

材料科学与工程著作系列  
HEP Series in Materials Science and Engineering

HEP  
MSE

杨 平 编著

# 材料科学名人典故 与经典文献

Distinguished  
Materials Scientists  
and Related  
Classical Literature





CS1705254

杨 平 编著

TB3  
0196

# 材料科学名人典故 与经典文献

Distinguished  
Materials Scientists  
and Related  
Classical Literature



CAILIAO KEXUE MINGREN DIANGU YU JINGDIAN WENXIAN

重庆师大图书馆



高等教育出版社·北京  
HIGHER EDUCATION PRESS BEIJING

材料科学名人典故与经典文献

### 图书在版编目(CIP)数据

材料科学名人典故与经典文献/杨平编著. --北京:  
高等教育出版社, 2012. 8

(材料科学与工程著作系列)

ISBN 978-7-04-035788-2

I. ①材… II. ①杨… III. ①材料科学-科学家-生  
平事迹-世界②材料科学-高等学校-教学参考资料

IV. ①K816. 16②TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 178988 号

策划编辑 刘剑波  
插图绘制 尹 莉

责任编辑 焦建虹  
责任校对 窦丽娜

封面设计 王凌波  
责任印制 毛斯璐

版式设计 杜微言

出版发行 高等教育出版社  
社 址 北京市西城区德外大街 4 号  
邮 政 编 码 100120  
印 刷 北京中科印刷有限公司  
开 本 787mm×1092mm 1/16  
印 张 27.5  
字 数 510 千字  
购书热线 010-58581118

咨询电话 400-810-0598  
网 址 <http://www.hep.edu.cn>  
<http://www.hep.com.cn>  
网上订购 <http://www.landraco.com>  
<http://www.landraco.com.cn>  
版 次 2012 年 8 月第 1 版  
印 次 2012 年 8 月第 1 次印刷  
定 价 49.00 元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题, 请到所购图书销售部门联系调换  
版权所有 侵权必究  
物 料 号 35788-00

# 前　　言

“材料科学基础”是材料科学与工程专业最为重要的专业基础课程，内容主要包括晶体学、晶态与非晶态结构、相图、缺陷、扩散、形变、相变、再结晶等，这些都是材料科学与工程专业本科生的必修内容。从组成结构可以看出，该课程涉及众多不同方向的专业基础知识群，可以从多方面为本科生的专业课程学习奠定扎实的综合专业基础。另一方面，对初学者来说，“材料科学基础”课程中各章节的内容往往显得既没有特别紧密、明显的逻辑联系和先后顺序，又不规则地显示出各章节知识及不同基础学科知识的某种交叉，并且每块知识都存在不同程度的不完整性、不成熟性、实验特性、探索性以及一定的未知内容。对已经习惯于数学、物理（包括力学、电学、光学、热学）、化学等相对成熟、完整、逻辑连贯的工程学科基础课程学习，而刚刚进入专业学习的大学生来说，接受这种类型的知识结构是非常重大的挑战，也是“材料科学基础”课程获得良好教学效果的明显障碍。在常规的“材料科学基础”课程教学过程中，学生所面对的这种学习、理解模式转换所造成的挑战以及教师获得良好教学效果所需要特别注意克服的这种障碍，往往没有得到足够的重视，因而给课程教学的顺利进行带来了种种困扰。近些年来，材料科学与工程专业的教师和学生开始认识到上述问题所带来的困扰，并逐步尝试采用不同的措施改进“材料科学基础”课程的教学。

