



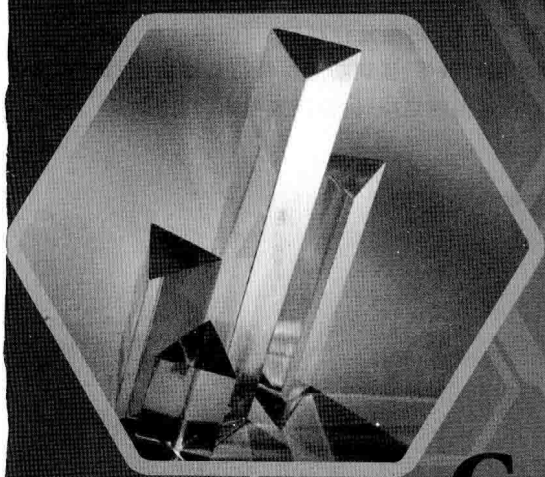
XIANDAI **G**ONGNENG CAILIAO XINGZHI
YU ZHIBEI YANJIU

现代**功能材料**性质 与制备研究

主 编 王贺权 曾 威 所艳华
副主编 焦玉凤 王红英 孙建波 周 楠 金大明



中国水利水电出版社
www.waterpub.com.cn



XIANDAI GONGNENG CAILIAO XINGZHANG
YU ZHIBEI YANJIU

现代**功能材料**性质 与制备研究

主 编 王贺权 鲁 威 所艳华
副主编 焦蓓凤 王红英 孙建波 周 楠 金大明



中国水利水电出版社
www.waterpub.com.cn

内 容 提 要

本书从功能材料体系出发,系统、扼要地讨论了各种功能材料的组成、结构、性能、制备和应用。主要内容包
括:晶体学基础、金属功能材料、无机功能材料、功能晶体材料、功能高分子材料、功能复合材料、功能膜材料、隐
身材料、形状记忆材料、智能材料、纳米功能材料、功能转换材料和新型功能材料等,强调功能材料与具体物件的
紧密结合及应用。本书选材新颖、广泛,内容丰富,前瞻性强,编排得当,论述前呼后应,讨论深入浅出,理论联系
实际,具有较强的实用性。

图书在版编目(CIP)数据

现代功能材料性质与制备研究/王贺权,曾威,所
艳华主编. —北京:中国水利水电出版社,2014.5
ISBN 978-7-5170-2080-6

I. ①现… II. ①王…②曾…③所… III. ①功能材
料—性质—研究②功能材料—制备—研究 IV. ①TB34

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 107365 号

策划编辑:杨庆川 责任编辑:杨元泓 封面设计:马静静

书 名	现代功能材料性质与制备研究
作 者	主 编 王贺权 曾 威 所艳华 副主编 焦玉凤 王红英 孙建波 周 楠 金大明
出版发行	中国水利水电出版社 (北京市海淀区玉渊潭南路1号D座100038) 网址:www.waterpub.com.cn E-mail:mchannel@263.net(万水) sales@waterpub.com.cn
经 售	电话:(010)68367658(发行部)、82562819(万水) 北京科水图书销售中心(零售) 电话:(010)88383994、63202643、68545874 全国各地新华书店和相关出版物销售网点
排 版	北京鑫海胜蓝数码科技有限公司
印 刷	三河市天润建兴印务有限公司
规 格	184mm×260mm 16开本 24.25印张 620千字
版 次	2014年8月第1版 2014年8月第1次印刷
印 数	0001—3000册
定 价	79.00元

凡购买我社图书,如有缺页、倒页、脱页的,本社发行部负责调换

版权所有·侵权必究

前 言

材料是人类文明的象征,材料的发展史就是人类文明的发展史。它是国民经济、社会进步和国家安全的基础与先导,材料技术已成为现代工业、国防和高技术发展的共性基础技术,是当前最重要、发展最快的科学技术领域之一。材料按其性能特征和用途可分为两大类:结构材料和功能材料。功能材料是指具有优良的物理(电、磁、光、热、声)、化学、生物学功能及其相互转化的功能,被用于非结构目的的高技术材料。它是信息技术、生物技术、能源技术等高技术领域和国防建设的重要基础材料,同时也对改造农业、化工、建材等起着重要作用。它具有特殊优良的力学、物理、化学和生物功能,在物件中起着一种或多种除结构力学性能外的特殊“功能”作用。

