念和研究方法。基于上述原因,作者试图在多年材料学专业“材料的晶体结构”课堂教学的经验和对先进金属材料科研工作的积累上,整理并编写一本既系统阐述材料结构的理论但又不过分涉及太多纯物理理论和数学推导的材料结构的书,以供从事工程材料研究的专业人员阅读和参考。

本书在讨论晶体的完整性方面,对晶体结构对称性的描述上注意了晶体点对称性和平移对称性必然的内在联系,并对晶体点阵常数作了相应的推导。为了便于读者了解空间群的概念,本书在介绍空间群时注重强调点群和商群的作用,并注意引用实际例证。与有机材料相比大多数无机材料的结构相对比较简单,因此本书适当介绍了晶体材料结构分析的一般原则和方法。同时根据先进金属材料的发展,本书注意介绍了原子概率占位的概念及相关的分析方法。由于晶体材料各向异性的开发与利用越来越受到人们的重视,因此本书对晶体材料各向异性的表述方法、理论计算原理及其实际应用也作了适当的介绍。本书在讨论晶体的非完整性方面,分别介绍晶体的点缺陷、线缺陷和面缺陷。除了介绍晶体缺陷的一般性结构理论外,还着重介绍一些典型晶体结构中的缺陷特点。本书主要讨论缺陷及其结构。为了使读者易于了解晶体缺陷的弹性性质,本书的附录简单介绍了一些张量和弹性理

论的基本知识。

总之,本书力争从材料工程的角度出发论述晶体基本的结构学问题,介绍晶体缺陷的基本知识,并注意增添一些晶体材料结构分析的新方法、新观念、新理论。希望本书能对我国相关材料的研究及相关专业教学的发展有积极的推动作用。

本书 1~5 章由毛卫民编写,其余各章由余永宁编写。

由于作者的认识水平有限,书中不妥之处,恳请读者给予指正。

作 者

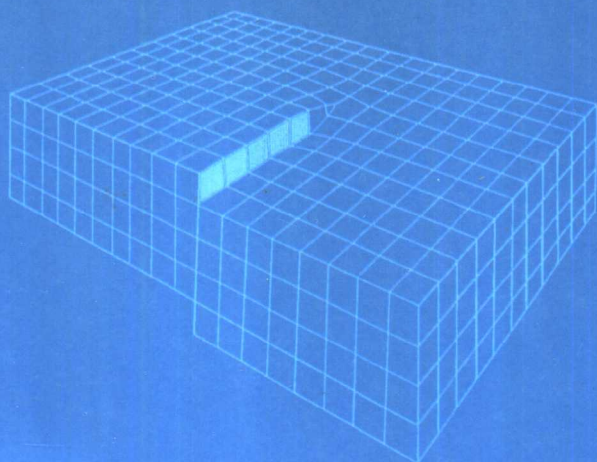
2001 年 6 月



内 容 简 介

本书较为系统地阐述了晶体材料的完整性结构及非完整性结构(缺陷)。在晶体的完整性方面,本书介绍了晶体的各种对称性和常见晶体结构,尤其对无机晶体结构及其表述方法作了较为细致的介绍。针对当前金属材料发展的方向,本书包含了先进金属材料结构分析的内容,介绍和分析了金属间化合物材料以及一些新材料的结构,同时还论述了晶体取向分析、定量计算以及理论模拟的方法等。在晶体的非完整性方面,本书介绍了晶体的点、线和面缺陷的结构,除了介绍其一般性结构理论外,对一些典型结构中的结构缺陷作了适当的讨论。本书的背景侧重于金属晶体材料。借助本书,读者可从材料工程角度,对材料晶体学、晶体结构和晶体缺陷知识有较深入的了解和一定程度的知识更新,为在材料科学与工程领域进行新工艺的开发和新材料的研究奠定良好的基础。

