



普通高等教育“十一五”国家级规划教材



“十二五”江苏省高等学校重点教材  
编号：2015-1-038

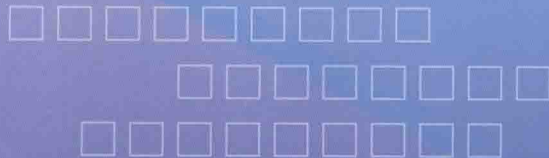
# 材料科学

(第3版)

# 研究与测试方法

CAILIAO KEJUE YANJIU YU CESHI FANGFA

朱和国 尤泽升 刘吉梓 © 编著  
沙 刚 © 主审



东南大学出版社  
SOUTHEAST UNIVERSITY PRESS



普通高等教育“十一五”国家级规划教材



“十二五”江苏省高等学校重点教材

编号:2015-1-038

# 材料科学研究与测试方法

(第3版)

朱和国 尤泽升 刘吉梓 编著

沙 刚 主审



东南大学出版社

SOUTHEAST UNIVERSITY PRESS

• 南京 •

## 内 容 提 要

本书首先介绍了晶体学基础知识,然后系统介绍了X射线的物理基础、X射线衍射的方向与强度、多晶体X射线衍射分析的方法、X射线衍射仪及其在物相鉴定、宏观应力与晶粒尺寸的测定、多晶体的织构分析、小角X射线散射、薄膜应力及厚度测定等方面的应用;介绍了电子衍射的物理基础、透射电子显微镜的结构与原理、衍射成像、运动学衬度理论、高分辨透射电子显微技术、扫描电镜、扫描透射电镜、电子背散射衍射等;介绍了AES、XPS、XRF、STM、AFM、LEED等常用表面分析技术和TG、DTA、DSC等常用热分析技术的原理、特点及其应用;最后简要介绍了红外光谱、拉曼光谱和ICP等。书中研究和测试的材料包括金属材料、无机非金属材料、高分子材料、非晶态材料、金属间化合物、复合材料等。对每章内容作了提纲式的小结,并附有适量的思考题。书中采用了一些作者尚未发表的照片和曲线,同时在实例分析中还注重引入了一些当前材料界最新的研究成果。

本书可作为材料科学与工程学科本科生的学习用书,也可供相关学科与专业的研究生、教师和科技工作者使用。

### 图书在版编目(CIP)数据

材料科学研究与测试方法/朱和国,尤泽升,刘吉梓  
编著. —3版. —南京:东南大学出版社,2016.9  
ISBN 978-7-5641-6703-5

I. 材… II. ①朱…②尤…③刘… III. ①材料科学—研究方法②材料科学—测试方法 IV. ①TB3

中国版本图书馆CIP数据核字(2016)第200941号

### 材料科学研究与测试方法(第3版)

出版发行 东南大学出版社  
出 版 人 江建中  
网 址 <http://www.seupress.com>  
电子邮箱 [press@seupress.com](mailto:press@seupress.com)  
社 址 南京市四牌楼2号  
邮 编 210096  
电 话 025-83793191(发行) 025-57711295(传真)  
经 销 全国各地新华书店  
印 刷 江苏凤凰数码印务有限公司  
开 本 787 mm×1092 mm 1/16  
印 张 25  
字 数 608千字  
版 次 2016年9月第3版  
印 次 2016年9月第1次印刷  
书 号 ISBN 978-7-5641-6703-5  
定 价 59.80元

本社图书若有印装质量问题,请直接与营销部联系。电话(传真):025-83791830。

## 第3版前言

本书是普通高等教育“十一五”国家级规划教材,自2008年第1版和2013年第2版以来,印刷多次,深受读者青睐,令作者欣慰。在江苏省教育厅校重点教材修订项目基金资助下,我们结合已有的教学经验、材料研究技术的最新进展和广大读者的宝贵建议,并参考国内外同类教材,对第2版进行以下修订:

1. 第4章:全面修订织构部分,补充了丝织构及其测定,对板织构极图测定的反射法和透射法进行了全面更新,更换了装置示意图和衍射原理图,从而使原先深奥抽象的空间几何关系变得更加简洁,内容更加通俗。为方便读者理解极图,还增加了实例说明了织构指数与极图之间的转换关系。本章还补充了薄膜应力的测量内容,弥补了原教材仅有薄膜厚度测量的不足。

2. 第6章:更新了电子枪的部分内容,增补不同电子枪时,电子束的特点比较;增加了电子衍射花样的标定实例,在复杂电子衍射花样中补充了菊池衍射花样,详细介绍了菊池花样产生的原理和特点,分析了不同入射条件下菊池线的分布特点及试样的微小倾动导致菊池花样大幅扫动的原理,从而为11章的EBSD学习奠定了理论基础。增补了不同操作矢量时全位错的判断实例,从而进一步加深了对位错及其柏氏矢量的理解。

3. 第7章:全面修订了高分辨内容,增加了新的理解和感受,改写了本章小结。

4. 第8章:STEM为SEM和TEM有机结合体,本章增加了STEM的原理、特点、成像衬度及其应用等内容。

5. 第9章:增加了X射线荧光光谱内容,全面介绍了X射线荧光光谱仪的工作原理、结构组成及其应用,丰富了表面成分分析的手段。增补了当今最为现代的研究手段——聚焦离子束的工作原理、与材料的相互作用及其应用。

