

日向同月秋月九五 四象数生万物



# 现代物理 测试技术

梁志德 王福 主编

冶金工业出版社



**普通高等教育“九五”国家级重点教材**

# **现代物理测试技术**

**梁志德 王 福 主编**

北 京  
冶金工业出版社  
2003

## 内 容 提 要

《现代物理测试技术》是高等学校材料科学与工程学科的本科生教材之一。

内容包括材料的物理测试技术中广泛应用的 X 射线衍射分析、透射电镜分析以及应用日广的扫描电镜及其 EBSP 分析、中子衍射分析和正受关注的某些表面分析技术。教材着重阐述各项技术及相应设备的工作原理,力求概念正确、清晰、形象。为便于学习,增加晶体学概要一章,并在各章后附有适量的习题。

本书适用于金属材料及无机非金属材料等专业的教学;材料科学与工程其他各专业亦可参考或采用。

## 图书在版编目(CIP)数据

现代物理测试技术 / 梁志德等主编. —北京 : 冶金工业出版社, 2003.3

普通高等教育“九五”国家级重点教材

ISBN 7-5024-3186-1

I . 现… II . 梁… III . 金属材料—物理性质试验—高等学校—教材 IV . TG115.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 110955 号

出版人 曹胜利(北京沙滩嵩祝院北巷 39 号, 邮编 100009)

责任编辑 刘冀琼 宋 良 美术编辑 王耀忠 责任校对 符燕蓉 责任印制 李玉山  
北京兴华印刷厂印刷; 冶金工业出版社发行; 各地新华书店经销

2003 年 3 月第 1 版, 2003 年 3 月第 1 次印刷

787mm×1092mm 1/16; 15.5 印张; 373 千字; 239 页; 1-2500 册

29.00 元

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

(本社图书如有印装质量问题, 本社发行部负责退换)



## 作 者 简 介

**梁志德** 1929年生，河北丰润人，1951年北洋大学冶金系毕业，现为东北大学教授、博士生导师。一直从事教学与科研工作，因系统发展了现代织构分析(ODF分析)而为国际织构界所重视，应邀担任《Textures and Microstructures》编委及国际材料织构会议(ICOTOM)常设国际委员会委员，1997年被选为亚洲—太平洋材料科学院成员；出版专著7部，发表论文百余篇，获省部级自然科学、科技进步奖10余项。



## 作 者 简 介

**王 福** 1941年生，黑龙江宁安人，1964年毕业于东北工学院，现为东北大学教授、博士生导师。1985年至1987年留学德国，从事材料性能与晶体取向关系的研究。一直从事教学与科研工作，在现代织构分析（ODF分析）方面做了大量工作，提出信息熵理论和完整ODF的计算，解决了剪断误差和齐次项丢失问题，受到国际同行的赞誉；共同开展了织构模拟、形变与再结晶织构的理论与应用研究工作，居国内先进水平；参与汽车板、电工钢、铝合金等材料的研究与开发工作；合写专著5部，发表论文80余篇，获省部级自然科学、科技进步奖9项。

## 前　　言

遵照我国高等教育改革的精神,材料学科各专业的教学计划中设有“现代物理测试技术”课,学时定为70。通过课程学习,学生对材料科学领域的研究和检测中常用的各种现代物理测试技术将有一个系统、概括和原理性的了解,达到能恰当选择测试技术,正确理解所得到的测试结果,必要时有能力经过自学实现亲自测试和分析。据此,我们编写了本教材。

材料科学领域中现代物理测试技术发展极快,新技术与日俱增。本书以应用最广和最基础的X射线衍射和透射电镜分析技术为主,并适当地向应用日广,且备受关注的技术扩展。扫描电镜一章中加入了应用日广的“电子背散射花样分析”的内容;电子探针虽应用较多,但因其工作原理与扫描电镜相同,故未单独论述。中子衍射、俄歇谱、光电子谱和扫描隧道显微镜分析等技术在材料测试中均有特长,本书各予简介。此外,为利于对衍射、衍衬分析的理解,书前加“晶体学概要”一章。

