

材料科学及测试技术

# 材料结构科学

上册

温树林 编著

科学出版社

## 内 容 简 介

本书较为全面、系统地论述了材料结构科学的基本原理、研究方法及其应用,分上、下两册出版。上册主要介绍材料结构科学的基本原理,材料的单晶、多晶、非晶、准晶态及其研究方法等;下册则介绍材料的结构缺陷,结构与性能之间的关系,以及新型材料的各种用途等。书中还阐述了作者近几年在材料结构方面所取得的研究成果。

本书可供从事材料科学、冶金、化工、机械、电子、航空、航天等方面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

## 材 料 结 构 科 学

上 册

温树林 编著

责任编辑 童安齐

科 学 出 版 社 出 版

北京朝阳门内大街 137 号

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

\*

1988 年 5 月第 一 版 开本:787×1092 1/32

1988 年 5 月第一次印刷 印张:9 5/8

印数:0001—2,900 字数:213,000

ISBN 7-03-000307-1/TB·11

定价: 3.70 元

第 一 次 印 刷

TB303

10

:2

材料科学及测试技术丛书

# 材料结构科学

下 册

温树林 编著

科学出版社  
样书

科学出版社

1989

館圖  
藏書  
京

B 591574

## 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工作经验与成就,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

• • iii •

# 科学出版社

## 材料科学及测试技术丛书

|                   |        |        |
|-------------------|--------|--------|
| 金属材料热力学           | 徐祖耀著   | 1.80 元 |
| 电子衍射图在晶体学中的应用     | 郭可信等编著 | 2.55 元 |
| 马氏体相变与马氏体         | 徐祖耀著   | 2.30 元 |
| 现代功能材料导论          | 温树林编著  | 2.00 元 |
| 钢中的非金属夹杂物         | 李代钟编著  | 1.95 元 |
| 高分辨电子显微学在固体科学中的应用 | 郭可信等主编 | 3.60 元 |
| X 射线衍射学进展         | 许顺生主编  | 2.70 元 |
| 金属的超塑性            | 何景素等编著 | 2.45 元 |
| 高空间分辨分析电子显微学      | 朱静等编著  | 3.10 元 |
| 陶瓷材料的力学性能         | 张清纯编著  | 3.00 元 |
| 金属高温疲劳            | 何晋瑞主编  | 2.80 元 |

## 序

材料的性能取决于结构,这是材料科学工作者考虑问题的基础。因此,研究材料的结构(包括理想结构和真实结构)与性能之间的关系,始终是材料科学工作者十分关注的一个重要研究课题。材料科学由以传统的经验方法生产具有基本性能材料的时代,发展到今天以现代测试技术及现代工艺生产具有多功能新材料的阶段,是与人们对物质结构认识的深化,以及物质结构理论与测试方法的迅速发展分不开的。

自从二十世纪初人们发现X射线在晶体中的衍射现象以来,物质结构科学发生了根本性的变化。X射线衍射方法首先广泛应用于许多学科与技术领域中,如材料学、固体物理、冶金、地质、生物等学科因X射线衍射方法为其提供了许多有价值的结构信息而得以发展。随后,电子衍射及中子衍射亦成为重要的结构研究方法,不仅充实着X射线结构分析数据,而且提供了一系列有关物质的原子及真实结构的新信息。这些方法不是相互取代,而是相互补充,独立发展。今天,采用不同辐射源的衍射及共振能谱等现代化手段、电子显微镜设备以及其他光学方法研究物质结构,正在取得许多新的重要成果,并为材料的制备工艺、元器件的设计制造及新材料的应用提供了理论依据。

温树林同志编著的《材料结构科学》(上、下册)一书,不仅全面、系统地介绍了研究现代物质结构的各种方法以及材料的结构与宏观性能的关系,而且论述了近几年来这一领域内的最新进展。更为可贵的是,本书亦包括了作者近年来用高

分辨电子显微镜对各种无机材料的缺陷结构、相变、晶格象等  
进行研究所取得的成果。因此我深信，本书不仅对材料科学  
工作者认识物质结构有所帮助，而且对他们如何运用现代测  
试技术选择无机材料学科的新课题也有所裨益。

