

 材料科学与工程专业
本科系列教材

无机材料科学基础

Wuji Cailiao Kexue Jichu

主 编 马建丽
副主编 鄂 磊



重庆大学出版社

<http://www.cqup.com.cn>

无机材料科学基础

主 编 马建丽
副主编 鄂 磊

重庆大学出版社

内 容 摘 要

本书较全面地介绍了无机材料科学和工程的基础理论,反映了无机材料学科的近代发展状况与水平,具有新颖性和易读性,深广度适中,重点突出,普适性强,在引入新知识的方法上注意了思维方法和分析能力的培养,在文字叙述上概念准确、严谨,数据正确可靠,图、表、事例典型,深入浅出,便于读者理解、自学。本书共10章,内容包括结晶学基础、晶体结构与晶体中的缺陷、无机熔体与非晶态固体、胶体化学基础、表面与界面、热力学应用、相平衡与相图、扩散与固相反应、相变、烧结。

本书可作为高等学校材料科学与工程专业、无机非金属材料科学与工程专业的专业基础课教材,同时也适用于相关专业研究生的教学与科研,还可供材料相关领域的科技人员使用和参考。

图书在版编目(CIP)数据

无机材料科学基础/马建丽主编. —重庆:重庆大学出版社,2008.8

(材料科学与工程本科专业系列教材)

ISBN 978-7-5624-4498-5

I. 无… II. 马… III. 无机材料—材料科学—高等学校—教材 IV. TB321

中国版本图书馆CIP数据核字(2008)第071083号

无机材料科学基础

主 编 马建丽

副主编 鄂 磊

责任编辑:曾令维 邵孟春 版式设计:曾令维

责任校对:谢 芳 责任印制:赵 晟

*

重庆大学出版社出版发行

出版人:张鸽盛

社址:重庆市沙坪坝正街174号重庆大学(A区)内

邮编:400030

电话:(023) 65102378 65105781

传真:(023) 65103686 65105565

网址:<http://www.cqup.com.cn>

邮箱:fxk@cqup.com.cn (市场营销部)

全国新华书店经销

重庆华林天美印务有限公司印刷

*

开本:787×1092 1/16 印张:23.25 字数:580千

2008年8月第1版 2008年8月第1次印刷

印数:1—3 000

ISBN 978-7-5624-4498-5 定价:35.00元

本书如有印刷、装订等质量问题,本社负责调换
版权所有,请勿擅自翻印和用本书
制作各类出版物及配套用书,违者必究

前言

材料是人类赖以生存和发展的物质基础,20世纪70年代人们把信息、材料和能源誉为当代文明的3大支柱。20世纪80年代以高技术群为代表的新技术革命,又把新材料、信息技术和生物技术并列为技术革命的重要标志。这主要是因为材料与国民经济建设、国防建设和人民生活密切相关。

材料除了具有重要性和普遍性外,还具有多样性。因此,材料的分类也是多种多样的。从物理和化学属性来分,可分为金属材料、无机非金属材料、有机高分子材料和不同类型材料组成的复合材料。从用途来分,可分为电子材料、航空航天材料、核材料、能源材料、建筑材料、生物材料等。更常见的两种分类方法则是结构材料与功能材料;传统材料与新型材料(先进材料)。

无机材料是材料的重要组成部分,它不仅是人类认识和应用最早的材料,而且具有金属材料 and 有机高分子材料所无法比拟的优异性能,在现代科学技术中占有越来越重要的地位。传统的无机材料主要以陶瓷、玻璃、水泥和耐火材料等硅酸盐材料为主,是工业和基本建设所必需的基础材料。随着现代高技术的发展,现已在传统硅酸盐材料的基础上开发出许多具有特殊性能的高温高强、电子、光学以及激光、铁电、压电等新型无机材料,所涉及的化合物是整个无机非金属体系,包括含氧酸盐、氧化物、氮化物、碳与碳化物、硼化物、氟化物、硫系化合物等。

