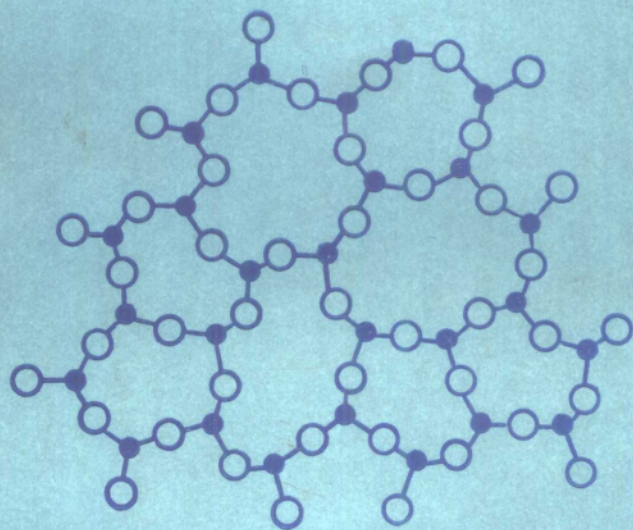


金属学原理

谢希文 路若英 编著



航空工业出版社

金属学原理

谢希文 路若英 编著

航空工业出版社

1989

内 容 提 要

本书系统地阐述了金属学的基本理论和知识,全书共十二章,包括金属和合金相的晶体结构、金属的凝固、二元相图、铁碳相图、三元相图、塑性变形、晶体缺陷、扩散、界面、回复、再结晶和晶粒长大、固态相变概论。编写本书时把内容的更新放在重要的地位,同时又力求便于读者自学,避免使内容庞杂和偏深。每章末都附有一些习题。

本书可作为高等学校机械制造类和冶金类金属材料及热处理、铸造、压力加工、焊接、腐蚀与防护等专业的教科书或主要参考书,也可供上述专业的科技人员自学和参考。

金 属 学 原 理

谢希文 路若英 编著

航空工业出版社出版发行
(北京市和平里小关东里14号)

邮政编码:100013

全国各地新华书店经售
北京市海淀吴海印刷厂印刷

1989年4月第1版 1989年4月第1次印刷

开本:787×1092毫米 1/16 印张:20.625

印数:1-1750册 字数:515千字

ISBN 7-80046-116-5/TG·002

定价:4.10元

前 言

金属学是研究金属的成分、结构、组织、加工工艺与其性能之间关系的一门学科，而金属学原理则侧重系统地阐述金属学的基本理论和知识。本书是根据1984年修订的金属学原理教学大纲，在编者多年的教学实践基础上编写的。

全书共分十二章，第一章介绍晶体学的基本知识和金属中常见的晶体结构；第二章介绍合金中各类相结构的特点；第三章介绍金属的凝固理论和铸锭组织的形成。通过这三章的学习，对于金属的晶体性和金属晶粒组织的形成过程能有初步的认识。第四章和第六章分别介绍二元相图和三元相图，通过这两章的学习，对于合金铸态组织的形成过程能有进一步的认识，并能分析实际的二元相图和三元相图。铁碳相图是一个比较复杂、但很重要的二元相图，同时也是学习碳钢、低合金钢和铸铁的基础，因此单列一章（第五章）。第七章介绍塑性变形的宏观规律，而第八章则在介绍晶体缺陷（主要是位错）的基础上，对塑性变形及有关现象作了更深入的分析。界面在许多金属学的物理过程中起重要的作用，因此单列一章（第十章），而没有作为面缺陷放在晶体缺陷一章中。第九章介绍扩散的宏观规律和微观机制。第十一章介绍变形金属在退火时发生的回复、再结晶和晶粒长大。最后一章简要概述了固态相变的特点。

使用本书时，不一定按照书中的顺序学习，通常在学完前三章后，就可以直接进入第七章以后各章，也可以与相图部分并行。实际上，许多章节都有密切的联系，先学的内容可以为后面打下基础，而后学的内容又可以加深对先学部分的理解。

随着科学与技术的飞速发展，金属学基本理论和知识的发展步伐也是很快的。在编写本书时，我们把内容的更新放在重要的地位，删除了一些陈旧过时的内容，但同时又力求便于读者自学，避免使内容庞杂和偏深。