随着科学技术尤其是信息、能源和生物等现代高技术的快速发展,功能材料越来越显示出它的重要性,并逐渐成为材料学科中最活跃的前沿学科之一。功能材料也是现代新型材料的代名词,代表了当前新材料发展的趋势。可以认为,现代新材料的发展主要是功能材料的发展。鉴于功能材料的重要地位,世界各国均十分重视功能材料技术的研究。我国功能材料的制备和应用领域也取得了重大发展和进步。我国“863 计划”中将新材料规划为高新技术 7 个主要研究领域之一,“973 计划”进一步将功能材料作为重点的研究项目,使我国在 20 年来的功能材料研究和开发领域取得了辉煌的成就,在一些材料领域取得了较大突破,在一些重点方向迈进了国际先进领域,并对科学技术的进步和国民经济的发展以及综合国力的提高起到了极其重要的作用。

由于一种材料本身具有多功能的性质,一种功能性质可包含多种不同的材料,而对特定的应用领域会有多种材料和多种功能的交叉情况。因此,难以达到各类工程技术专业人员,各行各业都普遍适用和理想的一种分类法。本书使用按材料类别和材料的功能性质的分类方法。

本书共 14 章,重点讨论了金属功能材料、无机功能材料、功能高分子材料、功能膜材料和复合材料、智能材料以及新型功能材料等。强调了功能材料的结构、组成、性能、应用以及制备方法。并根据功能材料发展的最新动态,讨论了功能材料在能源、智能航空航天等领域发展迅速的功能材料的组成、结构、性能、制备和应用。

本书在编写过程中参考了大量文献和著作,书后列出了主要的参考书籍名录,谨此表示深深的谢意,如有疏漏,敬请包涵。

由于编者水平有限,书中不足之处在所难免,恳请读者批评指正。

编者

2014 年 4 月

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 功能材料的发展	1
1.2 功能材料的性能	3
第 2 章 晶体学基础	7
2.1 晶体特征	7
2.2 晶体结构	15
2.3 晶体缺陷	26
第 3 章 金属功能材料	35
3.1 高温合金	35
3.2 电功能合金	37
3.3 磁性材料	41
3.4 超导材料	59
3.5 非晶态合金	67
3.6 贮氢合金	76
3.7 其他合金材料	84
第 4 章 无机功能材料	86
4.1 半导体材料	86
4.2 功能陶瓷	98
4.3 功能玻璃	107
第 5 章 功能晶体材料	114
5.1 光学晶体	114
5.2 非线性光学晶体	115
5.3 激光晶体	118
5.4 电光和光折变晶体	123
5.5 其他交互效应功能晶体	128
第 6 章 功能高分子材料	132
6.1 常见化学功能高分子	132

6.2	有机光功能材料	141
6.3	电功能高分子	147
6.4	高分子液晶	153
6.5	形状记忆高分子	159
6.6	医药功能高分子	163
第 7 章	功能复合材料	172
7.1	电功能复合材料	172
7.2	光学功能复合材料	176
7.3	吸声和吸波功能复合材料	177
7.4	结构功能复合材料	180
第 8 章	功能膜材料	201
8.1	膜材料的制备方法	201
8.2	高分子分离膜	204
8.3	纳滤膜	209
8.4	超滤膜	215
8.5	分子筛膜	217
8.6	其他薄膜材料	219
第 9 章	隐身材料	228
9.1	隐身技术	228
9.2	雷达吸波隐身材料	231
9.3	红外与激光隐身材料	250
9.4	可见光隐身材料	255
第 10 章	形状记忆材料	258
10.1	形状记忆原理	258
10.2	形状记忆合金材料	265
10.3	形状记忆合金材料的应用	273
第 11 章	智能材料	277
11.1	智能材料概述	277
11.2	智能无机材料	279
11.3	智能高分子材料	288
11.4	智能药物释放体	296
第 12 章	纳米功能材料	302
12.1	纳米材料的特殊效应	302

12.2	纳米材料的制备方法	304
12.3	纳米功能材料及其应用	312
第 13 章	功能转换材料	325
13.1	热电材料	325
13.2	光电材料	330
13.3	声光材料	334
13.4	压电材料	336
13.5	热释电材料	340
第 14 章	新型功能材料	342
14.1	微电子器件材料	342
14.2	红外材料	344
14.3	功能色素材料	350
14.4	其他新型功能材料	370
参考文献		379

