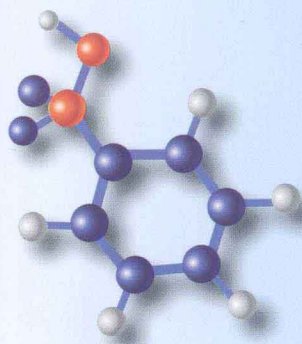




21世纪全国高等院校材料类**创新型**应用人才培养规划教材



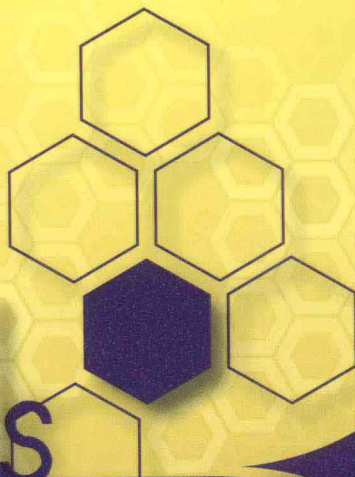
MATERIALS

材料科学概论

主 编 雷源源 张晓燕

- 以教学实际需要为出发点注重理论联系实际
- 建立材料知识体系介绍各种材料特征及性能
- 反映材料科学的特点，突出科普性和趣味性

Materials



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

21 世纪全国高等院校材料类创新型应用人才培养规划教材

材料科学概论

主	编	雷源源	张晓燕		
参	编	杨明	田琴	马	瑞
		万明攀	郝智		



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

内 容 简 介

本书分为金属材料、陶瓷材料、高分子材料、复合材料及部分新材料五部分。以金属材料为基础介绍了材料的微观组织结构和宏观性能之间的关系,又从不同材料所具有的共性规律的角度阐述了其他材料,最后部分新材料中介绍了一些材料科学与工程的前沿研究。

本书将帮助非材料专业的学生及广大对材料科学感兴趣的读者从整体上理解和认识材料科学。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学概论/雷源源, 张晓燕主编. —北京: 北京大学出版社, 2013. 12
(21 世纪全国高等院校材料类创新型应用人才培养规划教材)
ISBN 978-7-301-23682-6

I. ①材… II. ①雷…②张… III. ①材料科学—高等学校—教材 IV. ①TB3
中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 320484 号



书 名: 材料科学概论

著作责任者: 雷源源 张晓燕

策 划 编 辑: 童君鑫 黄红珍

责 任 编 辑: 黄红珍

标 准 书 号: ISBN 978-7-301-23682-6/TG·0049

出 版 发 行: 北京大学出版社

地 址: 北京市海淀区成府路 205 号 100871

网 址: <http://www.pup.cn> 新浪官方微博: @北京大学出版社

电 子 信 箱: pup_6@163.com

电 话: 邮购部 62752015 发行部 62750672 编辑部 62750667 出版部 62754962

印 刷 者: 北京富生印刷厂

经 销 者: 新华书店

787 毫米×1092 毫米 16 开本 16.75 印张 387 千字

2013 年 12 月第 1 版 2013 年 12 月第 1 次印刷

定 价: 36.00 元

未经许可, 不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版权所有, 侵权必究

举报电话: 010-62752024 电子信箱: fd@pup.pku.edu.cn

21 世纪全国高等院校材料类创新型应用人才培养规划教材

编审指导与建设委员会

成员名单（按拼音排序）

白培康（中北大学）

崔占全（燕山大学）

杜振民（北京科技大学）

关绍康（郑州大学）

李楠（武汉科技大学）

林志东（武汉工程大学）

刘开平（长安大学）

裴坚（北京大学）

孙凤莲（哈尔滨理工大学）

万发荣（北京科技大学）

王峰（北京化工大学）

王昆林（清华大学）

伍玉娇（贵州大学）

徐鸿（华北电力大学）

张朝晖（北京理工大学）

张敏刚（太原科技大学）

张晓燕（贵州大学）

赵莉萍（内蒙古科技大学）

陈华辉（中国矿业大学）

杜彦良（石家庄铁道大学）

耿桂宏（北方民族大学）

胡志强（大连工业大学）

梁金生（河北工业大学）

刘爱民（大连理工大学）

芦笙（江苏科技大学）

时海芳（辽宁工程技术大学）

孙玉福（郑州大学）

王春青（哈尔滨工业大学）

王金淑（北京工业大学）

卫英慧（太原理工大学）

夏华（重庆理工大学）

余心宏（西北工业大学）

张海涛（安徽工程大学）

张锐（郑州航空工业管理学院）

赵惠忠（武汉科技大学）

赵玉涛（江苏大学）

前 言

材料是人类一切生产和生活水平提高的物质基础，是人类进步的里程碑。某些新材料的出现，成功地推动了社会的进步，提高了人类的物质文明。同时，材料的不断创新和发展，也极大地推动了社会经济的发展。所以人类文明史，同时也是一部材料发展史。材料是支持人类生活，美化人类社会重要支柱的这一事实永远不会改变。让我们一起沿着人类文明的足迹，探索材料的昨天、今天和明天。对于新材料在当今新技术革命中的地位有所了解，将为以后的工作奠定基础。

