

CAILIAO KEXUE JICHU

材料科学基础

杜丕一 潘 颐 编著

中国建材工业出版社

材料科学基础

杜丕一 潘 颐 编著

中国建材工业出版社

图书在版编目(CIP)数据

材料科学基础/杜丕一,潘颐编著. —北京:中国建材工业出版社,2002.3
ISBN 7-80159-228-X

I. 材... II. ①杜...②潘... III. 材料科学—基础理论 IV. TB30

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 003201 号

材料科学基础

杜丕一 潘 颐 编著

*

中国建材工业出版社出版

(北京海淀区三里河路 11 号 邮编:100831)

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

北京丽源印刷厂印刷

*

开本:787mm×1092mm 1/16 印张:16.5 字数:380 千字

2002 年 3 月第一版 2002 年 3 月第一次印刷

印数:1~3000 册 定价:28.00 元

ISBN 7-80159-228-X/TU·111

前 言

材料科学基础涉及了材料科学与工程学科的重要基础理论知识。从传统材料及工程的角度看,材料可归属于实验学科,但是随着新材料的不断发展,材料学科更表现出了它科学性和综合性的一面。在当今高新技术的不断推动下,各种新材料的涌现,要求我们只有在掌握更深的基础理论及更多学科综合知识的基础上才有可能了解它和应用它。

本书以材料的结构状态为主线,从完整晶体结构出发直至非晶态固体,着重介绍了包括晶体结构、晶体结构的不完整性、固溶体和非晶态固体在内的全部内容;并对固体材料中质点的运动和迁移以及晶格振动与电子运动做了一定的阐述。本书着重概念的建立和演绎,并介绍了这些基本概念在具体的材料中的应用范例和普适性,与传统的“材料科学基础”类书籍相比,本书原则上摒弃了原来以单一材料作为专业基础时所建立的一套编排体系,也即在编写时仅以物质结构状态等观点出发来介绍与所有材料相关的科学基础问题,而摒弃了以金属、非金属等单一材料本身来介绍的情况,这更有利于读者全面了解和掌握整个材料的基本科学问题。

鉴于材料内部的领域交叉已成必然,作为高等学校教材,本书有利于拓宽学生的知识面,全面了解材料的基本科学理论,了解材料的多样性。通过对本书的学习,能大大促进学生对材料科学整体学科概念的建立和基本理论的掌握,也能适应当今科学技术的发展要求,材料科学工作者必须同时掌握多种材料方面知识的实际形势。作为材料的科学基础,本书除可作为大学生的教学用书之外,还可以作为研究生和广大技术研究人员的参考书,对认识和掌握材料的内在本质问题有一定的帮助。

本书是编者在浙江大学课程改革与建设中,及在几年的教学讲义基础上编写而成。全书由杜丕一主编,潘颐编写了其中与高分子材料相关的内容。此外,浙江大学材料化工学院的许多专家在全书的结构、体系及内容选定上提出了许多宝贵的意见和建议,本书还得到浙江大学21世纪初教学改革基金的部分支持,编者在此一并表示衷心的感谢。

鉴于编者水平所限,书中错误和不当之处在所难免,望广大读者批评指正。

编 者

2001年12月于浙江大学

目 录

第一章 晶体结构	(1)
第一节 晶体学基础	(1)
一、空间点阵	(1)
(一)空间点阵的概念	(2)
(二)晶胞	(2)
(三)晶系	(3)
(四)布拉菲点阵	(3)
(五)晶体结构与空间点阵	(4)
二、晶向指数和晶面指数	(6)
(一)晶向指数	(6)
(二)晶面指数	(8)
(三)六方晶系指数	(9)
(四)晶带	(10)
(五)晶面间距与晶面夹角	(11)
三、晶体的对称性	(13)
(一)对称要素	(13)
(二)点群、单形及空间群	(16)
第二节 晶体化学基本原理	(23)
一、电负性	(23)
二、晶体中的键型	(24)
(一)金属结合(金属键)	(24)
(二)离子结合(离子键)	(25)
(三)共价结合(共价键)	(26)
(四)范德瓦耳斯结合(分子间键)	(26)
(五)氢键	(26)
三、结合能和结合力	(27)
四、原子半径	(29)
第三节 典型晶体结构	(31)
一、金属晶体	(31)