第 1 章 绪 论

1.1 功能材料的发展

材料是现代社会的物质基础,是现代文明的支柱。材料科学是基础科学,又是新技术革命的先导。功能材料涉及学科很广,与化学、物理学、数学、医学、生物学密切相关,是一个内容及其丰富的领域。材料的发展突出特征表现为:学科之间的相互交叉渗透,使得各学科之间的关系日益密切,互相促进,难以分割;材料科学技术化、材料技术科学化,材料科学与工程技术日益融合,相互促进;新材料、新技术、新工艺相互结合,为各个工程领域开拓了新的研究内容,带来了新的生命力和发展前景。

1.1.1 功能材料的发展概述和重要地位

功能材料(Functional Materials)的概念是美国 J. A. Morton 于 1965 年首先提出来的。是指那些具有优良的电学、磁学、光学、热学、声学、力学、化学、生物医学功能,特殊的物理、化学、生物学效应,能完成功能相互转化,主要用来制造各种功能元器件而被广泛应用于各类高科技领域的高新技术材料。功能材料是在工业技术和人类历史的发展过程中不断发展起来的。特别是近 30 多年以来,由于电子技术、激光技术、能源技术、信息技术以及空间技术等现代高技术的高速发展,强烈刺激现代材料向功能材料方向发展,使得新型功能材料异军突起,促进功能材料的快速发展。自 20 世纪 50 年代以来,随着微电子技术的发展和应用,半导体材料迅速发展;60 年代出现激光技术,光学材料面貌为之一新;70 年代出现光电子材料,80 年代形状记忆合金等智能材料得到迅速发展。随后,包括原子反应堆材料、太阳能材料、高效电池等能源材料和生物医用材料等迅速崛起,形成了现今较为完善的功能材料体系。

功能材料是新材料领域的核心,是国民经济、社会发展及国防建设的基础和先导。它涉及信息技术、生物工程技术、能源技术、纳米技术、环保技术、空间技术、计算机技术、海洋工程技术等现代高新技术及其产业。功能材料对我国高新技术的发展及新产业的形成具有重要意义。

功能材料种类繁多,用途广泛,正在形成一个规模宏大的高技术产业群,有着十分广阔的市场前景和极为重要的战略意义。世界各国均十分重视功能材料的研发与应用,它已成为世界各国新材料研究发展的热点和重点,也是世界各国高技术发展中战略竞争的热点。按使用性能分,功能材料可分为微电子材料、光电子材料、传感器材料、信息材料、生物医用材料、生态环境材料、能源材料和机敏(智能)材料。

功能材料是新材料领域的核心,对高新技术的发展起着重要的推动和支撑作用,在全球新材料研究领域中,功能材料约占 85%。随着信息社会的到来,特种功能材料对高新技术的发展起

着重要的推动和支撑作用,是 21 世纪信息、生物、能源、环保、空间等高新技术领域的关键材料,成为世界各国新材料领域研究开发的重点,也是各国高技术发展中战略竞争的热点。1989 年美国 200 多位科学家撰写了《90 年代的材料科学与材料工程》报告,建议政府支持的 6 类材料中有 5 类属于功能材料。从 1995 年至 2010 年每两年更新一次的《美国国家关键技术》报告中,特种功能材料和制品技术占了很大的比例。欧盟的第六框架计划和韩国的国家计划等在他们的最新科技发展计划中,均将功能材料技术列为关键技术之一加以重点支持。2001 年日本文部省科学技术政策研究所发布的第七次技术预测研究报告中列出了影响未来的一百项重要课题,一半以上为新材料或依赖于新材料发展的课题,而其中绝大部分均为功能材料。我国对功能材料的发展亦非常重视,在国家攻关 863、973 等计划中,功能材料均占了相当大的比例。在 863 计划支持下,开辟了超导材料、稀土功能材料、平板显示材料、生物医用材料、储氢等新能源材料,金刚石薄膜、红外隐身材料、高性能固体推进剂材料、材料设计与性能预测等功能材料新领域,取得了一批接近或达到国际先进水平的研究成果。功能陶瓷材料的研究开发取得了显著进展,以片式电子组件为目标,我国在高性能瓷料的研究上取得了突破,并在低烧瓷料和贱金属电极上形成了自己的特色并实现了产业化,使片式电容材料及其组件进入了世界先进行列;镍氢电池、锂离子电池的主要性能指标和生产工艺技术均达到了国际的先进水平,推动了镍氢电池的产业化;功能材料还在“两弹一星”、“四大装备四颗星”等国防工程中作出了举足轻重的贡献。各国都非常强调功能材料对发展本国国民经济、保卫国家安全、增进人民健康和提高人民生活质量等方面的突出作用。当前国际功能材料及其应用技术正面临新的突破,诸如超导材料、微电子材料、光子材料、信息材料、能源转换及储能材料、生态环境材料、生物医用材料及材料的分子、原子设计等正处于日新月异的发展之中,发展功能材料技术正在成为一些发达国家强化其经济及军事优势的重要手段。