本书可作为材料学专业本科生、硕士研究生的专业基础教材,也可作为材料学专业博士研究生的专业参考书,还可作为材料领域科研及工程技术人员、高等院校教师的参考资料。



ISBN 7-5024-2837-2



9 787502 428372 >

ISBN 7-5024-2837-2/TG · 292 定价 49.00 元

目 录

第 1 章 晶体与晶体学

1.1 晶体学概述	1
1.1.1 引言	1
1.1.2 经典晶体学	2
1.1.3 近代晶体学	2
1.2 晶体与晶体材料	3
1.2.1 晶体的概念	3
1.2.2 晶体的基本特征	3
1.2.3 非晶体	4
1.2.4 液晶	5
1.2.5 准晶	5
1.2.6 晶体材料	6
1.3 晶体的基本对称性	8
1.3.1 对称操作	8
1.3.2 7 种晶系	8
1.3.3 14 种布拉菲点阵	9
1.3.4 不同晶系的单胞	10
1.3.5 二维点阵	12

第 2 章 晶体学点群

2.1 点群	14
2.1.1 点群的概念	14
2.1.2 平移群	15
2.1.3 点群的用途及推导方法	15
2.2 32 种晶体学点群	16
2.2.1 三斜晶系	16
2.2.2 单斜晶系	17
2.2.3 正交晶系	19
2.2.4 四方晶系	20
2.2.5 三方晶系	21
2.2.6 六方晶系	22

2.2.7 立方晶系	22
2.3 其他推导 32 种点群的方法	24
2.3.1 旋转群推导法	24
2.3.2 循环群推导法	25
2.4 劳厄群	26
2.4.1 中心对称定律	26
2.4.2 11 种劳厄群	27
2.4.3 二维点群和二维劳厄群	27
附录	28
附录 1 表达 32 种点群对称性的极射赤面投影图	28
附录 2 常用点对称操作的操作矩阵	31

第 3 章 空 间 群

3.1 点式空间群	32
3.1.1 概述	32
3.1.2 推导点式空间群	33
3.2 非点式操作	35
3.2.1 螺旋操作	36
3.2.2 滑移操作	38
3.2.3 空间群的商群和点群	40
3.2.4 一般等效位置	40
3.3 各晶系空间群特征概要	41
3.3.1 三斜晶系	41
3.3.2 单斜晶系	43
3.3.3 正交晶系	47
3.3.4 四方晶系	53
3.3.5 三方晶系	56
3.3.6 六方晶系和立方晶系	58
3.3.7 二维空间群(平面群)	59
3.4 国际表简介	61
3.4.1 国际表题头	61
3.4.2 国际表概阅	62
3.4.3 识别空间群	67
附录 230 种空间群的符号	67

第 4 章 无机晶体结构分析

4.1 常见的无机晶体结构	71
4.1.1 单质晶体结构	72
4.1.2 AX 型化合物	73

4.1.3	AX ₂ 型化合物	73
4.1.4	AX ₃ 型化合物	78
4.1.5	结构转变及概率占位	78
4.1.6	拓扑密堆型化合物	80
4.2	晶体 X 射线衍射分析简述	81
4.2.1	单晶四圆 X 射线衍射仪原理简介	81
4.2.2	X 射线多晶衍射法识别晶系	83
4.2.3	单胞内的原子数	85
4.2.4	X 射线多晶衍射谱的指数化	86
4.3	X 射线衍射与晶体对称性	86
4.3.1	系统消光	86
4.3.2	反常散射破坏中心对称定律	88
4.3.3	物理性能判别非中心对称性	90
4.3.4	强度统计分布函数 $N(z)$ 检验法	92
4.3.5	空间群的衍射群	93
4.4	电子密度函数	93
4.4.1	电子密度函数的推导	93
4.4.2	电子密度函数的性质和形式	94
4.4.3	原子占位分析	96
4.5	帕特森(Patterson)函数	96
4.5.1	函数定义	96
4.5.2	函数的物理意义	97
4.5.3	函数的基本特征	98
4.5.4	帕特森函数的对称性	99
4.6	常见无机晶体结构的测定	100
4.6.1	概述	100
4.6.2	粉末衍射法获得的结构因子	101
4.6.3	模型分析法	103
4.6.4	帕特森函数法和电子密度函数法	103
4.6.5	实例分析	105
4.7	中子衍射结构分析	106
4.7.1	衍射用中子波	107
4.7.2	原子对中子的散射与吸收	107
4.7.3	结构分析特征	108
4.7.4	中子衍射试样	109
附录	120 种衍射群所对应的空间群及其消光规律	110