本书由徐家桢、魏全金、左良、赵骥、王沿东、郭启志、王福、梁志德等执笔编写,梁志德、王福担任主编。编写过程得到了东北大学的支持,编者在此表示感谢。

中国科学院沈阳金属研究所林树智教授、苏会合高级工程师和东北大学张彩培教授认真审阅了书稿,提出了多项宝贵意见,编者们除虚心接受并据之修改外,谨表衷心的感谢。

由于编写者的业务水平和对教改精神的领会能力所限,本书在内容的撷取,论述的粗详和具体条目的理解等方面会有所不当,谬误之处,尚祈国内同仁和读者们不吝批评、指出,容日后改正。

编　者

2002年8月

# 目 录

<b>1 晶体学概要 .....</b>	<b>1</b>
1.1 晶体的对称性 .....	1
1.2 点群与晶系 .....	2
1.3 晶体结构、空间点阵、空间群 .....	4
1.4 晶体学参数 .....	9
1.5 晶带 .....	13
1.6 倒易点阵 .....	14
1.7 晶体投影 .....	15
习题 .....	20
<b>2 X 射线及其与物质的相互作用 .....</b>	<b>23</b>
2.1 X 射线的性质 .....	23
2.2 X 射线的产生 .....	23
2.3 X 射线管的 X 射线谱 .....	26
2.4 X 射线在物质中的衰减 .....	29
2.5 X 射线的防护 .....	33
习题 .....	33
<b>3 X 射线衍射实验基础 .....</b>	<b>35</b>
3.1 一个电子对 X 射线的散射 .....	35
3.2 一个原子对 X 射线的散射 .....	37
3.3 简单晶体对 X 射线的衍射 .....	41
3.4 复杂晶体对 X 射线的衍射 .....	45
3.5 衍射实验方法概要 .....	50
3.6 衍射实验的爱瓦德作图法 .....	52
习题 .....	53
<b>4 X 射线衍射基本实验技术 .....</b>	<b>55</b>
4.1 粉末照相法 .....	55
4.2 多晶衍射仪法 .....	60
4.3 X 射线能量色散测量 .....	67
4.4 多晶衍射花样的度量和指数化 .....	69

4.5 多晶衍射技术的发展.....	77
4.6 单晶衍射技术——劳埃法.....	78
习题 .....	86
<b>5 X 射线(多晶)衍射技术的若干应用.....</b>	<b>88</b>
5.1 晶块尺寸与微观应力的测定.....	88
5.2 晶胞常数的精确测定.....	93
5.3 织构的测定.....	98
5.4 宏观应力的测定 .....	106
5.5 物相分析 .....	110
5.6 晶体结构测定和非晶态结构测定简介 .....	115
习题.....	118
<b>6 X 射线小角度散射、貌相分析及扩展 X 射线吸收谱分析简介 .....</b>	<b>119</b>
6.1 X 射线小角度散射 .....	119
6.2 X 射线衍射貌相分析 .....	123
6.3 扩展 X 射线吸收精细结构 .....	131
习题.....	135
<b>7 透射电子显微镜的结构与功能 .....</b>	<b>136</b>
7.1 电子波 .....	136
7.2 电子透镜 .....	137
7.3 电子显微镜的构成 .....	138
习题.....	143
<b>8 电镜中的电子衍射分析 .....</b>	<b>144</b>
8.1 斑点花样及其解释 .....	144
8.2 菊池线花样 .....	169
8.3 会聚束衍射花样(CBDP)简介.....	175
习题.....	177
<b>9 电镜显微图像及其解释 .....</b>	<b>178</b>
9.1 复型像(质厚衬度像) .....	178
9.2 衍衬像 .....	182
9.3 转角 $\phi$ 的校正 .....	206
习题.....	206
<b>10 扫描电子显微镜.....</b>	<b>207</b>
10.1 SEM 结构原理 .....	207

10.2 各种信号.....	208
10.3 实验内容.....	209
10.4 扫描透射电子显微镜(STEM) .....	223
习题.....	224
<b>11 中子衍射简介.....</b>	<b>225</b>
11.1 中子散射原理.....	225
11.2 中子源及衍射装置.....	226
11.3 中子衍射技术在材料科学中的应用.....	228
习题.....	229
<b>12 表面探针及扫描隧道显微镜简介.....</b>	<b>230</b>
12.1 俄歇电子(能)谱(AES) .....	230
12.2 扫描隧道显微镜(STM) .....	234
12.3 X射线光电子谱(XPS) .....	237
习题.....	239
<b>主要参考书.....</b>	<b>240</b>