(一)晶体中的原子排列及典型金属晶体结构	(31)
(二)晶体中原子间的间隙	(34)
二、共价晶体	(37)
三、离子晶体	(41)
(一)离子堆积与泡林规则	(41)
(二)典型离子晶体结构分析	(42)
四、硅酸盐晶体	(46)
(一)硅酸盐的分类	(46)
(二)硅酸盐矿物结构	(48)
五、高分子晶体	(56)
(一)高分子晶体的形成	(56)
(二)高分子晶体的形态	(57)
习题与解答	(59)
第二章 晶体的不完整性	(63)
第一节 点缺陷	(64)
一、点缺陷的类型	(64)
(一)热缺陷	(64)
(二)组成缺陷	(65)
(三)电荷缺陷	(65)
(四)非化学计量结构缺陷	(65)
二、点缺陷的反应与浓度平衡	(66)
(一)热缺陷	(66)
(二)组成缺陷和电子缺陷	(69)
(三)非化学计量缺陷与色心	(71)
第二节 位错	(75)
一、位错的结构类型	(75)
(一)刃型位错	(75)
(二)螺型位错	(76)
(三)混合型位错	(78)
(四)柏格斯(Burgers)回路与位错的结构特征	(78)
(五)位错密度	(81)
二、位错的应力场	(81)
(一)位错的应力场	(81)
(二)位错的应变能与线张力	(84)
(三)位错核心	(86)

三、位错的运动·····	(87)
(一)位错的滑移·····	(87)
(二)位错攀移·····	(92)
四、位错与缺陷的相互作用·····	(94)
(一)位错之间的相互作用·····	(94)
(二)位错与点缺陷的相互作用·····	(98)
五、位错源与位错增殖·····	(100)
(一)位错的来源·····	(101)
(二)位错的增殖·····	(102)
第三节 表面、界面结构及不完整性·····	(105)
一、晶体的表面·····	(105)
(一)表面力场·····	(105)
(二)晶体表面状态·····	(106)
(三)晶体表面的不均匀性·····	(108)
二、晶界·····	(109)
(一)晶界几何·····	(109)
(二)小角度晶界·····	(111)
(三)大角度晶界·····	(113)
(四)晶界能·····	(115)
(五)孪晶界·····	(116)
(六)晶界的特性·····	(117)
习题与解答·····	(118)
第三章 固溶体·····	(121)
第一节 影响固溶度的因素·····	(122)
一、休姆-罗瑟里(Hume-Rothery)规律·····	(122)
二、尺寸因素·····	(123)
三、电价因素·····	(126)
四、电负性因素·····	(129)
第二节 固溶体各论·····	(132)
一、置换固溶体·····	(132)
二、间隙固溶体·····	(135)
三、有序固溶体·····	(136)
(一)短程有序-微观不均匀性·····	(136)
(二)长程有序·····	(138)
四、固溶体的理论分析与计算·····	(139)

五、中间相	(141)
(一)电子化合物	(142)
(二)间隙相	(142)
(三)间隙化合物	(144)
(四)拓扑密堆相	(144)
习题与解答	(146)
第四章 非晶态固体	(148)
第一节 非晶态固体的特征与表述	(148)
一、非晶态固体的结构特征	(148)
二、非晶态固体的结构表征函数	(150)
(一)径向分布函数(RDF)	(150)
(二)结构描述参数	(151)
三、非晶态固体的短程序	(152)
(一)化学短程序(CSRO)	(152)
(二)几何短程序(GSRO)与局域结构参数	(153)
第二节 非晶态半导体	(154)
一、非晶半导体的结构模型	(154)
二、非晶半导体的微结构	(158)
第三节 非晶态金属	(160)
一、非晶态金属和合金的结构模型	(160)
二、非晶态金属的微结构	(163)
(一)几何微结构	(164)
(二)化学微结构	(165)
(三)磁各向异性与微结构	(166)
第四节 玻璃	(167)
一、玻璃结构理论	(167)
(一)玻璃结构的无规网络学说	(167)
(二)玻璃结构的微晶子学说	(169)
(三)常见玻璃的微观结构	(170)
二、玻璃的转变	(176)
三、玻璃化的条件	(177)
(一)热力学与动力学条件	(177)
(二)结晶化学条件	(180)
第五节 非晶态高分子	(182)
一、非晶态高分子的结构模型	(182)