“材料科学基础”课程中的许多知识点非常抽象，这是材料专业本科生不适应、难以理解的重要原因之一。抽象的知识对讲解和学习来说都是比较困难的。然而这些抽象的概念和定理都是早期材料科学家通过长期的实验观察及理论探索逐渐形成的，而且这些知识的形成或多或少地与这些材料科学家的生平和成长历程有关。如果从事“材料科学基础”课程教学和学习的教师和学生对“材料科学基础”课程中各知识点形成的背景和过程有所了解，可能会从某一方面对克服相关教学中的障碍产生一定的推动作用，缓解教学中的矛盾。从这一考虑出发，编著者根据多年收集的、与“材料科学基础”课程内容有关的材料领域科学家的生平及他们所探索、发明的相关定律、概念的基本过程，以及相关资料的文献来源编纂成书奉献给广大材料专业的读者，希望对材料专业师生有所参考，对相关的教学有所促进。另一方面，材料领域科学家们的早期奋斗和探索也是知识创新的过程，因此编著者也希望本书对材料专业学生创新思维的形成有所帮助。

本书按照余永宁主编的《材料科学基础》(2012年第2版,高等教育出版社)的章节顺序进行系统介绍。每章内容包括4个方面:相关理论的基本内容、学习的意义及相关理论的应用;相关理论发展的历史简介;相关理论的基本概念及经典文献;相关的(材料)科学家生平介绍。加入简单的相关理论介绍是为了达到一定的复习目的,而不是只介绍名人典故与经典文献,因为这样会造成较大的知识与人物及文献的脱节。

本书可作为材料科学与工程专业教师备课及学生专业学习的参考书,书中的参考文献可为查阅相关信息的细节提供方便。本书引用了大量网上检索的资料,编著者尽量给出相关资料的出处,但仍可能未能正确引用,因此对没有正确给出资料来源的地方表示歉意。

由于编著者认知所限,书中涉及的历史资料极其庞大,书中难免出现谬误,恳请读者给予指正。

编著者

2012.6.9

# 目 录

<b>1 晶体学 .....</b>	1
1-1 晶体学的基本内容、学习意义及晶体学理论的应用 .....	1
1-2 晶体学研究历史简介 .....	2
1-3 晶体学的基本概念及经典文献 .....	3
1-3-1 晶体的基本特征 .....	3
1-3-2 7大晶系与14种布拉维点阵 .....	5
1-3-3 点群与空间群 .....	5
1-3-4 米勒指数与晶带轴定理 .....	5
1-3-5 倒易点阵 .....	7
1-3-6 极射赤面投影及标准投影图 .....	9
1-4 晶体学方面的名人典故 .....	12
1-4-1 斯丹诺(N. Steno)和面角守恒定律 .....	12
1-4-2 阿羽依(R. J. Haüy)与晶面整数定律 .....	14
1-4-3 外斯(C. S. Weiss)与晶带定律 .....	15
1-4-4 黑萨尔(J. F. C. Hessel)与32种点群 .....	15
1-4-5 费德罗夫(E. S. Fedorov)、熊夫利斯(A. M. Schönflies)、巴洛 (W. Barlow)与230种空间群 .....	16
1-4-6 米勒(W. H. Miller)与米勒指数 .....	18
1-4-7 布拉维(A. Bravais)与布拉维点阵 .....	20
1-4-8 伦琴(W. K. Röntgen)与X射线 .....	20
1-4-9 劳厄(M. von Laue)与晶体衍射(劳厄花样) .....	23
1-4-10 布拉格(Bragg)父子与衍射方程 .....	25
1-4-11 埃瓦尔德(P. P. Ewald)与倒易点阵 .....	29
1-4-12 极射投影与乌氏网 .....	32
参考文献 .....	36
<b>2 晶体结构 .....</b>	39
2-1 晶体结构的基本内容、学习意义及晶体结构理论的应用 .....	39
2-2 晶体结构研究历史简介 .....	41
2-3 晶体结构的基本概念及经典文献 .....	43