为了更好地掌握和理解各章的基本内容，每章末都附有一些习题，初学者应当充分认识到独立完成习题的重要性。

本书可作为高等学校机械制造类和冶金类金属材料及热处理、铸造、压力加工、焊接、腐蚀与防护等专业的教科书或主要参考书，也可供上述专业的科技人员自学和参考。

本书第一、二、三、四、五、六、十一章由北京航空航天大学谢希文编写并任主编，第七、八、九、十、十二章由北京航空航天大学路若英编写，书中的金相图片由北京航空航天大学唐顺仙提供和复制。全书由北京科技大学余永宁教授审阅。

限于编者的水平，书中难免有谬误之处，恳请读者批评指正。

编者

1987年11月

目 录

第一章 金属的晶体结构

§ 1 晶体结构与空间点阵	(1)
§ 2 点阵的描述	(2)
§ 3 十四种空间点阵(布拉菲点阵)	(3)
§ 4 晶胞中的位置坐标	(5)
§ 5 晶面指数	(6)
§ 6 晶向指数	(7)
§ 7 晶带与晶带轴	(7)
§ 8 立方晶系中的一些几何关系	(8)
§ 9 六方晶系晶面指数及晶向指数的标定	(10)
§ 10 晶体结构符号	(12)
§ 11 金属中常见的晶体结构	(12)
§ 11.1 面心立方结构	(13)
§ 11.2 体心立方结构	(14)
§ 11.3 密排六方结构	(14)
§ 12 密堆积结构中原子面的堆积方式	(15)
§ 13 密堆积结构中的间隙	(16)
§ 13.1 间隙的类型	(16)
§ 13.2 间隙的密度	(17)
§ 13.3 间隙的大小	(17)
§ 13.4 面心立方及密排六方结构中的间隙	(18)
§ 14 体心立方结构中的间隙	(19)
§ 15 其它类型结构	(20)
§ 15.1 金刚石型结构	(20)
§ 15.2 β -Sn(白锡)型结构	(20)
§ 15.3 钨型结构	(21)
§ 16 同素异晶性(多形性、同素异构性)	(21)
§ 17 金属中的原子大小	(23)
习 题	(24)
参考文献	(25)

第二章 合金相的晶体结构

§ 1 合金相的分类	(26)
------------------	--------

§ 2	置换固 溶体	(27)
§ 2.1	休姆-罗塞利规律	(27)
§ 2.2	达肯-葛瑞 (Darken-Gurry) 图	(28)
§ 2.3	葛施奈德纳 (Gschneidner) 规律	(30)
§ 3	间隙固 溶体	(31)
§ 4	超点阵	(31)
§ 4.1	Cu_3Au I ($L1_2$) 型	(32)
§ 4.2	β' - CuZn (B2) 型	(32)
§ 4.3	CuAu I ($L1_0$) 型	(33)
§ 4.4	CuPt ($L1_1$) 型	(33)
§ 4.5	Fe_3Al (DO_3) 型	(33)
§ 4.6	Mg_3Cd (DO_{19}) 型	(34)
§ 5	正常价化合物	(34)
§ 6	电子化合物 (电子相)	(35)
§ 7	间隙化合物 (间隙相)	(36)
§ 7.1	$R_x/R_M < 0.59$ 时的间隙化合物	(36)
§ 7.2	$R_x/R_M > 0.59$ 时的间隙化合物	(36)
§ 8	拉维斯 (Laves) 相	(37)
§ 9	σ 相	(39)
§ 10	Cr_3Si 型结构	(41)
	习 题	(42)
	参考文献	(43)

第三章 金属的凝固

§ 1	液态金属的结构和性质	(44)
§ 2	金属凝固的热力学条件	(45)
§ 3	形核过程	(47)
§ 3.1	均匀形核过程	(48)
§ 3.2	形核率	(49)
§ 3.3	均匀形核理论与实验结果的比较	(50)
§ 3.4	非均匀形核过程	(51)
§ 3.5	晶粒细化剂	(53)
§ 3.6	熔化时的形核	(54)
§ 4	晶体的长大	(54)
§ 4.1	固、液相界面结构	(54)
§ 4.2	确定固、液相界面类型的判据	(56)
§ 4.3	晶体长大动力学	(56)
§ 4.4	固、液相界面的稳定性	(58)
§ 5	铸锭的组织	(60)