(一)无规线团模型·····	(183)
(二)局部有序模型·····	(183)
二、玻璃化转变·····	(184)
习题与解答·····	(186)
第五章 固体材料中的质点运动与迁移·····	(187)
第一节 晶格中原子的运动与扩散·····	(187)
一、热缺陷的运动、产生与复合·····	(187)
二、基本扩散定律——菲克定律·····	(190)
(一)稳态扩散——菲克第一定律·····	(190)
(二)非稳态扩散——菲克第二定律·····	(192)
三、扩散系数·····	(198)
(一)自扩散系数·····	(198)
(二)偏扩散系数·····	(200)
(三)交互扩散系数——达肯方程·····	(202)
第二节 扩散机制及影响扩散的因素·····	(208)
一、扩散机制·····	(208)
(一)空位扩散·····	(208)
(二)间隙扩散·····	(208)
(三)氧化物中的空位扩散·····	(209)
二、影响扩散的因素·····	(211)
(一)温度的影响·····	(211)
(二)扩散介质结构的影响·····	(212)
(三)扩散物质的影响·····	(213)
(四)第三组元的影响·····	(214)
(五)位错、晶界和表面的影响·····	(214)
(六)外场作用的影响及离子电导·····	(217)
习题与解答·····	(221)
第六章 固体材料的晶格振动与电子运动·····	(223)
第一节 晶格振动与热性质·····	(223)
一、晶格的振动·····	(223)
(一)一维原子链的振动·····	(223)
(二)三维晶格的振动·····	(228)
(三)晶格振动的长波分析·····	(229)
二、晶格振动与热过程·····	(231)
(一)爱因斯坦和德拜比热理论·····	(231)

(二)晶格的热膨胀.....	(235)
(三)晶格的热传导.....	(237)
第二节 晶体中的电子运动与能带理论.....	(239)
一、一维周期场中的电子运动与能带	(239)
二、三维周期场中的电子运动与能带	(242)
三、电子运动的速度与加速度	(246)
四、电子导电与能带模型	(248)
习题与解答.....	(250)
参考文献.....	(253)

第一章 晶体结构

第一节 晶体学基础

为了更有效地使用材料以及开发设计新材料，必需了解影响材料性能的各种因素，掌握提高其性能的途径。材料的性能受到许多方面因素的影响，是一个十分复杂的问题，但长期的实践和探索研究表明，决定材料性能的基本因素是它们内部的微观构造，即其内部结构和组织状态。这就促使人们致力于材料内部构造的研究，以能从其内部的矛盾性来找出改善和发展材料的途径。