第 5 章 晶体取向与多晶体织构

5.1	取向与织构	117
-----	-------------	-----

5.1.1 晶体取向	117
5.1.2 晶体学织构	119
5.1.3 多晶材料各向异性的利用	121
5.2 取向分布函数的数学原理	121
5.2.1 极密度分布函数	121
5.2.2 取向分布函数	123
5.2.3 完整极密度分布计算取向分布函数原理	124
5.3 织构的表达与定量分析	128
5.3.1 立方晶系的取向空间	128
5.3.2 取向分布函数的表达方法	129
5.3.3 织构的定量分析	130
5.3.4 六方晶系与四方晶系的取向空间	133
5.4 塑性变形晶体学与变形织构	134
5.4.1 位错滑移	134
5.4.2 机械孪生	136
5.4.3 晶体在塑性变形过程中的转动	137
5.4.4 多晶体冷变形织构	138
5.4.5 变形织构的理论计算	138

第 6 章 晶体中的点缺陷

6.1 热力学	140
6.2 金属中的点缺陷	142
6.2.1 空位浓度的测量	142
6.2.2 自间隙原子	143
6.2.3 缺陷聚集的自组织	145
6.2.4 持续缺陷流引起的原子再分布	146
6.2.5 有序合金中的缺陷特征	146
6.3 辐照后的恢复阶段	147
6.4 辐照损伤	148

第 7 章 位错的定义及柏氏矢量

7.1 产生位错的沃尔特拉 (Volterra) 过程	151
7.2 位错的几何形态	152
7.3 柏氏回路和柏氏矢量	153
7.4 用柏氏矢量定义位错类型	155

第 8 章 位错的弹性性质

8.1 直位错的弹性场和能量	157
8.1.1 螺位错的弹性场和能量	157

8.1.2 刃位错的弹性场和能量	162
8.1.3 混型位错的弹性场和能量	167
8.2 位错受力	168
8.2.1 在外加应力场下的受力	168
8.2.2 位错的线张力	169
8.2.3 位错线所受的化学力	170
8.2.4 映像力	171
8.3 直位错间的交互作用	173
8.3.1 两个平行的螺位错间的交互作用力	174
8.3.2 两个平行的刃位错间的交互作用力	174
8.3.3 相互平行的刃位错和螺位错间的交互作用力	175
8.3.4 两个相互垂直的螺位错间的交互作用力	176
8.3.5 相互垂直的刃位错和螺位错间的交互作用力	176
8.4 各向异性介质中的位错	177
8.5 弯曲位错理论简介	178
8.5.1 柏格斯(Burgers)位移公式	178
8.5.2 位错环的应力场	180
8.5.3 两个位错环的交互作用能	181
8.5.4 外力场作用在位错上的力	182
8.5.5 两根无限长的直位错的交互作用	183

第 9 章 点缺陷与位错间的交互作用

9.1 球对称畸变的溶质原子和位错的交互作用	184
9.2 非球对称畸变的溶质原子和位错的交互作用	187
9.3 溶质原子的二级尺寸效应	189
9.4 置换溶质原子的弹性模量错配引起的交互作用	190
9.5 化学交互作用, 铃木气团	190

第 10 章 位错的点阵模型

10.1 皮尔斯-纳巴罗(Peierls-Nabarro)位错模型以及 P-N 应力场	193
10.1.1 位错的 P-N 模型、柏氏矢量分布函数和位错宽度	193
10.1.2 位错的 P-N 应力场	197
10.2 错排能和位错中心能量	200
10.3 P-N 势垒及 P-N 力	202

