

材料科学及测试技术丛书



相图与相结构

(相图的理论、实验和应用)

上册

梁敬魁 编著

科学出版社



材料科学及测试技术丛书

相图与相结构

(相图的理论、实验和应用)

上册

梁敬魁 编著

科学出版社

1993





材料科学及测试技术丛书

相图与相结构

(多晶X射线衍射和结构测定)

下 册

梁敬魁 编著

科 学 出 版 社

1 9 9 3



251/0069

(京)新登字 092 号

内 容 简 介

本书根据作者多年从事固体功能材料相图、相变和晶体结构研究工作及所取得的成果编著而成。全书共十章,分上、下两册出版。上册着重论述相图与相变的基本理论和类型,相图在新晶体材料的探索、晶体生长、材料合成和性能改善等方面的应用,以及相图的热力学计算和实验测定方法。下册除介绍X射线衍射的晶体学基础知识,相结构的有关概念和规律,X射线多晶衍射实验方法,以及晶体结构与性能的关系外,还全面、系统地论述了粉末衍射法晶体点阵常数的精确测量,粉末衍射图谱的指标化和未知晶体结构的粉末衍射法测定及结构修正。

本书可供从事晶体学和材料科学研究的科技人员及高等院校有关专业师生参考。

材料科学及测试技术丛书

相图与相结构

(相图的理论、实验和应用)

上 册

梁敬魁 编 著

责任编辑 何舒民 童安齐

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100707

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1993 年 1 月第 一 版 开本: 787×1092 1/32

1993 年 1 月第一次印刷 印张: 7 1/4

印数: 1—1 500

字数: 159 000

ISBN 7-03-003162-8/TF·12

定 价: 7.10 元

(京)新登字 092 号

内 容 简 介

本书根据作者多年从事固体功能材料相图、相变和晶体结构研究工作所取得的成果编著而成,全书共十章,分上、下两册出版。上册着重论述相图与相变的基本理论和类型,相图在新晶体材料、晶体生长、材料合成和性能改善等方面的应用,以及相图的热力学计算和实验测定方法。下册除介绍 X 射线衍射的晶体学基础知识,相结构的有关概念和规律, X 射线多晶衍射实验方法,以及晶体结构与性能关系外,还全面、系统地论述了粉末衍射法晶体点阵常数的精确测量,粉末衍射图谱的指标化和未知相晶体结构的粉末衍射法测定及结构修正。

本书可供从事晶体学和材料科学研究的科技人员及高等院校有关专业师生参考。

材料科学及测试技术丛书

相图与相结构

(多晶 X 射线衍射和结构测定)

下 册

梁敬魁 编著

责任编辑 何舒民 商安齐

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100707

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1993 年 2 月第 一 印 开本:787×1092 1/32

1993 年 2 月第一次印刷 印张:19 插页:3

印数:1—1 500

字数:432 000

ISBN 7-03-003163 6/TF·13

定 价:13.40 元

材料科学及测试技术丛书

编辑委员会

主 编: 严东生

副 主 编: 柯 俊 颜鸣皋

编辑委员: 冯 端 刘嘉禾 孙珍宝 师昌绪

许顺生 肖纪美 沈华生 李恒德

吴人洁 范 棠 柯 成 徐祖耀

钱人元 殷之文 郭可信 郭慕孙

章守华 葛庭燧 程继健

材料科学及测试技术丛书

出版说明

材料科学是现代科学技术的基础,是属于全局性的重要科学技术领域。由于许多材料的局限性会影响国民经济和国防现代化的进程,因此,为了提高我国材料科研工作的理论水平和材料生产的技术水平,为各个部门提供充足和优质的材料,我们出版了这套材料科学及测试技术丛书。本丛书分为材料科学与测试技术两部分。材料科学部分主要介绍金属、非金属及其他新型材料的研究成果、原理与理论;测试技术部分主要介绍上述材料的微观组织与结构及其观测技术,也介绍有关性能测试和过程机理。我们力求本丛书能反映我国材料科学研究工作者和材料工程技术人员的实践经验与成就,以及他们在发展材料科学与技术方面的见解,同时也反映国外的最新经验和成果。读者对象为从事材料科学的科研工作者和从事材料测试的工程技术人员以及高等院校的有关专业师生。

我们不仅期望本丛书能对我国的材料科学与技术的发展起到一定的推动作用,并且希望它对材料科学与技术领域内的科技工作者有所启发,从而进一步写出反映我国科学技术水平和发展方向的专著,以满足广大读者的需要。

材料科学及测试技术丛书

编辑委员会

材料科学及测试技术丛书

(已出版部分)