固态物质按其原子（或分子）的聚集状态可分为两大类：晶体与非晶体。我们经常看到自然界的许多晶体具有规则的外形（例如：天然金刚石、结晶盐、水晶等等），但是，晶体的外形不一定是规则的，这与晶体的形成条件有关，如果条件不具备，其外形也会变得不规则。固态的非晶体实际上是一种过冷状态的液体，只是其物理性质不同于通常的液体而已。玻璃就是一个典型的例子，故往往将非晶态的固体称为玻璃体。在晶体中，原子（或分子）在三维空间作有规则的周期性重复排列；而非晶体就不具有这一特点，原子虽亦处于紧密聚集的状态，但不存在长程的周期性排列。从液态到非晶态固体的转变是逐渐过渡的，没有明显的凝固点（反之亦然，无明显的熔点）；而液体转变为晶体则是突变的，有一定的凝固点和熔点。非晶体的另一特点是沿任何方向测定其性能所得结果都是一致的，不因方向而异，称为各向同性或等向性。晶体就不是这样，沿着一个晶体的不同方向所测得的性能并不相同（如导电性、导热性、热膨胀性、弹性、强度、光学数据以及外表面的化学性质等等），晶体的异向性是其原子的规则排列而造成的。非晶体在一定条件下可转化为晶体。例如，玻璃经高温长时间加热后能形成晶态玻璃；而通常呈晶体的物质如果将它从液态快速冷却或采用一些特殊的制备方法可能得到非晶体。从上述对物态的分析可知，要了解和掌握材料的性能，不能根据它们的外观，而应从其内部的原子排列情况来确定。分析研究材料晶体的内部结构已成为研究材料的一个重要方面，许多问题的认识 and 解决都与之密切相关。

晶体可以有单晶体和多晶体之分，由一个核心（称为晶核）生长而成的晶体称为单晶体。一些天然晶体如金刚石、水晶等都是单晶体；现在人工制备的有半导体工业用的单晶硅和锗，激光技术中用的红宝石和钇铝石榴石，以及金属或合金单晶等一大批单晶体。在单晶体中，原子都是按同一取向排列的。金属及陶瓷等很大一部分材料，在固态时通常都是晶体，但是这些材料通常是由许多不同位相的小晶体所组成，称为多晶体。这些小晶体往往呈颗粒状，不具有规则的外形，故称为晶粒。由于材料的许多特性都与其结晶状态有关，因

此，要更深入地了解材料，必须首先掌握其晶体基本构造情况，包括晶体中原子的相互作用和结合力，原子的聚集状态和分布规律，各种晶体的特点和彼此之间的差异等等。

一、空间点阵

(一) 空间点阵的概念

为了便于分析研究晶体中原子或分子的排列情况，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，但各个点子的周围环境都必须相同。这种点子的空间排列称为空间点阵，简称点阵；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，可作许多平行的直线把阵点连接起来，构成三维的几何格架，如图 1-1 所示。显然，在某一空间点阵中，各阵点在空间的位置是一定的，而通过阵点所作的空间格架则因直线的取向不同可有多种形式，因此必须强调指出，阵点是构成空间点阵的基本要素。

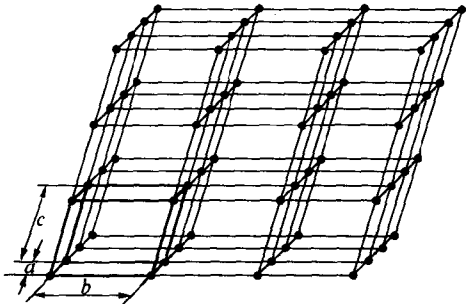


图 1-1 空间点阵的一部分

(二) 晶胞

从图 1-1 可以看出，位于同一直线上的阵点，每隔一个相等的距离就重复出现；同样，位于同一平面上的阵点构成了二维的点阵平面，将点阵平面沿一定方向平移一定距离，其阵点亦具有重复性。总之，由于各阵点的周围环境相同，空间点阵具有周期重复性。因此，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。在图 1-1 的左下方以粗黑线标出的平行六面体就是这个点阵的晶胞。可见，将晶胞作三维的重复堆砌就构成了空间点阵。同一空间点阵可因选取方式不同而得到不相同的晶胞，图 1-2 表示出在一个二维点阵中取出的不同晶胞。为此，要求在选取晶胞时应尽量反映出该点阵的对称性，一般是选取只在每个角上有一阵点的最小平行六面体作为晶胞，称为初级晶胞或简单晶胞；有时为了更好地表现出点阵的对称性，亦可不取简单晶胞而使晶胞中心或面的中心也存在有阵点，如体心（在六面体的中心有一阵点）、面心（在六面体的每个面中心有一阵点）或底心（在上、下底面中心各有一阵点）的晶胞。