我国国防现代化建设,如军事通信、航空、航天、导弹、热核聚变、激光武器、激光雷达、新型战斗机、主战坦克以及军用高能量密度组件等,都离不开特种功能材料的支撑。

2011 年教育部颁布的国家战略性新兴产业相关本科专业中就有功能材料,足显功能材料在国家战略及新兴产业中的重要性。

1.1.2 功能材料的现状和发展趋势

1. 功能材料的现状

当前,功能材料发展迅速,其研究和开发的热点集中在光电子信息材料、功能陶瓷材料、能源材料、生物医用材料、超导材料、功能高分子材料、功能复合材料、智能材料等领域。

现已开发的以物理功能材料最多,主要有:

(1) 单功能材料

单功能材料如导电材料、介电材料、铁电材料、磁性材料、磁信息材料、发热材料、蓄热材料、隔热材料、热控材料、隔声材料、发声材料、光学材料、发光材料、激光材料、红外材料、光信息材料等。

(2) 多功能材料

多功能材料如降噪材料、耐热密封材料、三防(防热、防激光和防核)材料、电磁材料等。

(3) 功能转换材料

功能转换材料如压电材料、热电材料、光电材料、磁光材料、电光材料、声光材料、电(磁)流变材料、磁致伸缩材料等。

(4) 复合和综合功能材料

复合和综合功能材料如形状记忆材料、传感材料、智能材料、显示材料、分离功能材料等。

(5) 新形态和新概念功能材料

新形态和新概念功能材料如液晶材料、非晶态材料、梯度材料、纳米材料、非平衡材料等。

目前,化学和生物功能材料的种类虽较少,但发展速度很快,功能也更多样化。其中的储氢材料、锂离子电池材料、太阳电池材料、燃料电池材料和生物医学工程材料已在一些领域得到了应用。同时,功能材料的应用范围也迅速扩大,虽然在产量和产值上还不如结构材料,但其应用范围实际上已超过了结构材料,对各行业的发展产生了很大的影响。

2. 功能材料的发展趋势

高新技术的迅猛发展对功能材料的需求日益迫切,也对功能材料的发展产生了极大的推动作用。目前从国内外功能材料的研究动态看,功能材料的发展趋势可归纳为如下几个方面:

①开发高技术所需的新型功能材料,特别是尖端领域(如航空航天、分子电子学、高速信息、新能源、海洋技术和生命科学等)所需和在极端条件(如超高压、超高温、超低温、高热冲击、高真空、高辐射、粒子云、原子氧和核爆炸等)下工作的高性能功能材料。

②功能材料的功能由单功能向多功能和复合或综合功能发展,从低级功能向高级功能发展。

③功能材料和器件的一体化、高集成化、超微型化、高密积化和超分子化。

④功能材料和结构材料兼容,即功能材料结构化,结构材料功能化。

⑤发展和完善功能材料检测和评价的方法。

⑥进一步研究和发展功能材料的新概念、新工艺和新设计。已提出的新概念有梯度化、低维化、智能化、非平衡态、分子组装、杂化、超分子化和生物分子化等;已提出的新工艺有激光加工、离子注入、等离子技术、分子束外延、电子和离子束沉积、固相外延、精细刻蚀、生物技术及在特定条件下(如高温、高压、高真空、微重力、强电磁场和超净等)的工艺技术;已提出的新设计有化学模式识别设计、分子设计、非平衡态设计、量子化学和统计力学算法等。