金属材料热力学	徐祖耀著
电子衍射图在晶体学中的应用	郭可信等编著
马氏体相变与马氏体	徐祖耀著
现代功能材料导论	温树林编著
钢中的非金属夹杂物	李代钟编著
高分辨电子显微学在固体科学 中的应用	郭可信等主编
X 射线衍射学进展	许顺生主编
金属的超塑性	何景素等编著
高空间分辨分析电子显微学	朱静等编著
陶瓷材料的力学性能	张清纯编著
金属高温疲劳	何晋瑞主编
材料结构科学 上册	温树林编著
材料结构科学 下册	温树林编著
固体材料界面研究的物理基础	闻立时编著
贝氏体相变与贝氏体	徐祖耀等著
高温测量原理与应用	朱麟章编著

序 言

材料是现代文明三大支柱(能源、信息、材料)之一,是人类文明的物质基础。材料的种类和性能的优劣直接影响着科学技术发展的深度和广度。

材料主要包括两个方面:一是工农业建设和日常生活所需要的材料,如钢铁、合金、陶瓷、玻璃、塑料等传统材料,人们对这类材料的要求是扩大品种、提高质量和改善性能;一是国防尖端科学和现代科学技术所需要的特种功能材料,如能源、信息、电子计算机、自动化技术、激光技术以及空间科学等所要求的各种不同性能的新型半导体、超导体、激光、磁性以及各种敏感材料等,人们对这类材料的要求是加快研制步伐,不断出现新材料,扩大应用范围。无论是常用的传统材料、还是新型功能材料,除了极少数的几种外,绝大多数都是由两种或两种以上的元素所组成。因此,了解各组成元素之间在不同条件下的相关关系,则是十分重要的。

相图主要研究处于平衡或准平衡状态下,物质的组分、物相和外界条件的关系,固体材料的性能随成分和结构而异,物质不同的晶体结构具有不同的性质,探索新晶体材料在很大程度上借助于材料在微观尺度上的晶体结构所提供的信息。相图与相结构和材料科学之间存在着广泛而密切的联系,它们是构成材料科学的一个相当重要的组成部分。相图与相结构不仅可以为具有实际应用价值的各种材料的合成、设计制备流程、热处理工艺、损坏机制等提供必要的宏观相平衡条件和微观晶体结构因素,而且对于功能材料单晶体的生长,也可

以提供单晶体生长方法、配料组分的选择、晶体完整性的提高等的热力学依据。相形成规律以及晶体结构随组分和外界条件变化而变化的研究,对新型材料的探索 and 了解材料的组分、结构和性能之间关系的规律性将起着十分重要的作用。

相图与相结构的基础理论和实验成果已广泛应用于材料科学、固体物理和固体化学的各个领域。《相图与相结构》一书是作者 30 多年来从事固体功能材料相图、相变和晶体结构研究方面的实践积累和经验的总结。

本书内容丰富,层次清晰,叙述深入浅出,理论联系实际,基本概念阐述清楚,实验方法介绍具体详细,引用文献充分,选用实例大多是作者本人的研究结果,是一本具有较高学术水平和实用价值的好书。对于从事晶体学和材料科学的工作者、研究生和高年级大学生来说,无疑会从本书中获取益处。

唐嘉锡
中国科学院

1991 年 7 月 18 日

前 言

材料的组分、结构和性能的关系是材料科学重要的研究课题。各组分之间的相平衡关系和晶体结构的研究,对于材料的合成工艺、性能的改善和新材料的探索具有十分重要的意义。本书是作者在长期从事固体功能材料相图、相变和晶体结构研究工作的基础上编著而成。本书着重实用性和对基本概念的介绍,力图将相图与相结构密切结合,以晶体结构为基础,阐述固态物质随外界条件和组分的变化而引起的微观结构,从体系相关系的变化,阐明物质的组分、结构与性能之间的关系。

全书共十章,分上、下两册出版。上册(共三章)主要论述相图与相变的有关概念,相图的热力学计算和实验测定,以及相图在材料科学中的应用。下册(共七章)着重介绍晶体点阵常数的精确测量和未知相晶体结构的X射线粉末衍射法测定,以及相关的X射线衍射晶体学基础知识和实验方法。本书既可供从事晶体学和材料科学的科技工作者参考,也可作为高等院校有关专业师生的教学参考书。

在编写本书过程中,得到卢嘉锡教授和李荫远教授的热情鼓励、支持和帮助,并蒙我的老师卢嘉锡教授为本书撰写序言。中国科学院研究生院柴璋教授和北京科技大学张维敬教授认真地审阅了全稿,并提出许多宝贵意见和有益的建议。中国科学院物理研究所、福建物质结构研究所给予大力支持。黄懋容、陈小龙、饶光辉、成向荣等协助有关工作,鄢晓华、陈战、朱文杰、季阳阳、梁璟梅、严嘉、苏时红等同志帮助抄写初