习 题.....	(62)
参考文献.....	(63)

第四章 二元相图

§1 系统、相、组元.....	(64)
§2 二元相图的表示和制作	(65)
§3 相律、杠杆定律及其应用	(66)
§3.1 相律	(66)
§3.2 杠杆定律	(68)
§4 匀晶系相图	(68)
§4.1 相图概述	(68)
§4.2 固溶体的“平衡”凝固过程	(69)
§4.3 固溶体的不平衡凝固过程	(69)
§4.4 晶内偏析与扩散退火	(70)
§5 固溶体凝固时溶质原子的重新分布	(71)
§5.1 液相成分保持均匀	(72)
§5.2 液相中的溶质仅通过扩散混合	(72)
§5.3 在相界面附近的液相中只有扩散, 其余部分还有对流, 可使液相成分保持均匀	(73)
§6 区域熔化	(75)
§7 成分过冷	(76)
§8 具有极小点的匀晶系相图	(77)
§9 匀晶系中固溶体的分解	(78)
§10 共晶系相图.....	(78)
§10.1 铅铋系相图及合金凝固过程分析.....	(78)
§10.2 亚共晶、共晶及过共晶合金显微组织的特点.....	(79)
§10.3 共晶体的分类.....	(80)
§10.4 共晶体凝固机制及动力学.....	(82)
§10.5 共晶体的范围.....	(83)
§10.6 不平衡凝固时出现的共晶体.....	(84)
§10.7 离异共晶体 (Divorced eutectic)	(85)
§10.8 固溶度极小时的共晶系相图.....	(86)
§10.9 过饱和固溶体的分解.....	(87)
§11 包晶系相图.....	(87)
§11.1 铂银系相图及合金凝固过程分析.....	(87)
§11.2 包晶反应机制.....	(89)
§11.3 固溶度极小时的包晶系相图.....	(90)
§12 合金二组元能形成中间相的相图.....	(90)
§12.1 中间相有一定的熔点.....	(90)

§ 12.2	中间相加热到一定温度要分解为液相及另一个固相	(91)
§ 13	合金组元中有同素异构转变的相图	(93)
§ 13.1	钛锆系相图	(93)
§ 13.2	铪铌系相图	(93)
§ 13.3	铁钨系相图	(95)
§ 14	合金二组元在液态有限互溶的相图	(95)
§ 15	二元相图中的恒温反应	(96)
§ 16	合金的性能与相图的关系	(97)
§ 17	相图的热力学解释	(100)
习 题		(104)
参考文献		(106)

第五章 铁碳相图

§ 1	铁碳系中的相	(107)
§ 2	铁-渗碳体相图	(108)
§ 3	碳钢的显微组织	(109)
§ 4	白口铸铁的显微组织	(111)
§ 5	铁-石墨相图	(113)
§ 6	灰口铸铁的显微组织	(114)
§ 7	变质铸铁、球墨铸铁与可锻铸铁	(115)
习 题		(116)
参考文献		(116)

第六章 三元相图

§ 1	三元合金成分的表达法	(117)
§ 2	三元相图的表示法	(118)
§ 3	三元系中的直线法则、杠杆定律及重心法则	(118)
§ 3.1	直线法则与杠杆定律	(119)
§ 3.2	重心法则	(119)
§ 4	三元系中的两相平衡——合金三组元在固态能完全互溶的相图	(120)
§ 4.1	相图概述	(120)
§ 4.2	相律的应用	(121)
§ 4.3	典型合金凝固过程分析	(121)
§ 4.4	垂直截面分析	(122)
§ 5	三元系中的三相平衡	(122)
§ 6	三元系中的三相共晶平衡	(123)
§ 6.1	相图概述	(123)
§ 6.2	投影图、等温截面和垂直截面	(124)
§ 6.3	典型合金凝固过程分析	(125)