2-3-1 晶体结构分类和晶体结构符号 .....	43
2-3-2 原子(离子)晶体堆垛和配位 .....	43
2-3-3 原子半径与配位数的关系 .....	43
2-3-4 离子半径比与配位数及堆垛方式之间的关系 .....	44
2-3-5 不同晶体的结构 .....	45
2-3-6 具有离子键的结构 .....	50
2-3-7 固溶体的结构 .....	52
2-3-8 多型性和同素异构 .....	54
2-3-9 准晶 .....	54
<b>2-4 晶体结构方面的名人典故 .....</b>	<b>55</b>
2-4-1 皮尔逊(W. B. Pearson)与 Pearson 符号 .....	55
2-4-2 乌科夫(R. W. G. Wyckoff)与 Wyckoff 原子位置 .....	56
2-4-3 戈尔德施米特(V. M. Goldschmidt)与 Goldschmidt 半径 .....	57
2-4-4 休姆-罗瑟里(W. Hume-Rothery)与 Hume-Rothery 定则 .....	60
2-4-5 黑格(G. Hägg)与 Hägg 相 .....	61
2-4-6 拉维斯(F. Laves)与 Laves 相 .....	62
2-4-7 鲍林(L. Pauling)与 Pauling 规则 .....	65
2-4-8 准晶与数学家彭罗斯(R. Penrose)、理论物理学家斯坦哈特(P. J. Steinhardt)及材料学家谢赫特曼(D. Shechtman) .....	73
<b>参考文献 .....</b>	<b>76</b>
<b>3 非晶态与半晶态结构 .....</b>	<b>81</b>
3-1 非晶态与半晶态结构的基本内容、学习意义及非晶态、半晶态结构理论的应用 .....	81
3-2 非晶态与半晶态材料研究历史简介 .....	83
3-2-1 非晶玻璃的研究历史 .....	83
3-2-2 聚合物的研究历史 .....	84
3-2-3 液晶材料的研究历史 .....	85
3-3 非晶态与半晶态结构的基本概念及经典文献 .....	87
3-3-1 熔点、原子定域化运动与玻璃化转变温度 .....	87
3-3-2 非晶态结构的描述及模型 .....	88
3-3-3 聚合物分类 .....	91
3-3-4 聚合物的构型和构象 .....	92
3-3-5 弹性体 .....	93
3-3-6 聚合物的长程有序(晶体)结构 .....	93
3-3-7 聚合物的晶体形态 .....	95

3-3-8 影响聚合物链结晶度的因素 .....	96
3-3-9 液晶的特点及分类 .....	96
3-3-10 液晶有序程度的描述 .....	97
<b>3-4 非晶态与半晶态结构方面的名人典故 .....</b>	<b>98</b>
3-4-1 杜韦斯(P. Duwez)与金属玻璃 .....	98
3-4-2 沃罗诺伊(G. F. Voronoi)与 Voronoi 堆垛 .....	99
3-4-3 贝尔纳(J. D. Bernal)与 Bernal 球堆垛 .....	100
3-4-4 扎卡里阿森(W. H. Zachariasen)与 Zachariasen 无规网络结构模型 .....	101
3-4-5 贝克兰(L. H. Baekeland)与电木 .....	102
3-4-6 施陶丁格(H. Staudinger)与聚合物的长链结构 .....	103
3-4-7 马克(H. F. Mark)与聚合物科学 .....	105
3-4-8 弗洛里(P. J. Flory)与无规线团模型 .....	105
3-4-9 德让纳(P. G. de Gennes)与液晶、聚合物长链分子的扩散 .....	107
3-4-10 古德伊尔(C. Goodyear)与硫化橡胶 .....	108
3-4-11 凯勒(A. Keller)与折叠链结构及串晶模型 .....	114
3-4-12 莱因策尔(F. R. Reinitzer)、莱曼(O. Lehmann)与液晶 .....	115
<b>参考文献 .....</b>	<b>117</b>
<b>4 相图 .....</b>	<b>121</b>
4-1 相图理论的基本内容、学习意义及相图理论的应用 .....	121
4-2 相平衡与相图研究历史简介 .....	123
4-2-1 相平衡与相图规律 .....	123
4-2-2 相图计算研究的进展 .....	124
4-3 相图理论的基本概念及经典文献 .....	125
4-3-1 Gibbs 相律及相图中的规则 .....	125
4-3-2 单元系的温度-压力图( $p-T$ 图) .....	126
4-3-3 二元系相图 .....	126
4-3-4 三元系相图 .....	128
4-3-5 相图热力学基础 .....	132
4-3-6 相图计算 .....	137
4-4 相图及金相学方面的名人典故 .....	139
4-4-1 铁碳相图 .....	139
4-4-2 罗伯特-奥斯汀(W. C. Roberts-Austen)与奥氏体 .....	144
4-4-3 莱德伯(K. H. A. Ledebur)与莱氏体 .....	146
4-4-4 H. W. Bakhuis-Roozeboom 与溶体热力学 .....	147
4-4-5 吉布斯(J. W. Gibbs)与 Gibbs 相律 .....	148