稿。借此机会,对他们付出的辛勤劳动表示衷心的感谢。

由于水平所限,书中不足之处在所难免,恳请广大读者批评指正。

梁敬魁

1991年7月于北京中关村

目 录

序言.....	v
前言.....	vii
第一章 相图.....	1
§ 1.1 相与相平衡	1
§ 1.2 相律	5
§ 1.3 相变	10
§ 1.4 相图	20
§ 1.5 杠杆定律	58
§ 1.6 相图构筑的几何规则	61
§ 1.7 相图的边界理论	66
§ 1.8 相图的应用	71
参考文献	88
第二章 相图的热力学计算.....	91
§ 2.1 概论	91
§ 2.2 相图计算的热力学基础	92
§ 2.3 热力学函数表达式	94
§ 2.4 由二元系热力学性质预示三元系热力学性质的方法.....	101
§ 2.5 热力学数据的收集与估算	109
§ 2.6 热力学参数的优化	126
§ 2.7 相图计算示例	129
参考文献	144
第三章 相图的实验测定.....	150
§ 3.1 试样的制备	150
§ 3.2 相图的实验测定	154

§ 3.3 金相法	160
§ 3.4 热分析法	163
§ 3.5 X射线衍射法	203
参考文献	216

目 录

第四章 X射线衍射的晶体学基础	219
§ 4.1 晶体的宏观对称元素	219
§ 4.2 宏观对称元素的组合定理	225
§ 4.3 32个晶体类型、点阵和晶系	228
§ 4.4 空间点阵与倒易点阵	239
§ 4.5 方向指数与晶面指数	245
§ 4.6 14种布喇菲点阵	249
§ 4.7 空间群	254
§ 4.8 X射线衍射方程	288
参考文献	295
第五章 多晶X射线衍射实验技术	296
§ 5.1 X射线源	297
§ 5.2 辐射波长与滤波片的选择	309
§ 5.3 粉末衍射照相机	313
§ 5.4 晶体单色器与单色照相机	323
§ 5.5 高低温X射线粉末衍射	337
§ 5.6 高压X射线粉末衍射	343
§ 5.7 粉末衍射仪	358
参考文献	379
第六章 化合物相结构的基本概念	382
§ 6.1 化合物分类和晶体结构类型概述	382
§ 6.2 密堆积理论和元素的晶体结构	389
§ 6.3 元素的原子半径和离子半径	400
§ 6.4 原子的电负性、电离能和电子亲和能	423
§ 6.5 配位数与配位多面体	426

§ 6.6	离子晶体结构(鲍林经验规则)	432
§ 6.7	影响相结构的因素	435
§ 6.8	晶体结构表示法	445
§ 6.9	类质同构和多型性	449
§ 6.10	合金有序相超结构	463
§ 6.11	非化学计量化合物	481
参考文献		491
第七章 晶体的性质与结构的关系		494
§ 7.1	晶体的物理性质与点群	494
§ 7.2	电学性质	495
§ 7.3	金属的延展性	500
§ 7.4	光学性质	501
§ 7.5	压缩率	503
§ 7.6	热膨胀系数	508
§ 7.7	热导率	513
§ 7.8	硬度和熔点	515
§ 7.9	解理	520
参考文献		522
第八章 晶体点阵常数的精确测量		523
§ 8.1	精确测定晶体点阵常数的意义	523
§ 8.2	照相法粉末衍射线的系统误差	524
§ 8.3	衍射仪法的系统误差	545
§ 8.4	晶体点阵常数的精确测定	561
参考文献		589
第九章 粉末衍射数据的指标化		591
§ 9.1	粉末衍射数据的完备性和准确性	591
§ 9.2	新相所属晶系的确定	592
§ 9.3	标定面指数的比值法	598
§ 9.4	标定面指数的图解法	600
§ 9.5	标定面指数的解析法	611

§ 9.6 标定面指数的计算机程序法	626
§ 9.7 约化胞	631
§ 9.8 齐次轴与德莱尼约化	654
§ 9.9 指标化结果正确性的判据	670
参考文献	674
第十章 相结构的 X 射线粉末衍射法测定	677
§ 10.1 X 射线衍射强度	677
§ 10.2 衍射强度的实验测定	705
§ 10.3 新相晶体结构的测定	720
§ 10.4 等效点系的组合	724
§ 10.5 原子参数的确定	747
§ 10.6 固溶体类型及其原子位置的确定	756
§ 10.7 粉末衍射图形拟合修正晶体结构——里特沃尔德法	766
§ 10.8 离子晶体的键价理论与晶体结构	792
参考文献	808