# 1 晶体学概要

## 1.1 晶体的对称性

岩盐、萤石、钙长石等都是常见晶体(图 1-1)。在结晶条件理想、发育完全时,晶体具有自然形成的规则外形,即由平面和凸出的棱和角组成的形体,称晶体多面体。结晶条件不好,晶体外形则发育不完全,甚至没有规则外形。譬如,金属合金。规则外形虽不是晶体根本的几何学特征,却使人有理由猜想,晶体是由大量的、彼此相同的质点或几种质点在三维空间规则排列而成的物体。组成晶体的物质点可以是原子、离子、原子团,其规则排列则是位置的周期性重复。X 射线衍射分析完全证实这点。

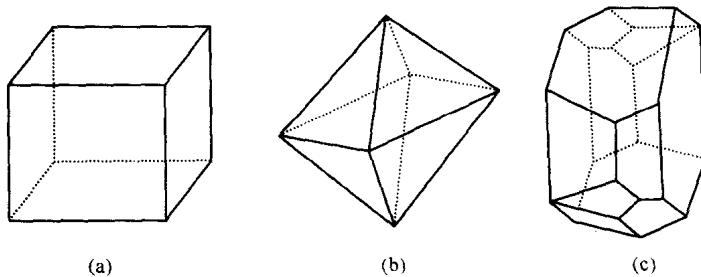


图 1-1 晶体多面体  
(a) 岩盐; (b) 萤石; (c) 钙长石

晶体多面体的规则外形和晶体结构中质点规则排列的图像的最重要几何学特征是其对称性。譬如,岩盐晶体(图 1-2)有如下几个特征:1)过中分平面将晶体分为左右两个相等图形,则此平面宛如一面镜子,使该二图形互为镜像,即左右任一相等图形互移至其像位置后,整个岩盐晶体相对观察者的形态(图形大小,配置关系)不变;2)晶体绕其中线(Z 轴)旋转 90°后,整个晶体形态不变;3)过晶体中心 O 任一直线上距 O 等远的两端晶体情况相同,即该两端图形互易位置后,整个晶体形态不变,等等。通过对大量晶体多面体的图形分析,导出了关于图形对称性的论述:1)一个形体如具有有限多个相等图形且图形呈规则分布,则称这些图形是对称分布,它们互为对称;如整个形体是由这些相等图形组成,则该形体为对称形体;相等图形的含意是各图形相对某一几何元素(点、直线、平面等等)具有同一规律的位置关系;如一图形中有任意两点 P、Q,则另一图形必有相应两点 P'、Q',且  $P'Q' = PQ$ ; 2)对称形

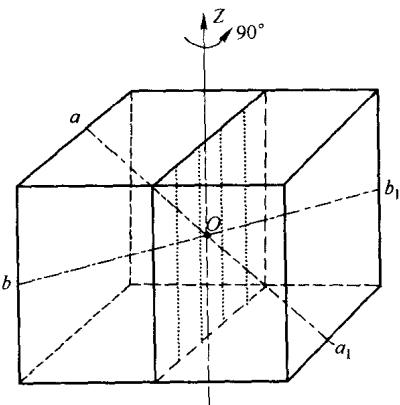


图 1-2 岩盐晶体外形的对称

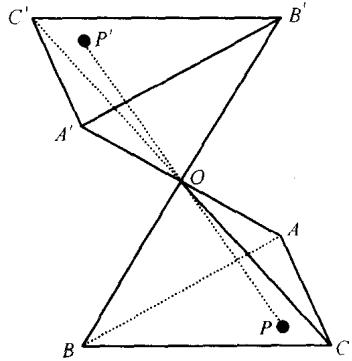


图 1-3 反演对称

体中各相等图形,按某种位置关系规则变换后形体恢复到变换前形态,称此变换为对称变换(复杂形体需通过对称变换来明显确认其中各图形是否对称分布);3)对称分布或对称变换时凭借的参照几何元素称为对称元素;4)对称形体中各相等图形可按不同的位置关系规则分布,因此有不同类型的对称。

晶体多面体外形的对称有 4 类:

(1) 反映对称 形体中二个相等图形相对于某一平面构成互为镜像位置关系,称该形体具有反映对称。该对称的对称元素是参照平面,名反映面,也称对称面,记为  $m$ (例如图 1-2 中的竖直线面)。