6. 新增一章EBSD:电子背散射衍射是晶体取向、织构分析的有效手段,是X射线的晶体取向织构分析的有益补充和发展。

7. 重写第12章:为适应材料研究的多样性,全面重写光谱分析的内容,主要介绍红外光谱、拉曼光谱及ICP等研究手段的原理及其应用,使材料研究的手段进一步丰富、完善和有效。

8. 对2版的其他章节也进行了局部修订。

总之,通过第3版,使本书的内容更加系统丰富、叙述更加简明扼要,但又不就方法而方法,而是全方位培养读者思考问题、分析问题和解决问题的能力,注重提高读者的自学和应用能力。

本书由南京理工大学一线教师编著。全书共12章及附录:第1~8,10章及附录(朱和国);第9章(朱和国,梁宁宁);第11章(尤泽升),第12章(刘吉梓),全书朱和国教授统稿,沙刚教授主审。

本书广泛参考和应用了其他一些材料科学工作者的研究成果、资料和图片,第3版得到了江苏省教育厅、南京理工大学教务处及材料学院等部门和领导的积极支持,东南大学吴申庆教授的热情鼓励,以及郭冠宏、于竹丽、徐驰、姜元昊、张恒等研究生的鼎力协助,在此表示深深的敬意和感谢!

由于作者水平有限,本书中定有疏漏和错误之处,敬请广大读者批评指正。

朱和国

2016.6 于南京

## 第 2 版前言

本书是普通高等教育“十一五”国家级规划教材,自 2008 年出版以来,已印刷四次,受到广大师生及同仁的关注,收到良好的教学效果,令作者深感欣慰。与此同时,也收到了很多读者的建议,指出了本书的不足之处,为此,我们结合自己的教学体会和当今材料研究技术的最新成果,并参阅国内外现有同类教材,对第一版进行以下修订:

1. 删去不常用的卷积内容,大幅修订织构章节,增加了一些特别重要的公式,如球面三角关系公式、谢勒公式等的推导过程,加深读者对内容的理解。
2. 增加日益受到重视的小角 X 射线散射理论及其应用实例。
3. 增加电子衍射花样斑点指数的作图实例,增进读者对其产生过程的深刻理解,揭开电子衍射花样的神秘面纱,为电子衍射花样的正确标定打下良好基础。
4. 增加高分辨电子显微像的形成原理,使本章内容更加完整。
5. 精简 XPS 内容,补充了峰标定符号的解释,增加了原子力显微镜的成像原理及其应用实例,突出反映材料研究中的新概念、新技术、新知识、新理论,反映教材内容的现代化。
6. 更新热分析技术在新材料开发、研究中的应用实例,特别是活化能计算的应用。
7. 全面更新光谱分析的内容,主要介绍红外光谱与拉曼光谱的理论及其应用,比较两者的特点,增加两者配合使用的实例。

总之,通过修订再版,使本书的内容更加系统丰富、叙述更加简明扼要,但又不就方法而方法,而是全方位培养读者思考问题、分析问题和解决问题的能力,注重提高读者的自学和应用能力。同时也为任课老师精心制作了课件,并免费提供,请与责编联系:amberzhang@seu.edu.cn。

本书由南京理工大学一线教师编著。全书共 11 章及附录,其中第 1 章~第 9 章及附录(朱和国),第 10 章(朱和国,杜宇雷),第 11 章(王新龙),全书由朱和国统稿,上海大学操光辉主审。

本书参考和应用了其他一些材料科学工作者的研究成果、资料和图片,再版过程中得到了东南大学的吴申庆教授、南京理工大学的刘金强、崔崇、吴镛等教授和孙强金高工的热情鼓励和帮助,以及蒋娅琳、姚寅群、贾翠翠、董抗、华波和孙浩等研究生的鼎力支持,在此表示深深的敬意和感谢!

由于作者的水平有限,对本书中的疏漏和错误之处,敬请广大读者批评指正。

朱和国

2013 年 4 月于南京

# 第 1 版前言

众所周知,材料、信息和能源是现代科学技术重点发展的三大领域,而材料又是信息和能源发展的物质基础,是重中之重,可以说没有先进材料就没有现代科技。然而,对材料的科学研究与测试方法的合理选择又是获得先进材料的核心环节,是材料科学的工作者必须掌握的基本知识。

《材料科学研究与测试方法》是普通高等教育“十一五”国家级规划教材,是材料科学与工程本科专业的基础课程,是作者在十多年的教学经验基础上并参考了国内外同类教材的最新发展编著而成的,书中采用了一些作者尚未公开发表的图片和曲线。全书主要包括晶体学基础、X射线的衍射分析及应用、电子衍射分析及应用、表面分析技术、热分析技术和光谱分析技术等内容。书中所涉及的材料包括金属材料、无机非金属材料、高分子材料、非晶材料、复合材料等。对每章内容均作了提纲式的小结,便于读者复习和掌握所学内容,对一些重要的研究方法,还列举了相关的研究实例,帮助读者领会材料科学研究的思路,懂得该研究什么、为何研究及怎样研究。全书力求深度适中,表述繁简结合,通俗易懂。

本书由南京理工大学一线教师合作编著,共 11 章,其中第 1~6 章、第 8 章和第 9 章由朱和国博士执笔;第 7 章和第 4.8 节由王恒志博士执笔;第 10 章由杜宇雷博士、李玮、朱和国共同完成;第 11 章由王新龙博士执笔。全书由朱和国统稿,上海大学材料学院洪堡学者操光辉博士任主审。