“材料科学”是20世纪60年代提出的概念。其有3个重要属性:一是多学科交叉,即固体物理学、结构化学、量子化学、冶金学、金属学、陶瓷学、统计学及计算科学等学科互相融合、交叉,如生物医用材料要涉及医学、生物学及现代分子生物学等学科;二是一种与实际使用结合非常紧密的科学,发展材料科学的目的在于发展新材料,提高材料的性能和质量,合理使用材料,同时降低材料成本和减少对环境的污染等;三是一个正在发展中的科学,不像化学、物理学已经有一个很成熟的体

系,材料学将随着各相关学科的发展而得到充实和完善。

无机材料科学基础是无机材料科学与工程的重要理论基础,其内容定位于将无机材料科学的各种基础理论,包括:结晶学、晶体化学、缺陷化学、熔体化学、非晶态科学、胶体化学、表面与界面化学、材料热力学和材料动力学中的基本知识应用于无机材料领域,阐明无机材料形成过程的实质,揭示无机材料结构与性能的内在联系与变换规律,从而为认识和改进无机材料,设计、研究、开发、生产无机材料提供必备的科学基础。

《无机材料科学基础》是高等学校材料科学与工程专业、无机非金属材料科学与工程专业的一门重要基础理论主干课程,也是研究生入学考试课程。其教材内容和质量对学生的知识结构、后续专业课的学习及学习兴趣的培养等都有着重要的影响,对培养学生科学的思维方法和创新能力以及运用基础理论解决实际问题的能力,构建无机材料科学研究人员和工程技术人员的专业知识体系具有主导作用。本教材是作者在课程改革与建设研究中,结合多年的教学经验,根据当前无机材料科学的发展和材料类创新人才培养的需要,参考国内外较新的同类教材编写而成。教材在内容取材上较全面地涵盖无机材料科学和工程的基础理论,力求既能反映本学科的近代发展状况与水平,又能满足专业基础课教学的要求,突出新颖性和易读性;坚持体现深广度适中,重点突出;增强普适性,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。在引入新知识的方法上注意了思维方法和分析能力的培养。在文字叙述上力求概念准确、严谨,数据正确可靠,图、表、事例典型,深入浅出,使读者易于理解和便于自学。本书共10章,内容包括结晶学基础、晶体结构与晶体中的缺陷、无机熔体与非晶态固体、胶体化学基础、表面与界面、热力学应用、相平衡与相图、扩散与固相反应、相变、烧结,其中胶体化学基础、表面与界面是针对新材料领域的热点问题——粉体制备、材料改性、膜材料、纳米材料等基础理论知识进行了较大篇幅的介绍。为了加深学生对知识的理解,提高解决问题的能力,各章后附有与实际结合紧密地思考题和习题。

本教材由天津城市建设学院的4位教师编写,马建丽主编,并编写第1,4,5,7章,赵丹编写第2章及第8章,鄂磊编写第3章及第9章,宁彩珍编写第6章及第10章。

本教材在编写过程中,兰云泉、李计元、田冬梅老师,高媛、郝亚超、王镒等研究生都做了大量的工作,该书的出版得到了重庆大学出版社的大力支持与协作,作者在此一并表示衷心的感谢!同时,对书中所引用文献的中外作者致以诚挚的谢意!