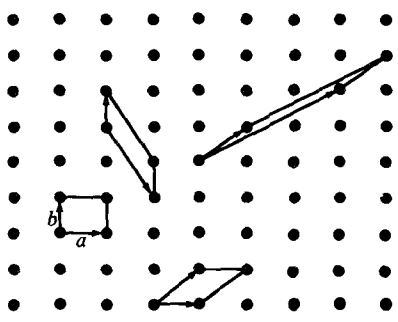


图 1-2 在点阵中选取晶胞

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），

则此晶胞就可由其三个棱边的边长 a 、 b 、 c （称为点阵常数）及晶轴之间的夹角 α 、 β 、 γ 这六个参数所完全表达出来（图 1-3）。事实上，采用三个点阵矢量 a 、 b 、 c 来描述晶胞将更为方便。这三个矢量不仅确定了晶胞的形状和大小，并且完全确定了此空间点阵。只要任选一个阵点为原点，以这三个矢量作平移（即平移的方向和单位距离由点阵矢量所规定），就可以确定空间点阵中任何一个阵点的位置

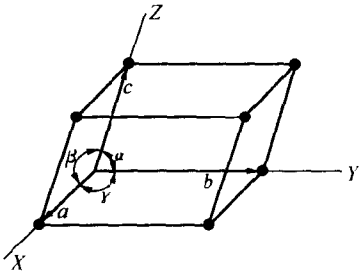


图 1-3 晶胞、晶轴和点矢量

$$\mathbf{r}_{uvw} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c} \tag{1-1}$$

式中， $\mathbf{r}_{uvw}$ 为从原点到某一阵点的矢量； u 、 v 、 w 分别表示沿三个点阵矢量的平移量，亦即该阵点的坐标。

（三）晶系

在晶体学中，常按“晶系”对晶体进行分类，这是根据其晶胞外形即棱边长度之间的关系和晶轴夹角情况而加以归类的，故只考虑 a 、 b 、 c 是否相等， α 、 β 、 γ 是否相等和它们是否呈直角等因素，而不涉及晶胞中原子的具体排列情况。在这种情况下，晶系只有 7 种类型，如表 1-1 所示，所有的晶体均可归纳在这 7 个晶系中。

表 1-1 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	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\text{Fe}, \text{Cd}, \text{Cu}, \text{Ag}, \text{Au}$

（四）布拉菲点阵

空间点阵可有多少种排列形式？按照“每个阵点的周围环境相同”的要求，布拉菲（A. Bravais）首先用数学方法确定，只能有 14 种空间点阵。这 14 种空间点阵以后就被称为布拉菲点阵，它们的晶胞如图 1-4 所示，表 1-2 则把它们归属于 7 个晶系。

前已指出，同一空间点阵可因不同的选取晶胞方式而得出不相同的晶胞。故 14 种布拉菲点阵是根据阵点在空间的排列状况来确定的，其晶胞的选取主要是考虑到更好地反映出晶体的对称性等因素。当然也可以有其他的取法，例如六方点阵的晶胞可取成平行六面体（图 1-5），但这样显示不出此点阵的对称特点，故不及取六方棱柱形晶胞为好。同样，体心