在编著过程中,作者参考和应用了其他一些材料科学工作者的研究成果、资料和图片,在此表示深深的敬意和感谢。在此还要感谢东南大学材料学院博士生导师吴申庆教授在百忙之中给予的精心指点和无私帮助;感谢东南大学材料学院余焜教授给本书提出的宝贵意见。感谢颜银标教授、孙强金高工所给予的大力支持;感谢吴旭、陈湜、徐彩萍、杨军、张立奎、周熙、朱敏、贺睿琦、任小敏等研究生对本书所做的工作;最后还要感谢潘春丽女士在文字处理方面的全力帮助。

由于作者的水平有限,对本书中的疏漏和错误之处,敬请广大读者批评指正。

朱和国

2007. 12 于南京

# 目 录

<b>1 晶体学基础</b> .....	1	<b>2 X射线的物理基础</b> .....	39
1.1 晶体及其基本性质 .....	1	2.1 X射线的发展史 .....	39
1.1.1 晶体的概念 .....	1	2.2 X射线的性质 .....	39
1.1.2 空间点阵的四要素 .....	1	2.2.1 X射线的产生 .....	39
1.1.3 布拉菲阵胞 .....	2	2.2.2 X射线的本质 .....	40
1.1.4 典型晶体结构 .....	4	2.3 X射线谱 .....	41
1.1.5 晶体的基本性质 .....	7	2.3.1 X射线连续谱 .....	42
1.1.6 准晶体简介 .....	7	2.3.2 X射线特征谱 .....	43
1.2 晶向、晶面及晶带 .....	8	2.4 X射线与物质的相互作用 .....	46
1.2.1 晶向及其表征 .....	8	2.4.1 X射线的散射 .....	46
1.2.2 晶面及其表征 .....	9	2.4.2 X射线的吸收 .....	47
1.2.3 晶带及其表征 .....	11	2.4.3 吸收限的作用 .....	50
1.3 晶体的宏观对称及点群 .....	11	本章小结 .....	51
1.3.1 对称的概念 .....	11	思考题 .....	52
1.3.2 对称元素及对称操作 .....	11	<b>3 X射线的衍射原理</b> .....	53
1.3.3 对称元素的组合及点群 .....	16	3.1 X射线衍射的方向 .....	53
1.3.4 晶体的分类 .....	17	3.1.1 劳埃方程 .....	53
1.3.5 准晶体的点群及其分类 .....	17	3.1.2 布拉格方程 .....	55
1.3.6 点群的国际符号 .....	19	3.1.3 布拉格方程的讨论 .....	56
1.3.7 点群的圣佛里斯符号 .....	19	3.1.4 衍射矢量方程 .....	59
1.4 晶体的微观对称与空间群 .....	20	3.1.5 布拉格方程的厄瓦尔德 图解 .....	60
1.4.1 晶体的微观对称 .....	20	3.1.6 布拉格方程的应用 .....	61
1.4.2 晶体的空间群及其符号 .....	22	3.1.7 常见的衍射方法 .....	61
1.5 晶体的投影 .....	23	3.2 X射线的衍射强度 .....	63
1.5.1 球面投影 .....	24	3.2.1 单电子对X射线的散射 .....	63
1.5.2 极式网与乌氏网 .....	26	3.2.2 单原子对X射线的散射 .....	65
1.5.3 晶带的极射赤面投影 .....	28	3.2.3 单胞对X射线的散射 .....	67
1.5.4 标准极射赤面投影图(标准 极图) .....	30	3.2.4 单晶体的散射强度与干涉 函数 .....	72
1.6 倒易点阵 .....	30	3.2.5 多晶体的衍射强度 .....	74
1.6.1 正点阵 .....	31	3.2.6 影响多晶体衍射强度的其他 因子 .....	75
1.6.2 倒点阵(倒易点阵) .....	31	本章小结 .....	78
1.6.3 正倒空间之间的关系 .....	31	思考题 .....	80
1.6.4 倒易矢量的基本性质 .....	33	<b>4 X射线的多晶衍射分析及其应用</b> .....	81
1.6.5 晶带定律 .....	34	4.1 X射线衍射仪 .....	81
1.6.6 广义晶带定律 .....	35		
本章小结 .....	35		
思考题 .....	37		