⑦加强功能材料的应用研究,扩展功能材料的应用领域,特别是尖端领域和民用高技术领域,迅速推广成熟的研究成果,以形成生产力。

1.2 功能材料的性能

1.2.1 半导体电性

根据能带理论,晶体中只有导带中的电子或价带顶部的空穴才能参与导电。由于半导体禁带宽度小于 2eV , 在外界作用下(如热、光辐射),电子跃迁到导带,价带中留下空穴。这种导带中的电子导电和价带中的空穴导电同时存在的情况,称为本征电导。这类半导体称为本征半导体。

杂质对半导体的导电性能影响很大,如若在硅单晶中掺入十万分之一的硼原子,可使硅的导电能力增加一千倍,杂质半导体分为 n 型半导体和 p 型半导体,在四价的硅单晶中掺入五价原子,成键后,多出一个电子,其能级离导带很近,易激发。这种多余电子的杂质能级称为施主能级。这类掺入施主杂质的半导体称为 n 型半导体,如图 1-1(a)所示,其中 E_D 为施主能级。

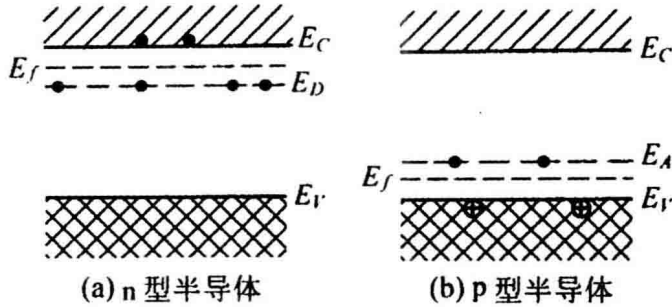


图 1-1 n 型与 p 型半导体能带结构

若在硅中掺入三价原子,成键后少一个电子,在距价带很近处,出现一个空穴能级,这个空穴能级能容纳由价带激发上来的电子,这种杂质能级称为受主能级。受主杂质的半导体称为 p 型半导体,如图 1-1(b)所示, E_A 为受主能级。

n 型、p 型半导体的电导率与施主、受主杂质浓度有关。低温时,杂质起主要作用;高温时,属于本征电导性。

1.2.2 超导性

1911 年荷兰物理学家昂尼斯发现汞的直流电阻在 4.2K 时,突然消失,他认为汞进入以零电阻为特征的“超导态”。通常把电阻突然变为零的温度称为超导转变温度,或临界温度,用 T_c 表示。

而后迈斯纳发现了迈斯纳效应,即超导体一旦进入超导态,体内的磁通量将全部被排出体外,磁感应强度恒等于零。该效应展示了超导体与理想导体完全不同的磁性。

所谓理想导体,其电导率 $\sigma = \infty$,由欧姆定律 $J = \sigma E$ 可知,其内部电场强度 E 必处处为零。由麦克斯韦方程 $\nabla \times E = -\partial B / \partial t$ 可知,当 $E = 0$,则 $\partial B / \partial t = 0$,表明超导体内 B 由初始条件确定, $B = B_0$ 。但实验结果表明,不论先降温后加磁场,还是先加磁场后降温,只要进入超导态(S 态),超导体就把全部磁通排出体外,与初始条件无关,如图 1-2 所示。

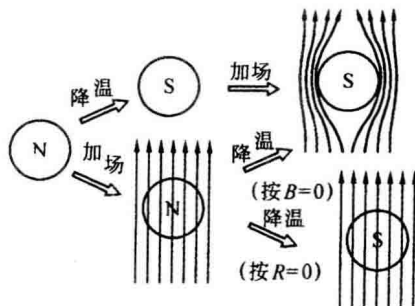


图 1-2 迈斯纳效应与理想导体情况比较

由此可知,电性质 $R=0$,磁性质 $B=0$ 是超导体两个最基本的特性,这两个性质既彼此独立又紧密相关。

1950 年美国科学家麦克斯韦和雷诺兹分别独立发现汞的几种同位素临界温度各不相同, T_c 满足关系式: $T_c \propto 1/M^\alpha$ ($\alpha=1/2$)。这种同位素相对原子质量越小, T_c 越高的现象称为同位素效应。汞同位素的临界温度见表 1-1。