第 11 章 位错运动

11.1 位错运动引起的塑性应变	206
11.2 位错的交割	208
11.3 位错滑移	209

11.3.1 位错翻越 P-N 能垒	209
11.3.2 弯结的活动性	210
11.3.3 单弯结的移动引起位错的滑动	211
11.3.4 在应力作用下位错靠弯结侧向移动而滑动	212
11.3.5 溶质原子对位错滑动的拖曳作用	213
11.4 位错攀移	217
11.4.1 扩散控制的直位错攀移	217
11.4.2 扩散控制的圆形棱柱刃位错的攀移	221
11.5 带割阶位错的攀移	223
11.6 带割阶位错的滑移	225

第 12 章 高速运动位错

12.1 匀速运动直螺位错应力场	229
12.2 匀速运动直刃位错应力场	231
12.3 位错应力场与运动速度的关系	232
12.4 匀速运动位错的能量	233
12.5 位错的等效质量	235
12.6 位错速度与阻尼	236

第 13 章 位错的产生和增殖

13.1 位错的产生	238
13.2 位错增殖源	243
13.2.1 弗兰克-瑞德(Frank-Read)源	243
13.2.2 F-R 空间源	245
13.2.3 双交滑移形成的位错源	246
13.2.4 巴丁-赫林(Bardeen-Herring)源	247
13.2.5 晶界源	248
13.2.6 动力学位错增殖源	248

第 14 章 位错的塞积

14.1 刃位错双边塞积	251
14.1.1 塞积群中位错的分布	251
14.1.2 滑开型裂纹的位错塞积模型	254
14.2 刃位错单边塞积	256
14.2.1 塞积群中位错的分布	256
14.2.2 单边刃位错塞积群的应力场	257
14.2.3 单边塞积群在滑移面的后应力	259
14.3 螺位错的双边塞积	260
14.3.1 塞积群中位错的分布	260

14.3.2 塞积群的应力场及撕开型(Ⅲ型)裂纹的位错模型	260
14.4 刃位错的攀移塞积与张开型(Ⅰ型)裂纹位错模型	261
14.5 位错塞积在宏观流变现象中的某些应用	263
14.5.1 脆性材料中裂纹的失稳判据	263
14.5.2 塞积群的钝化	263
14.5.3 在塞积群前诱发断裂及屈服机制	263

第 15 章 特殊晶体结构中的位错

15.1 全位错及滑移系	267
15.1.1 典型结构晶体的滑移系	267
15.1.2 外加力场在滑移系上的分切应力	269
15.1.3 独立滑移系	270
15.1.4 位错反应的弗兰克能量判据	272
15.2 面心立方结构中的部分位错	273
15.2.1 面心立方结构中的堆垛层错	273
15.2.2 汤普森(Thompson)记号	276
15.2.3 肖克莱(Shockley)部分位错和扩展位错	277
15.2.4 压杆位错	282
15.2.5 弗兰克部分位错	286
15.2.6 扩展位错的交滑移	288
15.2.7 层错四面体	290
15.2.8 割阶的扩展	291
15.2.9 扩展位错的攀移	297
15.2.10 位错的扩展结点以及三重层带结构	297
15.3 体心立方结构中的位错	300
15.3.1 堆垛层错	300
15.3.2 位错核心在 $\{112\}$ 面上的结构	303
15.3.3 位错核心在 $\{110\}$ 面上的结构	306
15.3.4 棱柱位错	307
15.4 密排六方结构中的部分位错	308
15.4.1 密排六方结构中的层错	308
15.4.2 肖克莱部分位错	309
15.4.3 弗兰克部分位错	311
15.5 有序合金中的位错	314
15.5.1 超位错	314
15.5.2 有序体的畴以及反相界类型	314
15.5.3 面心立方结构为基的有序合金中的位错	315
15.5.4 体心立方结构为基的有序合金中的位错	318