李德宇

1986 年 12 月

## 前 言

现代材料科学是近一二十年发展起来的。它是涉及现代物理学、化学、冶金学、制备工艺学等诸多学科的一门综合性交叉学科。

材料结构学是材料科学的重要组成部分。众所周知，材料的结构与其性能之间的关系十分密切，因此只有对材料结构了解透彻，才能研制出具有优异性能的新型材料，以造福于人类。当今世界上许多优秀的材料科学家在材料结构方面都有很深的造诣，其中有些人就一直从事结构方面的研究。

前几年，我编著了《现代功能材料导论》（科学出版社，1983年）一书，该书主要从物理学的观点介绍各种功能材料的性能及应用。近几年，在我的科研工作中，结构研究也占了很大的比例。现将这方面的工作加以总结，编写成《材料结构科学》，供广大读者参考。

本书旨在全面、系统地论述材料结构科学的基本概念和原理、研究方法及其应用。全书共二十五章，分上、下两册出版。前十二章为上册，主要介绍材料结构科学的基本原理，材料的结构形态及其研究方法等；后十三章为下册，主要介绍材料结构缺陷，结构与性能之间的关系等。本书包括作者近几年在材料结构方面所取得的研究成果。

在编著本书过程中，中国科学院上海硅酸盐研究所研究员李德宇审阅了全书，并提出许多宝贵意见，特在此表示衷心的感谢。

作者

1986.12

• vii •

## 序

材料科学的主要任务是研究材料的组分、结构与性能之间的相互关系和变化规律。

经典的结构分析的主要目标是确定单胞中各种原子的坐标,定出理想晶体的结构。事实上,实际晶体中都存在偏离理想结构的特定晶体缺陷,即每一种结构类型的晶体都有特定的缺陷结构和组态,其不仅表现在原子的排列上,还表现在更大尺度的晶体的内部以及表面显微组织(结构)和宏观形貌上。因此,和理想的晶体结构相对照,实际晶体的结构具有更加丰富的内容。

固体材料的性能大致可分为两大类:一类是非结构敏感的,如密度、比热、弹性模量等,其值和将材料结构视为理想的完整晶体的计算结果基本相符;另一类是结构敏感的,如屈服强度和断裂强度,其值和根据理想完整晶体计算的理论计算结果有显著差异,材料的实际结构、热加工工艺等的改变都可能对这些结构敏感性能产生重大影响。越来越令人注目的是,这类材料不仅在范性和强度方面,而且在许多物理性能,如电磁性能、光学性能及超导性能等方面,都是结构敏感的。传统的固体物理,往往只考虑完整晶体,因而无法解释有关结构敏感性问题。人们只有掌握了晶体中缺陷的正确表征,以及晶体结构、分布组态与运动规律,才能正确理解各种结构敏感性能与结构的关系及规律。

近年来,用电子计算机对晶体结构、性能和相变等物理过程进行模拟计算的计算技术,为实际晶体的结构理论的发展

• ▼ •

提供了有力的手段;随着实验技术,如透射、高分辨和分析电子显微术, X 射线、中子和电子衍射技术, EXAFS、扫描俄歇和 X 射线光电谱技术,离子、正电子和核技术等等的发展,人们对材料中晶体缺陷结构和化学表征有了更深入的了解,从而为研究材料实际结构和性能的关系提供了更加坚实的基础。

《材料结构科学》(上、下册)一书,总结了材料结构学方面的新近研究成果,比较全面、系统地阐述了材料结构学的基本原理、研究方法及其应用。在上册介绍材料结构学的基本原理,材料的单晶、多晶、非晶、准晶态结构及其研究方法的基础上,下册主要介绍材料结构缺陷,结构与性能关系及各种新型材料的新近发展。我相信,本书的出版必将为材料科学的发展起一定的积极作用。

林栋樑

1988.8

• • •

## 前 言

现代材料科学是近一二十年发展起来的。它是涉及现代物理学、化学、冶金学、制备工艺学等诸多学科的一门综合性交叉学科。

材料结构学是材料科学的重要组成部分。众所周知，材料的结构与其性能之间的关系十分密切，只有对材料结构了解透彻，才能研制出具有优异性能的新型材料。因此，当今世界上许多优秀的材料科学家都在从事结构方面的研究。

前几年，我编著了《现代功能材料导论》（科学出版社，1983年）一书，该书主要从物理学的观点介绍各种功能材料的性能及应用。近几年，在我的科研工作中，结构研究占了很大的比例。现将这方面的工作加以总结，编写成本书，供广大读者参考。