4-4-6	热力学之父——汤姆孙(W. Thomson) .....	151
4-4-7	亥姆霍兹(H. L. von Helmholtz)与热力学自由能 .....	154
4-4-8	克拉贝龙(B. P. E. Clapeyron)、克劳修斯(R. J. E. Clausius)与C-C 方程 .....	157
4-4-9	杜安(P. M. M. Duhem)与 Duhem 方程 .....	159
4-4-10	范拉尔(J. J. van Laar)与相图计算 .....	160
4-4-11	佩尔顿(A. D. Pelton)与热力学软件 FactSage .....	161
	参考文献 .....	162
<b>5</b>	<b>位错 .....</b>	<b>165</b>
5-1	位错理论的基本内容、学习意义及位错理论的应用 .....	165
5-2	位错理论的研究历史简介 .....	166
5-3	位错理论的基本概念及经典文献 .....	168
5-3-1	位错的概念 .....	168
5-3-2	位错的几何特征 .....	169
5-3-3	位错的观察 .....	169
5-3-4	直位错的弹性应力场及能量 .....	170
5-3-5	位错的点阵模型及核心结构 .....	171
5-3-6	位错受到的各种力 .....	171
5-3-7	位错之间及位错与其他缺陷之间的交互作用 .....	173
5-3-8	位错的产生和增殖 .....	174
5-3-9	位错的塞积 .....	174
5-3-10	实际晶体中的位错(FCC) .....	175
5-4	位错理论方面的名人典故 .....	177
5-4-1	沃尔泰拉(V. Volterra)与 Volterra 位错 .....	177
5-4-2	伯格斯(J. M. Burgers)与伯氏矢量 .....	180
5-4-3	泰勒(G. I. Taylor)与位错概念的提出 .....	183
5-4-4	波拉尼(M. Polanyi)和位错概念的提出 .....	186
5-4-5	奥罗万(E. Orowan)与位错概念的提出 .....	189
5-4-6	派尔斯(R. Peierls)与位错的点阵阻力 .....	194
5-4-7	纳巴罗(F. R. N. Nabarro)与位错的弹性应力场 .....	196
5-4-8	科特雷尔(A. H. Cottrell)与科氏气团 .....	198
5-4-9	史诺克(J. L. Snoek)和史氏气团 .....	198
5-4-10	弗兰克(F. C. Frank)与 Frank 位错 .....	199
5-4-11	肖克利(W. B. Shockley)与 Shockley 位错 .....	201
5-4-12	克勒(J. S. Köhler)、皮奇(M. O. Peach)与位错受力公式 .....	203