4.1.1	测角仪	81	5	电子显微分析的基础	151
4.1.2	计数器	83	5.1	光学显微镜的分辨率	152
4.1.3	计数电路	85	5.2	电子波的波长	153
4.1.4	X射线衍射仪的常规测量	86	5.3	电子与固体物质的作用	154
4.2	X射线物相分析	87	5.3.1	电子散射	155
4.2.1	物相的定性分析	87	5.3.2	电子与固体作用时激发的 信息	157
4.2.2	物相的定量分析	93	5.4	电子衍射	160
4.3	点阵常数的精确测定	98	5.4.1	电子衍射与X射线衍射的 异同点	161
4.3.1	测量原理	98	5.4.2	电子衍射的方向——布拉格 方程	162
4.3.2	误差源分析	98	5.4.3	电子衍射的厄瓦尔德图解	162
4.3.3	测量方法	99	5.4.4	电子衍射花样的形成原理及 电子衍射的基本公式	163
4.4	宏观应力的测定	103	5.4.5	零层倒易面及非零层倒 易面	164
4.4.1	内应力的产生、分类及其 衍射效应	103	5.4.6	标准电子衍射花样	165
4.4.2	宏观应力的测定原理	103	5.4.7	偏移矢量	168
4.4.3	宏观应力的测定方法	106	本章小结	170	
4.4.4	应力常数K的确定	109	思考题	172	
4.5	微观应力的测定	111	6	透射电子显微镜	173
4.6	非晶态物质及其晶化后的衍射	112	6.1	工作原理	173
4.6.1	非晶态物质结构的主要 特征	112	6.2	电磁透镜	174
4.6.2	非晶态物质的结构表征及其 结构常数	112	6.2.1	静电透镜	174
4.6.3	非晶态物质的晶化	114	6.2.2	电磁透镜	174
4.7	多晶体的织构分析	117	6.3	电磁透镜的像差	176
4.7.1	织构及其表征	117	6.3.1	球差	176
4.7.2	丝织构的测定与分析	120	6.3.2	像散	177
4.7.3	板织构的测定与分析	123	6.3.3	色差	177
4.8	晶粒大小的测定	133	6.4	电磁透镜的景深与焦长	179
4.9	小角X射线散射	135	6.4.1	景深	179
4.9.1	小角X射线散射的基本 原理	135	6.4.2	焦长	179
4.9.2	小角X射线散射实验	139	6.5	电镜分辨率	180
4.9.3	小角X射线散射技术的 特点	140	6.5.1	点分辨率	180
4.9.4	小角X射线散射技术的 应用	141	6.5.2	晶格分辨率	181
4.10	淬火钢中残余奥氏体的测量	144	6.6	电镜的电子光学系统	182
4.11	薄膜的测量	145	6.6.1	照明系统	182
4.11.1	薄膜厚度的测量	145	6.6.2	成像系统	184
4.11.2	薄膜应力的测量	145	6.6.3	观察记录系统	186
本章小结		146	6.7	主要附件	186
思考题		149	6.7.1	样品倾斜装置(样品台)	186



6.7.2	电子束的平移和倾斜装置	187	8	扫描电子显微镜及电子探针	250
	.....	187	8.1	扫描电镜的结构	250
6.7.3	消像散器	187	8.1.1	电子光学系统	251
6.7.4	光阑	188	8.1.2	信号检测处理、图像显示	252
6.8	透射电镜中的电子衍射	189	8.1.3	真空系统	253
6.8.1	有效相机常数	189	8.2	扫描电镜的主要性能参数	253
6.8.2	选区电子衍射	190	8.2.1	分辨率	253
6.9	常见的电子衍射花样	191	8.2.2	放大倍数	254
6.9.1	单晶体的电子衍射花样	191	8.2.3	景深	254
	.....	191	8.3	表面成像衬度	254
6.9.2	多晶体的电子衍射花样	194	8.3.1	二次电子成像衬度	255
	.....	194	8.3.2	背散射电子成像衬度	255
6.9.3	复杂的电子衍射花样	195	8.4	二次电子衬度像的应用	257
6.10	透射电镜的图像衬度理论	205	8.5	背散射电子衬度像的应用	259
6.10.1	衬度的概念与分类	205	8.6	电子探针	260
6.10.2	衍射衬度运动学理论与应用	207	8.6.1	电子探针波谱仪	260
6.10.3	非理想晶体的衍射衬度	213	8.6.2	电子探针能谱仪	262
	.....	213	8.6.3	能谱仪与波谱仪的比较	264
6.10.4	非理想晶体的缺陷成像分析	213	8.7	电子探针分析及应用	264
6.11	透射电镜的样品制备	222	8.7.1	定性分析	264
6.11.1	基本要求	223	8.7.2	定量分析	266
6.11.2	薄膜样品的制备过程	223	8.8	扫描透射电子显微镜	267
本章小结	.....	224	8.9	扫描电镜的发展	269
思考题	.....	227	本章小结	.....	270
7	薄晶体的高分辨像	229	思考题	.....	271
7.1	高分辨电子显微像的形成原理	229	9	表面分析技术	272
7.1.1	试样透射函数的近似表达式	230	9.1	俄歇电子能谱分析	272
7.1.2	衬度传递函数 $S(u, v)$	232	9.1.1	俄歇电子能谱仪的结构原理	272
7.1.3	像平面上的像面波函数 $B(x, y)$	234	9.1.2	俄歇电子谱	273
7.1.4	最佳欠焦条件及电镜最高分辨率	236	9.1.3	定性分析	274
7.1.5	第一通带宽度 ( $\sin \chi = -1$ ) 的影响因素	236	9.1.4	定量分析	275
7.2	高分辨像举例	242	9.1.5	化学价态分析	276
7.2.1	晶格条纹像	242	9.1.6	AES 的应用举例	276
7.2.2	一维结构像	244	9.1.7	俄歇能谱仪的最新进展	278
7.2.3	二维晶格像	245		.....	278
7.2.4	二维结构像	246	9.2	X 射线光电子能谱仪	279
本章小结	.....	249	9.2.1	X 射线光电子能谱仪的工作原理	279
思考题	.....	249	9.2.2	X 射线光电子能谱仪的系统组成	279
			9.2.3	X 光电子能谱及表征	281