本书是根据全校公选课程“材料科学概论”教学实际需要，结合多年来从事本课程的教学实践和体会，本着反映材料科学的特点，突出科普性和趣味性的原则，注意理论联系实际，以体现材料学科发展前沿知识，反映现代科学技术的成就为宗旨编写的，主要供非材料专业的学生或对材料科学感兴趣的读者使用。

随着我国现代化建设的不断发展，材料科学的应用越来越广，已渗透到许多领域。未来科学技术的综合化趋势对人才培养提出了新的要求，非材料专业的学生除了熟悉自己专业之外，还需要了解一些材料的基础知识。为了建立更广的材料知识体系，本书以金属材料为主，在此基础上又介绍了陶瓷材料、高分子材料和复合材料，为了解各种材料提供了必要的知识。

本书对材料科学基本概念和各种材料特征及性能进行了深入浅出、通俗易懂的阐述，力求教材内容的科学性、简洁性和趣味性，尤其在章节安排上，注意了材料科学的系统性、先进性和适用性。本书内容由五部分组成：第1章为金属材料，主要包括晶体结构、晶体缺陷、形变、相图、金属热处理、有色金属等；第2章为陶瓷材料，主要包括陶瓷的结构、性能、制备工艺等；第3章为高分子材料，包括概述、高分子结构、性能和制备工艺等；第4章为复合材料，包括复合材料的基本结构、金属基复合材料、陶瓷基复合材料和聚合物基复合材料；第5章为部分新材料，包括纳米材料、超导材料、信息材料、磁性材料、智能材料和新型能源材料等新材料的应用及研究现状。

本书的编写者为贵州大学雷源源(第1章的第1、4节)，张晓燕(第1章的第9节和第5章的第3、4、6节)，马瑞(第1章的第5节、第4章和第5章的第5节)，郝智(第3章)，万明攀(第1章的第2、3、7节)，田琴(第1章的第6、8节和第5章的第1、2节)，杨明(第2章)。全书由雷源源、张晓燕主编。

由于编者水平有限，不当之处在所难免，恳请读者批评指正。

编 者
2013年8月

目 录

第 1 章 金属材料 1

1.1 金属的晶体结构	3
1.1.1 原子间的键合	3
1.1.2 晶体学基础	6
1.1.3 纯金属的晶体结构	11
1.1.4 合金相结构	16
1.2 金属的晶体缺陷	18
1.2.1 点缺陷	19
1.2.2 线缺陷	20
1.2.3 柏氏矢量	23
1.2.4 位错密度	24
1.2.5 面缺陷	24
1.3 金属的塑性形变与回复再结晶 ...	28
1.3.1 金属的塑性形变	28
1.3.2 回复与再结晶	33
1.4 二元合金相图及其分类	40
1.4.1 相图的基本知识	41
1.4.2 匀晶相图分析	41
1.4.3 共晶相图及其结晶过程 ...	42
1.4.4 铁碳相图	49
1.5 凝固	53
1.5.1 金属的凝固	53
1.5.2 单相固溶体凝固	59
1.5.3 铸锭的凝固	61
1.6 扩散	62
1.6.1 表象理论	63
1.6.2 影响扩散的因素	64
1.6.3 扩散驱动力	65
1.6.4 扩散机制	65
1.7 钢的热处理	67
1.7.1 固态相变的类型	67
1.7.2 钢在加热时的转变	68
1.7.3 钢冷却时的转变	71