参考文献 .....	205
<b>6 表面与界面 .....</b>	<b>209</b>
6-1 界面理论的基本内容、学习意义及界面理论的应用 .....	209
6-2 界面理论研究历史简介 .....	211
6-3 界面理论的基本概念及经典文献 .....	212
6-3-1 晶体表面的结构、能量与偏聚 .....	212
6-3-2 小角度晶界的结构及能量 .....	214
6-3-3 特殊大角度晶界的结构及能量 .....	216
6-3-4 晶界迁移率 .....	219
6-3-5 晶界的平衡偏析 .....	223
6-3-6 晶粒的平衡形貌 .....	224
6-3-7 相界面结构、惯习面及取向关系 .....	224
6-4 界面理论方面的名人典故 .....	227
6-4-1 科塞尔 (W. L. J. Kossel) 与晶体表面结构 .....	227
6-4-2 朗缪尔 (I. Langmuir) 与表面吸附理论 .....	228
6-4-3 费里德 (G. Friedel) 与 CSL 晶界 .....	231
6-4-4 博尔曼 (W. A. Bollmann) 与 O 点阵 .....	233
6-4-5 巴路菲 (R. W. Balluffi) 与 CSL 晶界 .....	234
6-4-6 布兰登 (D. Brandon) 与 CSL 关系的 Brandon 判据 .....	234
6-4-7 库鸠莫夫 (G. V. Kurdumov) 与 K-S 关系 .....	236
6-4-8 阿伦森 (H. I. Aaronson) 与界面的台阶模型 .....	238
6-4-9 格莱特 (H. Gleiter) 与纳米晶 .....	238
6-4-10 马林斯 (W. W. Mullins) 与晶界能 .....	239
参考文献 .....	240
<b>7 扩散与点缺陷 .....</b>	<b>243</b>
7-1 扩散理论的基本内容、学习意义及扩散理论的应用 .....	243
7-2 扩散与点缺陷理论研究历史简介 .....	244
7-3 扩散与点缺陷的基本概念及经典文献 .....	246
7-3-1 扩散的唯象理论——Fick 定律及其解 .....	246
7-3-2 互扩散现象——Kirkendall 效应 .....	249
7-3-3 组元的迁移速度与热力学参数的关系 .....	250
7-3-4 Darken 方程与“上坡”扩散现象 .....	252
7-3-5 反应扩散 .....	252
7-3-6 扩散的微观理论 .....	252
7-3-7 高扩散率的通道 .....	254

7-3-8 点缺陷的类型、表示及浓度 .....	255
<b>7-4 扩散与点缺陷方面的名人典故 .....</b>	<b>257</b>
7-4-1 布朗 (R. Brown) 与 Brown 运动 .....	257
7-4-2 弗仑克尔 (Y. I. Frenkel) 和 Frenkel 缺陷 .....	260
7-4-3 肖特基 (F. H. Schottky) 与 Schottky 缺陷 .....	261
7-4-4 齐纳 (C. M. Zener) 与 环形交换机制 .....	262
7-4-5 菲克 (A. Fick) 与 Fick 定律 .....	263
7-4-6 克肯达尔 (E. Kirkendall) 与 Kirkendall 效应 .....	264
7-4-7 达肯 (L. S. Darken) 与 Darken 方程 .....	265
<b>参考文献 .....</b>	<b>266</b>
<b>8 形变 .....</b>	<b>269</b>
8-1 形变理论的基本内容、学习意义及形变理论的应用 .....	269
8-2 材料变形研究历史简介 .....	271
8-2-1 弹性形变 .....	271
8-2-2 单晶体的范性形变 .....	271
8-2-3 形变组织 .....	273
8-2-4 多晶体的织构 .....	273
8-3 形变理论的基本概念及经典文献 .....	274
8-3-1 弹性形变中的普弹性、滞弹性与高弹性 .....	274
8-3-2 单晶塑性变形的滑移行为 .....	276
8-3-3 形变孪晶 .....	280
8-3-4 多晶体塑性变形的应变协调与组织变化 .....	281
8-3-5 晶粒尺寸强化 .....	283
8-3-6 形变织构 .....	285
8-4 形变理论方面的名人典故 .....	287
8-4-1 胡克 (R. Hooke) 与胡克定律 .....	287
8-4-2 韦伯 (W. E. Weber) 与黏弹性 .....	289
8-4-3 施密特 (Schmid) 因子与滑移的分切应力 .....	290
8-4-4 西格 (A. Seeger) 与加工硬化理论 .....	292
8-4-5 多晶塑性变形的 Sachs 模型与 Taylor 模型 .....	293
8-4-6 霍尔 (E. O. Hall) 与佩奇 (N. Petch) 及 Hall-Petch 关系 .....	293
8-4-7 邦厄 (H. J. Bunge) 与织构的定量表征 ODF .....	295
8-4-8 汉森 (N. Hansen) 与微观形变组织术语 .....	296
8-4-9 库尔曼-维尔斯多夫 (D. Kuhlmann-Wilsdorf) 与位错的低能组态 .....	297
<b>参考文献 .....</b>	<b>297</b>