表 1-1 汞同位素的临界温度

共相对原子质量 M	198	199.7	200.6	200.7	202.4	203.4
T_c/K	4.177	4.161	4.156	4.150	4.143	4.126

1.2.3 磁性

磁性是功能材料的一个重要性质,有些金属材料在外磁场作用下产生很强的磁化强度,外磁场除去后仍能保持相当大的永久磁性,这种特性叫铁磁性。铁、钴、镍和某些稀土金属都具有铁磁性。铁磁性材料的磁化率可高达 10^6 。铁磁性材料所能达到的最大磁化强度叫饱和磁化强度,用 M_s 表示。

在有些非铁磁性材料中,相邻原子或离子的磁矩作反方向平行排列,总磁矩为零,这种性质为反铁磁性。Mn, Cr, MnO 等都属反铁磁性材料。

抗磁性是一种很弱、非永久性的磁性,只有在外磁场存在时才能维持,磁矩方向与外磁场相反,磁化率大约为 -10^{-5} 。如果磁矩的方向与外磁场方向相同,则为顺磁性,磁导率约为 $10^{-5} \sim 10^{-2}$ 。这两类材料都被看作是无磁性的。

亚铁磁性是某些陶瓷材料表现的永久磁性,其饱和磁化强度比铁磁性材料低。

任何铁磁体和亚铁磁体,在温度低于居里温度 T_c 时,都是由磁畴组成,磁畴是磁矩方向相同的小区域,相邻磁畴之间的界叫畴壁。磁畴壁是一个有一定厚度的过渡层,在过渡层中磁矩方向逐渐改变。铁磁体和亚铁磁体在外磁场作用下磁化时, B 随 H 的变化如图 1-3 所示。

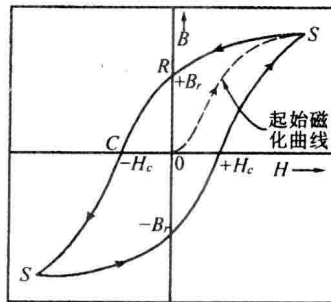


图 1-3 铁磁体和亚铁磁体的磁化曲线、退磁曲线和磁滞回线

1.2.4 光谱性质

人们关于原子和分子的大部分认识是以光谱研究为依据,从电磁辐射和材料的相互作用产

生的吸收光谱和发射光谱中,可以得到材料与其周围环境相互作用的信息。

激光光谱是指使物质产生发光时的激励光按频率分布的总体。通过激光光谱的测定可以确定有效吸收带的位置,即吸收光谱中哪些吸收带对产生某个荧光光谱带是有贡献的。

吸收光谱是指物质在光谱范围里的吸收系数按光频率分布的总体。一束光在通过物质之后有一部分能量被物质吸收,因此光强会减弱。发光物质的类型不同,吸收光谱也就随之不同。吸收光谱可直接表征发光中心与它的组成、结构的关系以及环境对它的影响,对发光材料的研究具有重要的作用。

发光物质发射光子的能量按频率分布的总体称为该物质的发射光谱。发射光谱同吸收光谱一样,取决于发光中心的组成、结构和周围介质的影响。

第 2 章 晶体学基础

2.1 晶体特征

2.1.1 晶体的宏观特征

1. 规则的几何外形

正如人们所熟知的：晶体具有规则的几何外形，具有自发地形成封闭的几何多面体外形能力的性质。规则的几何多面体外形同时表明晶体内部结构是规则的。当然由于受到外界条件的影响同一晶体物质的各种不同样品的外形可能不完全一样，因而晶体的外形不是晶体品种的特征因素。在不同的生长条件下，同一种晶体的结晶形貌也会不同。晶体的结晶形貌除了与晶体结构有关之外，还与晶体生长时的物理及化学条件有一定的关系。

2. 有固定的熔点

晶体和非晶体的宏观性质有很大的不同，最明显的一个区别是，在固体熔化过程中，晶体有固定的熔点，而非晶体则没有。非晶体的熔化过程是随着温度的升高而逐渐完成的，如图 2-1 所示。