(2) 反演对称 形体中二相等图形的任一对对应点( $P, P'$ )均在过参照点  $O$  直线的两端,且  $\overline{PO} = \overline{P'O}$ (图 1-3),称该形体具有反演对称。对称元素为参照点  $O$  名反演心,记为  $I$ ,即图 1-2 中的点  $O$ 。

(3) 旋转对称 形体中  $n$  个相等图形绕某一轴线旋转角度  $\alpha (= 360^\circ/n)$  后,整个形体恢复原来形态,则称此形体有  $n$  次旋转对称。该轴线为对称元素,名  $n$  次旋转轴,记为  $n$ (图 1-2 中  $OZ$  轴有  $n = 4$ )。由于晶体有内部结构,旋转对称需适应其质点排列周期性重复的约束。故  $n$  只能为 1、2、3、4、6 五种,不能为 5 或大于 6。

(4) 旋转-反演对称 形体中  $n$  个相等图形绕某一轴线旋转角度  $\alpha (= 360^\circ/n)$  后,再经反演变换,形体恢复原来形态,称该形体有旋转-反演对称。此轴线为对称元素,名反演轴,记为  $n$ 。该对称变换为复合变换,即两步变换均完成后,形体恢复原来形态。改变两步变换前后顺序,不会影响复合变换后的效果。显然,一次旋转-反演等效于反演,二次旋转-反演等效于垂直该反演轴的反映,……;惟四次对称变换是新的对称变换。因此,上列 4 类对称可简并为 2 类(旋转,旋转-反演)变换讨论。以上诸对称均为有限个相等图形(晶体多面体外形即为一例)之间位置分布关系的规律,统称为宏观对称。

## 1.2 点群与晶系

考查不同晶体(譬如图 1-1)对称情况时,便可发现:(1)不同晶体具有不同种类和数量的对称;(2)一个晶体的对称元素种类和数量是有限的,譬如,立方晶体有 3 个四次轴、4 个三次轴、6 个二次轴、9 个对称面、1 个反演心;(3)晶体中各对称元素之间配置方式是固定的,即一个晶体中可以同时存在多种对称类型和数量,但它们之间必然存在着几何学上互为制约的关系。譬如,两个对称面相交,其交线必为一个对称轴;3 次轴与 4 次轴共存时,其交角必为  $54^\circ 44'$ ,且它们的数量分别为 4 和 3;晶体中 4 次轴的数量只能有 1 或 3 两种情况;6 次轴与 4 次轴不能同时存在于一个形体中;等等。这些制约规律使晶体多面体中对称元素组合方式只能有 32 种,名 32 种点群,见表 1-1。

每一种点群中对称元素的种类、数量及配置关系是固定的,可用点群国际符号来表述。譬如, $432, 222, 2mm, 32, 23, 4/m \dots$ 。符号的表述约定为:对任一点群选取不多于 3 个特征方向(下称特征晶轴方向),依序写出各方向上的对称元素符号而成。譬如, $432$  表示平行第一、二、三特征晶轴方向分别为 4 次轴、3 次轴、2 次轴的点群; $4/m$  点群则表示平行第一特

表 1-1 晶体 32 种点群 七大晶系

晶系	国际符号		特征对称元素
	全写	简写	
三斜	1	1	
	$\bar{1}$	$\bar{1}$	
单斜	$m$	$m$	
	2	2	1 个 2 次轴或 2 次反演轴
	$2/m$	$2/m$	
斜方 (正交)	$2mm$	$mm$	
	222	222	
	$2/m$	$mmm$	3 个互相垂直的 2 次轴或镜面
	$2/m$		
正方 (四方)	4	4	
	$\bar{4}$	$\bar{4}$	
	$4/m$	$4/m$	
	$\bar{4}2m$	$\bar{4}2m$	1 个 4 次轴或 4 次反演轴
	$4mm$	$4mm$	
	422	42	
	$4/m$	$4/mmm$	
	$2/m$		
	$2/m$		
三方 (三角)	3	3	
	$\bar{3}$	$\bar{3}$	
	$3m$	$3m$	
	32	32	1 个 3 次轴或 3 次反演轴
	$\bar{3}2/m$	$\bar{3}m$	
六方	6	6	
	$\bar{6}$	$\bar{6}$	
	$6/m$	$6/m$	
	$\bar{6}2m$	$\bar{6}2m$	1 个 6 次轴或 6 次反演轴
	$6mm$	$6mm$	
	622	62	
	$6/m$	$6/mmm$	
	$2/m$		
立方	23	23	
	$2/m3$	$m3$	
	$\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$	4 个 3 次轴或 3 次反演轴
	432	43	
	$4/m$	$m3m$	
$\bar{3}2/m$			