<b>9 相变原理</b>	301
9-1 相变原理的基本内容、学习意义及相变原理的应用	301
9-2 相变原理研究历史简介	303
9-3 相变原理的基本概念及经典文献	304
9-3-1 相变的分类	304
9-3-2 相变的热力学——相变驱动力	305
9-3-3 经典形核理论	306
9-3-4 晶核的长大	311
9-3-5 转变动力学	314
9-3-6 Ostwald 熟化	316
9-4 相变原理方面的名人典故	316
9-4-1 克里斯蒂安(J. W. Christian)与相变分类	316
9-4-2 埃伦费斯特(P. Ehrenfest)与相变的热力学分类	318
9-4-3 福尔默(M. Volmer)与形核理论	321
9-4-4 贝克尔(R. Becker)、多林(W. Döring)与 Becker-Döring 理论	322
9-4-5 杰克逊(K. A. Jackson)与晶体表面结构稳定性	323
9-4-6 梅尔(R. F. Mehl)与转变动力学方程	324
9-4-7 奥斯特瓦尔德(F. W. Ostwald)与 Ostwald 熟化	326
9-4-8 特恩布尔(D. Turnbull)、形核理论与晶界扩散	331
参考文献	333
<b>10 各类相变</b>	337
10-1 各类相变的基本内容、学习意义及相变的应用	337
10-2 相变研究历史简介	338
10-3 各类相变的基本概念及经典文献	341
10-3-1 单相固溶体凝固	341
10-3-2 共晶凝固	343
10-3-3 铸锭的凝固	347
10-3-4 脱溶	347
10-3-5 共析转变	350
10-3-6 块形转变	350
10-3-7 调幅分解	350
10-3-8 马氏体转变	352
10-4 各类相变方面的名人典故	355
10-4-1 却尔曼斯(B. Chalmers)与组分过冷	355
10-4-2 普凡(W. G. Pfann)与区域提纯	360

10-4-3	布里奇曼 (P. W. Bridgman) 与单晶制备方法	361
10-4-4	吉尼耶 (A. Guinier)、普雷斯顿 (G. D. Preston) 与脱溶亚稳 G-P 区	362
10-4-5	梅尔 (R. F. Mehl) 与魏氏组织	365
10-4-6	希拉特 (M. Hillert) 与扩散控制的长大过程	366
10-4-7	马萨尔斯基 (T. B. Massalski) 与块状转变	367
10-4-8	卡恩 (J. W. Cahn) 与调幅分解	367
10-4-9	马腾斯 (A. Martens) 与马氏体相变	369
10-4-10	西山善次 (Z. Nishiyama)、瓦色尔曼 (G. Wassermann) 与马氏体相变的 N-W 关系	371
10-4-11	贝恩 (E. C. Bain) 与贝恩应变及贝恩关系	372
	参考文献	373
<b>11</b>	<b>再结晶</b>	<b>379</b>
11-1	再结晶理论的基本内容、学习意义及再结晶理论的应用	379
11-2	再结晶研究历史简介	381
11-3	再结晶理论的基本概念及经典文献	382
11-3-1	回复过程动力学及多边形化	383
11-3-2	再结晶的基本规律	383
11-3-3	再结晶形核机制	385
11-3-4	再结晶长大过程	386
11-3-5	晶粒的正常长大及异常长大	389
11-3-6	退火孪晶	390
11-3-7	再结晶织构	390
11-3-8	动态再结晶	391
11-4	再结晶理论方面的名人典故	392
11-4-1	罗森海茵 (W. Rosenhain) 与滑移带、加工硬化、晶界的非晶结构模型	392
11-4-2	胡郁 (H. Hu) 与亚晶合并模型、立方织构	394
11-4-3	贝克 (P. A. Beck)、应变诱导晶界迁移、择优长大理论及晶粒长大模型	396
11-4-4	James Chen-Min Li 与亚晶旋转形核机制	397
11-4-5	巴利特 (C. S. Barrett) 与再结晶织构的择优长大理论	398
11-4-6	K. Lücke 与 $40^\circ <111>$ 高迁移率	398
11-4-7	塞拉斯 (C. M. Sellars) 与动态再结晶应力-应变曲线的单、多峰模型	400
11-4-8	霍洛蒙 (J. H. Hollomon) 与 Zener-Hollomon 参数	400
11-4-9	择优形核与择优长大之争与相关材料学家	401
11-4-10	冯·诺伊曼 (J. von Neumann) 及晶粒长大的理论模型	401