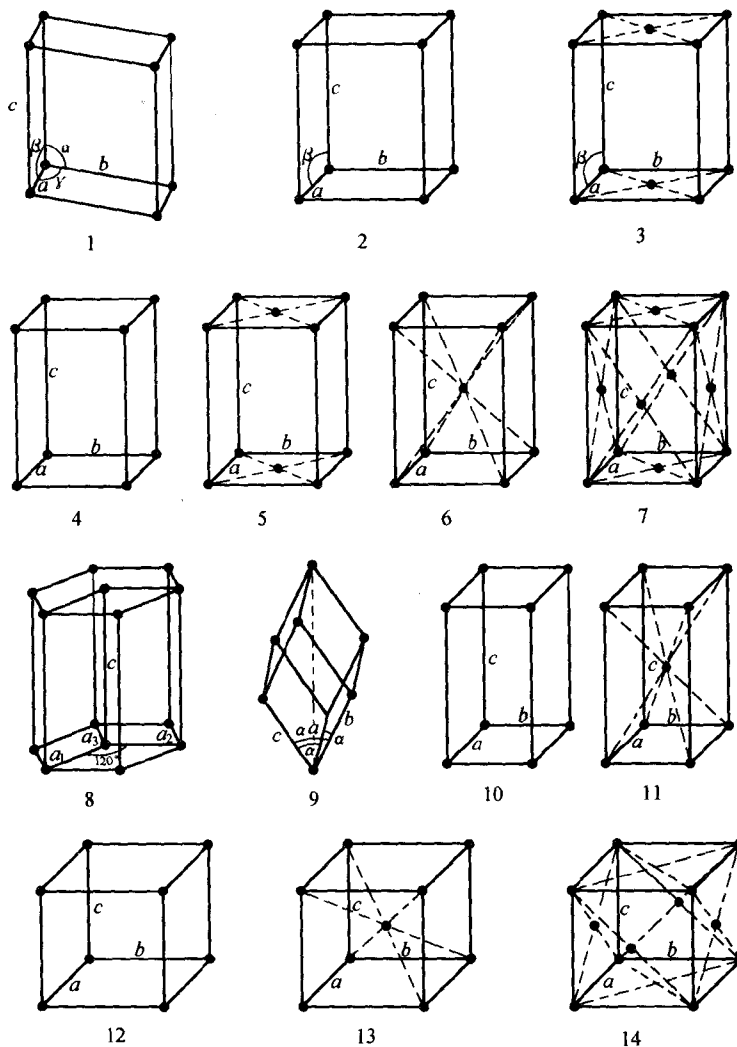


图 1-4 14 种布拉菲点阵的晶胞

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—菱形（三角）；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

立方晶胞可用初级晶胞（三斜）来表示，面心立方晶胞也可用菱形来表示（图 1-6），其缺点是它们的高度对称性得不到反映，故一般不采用这样的表示方法。

（五）晶体结构与空间点阵

晶体结构与空间点阵是有区别的。空间点阵是晶体中质点排列的几何学抽象，用以描述

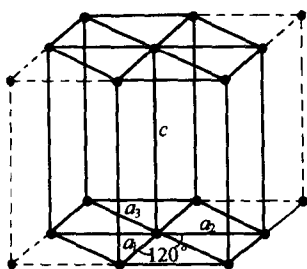
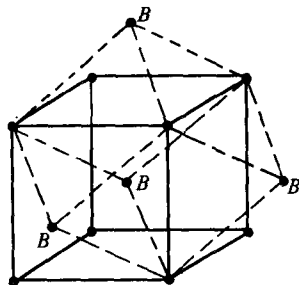
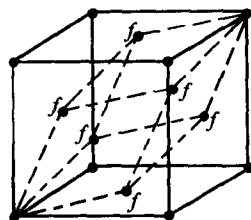


图 1-5 六方系晶胞可取平行六面体或六方棱柱形



(a)



(b)

图 1-6 体心立方和面心立方点阵还原为三斜和菱形初级晶胞

(a) 体心立方到三斜; (b) 面心立方到菱形;

B—体心原子; f—面心原子

和分析晶体结构的周期性和对称性, 由于各阵点的周围环境相同, 它只可能有 14 种类型。晶体结构则是指晶体中原子(包括同类的或异类的原子)或分子的具体排列情况, 它们能组成各种类型的排列, 因此可能存在的晶体结构是无限的。但是各种晶体结构总能够按其原子或分子(也可以是彼此等同的原子群或分子群)排列的周期性和对称性归属于 14 种空间点阵中的一种。这 14 种空间点阵可用相应的空间格子符号表示, 如表 1-2 所示, 最简单空间格子, 有时称为原始格子, 以符号 P 表示。