§ 7	三元系中的三相包晶平衡	(126)
§ 8	三元系中的四相平衡	(128)
§ 9	三元系中的四相共晶平衡	(129)
§ 9.1	相图概述	(129)
§ 9.2	典型合金凝固过程分析	(131)
§ 9.3	固溶度极小时的相图	(132)
§ 10	三元系中的四相包共晶平衡	(133)
§ 11	三元系中的四相包晶平衡	(134)
§ 12	三元系中的四相平衡小结	(136)
§ 13	三元系有中间相时的相图	(137)
§ 13.1	一个二元系有一个稳定化合物	(137)
§ 13.2	两个二元系各有一个稳定化合物	(138)
§ 13.3	三元系内有一个三元稳定化合物	(138)
§ 13.4	一个二元系有一个不稳定化合物	(138)
§ 13.5	三元系内有一个三元不稳定化合物	(141)
§ 14	三元相图所遵循的一般规律	(141)
§ 14.1	三元相图各类相区的特点	(142)
§ 14.2	三元相图等温截面中各类相区的特点	(142)
§ 14.3	三元相图垂直截面的特点	(143)
§ 15	实际三元相图分析	(143)
§ 15.1	金铋锗三元系	(143)
§ 15.2	金铅锡三元系	(144)
§ 15.3	银铈镧三元系	(145)
§ 15.4	铝铜镁三元系	(147)
§ 15.5	铁镍铬三元系	(150)
习 题		(154)
参考文献		(158)

第七章 金属的塑性变形

§ 1	单晶体的塑性变形	(159)
§ 1.1	滑移现象	(159)
§ 1.2	滑移系	(160)
§ 1.3	临界分切应力	(162)
§ 1.4	滑移时晶体的转动	(164)
§ 1.5	多滑移	(164)
§ 1.6	交滑移	(166)
§ 1.7	孪生	(166)
§ 1.8	扭折带	(169)
§ 1.9	单晶体的应力—应变曲线	(170)
§ 2	多晶体的塑性变形	(172)

§ 2.1	多晶体塑性变形的特点	(172)
§ 2.2	多晶体的屈服强度	(173)
§ 2.3	多晶体的应力—应变曲线	(174)
§ 3	金属经塑性变形以后组织和性能的变化	(174)
§ 3.1	组织的变化	(174)
§ 3.2	性能的变化	(177)
§ 4	合金的塑性变形	(178)
§ 4.1	固溶体合金	(178)
§ 4.2	多相合金	(180)
习 题		(181)
参考文献		(182)

第八章 金属晶体的缺陷

§ 1	晶体中原子的结合能	(183)
§ 2	点缺陷	(184)
§ 2.1	点缺陷的形成、结构和能量	(185)
§ 2.2	热力学平衡的点缺陷	(185)
§ 2.3	点缺陷的作用	(187)
§ 3	位错理论的产生	(187)
§ 3.1	完整晶体的理论切变强度	(187)
§ 3.2	位错概念的提出	(189)
§ 4	位错的类型与柏氏矢量	(190)
§ 4.1	刃型位错	(190)
§ 4.2	螺型位错	(191)
§ 4.3	柏氏矢量	(191)
§ 4.4	混合型位错	(194)
§ 4.5	位错的密度与分布	(195)
§ 5	位错的弹性性质	(196)
§ 5.1	概述	(196)
§ 5.2	位错的应力场	(198)
§ 5.3	位错的应变能	(201)
§ 5.4	位错的线张力	(202)
§ 5.5	作用在位错上的力	(203)
§ 5.6	位错之间的交互作用力	(204)
§ 5.7	位错与点缺陷的交互作用	(207)
§ 6	位错的运动	(209)
§ 6.1	位错的滑移	(209)
§ 6.2	位错的攀移	(211)
§ 7	位错的交割、增殖与塞积	(212)

§ 7.1	位错的交割	(212)
§ 7.2	位错的增殖	(216)
§ 7.3	位错的塞积	(218)
§ 8	实际晶体中的位错	(220)
§ 8.1	堆垛层错	(220)
§ 8.2	不全位错	(222)
§ 8.3	位错反应	(223)
§ 8.4	扩展位错	(224)
§ 8.5	位错的束集	(226)
§ 8.6	洛末-柯垂耳 (Lomer-Cottrell) 位错	(227)
§ 9	位错理论的应用	(229)
§ 9.1	加工硬化	(229)
§ 9.2	固溶强化	(229)
§ 9.3	第二相强化	(230)
习 题		(232)
参考文献		(235)