鉴于作者水平所限,书中不妥之处在所难免,恳请广大读者批评指正。

作者于城建园

2008年4月8日

目 录

第 1 章 结晶学基础	1
1.1 晶体及其基本性质	1
1.1.1 晶体	1
1.1.2 晶体中键的形成	2
1.1.3 晶体的基本性质	2
1.1.4 单晶体多晶体	2
1.2 空间点阵及对称性	3
1.2.1 空间点阵	3
1.2.2 对称性	5
1.3 晶体定向	11
1.3.1 晶体定向和整数定律	11
1.3.2 各晶系晶体的定向法则	12
1.4 结晶符号	14
1.4.1 晶向指数	14
1.4.2 晶面指数	15
1.5 倒易点阵的应用	16
1.5.1 晶带及晶带轴	16
1.5.2 晶带方程	17
1.5.3 求 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$ 两个晶面构成的晶带	17
1.5.4 求 $[u_1v_1w_1]$ 和 $[u_2v_2w_2]$ 决定的平面	17
1.5.5 晶面间距	17
1.5.6 晶面 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$ 的夹角 φ	18
1.5.7 晶向 $[u_1v_1w_1]$ 和 $[u_2v_2w_2]$ 的夹角 ρ	19
1.5.8 晶向的长度	20
1.6 结晶化学基本原理	20
1.6.1 紧密堆积原理	20
1.6.2 配位数和配位多面体	22
1.6.3 离子半径	23
1.6.4 离子极化	24

1.6.5	电负性	24
1.6.6	鲍林规则	25
1.6.7	晶体的结合力及其结合能	27
1.6.8	晶体的晶格能	31
	习题 1	33
第 2 章	晶体结构与晶体中的缺陷	35
2.1	典型结构类型	35
2.1.1	由立方面心点阵构成的典型结构	35
2.1.2	由密排六方点阵构成的典型结构	39
2.1.3	其他晶体结构	40
2.2	硅酸盐晶体结构	43
2.2.1	硅酸盐晶体结构的一般特点及分类	43
2.2.2	岛状结构	44
2.2.3	族群状结构	45
2.2.4	链状结构	46
2.2.5	层状结构	47
2.2.6	架状结构	49
2.3	晶体结构缺陷	51
2.3.1	点缺陷	51
2.3.2	固溶体	59
2.3.3	非化学计量化合物	65
2.3.4	线缺陷	67
2.3.5	面缺陷	71
	习题 2	73
第 3 章	无机熔体与非晶态固体	75
3.1	熔体的结构	75
3.2	熔体的性质	77
3.2.1	黏度	77
3.2.2	表面张力(γ)和表面能	80
3.2.3	导电性能	82
3.3	玻璃的结构	83
3.3.1	无规则网络学说	83
3.3.2	晶子学说	85
3.3.3	两大学说的比较和发展	85
3.4	玻璃的形成条件	86
3.4.1	热力学条件	86
3.4.2	动力学条件	87

3.4.3	结晶化学条件	90
3.5	玻璃的通性	92
3.5.1	各向同性	92
3.5.2	介稳性	92
3.5.3	熔融态向玻璃态转化的渐变性和可逆性	92
3.5.4	由熔融态向玻璃态转变过程中,物理、化学性质连续变化	93
3.5.5	可变性	93
3.6	常见玻璃的类型	93
3.6.1	硅酸盐玻璃	93
3.6.2	硼酸盐玻璃	96
3.6.3	磷酸盐玻璃	96
3.6.4	锗酸盐玻璃	97
3.6.5	卤化物玻璃	97
3.7	其他非晶态材料	97
3.7.1	金属玻璃(非晶态合金)	97
3.7.2	非晶态半导体	99
3.7.3	玻璃陶瓷(微晶玻璃)	103
	习题3	104
第4章	胶体化学基础	106
4.1	胶体化学简述	106
4.1.1	分散体系与溶胶	106
4.1.2	溶胶的基本性质	107
4.1.3	溶胶的胶团结构	110
4.1.4	溶胶的稳定性和聚沉作用	111
4.2	无机非金属材料浆料的胶体特性	114
4.2.1	黏土胶体化学的特点	114
4.2.2	陶瓷浆料	117
4.2.3	瘠性料的悬浮与塑化	119
4.3	溶胶-凝胶理论与无机材料	121
4.3.1	溶胶-凝胶简述	121
4.3.2	溶胶-凝胶法分类及原理	121
	习题4	125
第5章	表面与界面	126
5.1	材料的表面	126
5.1.1	表面的定义	126
5.1.2	理想表面	127
5.1.3	真实表面	127