表 1-2 空间点阵、晶系与晶族

序号	点阵类型	符号	晶 系	晶 族	序号	点阵类型	符号	晶 系	晶 族
1	简单三斜	P	三斜	低级晶族	8	简单六方	P	六方	中级晶族
2	简单单斜	P	单斜		9	菱形（三角）	R	菱方	
3	底心单斜	C			10	简单四方	P	四方 （正方）	
4	简单正交	P	正交		11	体心四方	I		
5	底心正交	C			12	简单立方	P	立方	
6	体心正交	I			13	体心立方	I		
7	面心正交	F			14	面心立方	F		

有些密排六方晶体结构(其晶胞如图 1-7 所示, 例如金属中常见的镁、锌、铍、镉等的结构)不能列为一种空间点阵。这是因为, 位于晶胞之内的原子与晶胞角上的原子具有不同的周围环境。在分析这种晶体结构时, 可将每个阵点看作由一对原子所组成, 即由晶胞角上的一个原子与相应的晶胞之内的一个原子共同组成一个阵点, 例如 0, 0, 0 阵点可看作是

由 $0, 0, 0$ 和 $2/3, 1/3, 1/2$ 这一对原子所组成, 这样就得出密排六方结构应属简单六方点阵。不同的晶体结构可属同一点阵, 而相似的晶体结构又可能属于不同的点阵。图 1-8 表示出铜、氯化钠及氟化钙三种晶体结构, 显然这三种结构有着很大的差异, 属于不同的结构类型, 然而它们的空间点阵都是一样的, 都属面心立方点阵。图 1-9 是铬及氯化铯的晶体结构, 它们都是体心立方结构, 但空间点阵却不相同, 铬为体心立方点阵, 而氯化铯则属简单立方点阵。

以上几例的分析, 说明了晶体结构与空间点阵既有区别又有联系。

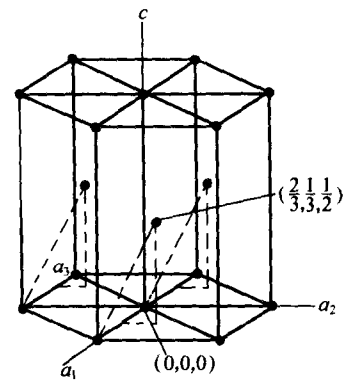


图 1-7 密排六方晶体结构

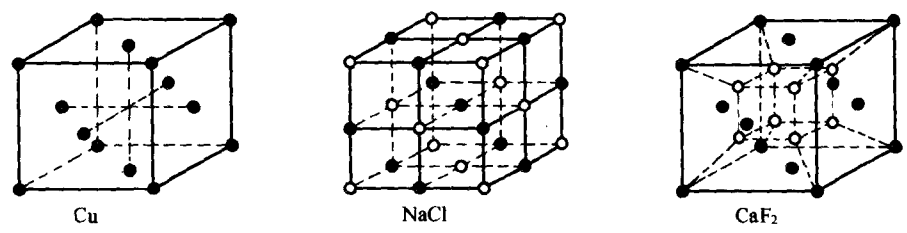


图 1-8 具有相同点阵的晶体结构



图 1-9 晶体结构相似而点阵不同

二、晶向指数和晶面指数

在分析研究有关晶体的生长、变形、相变以及性能等各方面的问题时, 常需涉及晶体中某些方向 (称为晶向) 和原子所构成的平面 (称为晶面)。为了便于表示各种晶向和晶面, 需要确定一种统一的标号, 称为晶向指数和晶面指数。国际上通用的是密勒 (Miller) 指数, 其标号方法如下:

(一) 晶向指数

前已指出, 任何阵点的位置可由矢量 r_{uvw} 或该阵点的坐标 u, v, w 来确定。同样, 晶向 $\overrightarrow{OP}$ 亦可沿 a, b, c 分解成三个分矢量 (图 1-10), 即

$$\overrightarrow{OP} = ua + vb + wc \quad (1-2)$$

不同的晶向只是 u 、 v 、 w 的数值不同而已，故可用 $[uvw]$ 来表示晶向指数。确定晶向指数的步骤如下：

(1) 以晶胞的晶轴为坐标轴 X 、 Y 、 Z ，以点阵矢量的长度（即晶胞边长）作为坐标轴的长度单位。

(2) 从晶轴系的原点 O 沿所指方向的直线取最近一个阵点的坐标 u 、 v 、 w （亦即 $\overrightarrow{OP}$ 三个分矢量对于点阵矢量 a 、 b 、 c 的倍数）。例如 100 ， 110 ， 111 等。