第九章 金属中的扩散

§ 1	菲克 (Fick) 第一定律	(236)
§ 2	菲克第二定律	(237)
§ 2.1	菲克第二定律	(238)
§ 2.2	菲克第二定律的解	(239)
§ 2.3	D 为变量时第二定律的解	(242)
§ 3	扩散的热力学理论	(244)
§ 3.1	扩散的驱动力	(244)
§ 3.2	扩散系数与迁移率	(244)
§ 4	扩散的微观理论	(245)
§ 4.1	无规行走与扩散距离	(245)
§ 4.2	原子迁移与扩散系数	(247)
§ 4.3	扩散机制	(248)
§ 5	几种扩散现象	(250)
§ 5.1	置换固溶体中的扩散	(250)
§ 5.2	表面扩散和晶界扩散	(253)
§ 5.3	反应扩散	(254)
§ 6	影响扩散的因素	(255)
§ 6.1	温度的影响	(255)
§ 6.2	成分的影响	(255)
§ 6.3	晶体结构的影响	(257)
§ 6.4	表面张力的影响	(258)

习 题	(258)
参考文献	(259)

第十章 界 面

§ 1 晶体表面	(261)
§ 2 界面的几何自由度	(262)
§ 3 晶界和亚晶界	(263)
§ 3.1 小角度晶界	(263)
§ 3.2 大角度晶界	(265)
§ 4 相界	(266)
§ 4.1 共格界面	(267)
§ 4.2 半共格界面	(267)
§ 4.3 非共格界面	(268)
§ 5 孪晶界	(268)
§ 5.1 共格孪晶界	(268)
§ 5.2 非共格孪晶界	(268)
§ 6 界面的能量和性质	(269)
§ 6.1 小角度晶界的界面能	(269)
§ 6.2 其它界面的界面能	(269)
§ 6.3 界面的性质	(270)
§ 7 晶界的运动	(271)
§ 7.1 晶界运动的驱动力	(271)
§ 7.2 影响迁移率的因素	(273)
§ 8 界面能与组织形貌	(275)
§ 8.1 单相组织	(275)
§ 8.2 复相组织	(276)
习 题	(278)
参考文献	(278)

第十一章 回复、再结晶和晶粒长大

§ 1 回复	(280)
§ 1.1 退火过程的驱动能	(280)
§ 1.2 电阻率、密度和加工硬化的回复	(281)
§ 1.3 回复动力学	(282)
§ 1.4 多边化	(282)
§ 1.5 回复过程中显微组织的变化	(284)
§ 2 再结晶	(285)
§ 2.1 再结晶的基本规律	(285)
§ 2.2 影响再结晶的主要因素	(285)

§ 2.3	再结晶动力学	(287)
§ 2.4	再结晶的形核位置及形核机制	(289)
§ 2.5	再结晶组织的形成	(291)
§ 3	晶粒长大	(292)
§ 3.1	正常或连续晶粒长大	(292)
§ 3.2	反常晶粒长大	(293)
§ 3.3	晶粒长大过程中发展的组织	(294)
§ 4	动态回复与动态再结晶	(295)
§ 4.1	动态回复	(295)
§ 4.2	动态再结晶	(295)
习 题		(297)
参考文献		(297)

第十二章 固态金属中的相变

§ 1	固态相变热力学	(298)
§ 1.1	纯金属的固态相变热力学	(298)
§ 1.2	合金的固态相变热力学	(299)
§ 2	固态相变的形核	(300)
§ 2.1	均匀形核	(300)
§ 2.2	非均匀形核	(302)
§ 3	新相的长大	(304)
§ 3.1	界面控制的长大	(304)
§ 3.2	扩散控制的长大	(306)
§ 4	固态相变动力学	(306)
§ 5	脱溶反应	(308)
§ 5.1	脱溶的条件	(308)
§ 5.2	脱溶的形式	(309)
§ 5.3	时效过程的脱溶顺序	(310)
§ 5.4	脱溶动力学	(312)
§ 5.5	调幅分解	(313)
习 题		(315)
参考文献		(315)