9.2.4	X光电子谱仪的功用	283	10.4.2	硅酸盐	321
9.2.5	XPS的应用举例	285	10.4.3	陶瓷反应合成	322
9.2.6	XPS的发展趋势	288	10.4.4	内生型复合材料	323
9.3	X射线荧光光谱	288	10.4.5	含能材料	324
9.3.1	工作原理	288	10.4.6	反应活化能的计算	325
9.3.2	结构组成	288	10.5	热分析技术的新发展	327
9.3.3	应用	289	10.5.1	联用技术	327
9.4	扫描隧道电镜	290	10.5.2	温度调制式差示扫描量热技术	329
9.4.1	STM的基本原理	290	10.5.3	动态热机械分析技术	329
9.4.2	STM的工作模式	291	本章小结		329
9.4.3	STM的特点	292	思考题		330
9.4.4	STM的应用举例	292	11	电子背散射衍射	331
9.5	原子力显微镜	295	11.1	基本原理	331
9.5.1	原子力显微镜的工作原理	295	11.1.1	电子背散射衍射(EBSD)	332
9.5.2	原子力显微镜的工作模式	296	11.1.2	扫描电镜的透射菊池衍射	332
9.5.3	试样制备	297	11.2	EBSD仪器简介	333
9.5.4	形貌成像的应用	297	11.3	EBSD衍射谱标定与晶体取向确定	334
9.6	聚焦离子束	299	11.3.1	EBSD衍射谱标定	334
9.6.1	工作原理	300	11.3.2	晶体取向确定	337
9.6.2	离子束与材料的相互作用	301	11.4	EBSD分辨率	339
9.6.3	聚焦离子束的应用	301	11.5	EBSD样品制备	340
9.7	低能电子衍射	303	11.6	EBSD的应用	341
9.7.1	低能电子衍射的基本原理	304	11.6.1	取向衬度成像	341
9.7.2	低能电子衍射仪的结构与花样特征	305	11.6.2	织构分析	342
9.7.3	LEED的应用举例	305	11.6.3	晶粒取向差及晶界特性分析	342
本章小结		307	11.6.4	物相鉴定	343
思考题		309	11.6.5	晶格缺陷分析	344
10	热分析技术	310	本章小结		344
10.1	热分析技术的发展史	310	思考题		345
10.2	热分析方法	310	12	光谱分析	346
10.2.1	热重分析法(TG)	311	12.1	红外光谱	347
10.2.2	差热分析法(DTA)	312	12.1.1	基本原理	347
10.2.3	差示扫描量热法(DSC)	315	12.1.2	红外光谱与分子结构间的关系	350
10.3	热分析测量的影响因素	317	12.1.3	红外吸收光谱仪	353
10.3.1	实验条件	317	12.1.4	试样制备及处理	355
10.3.2	试样特性	318	12.1.5	应用实例	356
10.4	热分析的应用	319	12.2	拉曼光谱	359
10.4.1	块体金属玻璃	319	12.2.1	基本原理	359

12.2.2	拉曼光谱仪器和拉曼光谱术	361	附录3	32种点群对称元素示意图	371
12.2.3	拉曼光谱与红外光谱的比较	362	附录4	宏观对称元素及说明	372
12.2.4	试样的准备与安置	363	附录5	32种点群的习惯符号、国际符号及圣佛利斯符号	373
12.2.5	拉曼光谱在材料研究中的应用	364	附录6	质量吸收系数 $\mu_m$	374
12.3	电感耦合等离子体原子发射光谱	366	附录7	原子散射因子 $f$	375
	本章小结	369	附录8	原子散射因子校正值 $\Delta f$	376
	思考题	369	附录9	粉末法的多重因素 $P_{hkl}$	376
附录		370	附录10	某些物质的特征温度 $\Theta$	376
附录1	常用物理常数	370	附录11	德拜函数 $\frac{\phi(x)}{x} + \frac{1}{4}$ 之值	377
附录2	晶体的三类分法及其对称特征	370	附录12	应力测定常数	377
			附录13	常见晶体的标准电子衍射花样	378
			参考文献		383

# 1 晶体学基础

## 1.1 晶体及其基本性质

### 1.1.1 晶体的概念

晶体是指其内部的原子、分子、离子或其集团在三维空间呈周期性排列的固体。而这些周期性排列的原子、分子、离子或其集团是构成晶体结构的基本单元,称晶体的结构基元。如果将结构基元抽象成一个几何点,则可将晶体结构抽象成无数个在三维空间呈规则排列的点阵,该点阵又称空间点阵。图 1-1 即为一般晶体抽象而成的空间点阵。

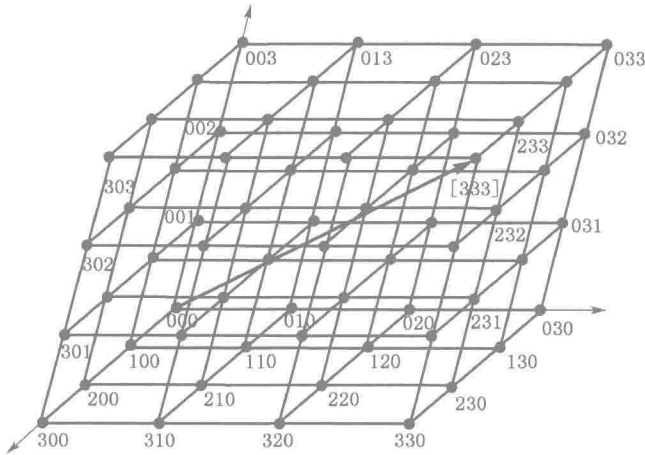


图 1-1 一般空间点阵

### 1.1.2 空间点阵的四要素

(1) 阵点 即空间点阵中的阵点。它代表结构基元的位置,是晶体结构的相当点,就其本身而言,仅具有几何意义,不代表任何质点。空间点阵具有无穷多个阵点。

(2) 阵列 即阵点在同一直线上的排列。任意两个阵点即可构成一个阵列,同一阵列上阵点间距相等,阵点间距为该方向上的最小周期,平行阵列上的阵点间距必相等,不同方向上的阵点间距一般不相等。空间点阵具有无穷多个阵列。