(3) 将此数化为最小整数并加上方括号，即为晶向指数 $[uvw]$ ，例如 $[100]$ ， $[110]$ ， $[111]$ 等。如果 u 、 v 、 w 为负值，则将负号记于其上方，如 $[\bar{1}00]$ ， $[\bar{1}\bar{1}0]$ ， $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 等。

显然，晶向指数表示着所有相互平行、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。

现在以立方晶系为例来具体地加以运用。图 1-11 中标出了立方晶系一些重要晶向的晶向指数。如 X 轴方向，其晶向指数由 A 点的坐标来确定， A 点坐标为 $1, 0, 0$ ，所以 X 轴的晶向指数为 $[100]$ 。同理， Y 轴和 Z 轴的晶向指数分别为 $[010]$ 和 $[001]$ 。 D 点的坐标为 $1, 1, 0$ ，故 $\overrightarrow{OD}$ 方向的晶向指数为 $[110]$ 。 G 点的坐标为 $1, 1, 1$ ，故对角线 $\overrightarrow{OG}$ 方向的晶向指数为 $[111]$ 。 $\overrightarrow{OH}$ 方向的晶向指数可根据 H' 点的坐标来求得，为 $[210]$ 。若要求 $\overrightarrow{EF}$ 方向的晶向指数，应将 $\overrightarrow{EF}$ 平移使 E 点同原点 O 重合，这时 F 点移至 F' ， F' 点的坐标为 $\bar{1}, 1, 0$ ，故 $\overrightarrow{OF'}$ 的晶向指数为 $[\bar{1}10]$ 。既然 $\overrightarrow{EF}$ 与 $\overrightarrow{OF'}$ 相平行，所以其晶向指数亦为 $[\bar{1}10]$ 。

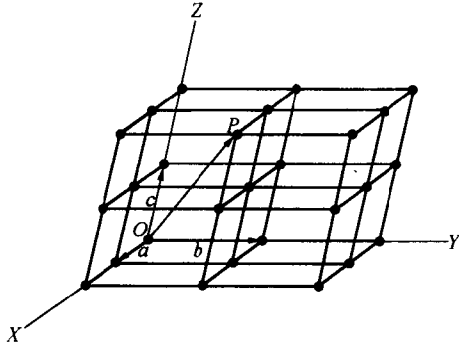


图 1-10 点阵矢量

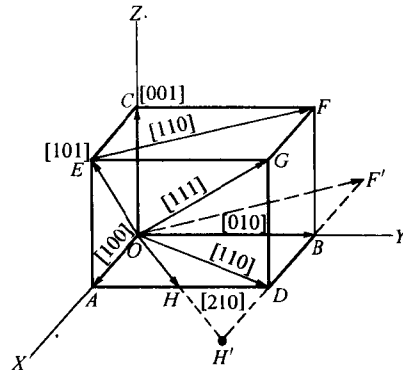


图 1-11 立方晶系一些重要晶向的晶向指数

晶体中因对称关系而等价的各组晶向可归并为一个晶向族，用 $\langle uvw \rangle$ 表示。例如，对立方晶系来说， $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 和 $[\bar{1}00]$ 、 $[0\bar{1}0]$ 、 $[00\bar{1}]$ 等六个晶向，它们的性质是完全相同的，用符号 $\langle 100 \rangle$ 表示。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是等价的。例如，对于正交晶系 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 这三个晶向并不是等价晶向，因为以上三个方向上的原子间距分别为 a 、 b 、 c ，沿着这三个方向，晶体的性质并不相同。