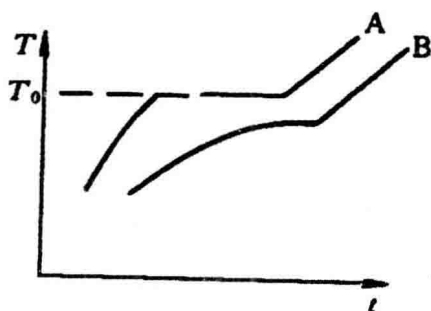


图 2-1 熔解时温度随时间的变化曲线

因为熔化的过程就是晶体长程序解体的过程，破坏长程序所需的能量就是平常说的熔解热，所以晶体当温度达到熔点时，继续加热温度不升高而等到全部熔化后才升高，即晶体具有一定的熔点。这也表明晶体内部结构的规则性是长程序的。

3. 晶面角守恒

在适当条件下,晶体能自发地发展成为一个凸多面体形的单晶体,围成这样一个多面体的面称为晶面。实验测定表明,同一晶体物质的各种不同样品中,相对应的各晶面之间的夹角保持恒定,例如图 2-2 所示,石英晶体的不同样品中 b, c 晶面夹角总是 $120^{\circ}00'$, a, c 晶面间夹角总是 $113^{\circ}08'$,所以晶面角才是晶体外形的特征因素。但晶面的相对大小和形状都是不重要的,所以可以用晶面法线的取向来表征晶面的方位,以法线之间的夹角来表征晶面之间的夹角。这个普遍的规律被概括为晶面角守恒定律:属于同一晶种的晶体,两个对应晶面间的夹角恒定不变。晶面角守恒表明同一种晶体,其内部结构的规则性是相同的。

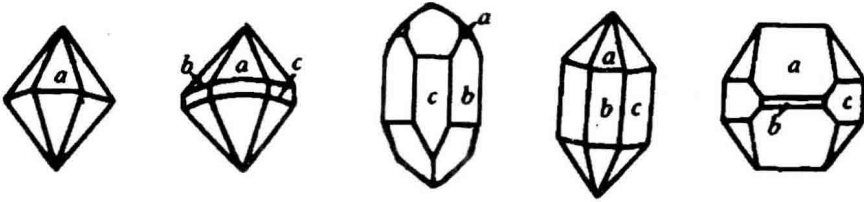


图 2-2 石英晶体的若干外形图

4. 物理性质的各向异性

晶体是各向异性的。所谓各向异性,是指同一晶体在不同方向上具有不同的性质。例如,云母和方解石,它们都具有完好的解理性,受力后都是沿着一定方向裂开。晶体的各向异性表明晶体内部结构的规则性在不同方向上是不一样的。

晶体的这些宏观特征表明晶体中原子、分子或离子是按一定方式重复排列的。这种性质称为晶体结构的周期性,这是晶体最基本的特征。

2.1.2 空间点阵

晶体内的原子、离子、分子在三维空间作规则排列,这个规则本身指的是相同的部分具有直线周期平移的特点。为了概括晶体结构的周期性人们提出了空间点阵学说。

空间点阵学说认为,一个理想晶体是由全同的称作基元的结构单元在空间无限重复而构成。基元可以是原子、离子、分子,晶体中的所有基元的组成、位形和取向都是相同的。因此,晶体的内部结构可抽象为由一些相同的几何点在空间作周期性的无限分布,几何点代表基元的某个相同位置,点的总体就称作空间点阵,简称点阵,如图 2-3 所示。

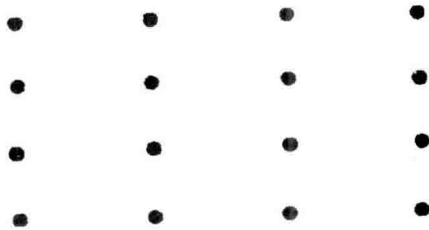


图 2-3 点阵

空间点阵是实际晶体结构的数学抽象,是一种空间几何构图。它突出了晶体结构中微粒排列周期性的特点。因此,在谈及晶体结构时是离不开它的。但只有点阵而无构成晶体的物理实体——微粒,则不会成为晶体。在讨论晶体时二者缺一不可,显然可得到如下的逻辑关系:

点阵+基元=晶体结构

此处的基元就是构成晶体中原子、离子、分子或原子基团。图 2-4 中(a)表示含有两个原子的基元,(b)中黑点组成点阵。每个黑点称作阵点上安置上具体的基元,就得到了晶体结构。