1.7.4 常见的热处理工艺	76
----------------------	----

1.8 铸铁	80
--------------	----

1.8.1 铸铁的特点及分类	80
----------------------	----

1.8.2 铸铁的石墨化	83
--------------------	----

1.8.3 普通灰口铸铁	86
--------------------	----

1.8.4 可锻铸铁	89
------------------	----

1.8.5 球墨铸铁	91
------------------	----

1.8.6 蠕墨铸铁	92
------------------	----

1.8.7 合金铸铁	93
------------------	----

1.9 有色金属及合金	95
-------------------	----

1.9.1 铝及铝合金	96
-------------------	----

1.9.2 铜及铜合金	101
-------------------	-----

1.9.3 镁及镁合金	104
-------------------	-----

1.9.4 锌及锌合金	105
-------------------	-----

1.9.5 钛及钛合金	106
-------------------	-----

1.9.6 镍及镍合金	107
-------------------	-----

1.9.7 稀有金属概述	108
--------------------	-----

综合习题	112
------------	-----

第 2 章 陶瓷材料 113

2.1 陶瓷材料概述	114
------------------	-----

2.1.1 陶瓷和陶瓷材料	114
---------------------	-----

2.1.2 陶瓷材料的分类	116
---------------------	-----

2.1.3 结构陶瓷	117
------------------	-----

2.1.4 功能陶瓷	118
------------------	-----

2.2 陶瓷材料的结构基础	124
---------------------	-----

2.2.1 晶体相	126
-----------------	-----

2.2.2 玻璃相	127
-----------------	-----

2.2.3 气相	128
----------------	-----

2.3 陶瓷材料的形变	128
-------------------	-----

2.3.1 陶瓷材料的弹性形变	128
-----------------------	-----

2.3.2 陶瓷材料的塑性形变	129
-----------------------	-----

2.3.3 断裂韧性	129
------------------	-----

2.3.4 抗热冲击性	130
-------------------	-----



2.4 陶瓷的制备工艺	131	4.1.3 复合材料的界面	186
2.4.1 粉体的制备	131	4.2 金属基复合材料	187
2.4.2 坯料的成型	132	4.2.1 金属基复合材料概述	187
2.4.3 坯料的干燥	132	4.2.2 金属基复合材料的 制备	188
2.4.4 制品的烧结	133	4.2.3 金属基复合材料的 界面	192
2.4.5 后加工	136	4.2.4 金属基复合材料的 性能	193
2.4.6 常见陶瓷的制备工艺 举例	137	4.3 陶瓷基复合材料	196
2.4.7 影响陶瓷成品性能的 因素	138	4.3.1 陶瓷基复合材料概述	196
综合习题	140	4.3.2 陶瓷基复合材料的 制备	197
第3章 高分子材料	141	4.3.3 陶瓷基复合材料的 界面	199
3.1 高分子材料概述	142	4.3.4 陶瓷基复合材料的 性能	200
3.1.1 高分子材料在现代 材料中的地位	142	4.4 聚合物基复合材料	201
3.1.2 高分子材料研究的主要 内容	143	4.4.1 聚合物基复合材料 概述	201
3.1.3 高分子材料的发展 概况	143	4.4.2 聚合物基复合材料的 制备	201
3.1.4 高分子材料的基本 概念	145	4.4.3 聚合物基复合材料的 界面	206
3.2 高分子材料的制备	153	4.4.4 聚合物基复合材料的 性能	206
3.2.1 缩聚反应	153	综合习题	209
3.2.2 加聚反应	154	第5章 部分新材料	210
3.3 高分子材料的结构	157	5.1 纳米材料	211
3.3.1 大分子链结构	157	5.1.1 纳米材料概述	211
3.3.2 高聚物的聚集态结构	162	5.1.2 纳米材料的分类	211
3.4 高分子材料的性能	167	5.1.3 纳米材料的特性	213
3.4.1 聚合物的力学性能	167	5.1.4 纳米材料的制备	214
3.4.2 聚合物的溶液性能	172	5.1.5 纳米材料的应用	215
3.4.3 聚合物的热性能	173	5.2 信息材料	216
3.4.4 聚合物的电学性能	173	5.2.1 信息材料的分类	216
3.4.5 高分子液体的流变性	174	5.2.2 信息功能材料	217
综合习题	174	5.2.3 信息材料的应用	220
第4章 复合材料	175	5.2.4 信息材料的发展现状和 趋势	221
4.1 复合材料的基本结构	177		
4.1.1 复合材料的基体	177		
4.1.2 复合材料的增强体	181		

5.3 智能材料	221	5.5.1 软磁材料	234
5.3.1 智能材料的定义	221	5.5.2 永磁材料	241
5.3.2 智能材料结构的设计	222	5.5.3 磁记录材料	247
5.3.3 驱动器材料	223	5.5.4 其他磁功能材料	248
5.3.4 传感器材料	226	5.6 新型能源材料	249
5.4 超导材料	228	5.6.1 制氢和储氢材料	249
5.4.1 超导现象及超导特性	228	5.6.2 太阳能电池	253
5.4.2 超导材料的分类	229	综合习题	255
5.4.3 超导材料的应用	232	参考文献	257
5.5 磁性材料	234		

第 1 章

金属材料



本章教学要点

知识要点	掌握程度	相关知识
金属晶体结构	了解原子间的键合 了解 14 种布拉菲点阵 了解三种典型金属的晶体结构类型 了解合金相和中间相	原子间键合 晶体结构及空间点阵 三种典型金属晶体结构 合金相结构
位错	了解位错理论的起源 了解位错的基本类型 了解位错的运动过程	位错理论的提出 位错基本类型 位错运动过程
金属的塑性形变	了解金属的弹性形变实质及特征 了解金属的塑性形变实质及特征 了解位错对金属塑性形变的影响	弹性形变实质 塑性形变实质 位错对塑性形变的影响
钢的热处理	了解热处理的意义 了解钢加热时的变化 了解钢冷却时的变化 了解常用热处理工艺的作用	钢在加热时的转变 钢在冷却时的转变 常用热处理工艺
有色金属及合金	了解铝及铝合金的特点及应用 了解铜及铜合金的特点及应用 了解镁及镁合金的特点及应用 了解钛及钛合金的特点及应用	铝及铝合金 铜及铜合金 镁及镁合金 钛及钛合金



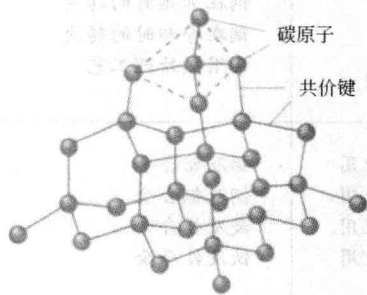
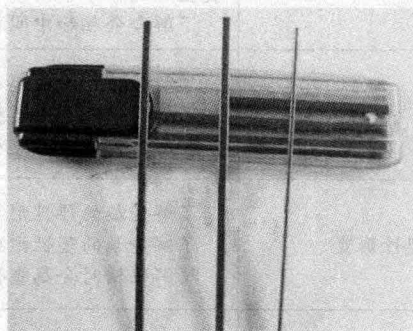
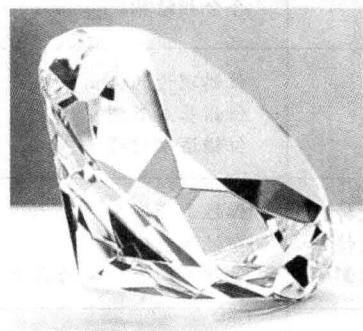
导入案例