5.2	表面缺陷与 TLK 模型	131
5.3	表面原子扩散	132
5.3.1	表面原子扩散机制	133
5.3.2	晶面增原子扩散	134
5.3.3	晶体结构和扩散系数的定量表述	135
5.3.4	晶面指数对自扩散的影响	136
5.3.5	增原子种类对扩散参数的影响	137
5.3.6	表面多原子、分子迁移扩散	139
5.4	材料表面电子结构	142
5.4.1	从原子轨道分裂能级到固体能带	142
5.4.2	三维晶体电子结构和 Bloch 波函数	142
5.4.3	表面态的定性理解	144
5.4.4	费米能 E_F 及费米分布函数 $F(E)$	145
5.4.5	状态密度	146
5.4.6	金属表面电子结构的特点	148
5.4.7	半导体表面电子结构	150
5.4.8	纳米材料表面电子结构简介	156
5.5	表面行为	160
5.5.1	表面吸附与偏析	160
5.5.2	弯曲表面效应	161
5.5.3	润湿与黏附	163
5.6	界面及界面结构	165
5.6.1	晶界	166
5.6.2	界面的空间表示	166
5.6.3	小角晶界及界面能	166
5.6.4	大角晶界及界面能	169
5.6.5	共格界面理论	171
5.6.6	晶界构型	173
5.7	界面特性	176
5.7.1	晶界偏析	176
5.7.2	晶界应力	178
5.7.3	晶界电荷与静电势	179
	习题 5	181
	第 6 章 热力学应用	183
6.1	热力学在凝聚态体系中应用的特点	183
6.1.1	化学反应过程的方向性	183
6.1.2	过程产物的稳定序和生成序	184
6.1.3	经典热力学应用的局限性	184

6.2	热力学应用计算方法	185
6.2.1	经典法	185
6.2.2	Φ 函数法	186
6.2.3	ΔG 算法举例	187
6.3	热力学应用实例	190
6.3.1	伴有气相参与的固相反应	190
6.3.2	伴有熔体参与的固相反应	192
6.3.3	金属氧化物的高温稳定性	193
6.4	晶体缺陷热力学	196
6.4.1	空位热力学	196
6.4.2	位错热力学	197
6.4.3	界面热力学	198
6.5	相图热力学	199
6.5.1	自由能-组成曲线	199
6.5.2	自由能-组成曲线相互关系的确定	202
6.5.3	自由能-组成曲线推导相图	203
	习题 6	205
第 7 章 相平衡与相图		207
7.1	相平衡的基本概念	208
7.1.1	相	208
7.1.2	相平衡	209
7.1.3	相律	209
7.2	相平衡的研究方法	211
7.2.1	动态法	211
7.2.2	静态法(即淬冷法)	214
7.3	单元系统	215
7.3.1	单元系统相图的基本原理	215
7.3.2	专业单元系统相图	217
7.4	二元系统	220
7.4.1	二元系统的相图类型	221
7.4.2	二元系统相图举例	227
7.5	三元系统	233
7.5.1	三元系统组成的表示方法	233
7.5.2	浓度三角形的性质	234
7.5.3	三元系统相图的基本类型	236
7.5.4	三元系统相图举例	246
7.6	四元系统	254
7.6.1	四元系统组成表示方法	255