(3) 阵面 即阵点在同一平面上的分布。任意不在同一阵列上的三阵点即可构成一个阵面。单位阵面上的阵点数称面密度,相邻阵面间的垂直距离称面间距,平行阵面上的面密度和面间距均相等。空间点阵具有无穷多个阵面。

(4) 阵胞 即在三维方向上两两平行并且相等的六面体。是空间点阵中的体积单元。

空间点阵可以看成是这种平行六面体在三维方向上的无缝堆砌。注意：①阵胞有多种选取方式，主要反映晶体结构的周期性；②当阵点仅在阵胞的顶角上，一个阵胞仅含一个阵点，代表一个基元时，该阵胞又称物理学原胞，原胞的体积最小，三维基矢设为  $a_1, a_2, a_3$ 。

### 1.1.3 布拉菲阵胞

为了同时反映晶体结构的周期性和对称性，通常按以下原则选取阵胞：

- (1) 反映晶体的宏观对称性；
- (2) 尽可能多的直角；
- (3) 相等的棱边和夹角尽可能多；
- (4) 满足上述条件下，阵胞体积尽可能最小。

按以上原则选取阵胞时，法国晶体学家布拉菲(A. Bravais)通过研究发现空间点阵的阵胞只有 14 种，此时阵点不仅可在阵胞的顶点，还可在阵胞的体内或面上，阵胞的体积也不一定为最小，可能是原胞体积的整数倍。布拉菲阵胞又称晶胞，或惯用胞，或结晶学原胞。图 1-2 为 14 种布拉菲阵胞，三维基矢设为  $a, b, c$ 。

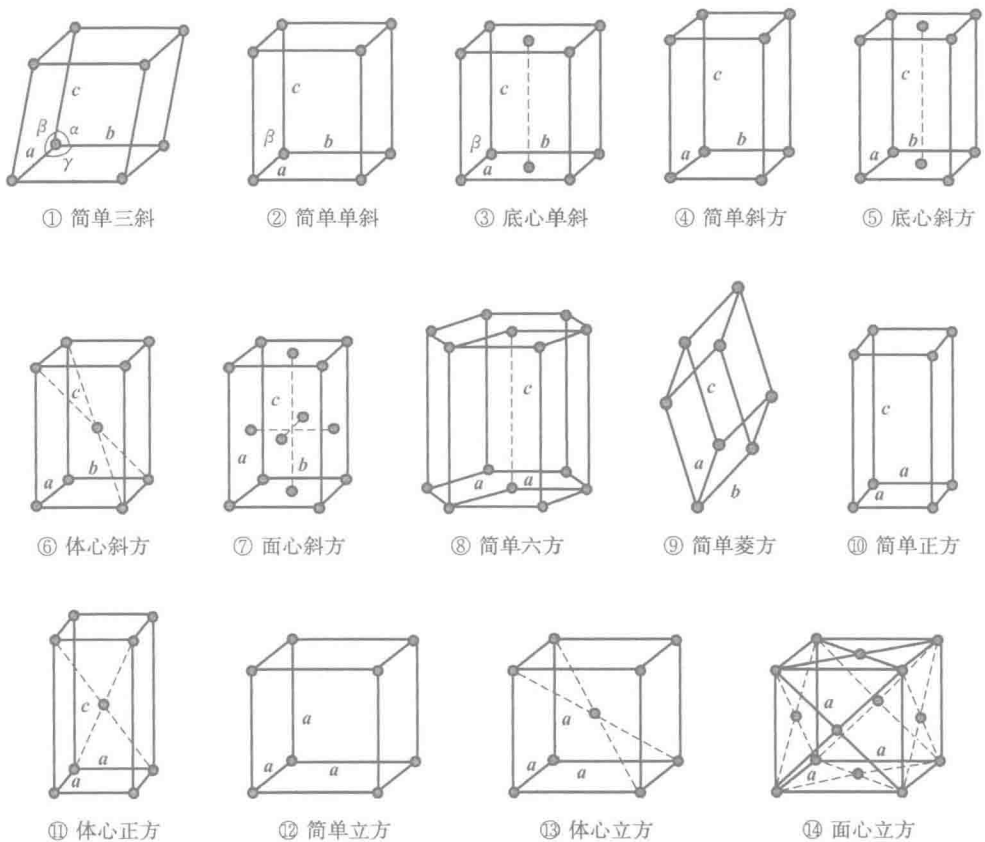


图 1-2 布拉菲点阵示意图

晶胞的形状与大小用相交于某一顶点的三个棱边上的点阵周期  $a, b, c$  以及它们之间的夹角  $\alpha, \beta, \gamma$  来表征，其中  $\alpha, \beta, \gamma$  分别为  $b$  与  $c, c$  与  $a, a$  与  $b$  的夹角。 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$

称为晶格常数。

14种布拉菲阵胞根据点阵参数的特点分为立方、正方、斜方、菱方、六方、单斜及三斜七大晶系。根据阵点在阵胞中的位置特点又可将其分为简单(P)、底心(C)、体心(I)和面心(F)四大点阵类型。