第一章 金属的晶体结构

金属及合金在固态下都是晶体。所有晶体，按固体键的性质可以分为离子晶体、共价晶体、分子晶体和金属晶体。金属原子结构的特点是价电子少（一般只有一至二个），而且与原子核的结合极弱，实际上可以认为是自由的，因此价电子又称自由电子。在金属晶体中，自由电子是所有金属正离子所共有，并在金属正离子之间运动，形成所谓电子云，金属键就是电子云和金属正离子之间的静电引力。这种关于金属键的描述仅仅是一种简化了的说法，但是用这个简单的模型已经可以解释金属与合金中的许多现象。金属的许多性质都与金属晶体的特性密切相关。

本章分两大部分：第一部分是晶体学基础，介绍晶体学的最基本内容；第二部分是金属的晶体结构，着重介绍金属中最常见的三种晶体结构及其间隙，以及其它几种比较重要的晶体结构。

§1 晶体结构与空间点阵

晶体结构的最突出特点就是周期性。一个理想晶体可以看成是由完全相同的基元（*motif* 或 *basis*）在空间按一定的规则无限重复得到的。这个基元可以是单个原子，也可以是一组相同或不同的原子。许多金属晶体结构的基元就是单个原子，如铝、铁、铜、银等，而结构复杂的 α -Mn，它的基元则多达 29 个原子。

周期重复的图形可以用点阵来描述。点阵是一个几何概念，它由无数的一维、二维或三维规则排列的点组成，构成一维、二维或三维点阵，其中每个点都有相同的环境。三维点阵又称空间点阵。

如果我们在晶体的一个基元中任意规定一点，然后在所有其它基元的相同位置也标出这一点，这些点的阵列就构成了该晶体的空间点阵。图 1.1 (a)、(b)、(c) 给出三种不同的二维周期重复图形，这三个图形的基元各不相同，但是却具有相同的二维点阵，如图 1.1 (d) 所示。

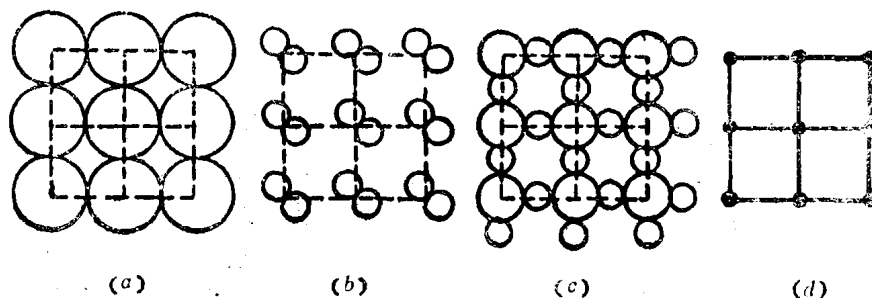


图 1.1 二维周期重复图形及其点阵

如果给出晶体中基元的原子种类、数目及排列情况，以及基元间的相对位置（这是由空间点阵决定的），这个晶体的结构也就完全确定了。换句话说，如果把基元放在空间点阵中每一个阵点的相同位置上，就可得到该晶体的结构。因此，晶体结构与空间点阵及基元的关系可以用下式表示：

$$\text{空间点阵} + \text{基元} = \text{晶体结构}$$

应当注意到，上式并不是一个数学关系式，而是用来表示这三者之间的关系。

§2 点阵的描述

如果点阵只能用画在纸上的点的阵列来描述，那将是非常不便的，特别是对于三维空间点阵就更加困难。

点阵可以用平移基矢来描述。对于二维点阵，需要选择始于同一原点的两个平移基矢 \mathbf{a} 和 \mathbf{b} ，使得从一个阵点到任何另一个阵点的平移矢量 \mathbf{r} 都可以用下式表示：

$$\mathbf{r} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} \quad (1.1)$$

式中 u 和 v 都是整数，正负均可。

图 1.2 给出一个二维点阵，其中 \mathbf{a}_1 和 \mathbf{b}_1 为一对平移基矢，因为从一个阵点到任何另一个阵点的平移矢量 \mathbf{r} 都可以用 (1.1) 式来表示。同理， \mathbf{a}_2 及 \mathbf{b}_2 也是这个二维点阵的一对平移基矢。但是 \mathbf{a}_3 及 \mathbf{b}_3 这一对矢量却不是平移基矢，因为从这一对矢量的原点到