金刚石与石墨

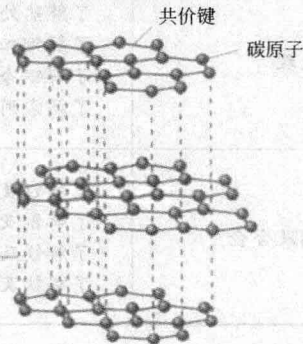
金刚石和石墨(图 1.01)都属于碳单质,它们是由相同元素构成的同素异形体。但由于它们内部结构不同,金刚石和石墨的性质有天壤之别。

金刚石呈正四面体空间网状立体结构,碳原子之间形成共价键。当切割或熔化金刚石时,需要克服碳原子之间的共价键。金刚石是自然界已经知道的物质中硬度最大的材料,它的熔点高。上等无瑕的金刚石晶莹剔透,折光性好,光彩夺目,是人们喜爱的钻石,也是尖端科技不可缺少的重要材料;颗粒较小、质量低劣的金刚石常用在普通工业方面,如用于制作仪器、仪表、轴承等精密元件、机械加工、地质钻探等。钻石在磨、锯、钻、抛光等加工工艺中,是切割石料、金属、陶瓷、玻璃等所不可缺少的;用金刚石钻头代替普通硬质合金钻头,可大大提高钻进速度,降低成本;镶嵌钻石的牙钻是牙科医生得心应手的工具;镶嵌钻石的眼科手术刀的刀口锋利光滑,即使用 1000 倍的显微镜也看不到一点缺陷,是治疗白内障普遍使用的利器。金刚石在机械、电子、光学、传热、军事、航天航空、医学和化学领域有着广泛的应用前景。

石墨是六边形层状结构,层内碳原子排列成平面六边形,每个碳原子以三个共价键与其他碳原子结合;同层中的离域电子可以在整层活动,层间碳原子以分子间作用力(范德华力)相结合。石墨是一种灰黑色、不透明、有金属光泽的晶体。天然石墨耐高温,热膨胀系数小,导热、导电性好,摩擦系数小。石墨被大量用来做电极、坩埚、电刷、润滑剂、铅笔等。



钻石的结构



石墨的结构

图 1.01 金刚石与石墨

在材料工业中,金属材料一直占绝对优势。这是因为金属材料(如钢铁)工业已经具有了一整套相当成熟的生产技术和较强的生产能力,并且质量稳定,供应方便,在性能价格比上也占有一定优势。在相当长时期内,金属材料的资源也是有保证的,且其可回收,可循环使用,材料本身对环境没有污染。当然,最重要和根本的原因还在于金属材料具有其他材料体系不能完全取代的独特的性质和使用性能。金属的许多性能都与晶体中原子(分子或离子)的排列方式有关。本章主要介绍金属的组织结构、加工工艺与性能之间的关系及其变化规律。

1.1 金属的晶体结构

材料的成分不同,其性能也不同。同一成分的材料,其内部结构和组织状态不同,性能也不同。因此,研究材料内部结构对了解材料性能非常重要。本节主要介绍金属的内部结构。

金属在固态下通常都是晶体。所谓晶体,是指其内部原子(分子或离子)在三维空间作有规则的周期性重复排列的物体。晶体中原子(分子或离子)在空间的具体排列方式称为晶体结构。金属的许多性能都与其微观排列方式有关,因此分析金属的晶体结构是研究金属材料的关键,其中包括晶体中原子是如何相互作用并结合起来的,原子的排列方式和规律,各种晶体的特点和差异等。

1.1.1 原子间的键合

材料的许多性能在很大程度上取决于原子结合键。例如,金刚石和石墨都是含碳的单质,但金刚石是无色坚硬的晶体,而石墨是黑色光滑的片状物,两者性能相差甚远。这是由于两种物质碳原子之间具有不同的键合方式。

根据结合力的强弱可以把结合键分为两大类:一类是结合力较强的主价键,包括离子键、共价键和金属键;另一类是结合力较弱的次价键,包括范德瓦尔斯键和氢键。

1. 离子键

金属元素特别是ⅠA、ⅡA族金属在满壳层外面,有1~2个价电子很容易脱离原子核,而ⅥA、ⅦA族的非金属元素原子的外壳层得到1~2个电子便可成为稳定的电子结构。当这两类元素结合时,金属元素的外层电子就会转移到非金属元素的外壳层上,使两者都形成稳定的电子结构,分别形成正离子和负离子。正负离子之间由于静电引力相互吸引,使原子结合在一起,形成了离子键。所以这种结合的特点是,以离子而不是以原子为结合单元。

氯化钠是典型的离子键结合,如图1.1所示,Na的最外层电子贡献给Cl,Na变为带正电的离子,内层电子数为8,是满层电子数;Cl接受1个电子,变为带负电的离子,并使外层电子数为8,也是满层电子数。故1个Na原子和1个Cl原子依靠正负离子间的吸引力而结合在一起。