本书旨在全面、系统地论述材料结构的基本概念和原理、研究方法及其应用。全书共二十五章，分上、下两册出版。前十二章为上册，主要介绍材料结构的基本原理，材料的结构形态及其研究方法等；后十三章为下册，主要介绍材料结构缺陷，结构与性能之间的关系等。本书包括作者近几年在材料结构方面所取得的研究成果。

在编著本书过程中，中国科学院上海硅酸盐研究所研究员李德宇审阅了上册，上海交通大学林栋樑教授审阅了下册，他们提出许多宝贵意见，特在此表示谢意。此外，参加本书编写工作的还有温树棠（第二十一章）、宋祥云（第二十二章）和

袁宁儿(第二十三章)。

作者

1988.8

# 目 录

|                                 |    |
|---------------------------------|----|
| 第一章 材料结构的基本概念.....              | 1  |
| 1.1 空间点阵、晶格和晶胞.....             | 1  |
| 1.2 点群、结构对称性和物理性能.....          | 2  |
| 1.3 空间群 .....                   | 5  |
| 1.4 倒格子和倒空间 .....               | 7  |
| 1.5 结构因子和电子密度 .....             | 9  |
| 1.6 结构象、晶格象和原子象.....            | 14 |
| 1.7 对偶分布函数和配位数 .....            | 15 |
| 1.8 分布函数与衍射实验的关系——结构因子表达式 ..... | 19 |
| 1.9 各类材料的对偶分布函数和结构因子 .....      | 23 |
| 参考文献.....                       | 24 |
| 第二章 晶体结构的几何学基础.....             | 26 |
| 2.1 导言 .....                    | 26 |
| 2.2 多面体 .....                   | 26 |
| 2.3 周期性点阵网络 .....               | 29 |
| 2.4 多面体空间填充结构 .....             | 32 |
| 2.5 等球密堆积 .....                 | 36 |
| 2.6 基于三向和四向点阵网络的结构 .....        | 41 |
| 2.7 基于六向和八向点阵网络的结构 .....        | 43 |
| 2.8 晶体的结构类型 .....               | 46 |
| 参考文献.....                       | 48 |
| 第三章 正空间结晶学 .....                | 49 |
| 3.1 导言 .....                    | 49 |
| 3.2 基本概念和术语 .....               | 50 |
| 3.3 正空间结构象 .....                | 55 |

|      |                      |     |
|------|----------------------|-----|
| 3.4  | 氮化硅结构象 .....         | 65  |
| 3.5  | 铀的原子象 .....          | 68  |
| 3.6  | 金原子精细结构象 .....       | 70  |
|      | 参考文献 .....           | 73  |
| 第四章  | 晶体和缺陷 .....          | 74  |
| 4.1  | 导言 .....             | 74  |
| 4.2  | 晶体宏观对称性 .....        | 74  |
| 4.3  | 理想晶体和实际晶体 .....      | 75  |
| 4.4  | 晶体中的点缺陷 .....        | 76  |
| 4.5  | 晶体中的线缺陷 .....        | 78  |
| 4.6  | 晶体中的面缺陷 .....        | 83  |
| 4.7  | 晶体中的体缺陷 .....        | 85  |
| 4.8  | 符合化学计量比的不完美晶体 .....  | 87  |
| 4.9  | 非化学计量比化合物 .....      | 90  |
| 4.10 | 固溶体 .....            | 91  |
| 4.11 | 晶体中的微畴和畴界 .....      | 93  |
|      | 参考文献 .....           | 95  |
| 第五章  | 晶界结构 .....           | 96  |
| 5.1  | 晶界的位错理论 .....        | 96  |
| 5.2  | 晶界结构的共格模型 .....      | 100 |
| 5.3  | 晶界的结构单位模型 .....      | 102 |
| 5.4  | O 点阵模型 .....         | 108 |
| 5.5  | 氮化硅的共格晶界和小角晶界 .....  | 109 |
| 5.6  | 氮化硅陶瓷的晶界相和有关缺陷 ..... | 111 |
|      | 参考文献 .....           | 118 |
| 第六章  | 无序结构和相关势近似 .....     | 120 |
| 6.1  | 周期性与非周期性体系 .....     | 120 |
| 6.2  | 无序结构 .....           | 121 |
| 6.3  | 哈密顿模型 .....          | 123 |
| 6.4  | 格林函数 .....           | 125 |