第 16 章 晶态固体的表面和界面

16.1 晶体表面	321
16.1.1 表面弛豫和重构	322
16.1.2 表面吸附与分凝	323
16.2 晶态固体中界面类型	324
16.3 同相界面	324
16.3.1 同相界面的自由度	324
16.3.2 界面晶体学	325
16.4 小角度界面	336
16.5 大角度界面	345
16.5.1 大角度界面结构的一般描述	345
16.5.2 结构单元模型	348
16.5.3 多面体单元模型	349
16.5.4 大角度晶界的晶界能	349
16.6 异相界面	350

附录 张量及弹性力学基本知识

F.1 指标符号	354
F.2 坐标变换	355
F.3 张量简介	356
F.3.1 张量定义	356
F.3.2 张量运算	357
F.3.3 不变张量(各向同性张量)	359
F.3.4 二阶张量	359
F.3.5 张量场	361
F.4 高斯定理及斯托克斯定理	361
F.5 弹性体的应力分析	362
F.5.1 应力矢量、应力张量	362
F.5.2 已知一点的应力张量,求这点任意方向的应力矢量	363
F.5.3 应力平衡方程	263
F.5.4 主应力,应力张量的不变量	364
F.5.5 最大切应力	365
F.6 变形分析	366
F.6.1 变形体内位移场及位移微分	366
F.6.2 应变张量及转动矢量	367
F.6.3 无限小微元的应变	367
F.6.4 主应变,应变张量的不变量	368
F.6.5 应变协调方程	368

F.7 应力与应变间的本构关系	369
F.7.1 外力对弹性体做功及内力做功	369
F.7.2 热力学定律与热力学平衡条件	370
F.7.3 各向同性材料的胡克定律	371
F.8 弹性应变能密度	373
F.9 弹性问题的求解	374
F.10 弹性力学的平面问题	375
F.11 弹性问题的一般原理	377
 参考文献	 378
索引	380

第 1 章 晶体与晶体学

* * *

本章提要:简述了晶体学的学科划分和发展历史,对晶体的概念与特征作了系统阐述,对晶体、非晶体、液晶、准晶等不同物质作出了描述与分析。简述了晶体的基本点称性和平移对称性。论证了晶体基本对称性的常规表达方式,并综述了 7 种晶系和 14 种布拉菲点阵。

* * *

1.1 晶体学概述

1.1.1 引言

在工业生产和科学研究中人们经常要接触到晶体,如铁、铝、铜等金属都是晶体材料,因而需要掌握晶体学基础知识。在冶金行业里,人们熟知 α -铁、钨、钨等是体心立方金属(bcc), γ -铁、铝、铜等是面心立方金属(fcc), 镁、锌、镉等是密排六方金属(cph)。另外可用晶面晶向指数所确定的晶体内的各种平面和方向描述和分析晶体结构及其某些性质,同时可以用 X 射线测定晶体的结构类型和点阵常数,这样就可以对金属的晶体结构有一个初步的认识。若要深入了解和研究晶体结构的许多细节以及复杂晶体的结构,则还需要进一步系统地掌握晶体学的知识。尤其在材料科学与技术飞速发展的今天,新材料不断涌现;晶体材料结构方面的知识越来越显现出其重要性。

晶体学是一门边缘科学,它涉及许多门学科,如数学、化学、固体物理学、生物学等。晶体学也是一门基础科学,在工业生产上,如化工、冶金、半导体、电子、生物、药物、采矿、地质等等部门,都需要晶体学的知识。由于各种专业学科对晶体学知识往往有各自特殊的要求,所以在各学科的有关专业著作内常常只包含有部分晶体学基本知识,这在一定条件下会限制人们对晶体学作深入了解。

上述各个学科所涉及的晶体学知识大部分归属于结晶学的范畴,有时也把结晶学(Crystallography)称为晶体学。结晶学是以晶体为研究对象的一门自然科学,通常分成 5 部分:

(1) **晶体生成学(Crystallogeny)**。研究天然及人工晶体的发生,成长和变化的过程与机理,以及控制和影响它们的因素。如金属学中涉及金属的结晶,合金的凝固等有关部分。

(2) **几何结晶学(Geometrical Crystallography)**。研究晶体外表几何多面体的形状以及其间的规律性。如采矿学、地质学等常需要这方面的知识。

(3) **晶体结构学(Crystallogy)**。研究晶体内部结构中质点排布的规律性,以及晶体结构的不完善性(如晶体的对称性,原子在晶体点阵中的位置及晶体缺陷等)。

(4) **晶体化学(Crystallochemistry)**。研究晶体的化学组成与晶体结构及晶体的物理、化学性质间关系的规律性。

(5) **晶体物理学(Crystallophysics)**。研究晶体的各项物理性质及其产生的机理。

另外从实验的角度出发,晶体学还可包括获取晶体结构有关信息的测量方法及其原理,如X射线晶体学。作为具有工业应用背景的材料,晶体材料所涉及的晶体学通常包括研究晶体内部原子排布规律性及其对称性,晶体的取向、晶体的缺陷和晶体结构的测量方法等。

1.1.2 经典晶体学

经典晶体学开始于自然界矿物晶体,从晶体外形分析晶体的组成和结构属于矿物学。后来发现晶体学问题涉及许多领域,各种学科都会遇到晶体学问题。因此晶体学逐步发展成为一门独立的科学。

经典晶体学的发展过程主要可简述如下。1669年丹麦斯泰诺(Nicolaus Steno)发现晶体面角守恒定律。晶体外观很复杂,但经分析发现它反映了晶体结构的内在规律,因而总结出了晶体面角守恒定律。1801年法国赫羽依(René Just Haüy)发现了晶体学基本定律,即有理指数定律。这一定律进一步揭示了晶体外形与内部构造的联系,同时也推动了晶体结构理论的形成与发展。1809年沃拉斯通(William Hyde Wollaston)设计出反射测角仪,使测量精度得到提高,从而开始了大量测量晶体外形以推断内部结构的工作。这种精密仪器的出现使后来得以积累大量晶体测角资料。1805~1809年德国韦斯(Christian Samuel Weiss)总结出晶体对称定律。他将晶体分为六大晶系,从而开始对晶体进行科学分类,同时还推导出了晶带定律。1818~1839年韦斯和英国米勒(William Hallows Miller)确定了沿用至今的晶面符号。1830年德国黑萨尔(L.F.Ch. Hessel)推导出了经典晶体学描述晶体外形对称性的32种点群。1885~1890年首先是俄国费德罗夫(Е.С. Фёдоров),然后是德国熊夫利斯(Arthur Moritz Schöflies)推导出了描述晶体结构对称性的230种空间群。到了19世纪的末期晶体结构的点阵理论已基本成熟,为后来的晶体结构分析奠定了理论基础。这些理论至今仍然成立。

1.1.3 近代晶体学

1895年德国物理学家伦琴(W.C.Röntgen)发现了X射线。1912年德国劳厄(Max. von Laue)用X射线作光源,用晶体作光栅,进行照射实验,进而发现了X射线在晶体中的衍射现象。这是一个具有划时代意义的实验。首先它证实了晶体结构点阵理论的正确性,其次它确定了X射线的本质,即X射线是电磁波,同时它奠定了近代晶体学基础,使X射线成为认识晶体结构的重要手段并形成了X射线晶体学。1913年英国布拉格父子(W.H. Bragg和W.L. Bragg)和俄国吴里夫(Г.В. Вульф)推导出了X射线衍射的最基本公式,即布拉格公式,极大地推动了晶体结构的分析工作。20年代以后人们收集X射线图谱,测量各种有代表性无机物和结构简单的有机物的晶体结构,60年代人们已能测定蛋白质大分子的晶体结构,现代测量工具及计算机使晶体结构分析的精度和速度都大大提高。