(1) 简单型。阵点分布于六面体的8个顶点处,符号为P。

(2) 底心型。阵点除了分布于六面体的8个顶点外,在六面体的底心或对面中心处仍分布有阵点,符号为C。

(3) 体心型。阵点除了分布于六面体的8个顶点外,在六面体的体心处还有一个阵点,符号为I。

(4) 面心型。阵点除了分布于六面体的8个顶点外,在六面体的6个面心处还各有一个阵点,符号为F。

各点阵如表1-1所示。

表 1-1 晶系及点阵类型

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

注意:

① 空间点阵是为方便研究晶体结构而进行的一种数学抽象,反映了晶体结构的几何特征,它不能脱离具体的晶体结构而单独存在。

② 空间点阵的阵点仅具几何意义,并非具体的质点,它可以是结构基元的质心位置,也

可以是结构基元中任意等价的点。

③ 晶体的结构复杂、种类繁多,但从中抽象出来的空间点阵只有 14 种。

④ 晶体结构=空间点阵+结构基元。

⑤ 原胞包含一个基元,而非一个原子。

⑥ 一种点阵可代表多种晶体结构。结构基元可以由一个或多个等同质点的不同的形式进行排列和结合。

### 1.1.4 典型晶体结构

晶体结构根据其对应点阵的特点,可分为简单点阵和复式点阵两类。简单点阵即点阵结构仅有一种结构形式,常见的有简单立方、体心立方和面心立方 3 种;而复式点阵则是由两种同类或异类原子形成的点阵结构套构而成,常见的有密排六方结构、金刚石结构、NaCl 结构、CsCl 结构以及闪锌矿结构等。

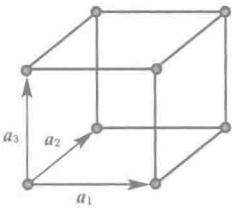


图 1-3 简单立方

#### 1) 简单立方(sc)结构

图 1-3 为简单立方示意图。简单立方的边长为  $a$ , 基矢为  $a_1, a_2, a_3$ ,  $a_1 = a_2 = a_3 = a$ , 阵点仅在立方体的 8 个顶点上, 体内无阵点, 每个阵点为其周围 8 个阵胞共有, 单个阵胞拥有  $8 \times 1/8 = 1$  个阵点, 或 1 个结构基元。当结构基元为原子时, 该原胞含有一个原子, 其坐标为  $(0, 0, 0)$ , 每个原子占有的体积为  $a^3$ 。简单立方阵胞也是该点阵的一种原胞。该原胞的三维基矢  $a_1, a_2, a_3$  分别与阵胞基矢  $a, b, c$  相等。即

$$\begin{cases} a_1 = a \\ a_2 = b \\ a_3 = c \end{cases} \quad (1-1)$$

原胞体积 = 阵胞体积 =  $a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = abc = a^3$ 。

#### 2) 体心立方(bcc)结构

体心立方的边长为  $a$ , 阵点除了在 8 个顶点外, 立方体的体心还分布有一个阵点, 每个阵胞含有 2 个阵点, 当结构基元为原子时, 则该阵胞含有 2 个原子, 坐标分别为  $(0, 0, 0)$  和  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 。原胞选取如图 1-4 所示, 原胞基矢  $a_1, a_2, a_3$  与阵胞基矢的关系为

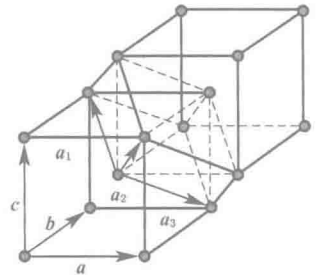


图 1-4 体心立方结构及其原胞

$$\begin{cases} a_1 = \frac{1}{2}(-a + b + c) \\ a_2 = \frac{1}{2}(a - b + c) \\ a_3 = \frac{1}{2}(a + b - c) \end{cases} \quad (1-2)$$

原胞体积为  $a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = \frac{1}{2}a^3$ , 为体心立方阵胞的一半。晶体结构为体心立方的常见

元素有 Mo、W、Li、Na、K、Cr、 $\alpha$ -Fe 等。

### 3) 面心立方(fcc)结构

面心立方的边长为  $a$ ,除了 8 个顶点有阵点外,6 个面的中心均有一个阵点,每个阵胞含有 4 个阵点,其坐标分别为  $(0, 0, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ 、 $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 。该阵胞的原胞选取如图 1-5 所示,原胞基矢  $a_1$ 、 $a_2$ 、 $a_3$  与阵胞基矢  $a$ 、 $b$ 、 $c$  的关系为

$$\begin{cases} a_1 = \frac{1}{2}(b+c) \\ a_2 = \frac{1}{2}(c+a) \\ a_3 = \frac{1}{2}(a+b) \end{cases} \quad (1-3)$$

原胞的体积为  $a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = \frac{1}{4}a^3$ ,仅为阵胞体积的 1/4。晶体结构为面心立方的常见元素有 Al、Cu、Au、Ag、 $\gamma$ -Fe 等。