征晶轴方向不仅为 4 次轴,而且还有法线平行该特征晶轴方向的对称面,等等。32 种点群又可依据具有特征对称种类的不同并归成七类,即七种晶系(表 1-1)。譬如, $23$ 、 $m3$ 、 $432$ 、 $\bar{4}3m$ 、 $m3m$  五种点群均具有 4 个 3 次轴,这 4 个 3 次轴称为该晶系的特征对称元素,名立方晶系; $222$ 、 $2mm$ 、 $mmm$  三种点群均具有 3 个互相垂直的 2 次轴或对称面,具有此特征对称元素的晶系,名正交晶系,等等。即具有同一类特征对称元素的各晶体同属一种晶系。各晶系特征对称元素的约定也是以最能体现该类晶体对称特点为依据的。点群国际符号的特征

晶轴方向(表 1-2)的约定是依据最能体现该类各点群共同对称特点的原则。点群国际符号虽仅给出不多于 3 个方向上的对称元素,但可依据对称原理由其推引出该点群的其他对称元素及其分布的情况,譬如,立方体具有  $\frac{4}{m} 3 \frac{2}{m}$  点群,正四面体则具有 23 点群。

表 1-2 点群的特征晶轴方向约定

晶系	3 个位置所代表的方向		
	1	2	3
立方晶系	$a$	$a + b + c$	$a + b$
六方晶系	$c$	$a$	$2a + b$
四方晶系	$c$	$a$	$a + b$
三方晶系	$a + b + c$	$a - b$	—
三方晶系(取六方晶系)	$c$	$a$	—
正交晶系	$a$	$b$	$c$
单斜晶系	$b$	—	—
三斜晶系	—	—	—

注:  $a$ 、 $b$ 、 $c$  的含意将在 1.3.2 小节中阐明。

## 1.3 晶体结构、空间点阵、空间群

### 1.3.1 晶体结构

组成一晶体的物质点在三维空间呈周期排列的构型即为该晶体的晶体结构。从其中抽出一个能完全体现此晶体结构物质组成和几何分布特征并显现其所源晶体多面体对称特征的尽可能小的单元称为此晶体结构的晶胞。晶胞在三维空间里密堆砌重复即成原晶体结构。各种晶体物质的晶体结构及其晶胞是不一样的。譬如,图 1-4 即为岩盐的晶体结构及晶胞的示意图。各种晶体结构的晶胞均为小平行六面体,其形状可用三共顶点的棱长  $a$ 、 $b$ 、 $c$  和三棱间夹角  $\alpha(b \wedge c)$ 、 $\beta(c \wedge a)$ 、 $\gamma(a \wedge b)$  等六参数描述,这六参数名为晶胞参数,也称晶胞常数。

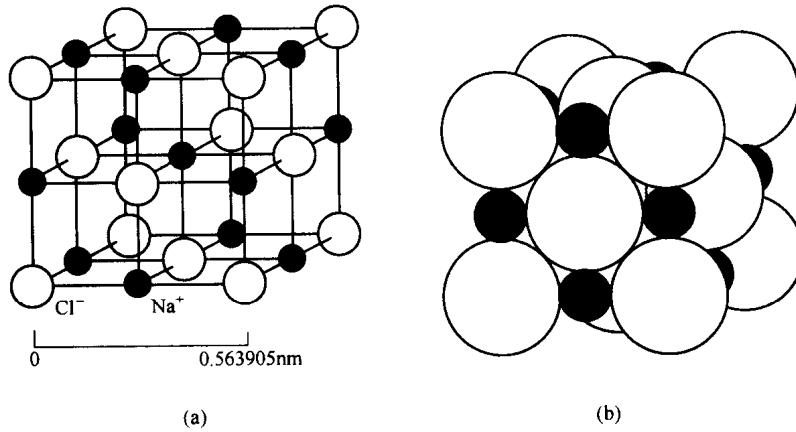


图 1-4 岩盐的晶体结构(图中大球为  $\text{Cl}^-$ ,小球为  $\text{Na}^+$ )