11-4-11 戈斯(N. P. Goss)与二次再结晶 .....	405
参考文献 .....	405
人物索引 .....	410
后记 .....	420

# 1

## 晶体学

### 1-1 晶体学的基本内容、学习意义及 晶体学理论的应用

#### 1. 基本内容

现代使用的材料绝大部分是晶态材料。晶态材料包括单晶材料、多晶材料、微晶材料和液晶材料等。人们日常使用的各种金属材料大部分是多晶材料。物质结晶状态的本质特征是结构基元在空间呈规则的三维周期排列。这一本质特征决定了晶体的宏观、微观特征和物理性质。

晶体学是一门边缘交叉学科,它涉及许多学科,如数学、物理学、化学和生物学等。同时,晶体学又是很多学科的基础,它包含的内容比较广泛。一般可以将晶体学分成5个部分:晶体几何学、晶体结构学、晶体生成学、晶体物理学和晶体化学。

晶体学涉及的基本内容有:

- ① 晶体的基本性质,如对称性及各向异性。

② 点对称变换或操作,包括旋转操作、镜像反映、反演操作。  
③ 通过点对称性将晶体分成7大晶系,由点对称性及平移对称性共同决定14种布拉维(Bravais)点阵。

④ 点阵几何、点阵常数、晶面指数及晶向指数(即米勒指数表示方法)、晶带轴定律。

⑤ 倒易点阵。

⑥ 从几何角度描述晶体学方向、晶面之间角度或对称关系的二维图形——极射赤面投影图。

## 2. 学习意义

晶体学与其他学科密切相关。除第4章外,其他章节的学习都需要不同程度的晶体学基础。对晶体结构及各类晶体缺陷,缺少晶体学概念都难以系统地深入学习下去。物理冶金过程,如结晶、形变、相变及再结晶,都受相关材料晶体学特征的显著影响。晶体从气相中沉积出来,或从液相及固态玻璃中生长出来,或从固相母相中形成,总是受能量最低原则的控制,造成:各晶面或方向生长速度的差异;长成规则形状并受条件控制;性能的各向异性,界面存在晶体学;晶体受力加工时总在特定的晶面上发生滑动,力足够大时,晶粒的同类晶面常平行于外界坐标的某一方向产生所谓的织构。晶体内部的原子迁移也会受晶体学方向的影响:某些方向扩散得快一些,另一些方向扩散得慢一些。某些晶面的能量高,另一些晶面的能量低。新相形核可能总在母相某类晶面上进行。可见,晶体学理论贯穿于本书各章节,与每一章节都是密切联系的。