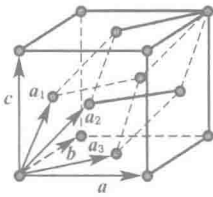


图 1-5 面心立方结构及其原胞

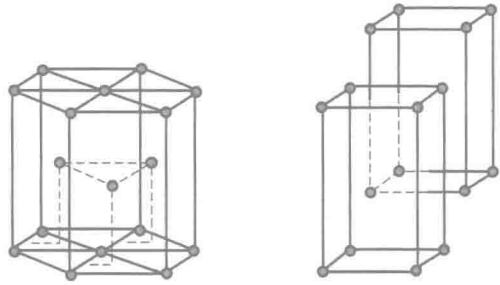


图 1-6 密排六方结构

### 4) 密排六方结构

通常由六棱柱表示。底边边长为  $a$ ,阵点位于上下正六边形的中心和 6 个顶点处,另 3 个位于六棱柱的中截面上,其在底面上的投影处于相隔三角形的重心处,共含六个阵点。顶角、底心上的阵点与中截面上阵点的周围环境不同,因而密排六方结构可看成是由 3 个单位平行六面体组成,每个平行六面体又由两个简单六面体套构而成,故密排六方结构是复式格子。结构基元由两个原子组成。原胞的选取可与晶胞相同,为平行六面体,原胞含有一个基元,共两个原子,其坐标分别为  $(0, 0, 0)$  和  $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$ 。具有密排六方结构的元素有 Mg、Be、Cd、Zn 等。

### 5) NaCl 结构

NaCl 的晶体结构如图 1-7 所示,是典型的离子晶体,每个基元由一个 Na 离子和一个 Cl 离子组成,晶胞共有 4 个基元 8 个离子,Na 离子分布于立方体的顶角和六个面的面心,形成面心立方结构,Cl 离子的分布也构成了面心立方结构,沿棱边平移半个棱边长。因此,NaCl 晶体的空间点阵是由 Na 离子和 Cl 离子两个面心立方结构沿棱边平移半个棱边长套构而成。其空间点阵为面心立方。原胞的选取可等同于面心立方,若以  $\text{Na}^+$  的面心立方选基矢,则平行六面体的顶点为  $\text{Na}^+$ ,而六面体的体心为  $\text{Cl}^-$ ,原胞含有一个基元(一个  $\text{Na}^+$



和一个  $\text{Cl}^-$ ), 其坐标分别为  $(0, 0, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ , 见图 1-7(b)。具有 NaCl 晶体结构的还有 KCl、AgBr、PbS 等。

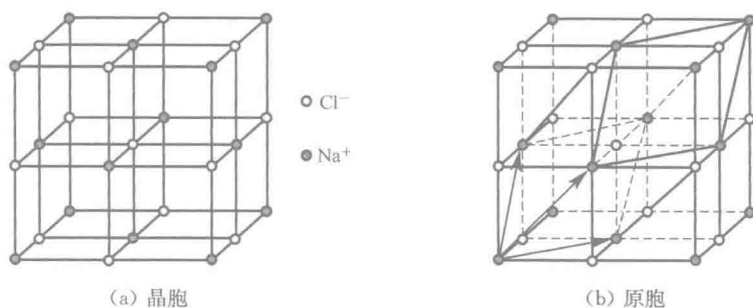


图 1-7 NaCl 结构

### 6) CsCl 结构

晶胞如图 1-8 所示。 $\text{Cl}^-$  和  $\text{Cs}^+$  分别位于立方体的顶角和体心, 每个晶胞含有一个基元,  $\text{Cl}^-$  和  $\text{Cs}^+$  分别构成简单立方结构, 并沿立方体的空间对角线平移  $1/2$  的长度套构而成。其空间点阵为简单立方。该点阵的原胞选取可同于晶胞, 含有一个基元(一个  $\text{Cl}^-$  和一个  $\text{Cs}^+$ )。当  $\text{Cl}^-$  的坐标为  $(0, 0, 0)$  时, 则  $\text{Cs}^+$  的坐标为  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ , 或相反。常见的还有 TiBr、AlTi、BeCu 等。

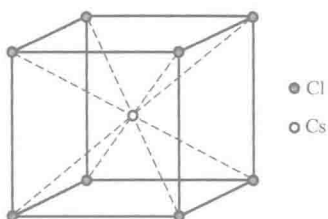


图 1-8 CsCl 结构

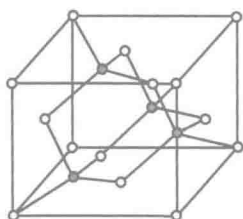


图 1-9 闪锌矿结构

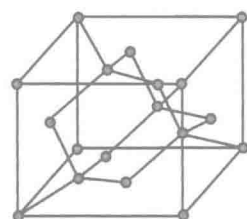


图 1-10 金刚石结构

### 7) 闪锌矿结构

闪锌矿结构如图 1-9 所示。两种异类原子分别构成面心立方结构, 并沿空间对角线方向平移  $1/4$  的长度套构而成, 晶胞中含有 4 个基元。闪锌矿结构的空点阵为面心立方。原胞的选取可同于面心立方, 每个原胞中含有一个基元(两个异类原子)。具有闪锌矿结构的还有 CuF、CuCl、AgI、ZnS、CdS 等。

### 8) 金刚石结构

金刚石结构如图 1-10 所示。是由两套面心立方沿空间对角线平移  $1/4$  的长度套构而成, 晶胞共有 8 个同类原子, 其坐标分别为:  $(0, 0, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ 、 $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 、 $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ 、 $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$ 、 $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$ 、 $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ 。金刚石结构的空点阵为面心立方, 原胞的选取也可同于面心立方, 每个原胞中含有一个基元(两个同类原子), 具有金刚石结构的还有 Si、Ge、Sn 等。