一般离子晶体中正负离子静电引力较强,所以熔点较高。离子晶体如果发生相对移动,将失去电平衡,使离子键遭到破坏,故以离子键结合的材料是脆性的。此外,由于离

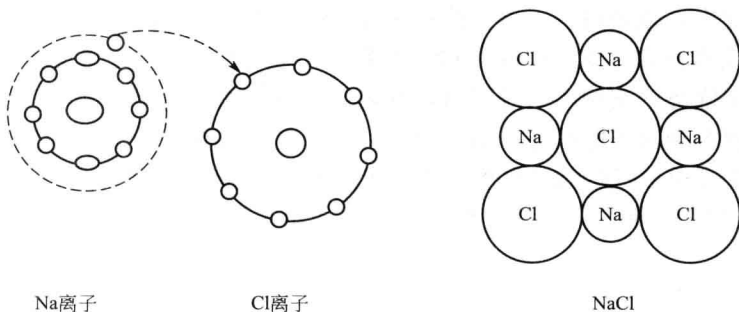


图 1.1 NaCl 的离子键

子晶体中很难产生可以自由运动的电子，因此，它们都是良好的电绝缘体。

2. 共价键

共价键是由两个或多个电负性相差不大的原子通过共用电子对形成的化学键。在元素周期表中的ⅣA、ⅤA族元素，其价电子数为4、5，得失电子都较困难，因此不容易实现离子结合。在这种情况下，相邻原子通过共用电子对来实现稳定的电子结构。例如，金刚石是典型的共价键结合，如图1.2所示，碳的4个价电子分别与周围4个碳原子的电子组成4个共用电子对，达到8电子稳定结构。

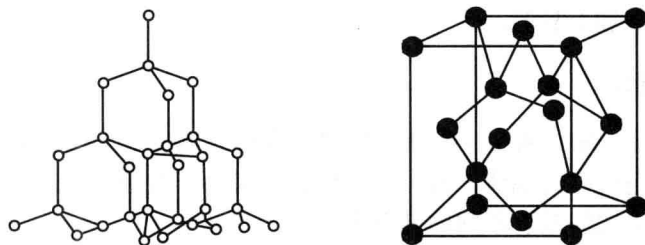


图 1.2 金刚石的原子结合(圆点代表C原子)

共价键的结合力很大，因此共价晶体结构比较稳定，具有硬度高、强度大、脆性大、熔点高等性质。

3. 金属键

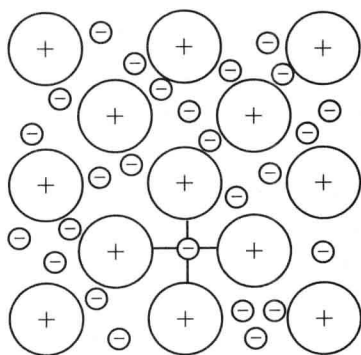


图 1.3 金属键示意图

典型金属原子的结构特点是，最外层电子数很少，容易失去外壳层电子而具有稳定的电子结构。当金属原子相互靠近时，其最外层电子脱离原子成为自由电子，并在整个晶体内运动，为整个金属所共有，即弥漫于金属正离子组成的晶格之中形成电子云。这种由金属中的自由电子和金属正离子之间相互作用所构成的键称为金属键。如图1.3所示，绝大多数金属以金属键方式结合，它的基本特点是电子的共有化。

此外，金属键无饱和性，也无方向性，因此每个原子有可能同更多的原子相结合。由于原子排列得越紧

凑,体系的能量越低,晶体也就越稳定,所以金属晶体中的原子排列都比较紧密。



阅读材料1-1

金属的特性

金属(图 1.4)具有金属光泽及良好的导电性、导热性、延展性,以及正的电阻温度系数。

这是由于金属晶体由金属键结合,因而具有上述一系列的金属特性。例如,金属中的自由电子在外电场作用下会沿着电场方向做定向运动,形成电流,从而显示良好的导电性。又因金属中正离子是以某一固定位置为中心做热振动的,对自由电子的流通就有阻碍作用,这就是金属具有电阻的原因。随着温度的升高,正离子振动的振幅加大,对自由电子通过的阻碍作用也加大,因而金属的电阻是随着温度的升高而增大的,即具有正的电阻温度系数。此外,由于自由电子的运动和正离子振动可以传递热能,因而使金属具有较好的导热性。当金属发生塑性变形(即晶体中原子发生了相对位移)后,正离子与自由电子间仍能保持金属键的结合,使金属显示出良好的延展性。因为金属晶体中的自由电子能吸收可见光的能量,故使金属具有不透明性。吸收能量而跃迁到较高能级的电子,当它重新回到原来的低能级时,就把所吸收的可见光的能量以电磁波的形式辐射出来,在宏观上就表现为金属的光泽。

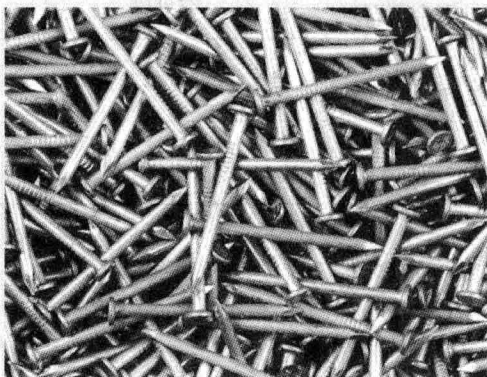
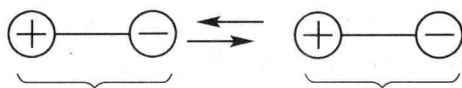