7.6.2	简单四元系统	255
7.6.3	生成化合物的四元系统	256
7.6.4	CaO-C ₂ S-C ₁₂ A ₇ -C ₄ AF 四元系统	260
7.7	三元交互系统	263
7.7.1	组成表示方法	263
7.7.2	状态图	264
	习题 7	265
第 8 章	扩散与固相反应	271
8.1	扩散动力学方程	271
8.1.1	菲克第一定律	271
8.1.2	菲克第二定律	272
8.1.3	扩散的布朗运动理论	272
8.1.4	扩散动力学方程的应用	273
8.2	扩散系数	275
8.2.1	扩散过程的推动力	275
8.2.2	扩散系数	277
8.2.3	固体氧化物中的扩散	278
8.3	扩散的影响因素	280
8.3.1	内在因素	280
8.3.2	外在因素	282
8.4	固相反应机理	283
8.4.1	固相反应的含义及特征	283
8.4.2	固相反应的分类	284
8.4.3	固相反应的机理	284
8.5	固相反应动力学方程	285
8.5.1	一般动力学关系	285
8.5.2	化学反应动力学范围	286
8.5.3	扩散动力学范围	287
8.6	影响固相反应的因素	292
8.6.1	内在因素	292
8.6.2	外在因素	293
	习题 8	294
第 9 章	相变	296
9.1	相变的分类	296
9.1.1	按物态变化分类	296
9.1.2	按热力学分类	296
9.1.3	按结构变化分类	298

9.1.4	按相变机理分类	298
9.1.5	按质点迁移特征分类	298
9.2	液-固相变	298
9.2.1	相变过程的不平衡态与亚稳区	298
9.2.2	相变过程热力学	299
9.2.3	晶核形成条件	300
9.3	液-固相变过程动力学	302
9.3.1	晶核形成过程动力学	302
9.3.2	晶体生长过程动力学	304
9.3.3	总的结晶速率	306
9.3.4	析晶过程	308
9.3.5	影响析晶能力的因素	309
9.4	液-液相变过程	310
9.4.1	液相的不混溶现象——玻璃的分相	310
9.4.2	亚稳和失稳分解过程	311
9.5	固-固相变	314
9.5.1	固态相变的特点	314
9.5.2	固态相变时的成核	316
9.5.3	晶核长大	318
9.5.4	固态相变的基本结构特征	320
9.6	气-固相变	322
9.6.1	蒸发	323
9.6.2	凝聚	323
	习题9	323
第10章	烧结	325
10.1	概述	325
10.1.1	烧结定义	325
10.1.2	烧结过程	326
10.1.3	与烧结相关的概念	327
10.1.4	烧结推动力	327
10.1.5	烧结模型	330
10.2	固态烧结	331
10.2.1	蒸发-凝聚传质(气相传质)	331
10.2.2	扩散传质	333
10.3	液态烧结	339
10.3.1	液态烧结的特点	339
10.3.2	液相烧结模型	339
10.3.3	流动传质	339

10.3.4	溶解-沉淀传质	341
10.3.5	各种传质机理分析比较	343
10.4	烧结过程中的结晶与晶粒长大	344
10.4.1	初次再结晶	344
10.4.2	晶粒长大	345
10.4.3	二次再结晶	347
10.4.4	晶界在烧结中的作用	348
10.5	影响烧结的因素	349
10.5.1	原始粉末性质	349
10.5.2	外加剂	352
10.5.3	成型压力	353
10.5.4	烧结工艺	353
	习题 10	354
	参考文献	355

第 1 章

结晶学基础

结晶学是以晶体为研究对象的自然科学。从本质上看,晶体是由其构造基元(即组成晶体的原子、分子或离子团)在空间作近似无限的、周期的重复排列构成的。晶体材料可按不同方法进行分类,按化学组成可分为无机晶体、有机晶体;按状态可分为单晶、多晶、晶体薄膜、晶须或晶体纤维;按物理性质可分为光学晶体、激光晶体、非线性晶体、压电晶体、闪烁晶体、电学晶体、磁光晶体、声光晶体等。结晶学对晶体的研究首先是从研究晶体几何外形的特征开始的。17 世纪初开普勒(Johannes Kepler)就提出球形粒子密堆成雪晶的设想,随后矿物学家对晶体的多面体外形进行了详细的研究,揭示了晶面角守恒定律和晶面的有理指数定律。到 18 世纪末,Haiiy 描述了如何从分子基块(平行六面体)构成各种晶体的直观设想。19 世纪出现了布喇菲(A. Bravais)的空间点阵学说,这一学说能解释有理指数定律和晶面角守恒定律,但它只是合理的猜想,其正确性到 1912 年才被劳厄(Laue, Max Theodor Felix von)等人的 X 射线衍射实验证实。几十年来的研究已探明了成千上万的晶体结构,肯定了晶体的周期性。