|                       |                             |     |
|-----------------------|-----------------------------|-----|
| 6.5                   | 相关势近似的导出和特征 .....           | 129 |
| 6.6                   | 相关势近似计算状态密度 .....           | 131 |
| 6.7                   | 相关势近似发展和应用 .....            | 133 |
| 6.8                   | 有序与无序结构间相变 .....            | 134 |
| 6.9                   | 非晶态固体 .....                 | 137 |
|                       | 参考文献 .....                  | 141 |
| 第七章 非晶材料的结构和准晶态 ..... |                             | 142 |
| 7.1                   | 金属玻璃 .....                  | 142 |
| 7.2                   | 金属玻璃的结构特征 .....             | 143 |
| 7.3                   | 结构模型 .....                  | 145 |
| 7.4                   | 结构无序参数 .....                | 149 |
| 7.5                   | 非晶半导体和液态半导体结构 .....         | 150 |
| 7.6                   | 液态半导体 .....                 | 154 |
| 7.7                   | 非晶硅的结构 .....                | 156 |
| 7.8                   | 熔盐的结构 .....                 | 158 |
| 7.9                   | 非晶 $\text{SiO}_2$ 结构 .....  | 160 |
| 7.10                  | 物质的准晶态 .....                | 162 |
|                       | 参考文献 .....                  | 164 |
| 第八章 材料结构的研究方法 .....   |                             | 166 |
| 8.1                   | 研究晶体结构的单晶衍射法 .....          | 166 |
| 8.2                   | X 射线结构分析的多晶衍射法 .....        | 168 |
| 8.3                   | 扩展 X 射线吸收精细结构 (EXAFS) ..... | 170 |
| 8.4                   | 中子衍射用于结构分析 .....            | 173 |
| 8.5                   | 电子衍射用于研究材料结构 .....          | 177 |
| 8.6                   | 电子显微镜和场离子显微镜 .....          | 180 |
| 8.7                   | 材料结构分析的光谱研究方法 .....         | 184 |
| 8.8                   | 喇曼谱、红外谱和微波谱 .....           | 185 |
| 8.9                   | 核磁共振谱 .....                 | 188 |
|                       | 参考文献 .....                  | 190 |
| 第九章 金属结构和合金结构 .....   |                             | 192 |

|      |                            |     |
|------|----------------------------|-----|
| 9.1  | 导言 .....                   | 192 |
| 9.2  | 金属晶体的结构与物理性能的关系 .....      | 195 |
| 9.3  | 合金固溶体与超结构现象 .....          | 196 |
| 9.4  | 合金的结构 .....                | 198 |
| 9.5  | AA 型合金结构 .....             | 199 |
| 9.6  | $A_2B_1$ 型合金结构 .....       | 202 |
| 9.7  | $A_1B_2$ 型合金结构 .....       | 203 |
| 9.8  | $A_2B_2$ 型合金结构 .....       | 204 |
| 9.9  | BB 型合金的结构 .....            | 205 |
| 9.10 | 具有间隙结构的合金 .....            | 206 |
|      | 参考文献 .....                 | 211 |
| 第十章  | 金属氧化物的结构 .....             | 212 |
| 10.1 | 导言 .....                   | 212 |
| 10.2 | $M_2O$ 型氧化物结构 .....        | 214 |
| 10.3 | $MO$ 型氧化物结构 .....          | 216 |
| 10.4 | $ZnO$ 结构和性能 .....          | 219 |
| 10.5 | $M_2O_3$ 型金属氧化物 .....      | 221 |
| 10.6 | $Al_2O_3$ 结构与性能的关系 .....   | 223 |
| 10.7 | $MO_2$ 型氧化物结构 .....        | 227 |
| 10.8 | $ZrO_2$ 的结构 .....          | 228 |
| 10.9 | $SiO_2$ 的结构 .....          | 233 |
|      | 参考文献 .....                 | 234 |
| 第十一章 | 复合氧化物和含氧酸盐 .....           | 236 |
| 11.1 | 固溶体和超结构 .....              | 237 |
| 11.2 | 密堆积型的含氧酸盐和复合氧化物结构 .....    | 238 |
| 11.3 | 尖晶石结构 .....                | 239 |
| 11.4 | $\beta-Al_2O_3$ 结构系列 ..... | 240 |
| 11.5 | 钙钛矿结构 .....                | 243 |
| 11.6 | 钨青铜结构 .....                | 245 |
| 11.7 | 铌酸钡钠的结构特点 .....            | 247 |