## 3. 晶体学的应用

虽然晶体学是基础科学,但它却反映在各个学科上,如地质学、矿物学、化学、物理学、材料科学、生物学等。以材料科学中的形变、再结晶、相变工艺过程为例,脆性断裂可能发生在晶体的特定晶面上,称为解理断裂;金属冲压时提前出现破裂,可能是晶体学织构控制不当所致;对于固态相变中的脱溶过程,新相常常以规则形状在母相的特定晶面(称为惯习面)出现,新相、母相之间存在特定的取向关系,有时根据已知的母相、新相的结构,按两相界面原子匹配最好的原则可以成功推算出新相在母相的哪个晶面、沿哪个方向析出。这些都涉及晶体学的内容。

# 1-2 晶体学研究历史简介

晶体学的研究始于自然界矿物晶体,从晶体的外形分析晶体的内部结构。晶体学分为经典晶体学和现代晶体学。两者的分界线是伦琴(W. C. Röntgen)1912年X射线的发现及劳厄(M. von Laue)在晶体衍射中的应用。晶体学理论

主要在经典晶体学阶段成熟,现代晶体学阶段主要是测定了各种晶体的结构。这是第2章的内容。

17世纪以后,晶体学开始成为研究晶体的一门科学。1669年,丹麦的斯丹诺(N. Steno)发现了晶体的面角守恒定律,也称Steno定律<sup>[1]</sup>。1801年,法国的阿羽依(R. J. Haüy)发现了晶体的晶面整数定律,又称有理指数定律<sup>[2]</sup>,该定理进一步揭示了晶体的外观形貌和内部结构之间的关系。1809年,德国的外斯(C. S. Weiss)总结出晶体的对称定律和晶带定律<sup>[3]</sup>,并将晶体分为6大晶系。1830年,德国的黑萨尔(J. F. C. Hessel)首先推导出描述晶体外形对称性的32种点群<sup>[4]</sup>。1848年,法国的布拉维(A. Bravais)推导出晶体结构中一切可能的空间格子共有14种不同类型<sup>[5]</sup>。1867年,俄国的加多林(А. В. Гадолин/A. W. Gadolin)用数学方法也推导出描述晶体外形对称性的32种点群,完成了晶体宏观对称性的总结。1885—1890年之间,首先是俄国的费德罗夫(E. S. Fedorov/Y. S. Fyodorov)<sup>[6]</sup>,然后是德国的熊夫利斯(A. M. Schönflies)<sup>[7]</sup>和英国的巴洛(W. Barlow)<sup>[8]</sup>,推导出描述晶体结构对称性的230种空间群,为晶体结构分析奠定了理论基础,这些理论至今仍然应用。德国哥廷根大学理论物理教授Woldemar Voigt首先引入张量的概念,被认为是物质各向异性现代诠释之父。1895年,德国的伦琴(W. K. Röntgen)发现了X射线<sup>[9]</sup>。1912年,德国的劳厄(M. von Laue)发现了X射线在晶体中的衍射现象<sup>[10]</sup>,这是一个具有划时代意义的实验。首先,它证实了晶体结构点阵理论的正确性;其次,它确定了X射线是电磁波;同时,它奠定了近代晶体学的基础,使X射线成为认识晶体结构的重要手段,在几十年间确定了数万种晶体的原子结构。第二年,W. H. Bragg和他的儿子W. L. Bragg引进了分光计电离室衍射的方法,这种方法被广泛采用,既可以用来分析许多晶体类型的晶体结构,又可以测量X射线的波长<sup>[11]</sup>。

## 1-3 晶体学的基本概念及经典文献

### 1-3-1 晶体的基本特征

晶体的基本特征包括自限性、均匀性、各向异性、对称性和稳定性等。其中,各向异性和对称性是最核心的特性。

#### 1. 各向异性

各向异性指沿晶体的不同方向,力学性能或物理性能不同。晶体的弹性模量、扩散系数(非立方晶系)、机械强度、塑性延伸率、热传导系数、泊松系数等都可能随晶体学方向而变。图1-1给出体心立方结构的钨、面心立方结构的铜和