图 1.4 金属制品

4. 范德瓦尔斯键



原子或分子偶极

图 1.5 极性分子间的范德瓦尔斯力示意图

原子或离子结构中的无序波动会引起核周围电子云的畸变,而这种波动可以由热振动或电磁振动引起。电子壳层的非对称移动引起动态偶极,偶极之间的相互作用产生弱的吸引力,范氏力就是借助这种微弱的、瞬时的电偶极矩的感应作用将原来具有稳定的原子结构的原子

或分子结合为一体的,如图 1.5 所示。

由于范德瓦尔斯键很弱,分子晶体的结合力很小。在外力作用下,易产生滑动造成大的变形。因此,分子晶体的熔点很低,硬度也低。

5. 氢键

氢键是一种特殊的分子间作用力,它是由氢原子同时与两个电负性很大而原子半径很小的原子(O、F、N等)相结合而产生。它比范德瓦尔斯键要强得多,但比化学键弱。

实际上,大部分材料的内部原子结合键往往是几种结合键的混合。例如,过渡族元素原子结合中除了金属键外,也会出现少量的共价键结合,这也是过渡族金属具有高熔点的原因。



以上简单讨论了结合键的类型和特征，表 1-1 比较了部分物质的键能和熔融温度。

表 1-1 部分物质的键能和熔融温度

物 质	键 合 类 型	键 能		熔融温度/℃
		kJ/mol (eV/原子、离子、分子)		
Hg	金属键	68	0.7	—39
Al		324	3.4	660
Fe		406	4.2	1538
W		849	8.8	3410
NaCl	离子键	640	3.3	801
MgO		1000	5.2	2800
Si	共价键	450	4.7	1410
C(金刚石)		713	7.4	>3550
Ar	范德瓦尔斯键	7.7	0.08	—189
Cl ₂		31	0.32	—101
NH ₃	氢键	35	0.36	—78
H ₂ O		51	0.52	0

1.1.2 晶体学基础

1. 空间点阵

1) 空间点阵的概念

实际晶体中的质点(原子、分子、离子等)在三维空间可以有无限多种排列形式。为了便于分析、研究晶体中质点的排列情况，可把它们抽象为规则排列于空间的无数个几何点，这些点可以是原子或分子的中心，也可以是彼此等同的原子群或分子群的中心，但各个点的周围环境都必须相同。这种点的空间排列就称为空间点阵。点阵中的点称为阵点或结点。在表达空间点阵的几何图形时，为了观察方便起见，可用许多平行的直线将所有阵点连接起来，构成一个三维几何格架，称为空间格子，如图 1.6 所示。注意，空间点阵只是表示原子或原子团分布规律的一种几何抽象，每个阵点不一定就代表一个原子，也就是说，每个阵点可能

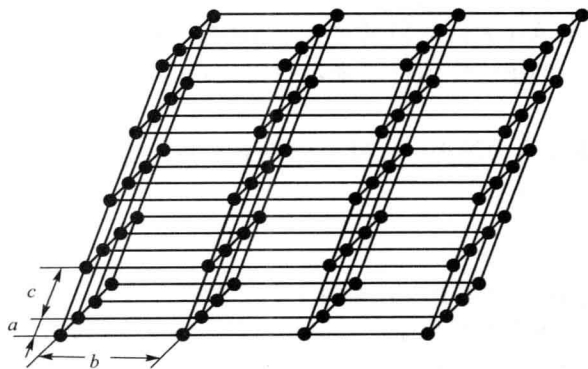


图 1.6 空间点阵的一部分

代表一群原子。但每个阵点都是等同的，周围环境都必须相同。

2) 晶胞

由于各阵点的周围环境相同，空间点阵具有周期重复性。为了说明点阵排列的规律和特点，可在点阵中取出一个具有代表性的基本单元(通常是取一个最小的平行六面体)作为点阵的组成单元，称为晶胞。将晶胞作三维的重复堆砌就构成了空间点阵。可见，采用晶胞来反映晶体中原子

(分子或离子)排列的规律就更为简单明了。但需注意,同一空间点阵可因选取方式不同而得到不相同的晶胞,因此选取晶胞时要使选取出的晶胞尽量反映出点阵的高度对称性且尽可能是简单晶胞,即只在平行六面体的八个顶角上有阵点。有时,为了更好地表现出点阵的对称性,也可不选简单晶胞而使晶胞中心或面的中心也存在阵点,如体心(在平行六面体的中心有一阵点)、底心(在上下底面的中心各有一阵点)的晶胞。

如何描述晶胞的形状和大小呢?通过晶胞角上的某一阵点(往往取左下角后面一点),沿其三个棱边作坐标轴 x 、 y 、 z (称为晶轴),则此晶胞及所属点阵类型即可由三条棱边的边长 a 、 b 、 c (称为点阵常数)及棱间夹角 α 、 β 、 γ 6 个参数来描述,如图 1.7 所示。