结晶学的研究内容主要包括:晶体生成学、几何结晶学、晶体结构学、晶体化学和晶体物理学等。本章重点介绍几何结晶学的基础。

1.1 晶体及其基本性质

1.1.1 晶体

晶体最早以其规则的几何外形和美丽的色彩引起人们的注意,随着人类认识的深入和科学技术的发展,人们逐渐认识到,规则的几何外形并不是晶体的本质,很多晶体由于受到生长条件的限制或后期损伤而不具有规则的几何外形。例如,NaCl 应具有立方体的外形,但有些食盐颗粒却是无规则多面体。那么什么又是晶体的本质呢?

晶体是原子(或分子)在三维空间作规则的周期性重复排列的固体。金属与陶瓷通常是晶态,高分子材料或生物材料也有相应的晶相。

1.1.2 晶体中键的形成

按照晶体中原子之间结合力的本质(即化学键)的类型,可把晶体分为离子晶体、共价晶体(或原子晶体)、金属晶体、分子晶体。其中离子晶体是由正、负离子以离子键结合起来的晶体;共价晶体是原子之间靠共价键结合起来的晶体;构成分子晶体的结构单元是分子,分子内原子是靠共价键结合,而分子与分子之间是靠范德华力结合的晶体;组成晶体的原子是由金属键结合起来的,称之为金属晶体。

1.1.3 晶体的基本性质

晶体的基本性质是指一切晶体所共有的,与其他状态的物体相区别的性质。它是由晶体所具有的格子所决定的。晶体的基本性质主要有以下七项。

1) 固定熔点(Definite melting point):晶体在熔化时必须吸收一定的熔融热才能转变为液态(同样在凝固时放出同样大小的结晶热)。

2) 结晶均一性(Uniformity):由于晶体内部结构的特征,因此,晶体在其任一部位上都具有相同的性质。例如,在晶体的不同部位任意取下两小块,测定其密度时,它们应该完全相同。同样,它们在相应的光学、电学、热学等性能也完全相同。

3) 各向异性(Aeolotropism):晶体在不同的方向上表现出性质的差异称为晶体的各向异性。如:石墨的电导率不同方向差别很大,垂直方向为层平行方向的 $1/10^4$ 。蓝晶石硬度,AA方向莫氏硬度为4.5,BB方向为7,食盐晶体抗张强度,对角线方向最大,垂直晶面方向最小。这也是由于晶体的格子构造所决定的。因为在晶体的不同方向上,质点的排列方式和距离可以不同的,所以反映在晶体的性能上,不同方向就有差别。

4) 自限性(Self-limited):晶体能自发地形成封闭的凸几何多面体外形的特征,称为晶体的自限性或自范性。结晶多面体上的平面称为晶面。晶面的交棱称为晶棱。对应于晶体的空间格子构造,晶面相当于最外层的面网,晶棱就相当于最外层面网相交的行列。晶体的自限性也是由晶体的本质所决定的。只要有足够的空间,晶体就能生成一定的规则几何外形。反之,晶体由于生长条件的限制,往往不具有规则的几何外形。但是,这并不能说明晶体不具有自限性。

5) 对称性(Symmetry):晶体中的相同部分(包括晶面、晶棱等)以及晶体的性质能够在不同的方向或位置上有规律地重复出现,称为晶体的对称性。它也是由晶体内部质点按周期重复排列的结果。

6) 热力学能最小性(Stability):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热力学能为最小。因此,晶体是最稳定的。

7) 晶面角守恒(Conservation law of crystal face angle):晶体的晶面大小和形状会随外界的条件不同而变化,但同一种晶体的相应晶面(或晶棱)间的夹角却不受外界条件的影响,它们保持恒定不变的值。