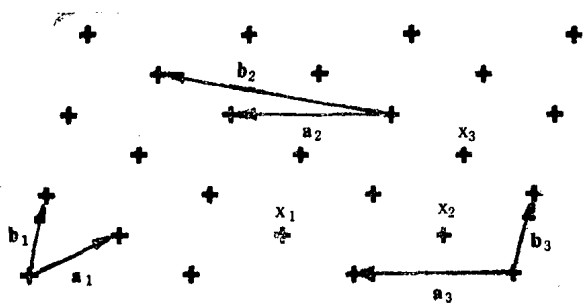


图 1.2 二维点阵及其平移基矢

$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3$ 等阵点的平移矢量均不能在 u 与 v 仍为整数的条件下用 (1.1) 式来表示，因此这两个矢量只能是两个点阵平移矢量。

对于三维点阵，需要选择始于同一原点的三个平移基矢 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ ，使得从一个阵点到任何另一个阵点的平移矢量 \mathbf{r} 可以用下式表示：

$$\mathbf{r} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c} \quad (1.2)$$

式中 u, v, w 都是整数，正负均可。

图 1.3 给出一个空间点阵（即三维点阵）及其平移基矢 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ ，图中的一个点阵平移矢量可用下式表示：

$$\mathbf{r} = 2\mathbf{a} + \mathbf{b} + \mathbf{c}$$

但是，仅仅给出从某个阵点画出的三个平移基矢还不能立即看出点阵的形状。如果以这三个基矢为棱边作出一个平行六面体，就可以很清楚地看到点阵的形状，这一平行六面体称为点阵晶胞，或简称晶胞。这种晶胞在空间无限重复堆垛就得到空间点阵。

为了表示晶胞的形状及大小，可将晶胞画在空间坐标上，坐标轴（又称晶轴）分别与晶胞的三个棱边重合，坐标的原点在晶胞的一个顶点，坐标轴的顺序按右螺旋规则（也可以按左螺旋规则，本书中均采用前者）。晶胞的棱边长度分别以 a, b, c 表示，其单位为纳米

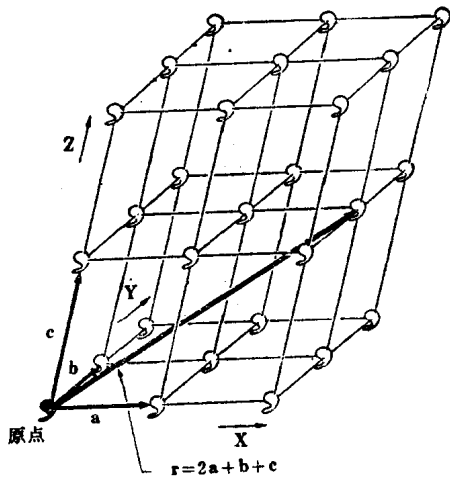


图 1.3 空间点阵及其平移基矢

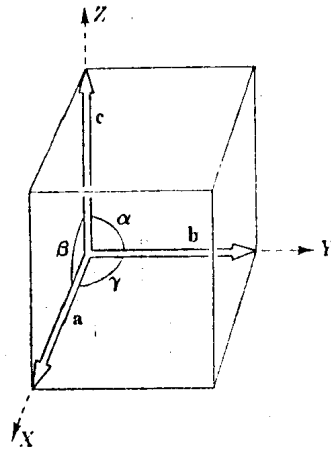


图 1.4 晶胞的空间坐标表示法

(即 nm, $1\text{nm}=10^{-9}\text{m}$) 或埃 (即 \AA , $1\text{\AA}=10^{-10}\text{m}$); 棱间夹角 (即坐标轴夹角) 分别以 α 、 β 、 γ 表示, 如图 1.4 所示。棱边长 a 、 b 、 c 和棱间夹角 α 、 β 、 γ 共六个参数叫做点阵常数或晶格常数。

如果晶胞只在八个顶角各有一个阵点, 由于每个阵点为相邻八个晶胞所共有, 即只有 $1/8$ 属于该晶胞, 因此一个晶胞只有一个阵点。这种晶胞又称简单晶胞。

如果在点阵晶胞的范围内, 标出相应晶体结构中各原子的位置, 这部分原子构成了晶体结构中有代表性的部分, 含有这一附加信息的晶胞称为结构晶胞, 这种晶胞在空间无限重复堆垛就得到晶体结构。