3) 晶系

根据 6 个点阵参数间的相互关系,可将全部空间点阵归属于 7 种类型,即 7 个晶系,见表 1-2。所有的晶体均可归纳在这 7 个晶系中。

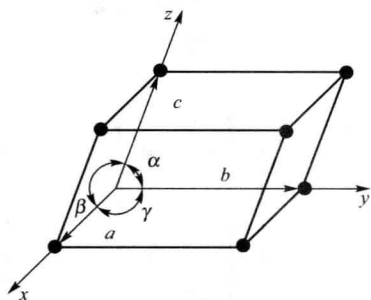


图 1.7 晶胞、晶轴及点阵矢量

表 1-2 晶 系

晶 系	棱边长度及夹角关系	举 例
三斜	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	K_2CrO_7
单斜	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	$\beta\text{-S}, \text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
正交	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\alpha\text{-S}, \text{Ga}, \text{Fe}_3\text{C}$
六方	$a_1 = a_2 = a_3 \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$\text{Zn}, \text{Cd}, \text{Mg}, \text{NiAs}$
菱方	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$\text{As}, \text{Sb}, \text{Bi}$
四方	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\beta\text{-Sn}, \text{TiO}_2$
立方	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\text{Fe}, \text{Cr}, \text{Cu}, \text{Ag}, \text{Au}$

4) 布拉菲点阵

自然界中的晶体有很多种,它们都具有各自的晶体结构。按照“每个阵点的周围环境都相同”的要求,法国晶体学家布拉菲(Bravais)于 1848 年用数学方法证明空间点阵只能有 14 种,故这 14 种空间点阵叫做布拉菲点阵。它们分属 7 个晶系,见表 1-3。它们的晶胞如图 1.8 所示。

表 1-3 布拉菲点阵

布拉菲点阵	晶 系	布拉菲点阵	晶 系
简单三斜	三斜	简单六方	六方
简单单斜 底心单斜	单斜	简单菱方	菱方
简单正交 底心正交 体心正交 面心正交	正交	简单四方 体心四方	四方
		简单立方 体心立方 面心立方	立方