(a)晶胞结构;(b)密堆积层排列

### 1.3.2 空间点阵

岩盐晶体结构中不仅  $\text{Na}^+$  和  $\text{Cl}^-$  离子呈周期规则排列, 若在晶体结构中任选一点, 可找到无限多个与所选点具有同样几何和物质环境的等同点, 这组等同点在三维空间的排列型式与  $\text{Na}^+$  或  $\text{Cl}^-$  的排列型式完全相同。由各类等同点在三维空间排列型式构成的此三维几何图形称为空间点阵。它是晶体结构中物质分布周期性特征的几何表示。空间点阵来源于晶体结构, 又比晶体结构具有更抽象、更概括的几何意义。不同晶体结构可以具有相同的空间点阵, 譬如, 岩盐、铜、金刚石等的空间点阵相同(图 1-5)。将空间点阵中阵点源出的几何和物质环境赋还, 即为所源的晶体结构。因而对晶体结构的许多问题的研究都可首先简化为对空间点阵的探讨。

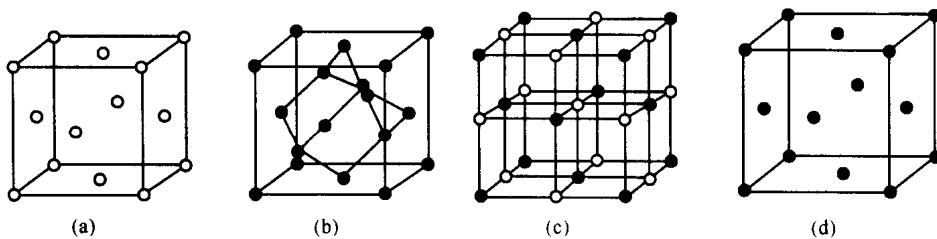


图 1-5 铜、金刚石、岩盐的晶体结构与它们的空间点阵

(a)铜;(b)金刚石;(c)岩盐;(d)空间点阵

空间点阵的阵点又称结点, 为了表述空间点阵中结点的不同分布状况, 即结点构成的不同图形, 常将空间点阵按下列三种方式(图 1-6)来对待:

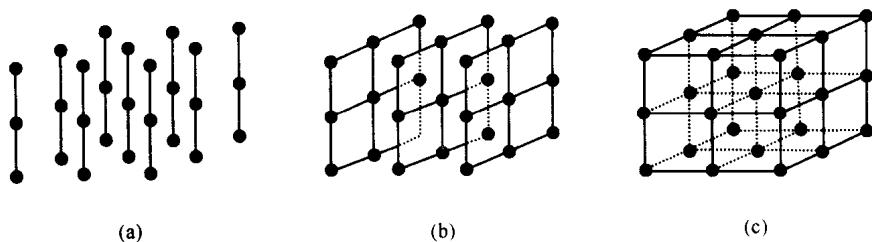


图 1-6 空间点阵的三种对待方式

(a)结点直线束;(b)结点平面组;(c)空间格子

(1) 结点直线束 空间点阵等效于互相平行、等间距的结点直线束。不同方向(取向)的结点直线束以不同的结点直线指数来表述。

(2) 结点平面组 空间点阵等效于互相平行、等间距的结点平面组。不同方向(取向)的结点平面组以不同的结点平面指数来表述。

(3) 空间格子 空间点阵可视为由小平行六面体在三维空间里周期堆砌而成的空间格子。

需要进一步指出, 构成同一空间点阵的小平行六面体的形状与大小可有无穷多种选择。因此, 需要建立一个合乎逻辑的选择约定。这一约定是:(1)小平行六面体必须呈现空间点阵所源晶体的晶系的对称特征。譬如, 原晶体的晶系具有 6 次旋转对称, 则其小平行六面体亦需为具有 6 次旋转对称; 再如, 原晶体晶系具有 4 个 3 次旋转轴, 则其小平行六面体亦需