1.1.4 单晶体多晶体

由一个核心(称为晶核)生长而成的晶体称为单晶体,在单晶体中所有原子都是按同一取向排列。一些天然晶体如金刚石、水晶等是单晶体,它们都具有规则的几何形状和一定的对称

性。现已能够人工培育制造出各种单晶体,如单晶硅、单晶锗、红宝石等。但是,通常材料都是由许多位向不同的小晶体所组成的,故称为多晶体。这些小晶体往往是颗粒状的,具有不规则的外形,因此称为晶粒。晶粒与晶粒之间的接触面称为界面,又叫晶界。虽然每个晶粒都存在各向异性,但是由许多位向不同的晶粒组合在一起形成的晶体材料,其性能则是各个晶粒性能的平均值,故表现为各向同性,这种现象称为多晶体的宏观各向同性。对于多晶体材料,虽然在整个材料内部原子的排列不存在完全一致的规律性,但对某一晶粒而言,其原子排列是规律的。各晶粒之间虽有不同取向,但各晶粒内原子的排列方式又基本一致,且晶粒的半径(一般 $1\ \mu\text{m} \sim 0.1\ \text{mm}$)远大于原子间距(约 $200\ \text{pm}$),所以仍可称之为长程有序。

1.2 空间点阵及对称性

1.2.1 空间点阵

(1) 空间点阵

我们把由一系列在三维空间按周期性排列的几何点称为一个空间点阵。点阵体现了晶体的平移对称性或周期性。我们可以通过图 1.1 来理解点阵的概念。在这里我们要运用一些想象力,忘却边框的存在,令图像延伸到无限远处。首先在图形上任意选定一点 m ,然后在图形中寻找与 m 环境全同的其他点,例如图中的 n 点或其他点,这些环境相同的点所构成的阵列就成为该图的点阵。点阵是对实在图形进行抽象化的产物,用于说明图形的平移对称性。从 m 点到 n 点,对应平移矢量 t 的平移被称为点阵平移。原图作了点阵平移后,将可以完全恢复。值得注意的是,平移对称性只适用于无限大的图形,有限图形的边框会导致图形不能完全恢复。从 m 点出发可以在非共线的两个方向求出最短的平移矢量 a 和 b ,称为基矢,则

$$t = n_1 a + n_2 b \quad (n_1, n_2 \text{ 为整数}) \quad (1.1)$$

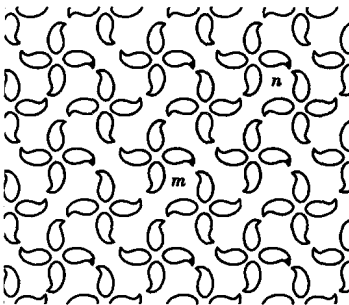


图 1.1 墙纸与其相应的点阵类型

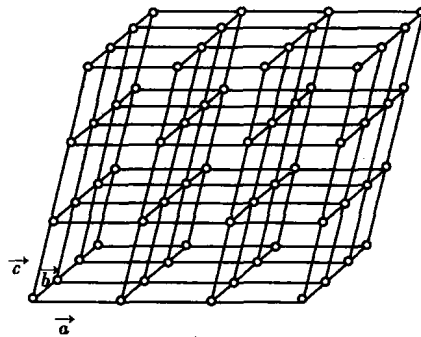


图 1.2 三维点阵

三维情况如图 1.2 所示。完全类似,为

$$t = n_1 a + n_2 b + n_3 c \quad (n_1, n_2, n_3 \text{ 为整数}) \quad (1.2)$$

在无限的三维空间点阵中,存在下列几种要素:

- 1) 结点——空间点阵中的阵点,它们代表晶体结构中的等同点。
- 2) 行列——结点在直线上的排列,如图 1.3 所示。行列中相邻结点间的距离称为结点间