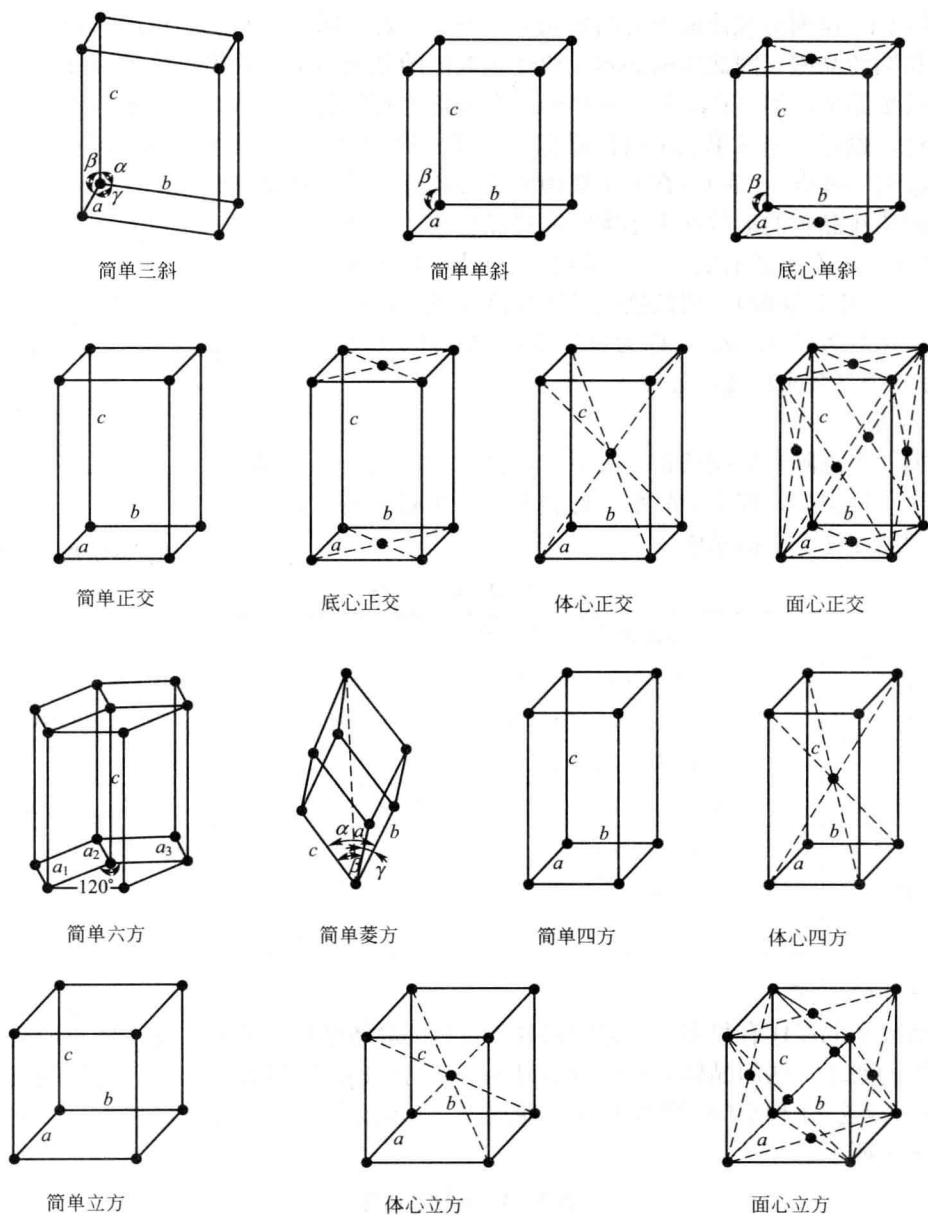


图 1.8 14 种布拉菲点阵

空间点阵用以描述和分析晶体结构的周期性和对称性，是晶体中质点排列的几何学抽象。由于各阵点必须等同且周围环境相同，它只能有 14 种类型。晶体结构是指晶体中实际质点(包括同类或异类的原子、分子或离子)的具体排列情况。实际质点能组成各种类型的排列，因此可能出现的晶体结构是无限的。但是各种晶体结构总能够按质点排列的周期性和对称性归属于 14 种空间点阵中的一种。

2. 晶向指数和晶面指数

在材料科学中，分析研究有关晶体的生长、变形、相变及性能等问题时，常需涉及晶

体中的某些方向(称为晶向)和原子构成的平面(称为晶面)。为了便于表示和区别各种晶向和晶面,国际上通常用密勒(Miller)指数来统一标定晶向指数和晶面指数。

1) 晶向指数

晶向指数的确定步骤如下:

(1) 建立坐标系。以晶胞的某一点 O 为原点,三条棱边为坐标轴(x, y, z),并以晶胞棱边的长度(即晶胞的点阵常数 a, b, c)分别作为坐标轴的长度单位。

(2) 过原点 O 作一直线 OP ,使其平行于待定的晶向。

(3) 在直线 OP 上选取距原点 O 最近的一个阵点,并确定该点的 3 个坐标值。

(4) 将这三个坐标值化为最小整数 u, v, w ,加上方括号, $[uvw]$ 即为待定晶向的晶向指数。如果 $[uvw]$ 中某个数值为负值,则将负号标注在这个数的上方,如 $[0\bar{1}2]$, $[\bar{1}0]$ 等。

图 1.9 中给出了正交晶系中的几个晶向的晶向指数。注意,一个晶向指数并不表示一个晶向,而是表示一组互相平行、方向一致的晶向。若所指的方向相反,则晶向指数的数字相同,但符号相反。由于晶体中的对称关系,原子排列情况相同、空间位向不同的一组晶向称为晶向族,用 $\langle uvw \rangle$ 来表示。例如,立方晶系中的 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 和 $[\bar{1}00]$ 、 $[0\bar{1}0]$ 、 $[00\bar{1}]$ 六个晶向的原子排列情况完全相同,性质相同,可用晶向族 $\langle 100 \rangle$ 表示。注意,如果不是立方晶系,改变晶向指数的顺序,所表示的晶向可能不等同。例如,在正交晶系中由于 $a \neq b \neq c$,即 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 各晶向的原子间距并不相等,故不属于同一晶向族。

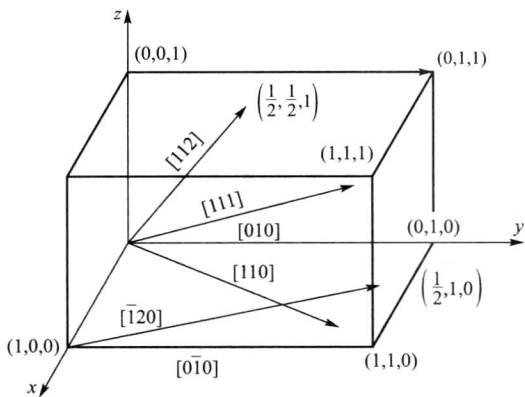


图 1.9 正交晶系中的部分晶向

2) 晶面指数

在晶体中,原子的排列构成了许多不同方位的晶面,用晶面指数来表示和区分这些晶面。晶面指数的确定步骤如下:

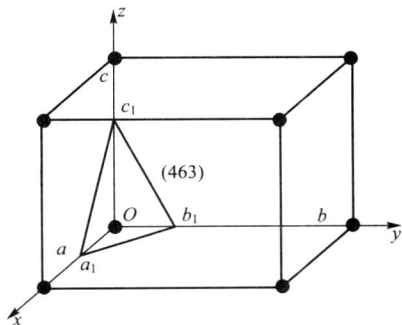


图 1.10 晶面指数的表示方法

$$\begin{aligned}\overrightarrow{Oa_1} &= \frac{1}{2}a \\ \overrightarrow{Ob_1} &= \frac{1}{3}b \\ \overrightarrow{Oc_1} &= \frac{2}{3}c\end{aligned}$$

(1) 建立如前所述的坐标系,但原点要定于待定晶面之外,避免出现零截距。

(2) 求出待定晶面在 3 个坐标轴上的截距,若该晶面和某坐标轴平行,则在此轴上的截距为 ∞ 。

(3) 取这些截距的倒数。

(4) 将上述倒数化为最小的简单整数,并加上圆括号,即表示该晶面的指数,记为 (hkl) 。

图 1.10 所标出的晶面, $a_1, b_1,$