为具有 4 个 3 次轴的形体;(2)小平行六面体的直角尽可能多,体积尽可能小。业已证明,按此约定规则选择出的小平行六面体亦称阵胞,这类小平行六面体仅有 14 种形状(图 1-7),其在三维空间里周期性密堆砌成的点阵称布拉菲点阵。布拉菲点阵是按对称原则定向了的空间点阵(称此类方式定向为布拉菲标准定向)。其阵胞仍以  $a$ 、 $b$ 、 $c$ 、 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$  六参数表述其形状与大小,故称其为点阵参数或点阵常数。 $a$ 、 $b$ 、 $c$  表示点阵阵胞中三共角顶点的棱长与方向,它们也是点阵沿该方向的重复周期; $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$  依次为  $b \wedge c$ 、 $c \wedge a$ 、 $a \wedge b$  之间的夹角。通常  $a$ 、 $b$ 、 $c$  三者的方向关系依右手定则约定:拇指—— $a$ ,食指—— $b$ ,中指—— $c$ 。依据点阵所含特征对称的不同,14 种布拉菲点阵归并成七大类,借称七大晶系。

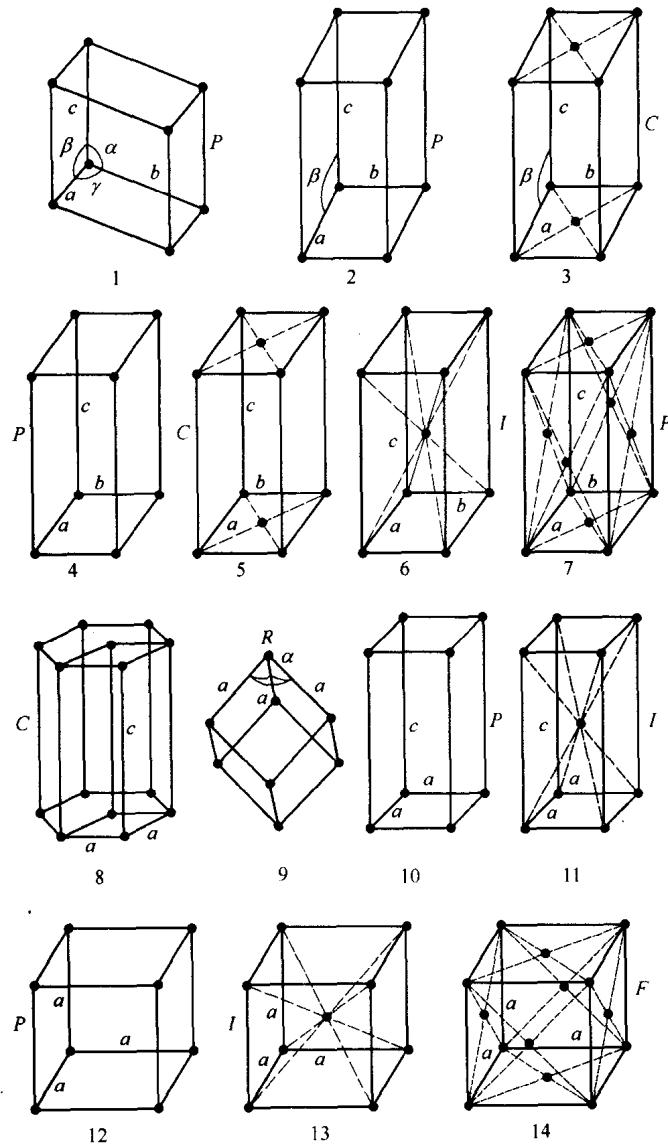


图 1-7 14 种布拉菲点阵的阵胞

- 1—简单三斜;2—简单单斜;3—底心单斜;4—简单正交;5—底心正交;
- 6—体心正交;7—面心正交;8—简单六方;9—简单三方;10—简单四方;
- 11—体心四方;12—简单立方;13—体心立方;14—面心立方