通常把点阵晶胞与结构晶胞都称之为晶胞, 但是要注意到, 这二者是有区别的。当晶体结构的基元只包含一个原子时, 结构晶胞与点阵晶胞的结点数目完全一样。但是对于前者, 结点代表晶体中原子所在的位置, 而对于后者, 结点则代表空间点阵中的阵点位置。

§3 十四种空间点阵 (布拉菲点阵)

法国晶体学家布拉菲 (A.Bravais) 于 1850 年用数学 (群论) 方法推导出空间点阵只能有十四种, 根据其对称特点, 它们分别属于七个晶系。图 1.5 为十四种空间点阵的晶胞, 表 1.1 给出每种晶胞的名称、所属晶系、棱边及夹角关系、符号。

空间点阵的类型可以用皮尔逊 (Pearson) 符号表示, 该符号中第一个为小写字母, 代表所属晶系; 第二个为大写字母, 代表点阵类型, 详见表 1.2。

虽然菱方晶系的晶胞是简单晶胞, 但是却用 R 作为其点阵类型符号。

由图 1.5 及表 1.1 可以看到, 每个晶系都有一种空间点阵为简单点阵, 即可以用简单晶胞表示, 每个晶胞只包含一个阵点。其余空间点阵的晶胞不是简单晶胞, 每个晶胞包含两个或四个阵点。其实所有十四种空间点阵都可以用简单点阵来描述, 其晶胞也都是简单晶胞。例如, 面心立方点阵和体心立方点阵都可以用简单菱方点阵表示, 如图 1.6 (a)、

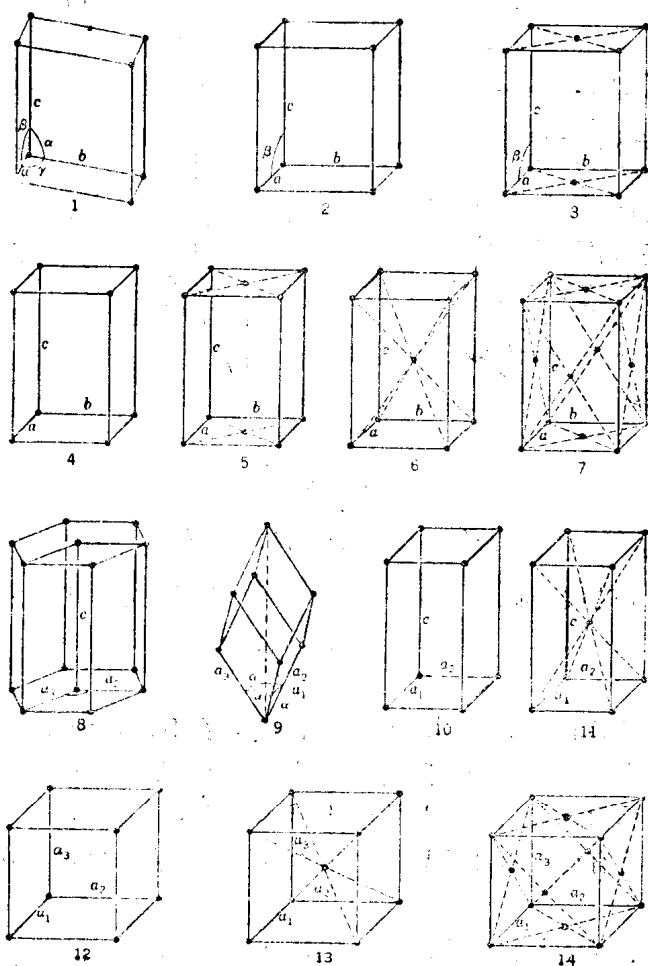


图 1.5 十四种空间点阵的晶胞

表 1.1 空间点阵 (参看图1.5)

晶系	空间点阵	棱边长及夹角关系	符号	晶胞阵点数	分图号
三斜	简单三斜	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	aP	1	1
单斜	简单单斜	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	mP	1	2
	底心单斜		mC	2	3
正交	简单正交	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	oP	1	4
	底心正交		oC	2	5
	体心正交		oI	2	6
	面心正交		oF	4	7
六方	简单六方	$a_1 = a_2 \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	hP	1	8
菱方(三角)	简单菱方	$a_1 = a_2 = a_3, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	hR	1	9