点阵中,仅在小六面体角顶有结点的点阵称为简单点阵,记号为  $P$ 。除角顶有结点外,在阵胞的体心、或各面面心、或互相平行的两平面的面心处还有结点的点阵分别称体心(记号为  $I$ )、面心(记号为  $F$ )和底心(分别记号为  $A$ 、 $B$ 、 $C$ )点阵,它们统称为复杂点阵。阵胞中,角顶处结点为 8 个毗邻的阵胞共有,每个阵胞仅占有  $1/8$ ;面心处结点为 2 个相邻阵胞共有,每个阵胞仅占有  $1/2$ ;体心处结点为一个阵胞独占,故简单、底心、体心、面心点阵阵胞内的结点数分别为  $1$ 、 $2$ 、 $2$ 、 $4$ 。阵胞内,结点位置是用其点坐标来表述,坐标值以点阵常数相对值表示。譬如,结点坐标  $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$  表示其真实坐标为  $a/2, b/2, c/2$ 。同一类型的结点坐标宜选最靠近原点( $[000]$ )的结点来代表。因此,简单、体心、底心、面心点阵阵胞里结点坐标分别为:  $[000]$ 、 $[000]$ 、 $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$ 、 $[000]$ 、 $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right]\right]$ (或  $\left[\left[\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}\right]\right]$ ) 或  $\left[\left[0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$ 、 $[000]$ 、 $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right]\right]$ 、 $\left[\left[\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}\right]\right]$ 、 $\left[\left[0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$ 。

### 1.3.3 空间群

图 1-8 为金刚石结构俯视图的一部分,整个图形广延无限。由图可见:(1)  $P-P'$ 、 $P_1-P'_1$  等处均有对称面,过  $A, A'$  等点垂直纸平面的轴线均为 2 次旋转轴,等等。这表明,晶体多面体中对称元素在晶体结构中同样存在,但它们不交于一点,而是规则分布在整個结构当中;(2) 晶体结构的“广延无限”周期排列的几何学特征使其具有一种崭新的对称变换类型——平移,即整个结构沿某一方向移动一个特定距离,整个晶体结构图形恢复原状。譬如,图中沿  $X$  方向每移动一个  $a$ ,  $a$  为  $X$  方向同层最近碳原子的距离矢量,整个结构图形恢复原状。又如,沿  $P-P'$  方向每移动  $\sqrt{2}a/2$  距离后,结构图形又恢复原状,等等。显然,平移对称仅能存在于有无限多个相等图形的位置关系的形体里。设想某形体中有无限多个相等图形,它们对应着周期为  $\tau$  的直线点列依次从  $-\infty$  到  $+\infty$  等距离排列,则称此无限多个相等图形分布具有平移对称,或称该形体具有平移对称。此时对称元素为周期是  $\tau$  的直线点列,称其为平移点列,而周期  $\tau$  为平移矢量(图 1-9)。

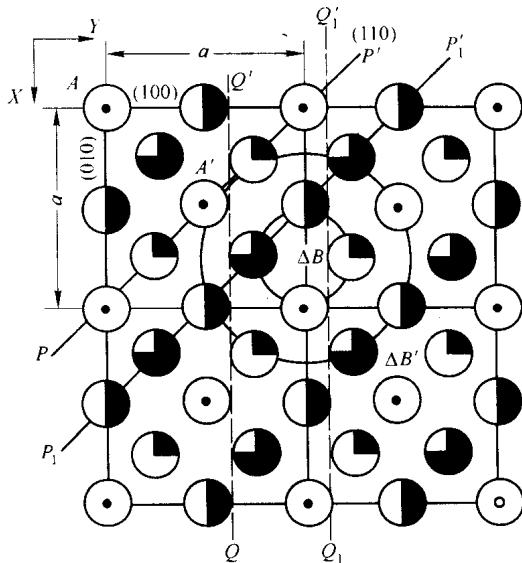


图 1-8 金刚石结构

- |  |                           |  |                      |
|--|---------------------------|--|----------------------|
|  | 沿 $c$ 轴第 0 和 $1/2$ 层上原子位置 |  | 沿 $c$ 轴上 $c/4$ 处原子位置 |
|  | 沿 $c$ 轴上 $3c/4$ 处原子位置     |  | 沿 $c$ 轴上 $c$ 处原子位置   |

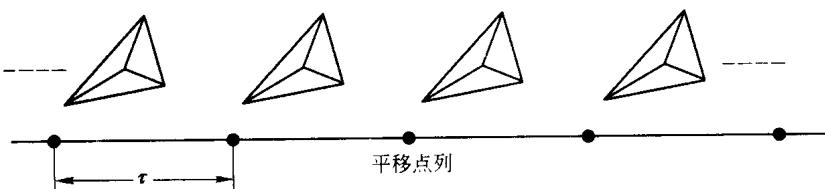


图 1-9 平移对称