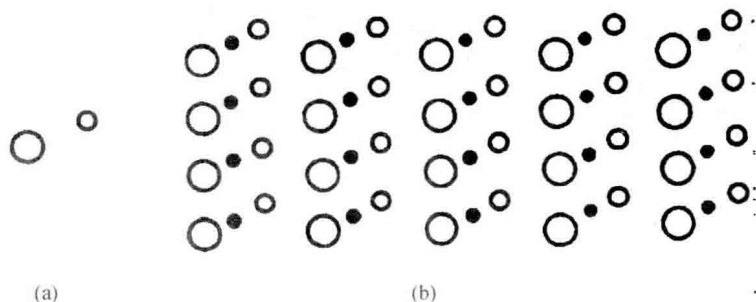


图 2-4 点阵图

点阵是一种数学抽象,用来概括晶体结构的周期性。整个晶体结构可看作由代表基元的点沿空间三个不同的方向,按一定的距离周期性地平移而构成。因此空间点阵是由点阵矢量 R 联系的诸点列阵。

$$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$$

式中, a_1, a_2, a_3 代表三个方向上的晶格基矢量, n_1, n_2, n_3 是一组整数。

点阵概括了理想晶体的结构上的周期性,而这样的理想晶体实际上并不存在。只有在绝对零度下,并且忽略表面原子和体内原子的差别,忽略体内原子在排列时具有少量的不规则性时,理想晶体才是实际晶体的较好的近似。

2.1.3 晶向指数和晶面指数

晶格的格点可以看成是分列在一系列相互平行、等距的直线系上,这些直线系称为晶列。图 2-5 用实线和虚线表示出两个不同的晶列。即同一个点阵可以形成方向不同的晶列。

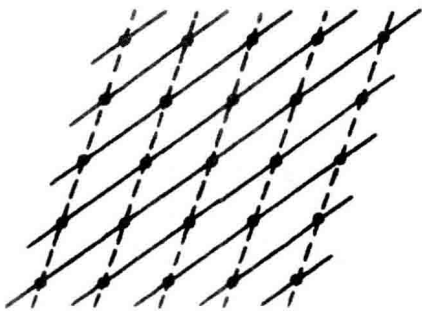


图 2-5 晶列

每一个晶列所指的方向称为晶向。如果从一个阵点沿晶向到最近的阵点的位移矢量如下:

$$l_1 a_1 + l_2 a_2 + l_3 a_3$$

则晶向就可用 l_1, l_2, l_3 来表示, 即 $[l_1 l_2 l_3]$ 。

晶体中所有阵点可以被划分成许多组平行等距的一组平面, 这些平面点阵所处的平面称为晶面, 这些平面称为平面簇, 如图 2-6 所示。

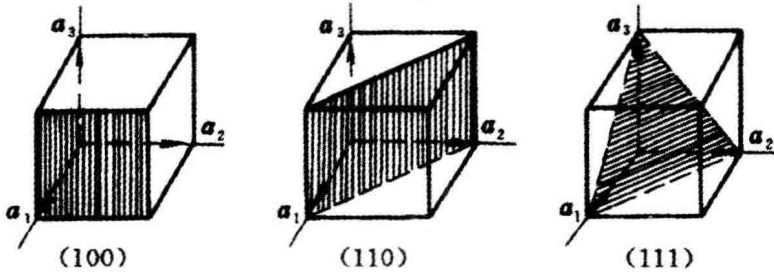


图 2-6 晶面示意图

晶向和晶面的生长、变形、性能及方向性等密切相关, 因此在研究晶体中常常用到晶向和晶面的进行标示, 这就是晶向指数和晶面指数, 国际上统一用密勒指数来进行标定。密勒指数可以这样来确定: 以晶胞中的一点 O 为原点, 并作出沿 a_1, a_2, a_3 的轴。如果我们从原点顺序地考查一个个面切割第一轴的情况, 显然必将遇到一个面切割在 $+a_1$ 或 $-a_1$ 。假使这是从原点算起的第 h_1 个面, 那末晶面系的第一个面的截距必然是 $\pm a_1$ 的分数, 可以写成下式:

$$a_1/h_1$$

同样可以论证第一个面在其他两个轴上的截距将为下式:

$$a_2/h_2 \text{ 和 } a_3/h_3$$

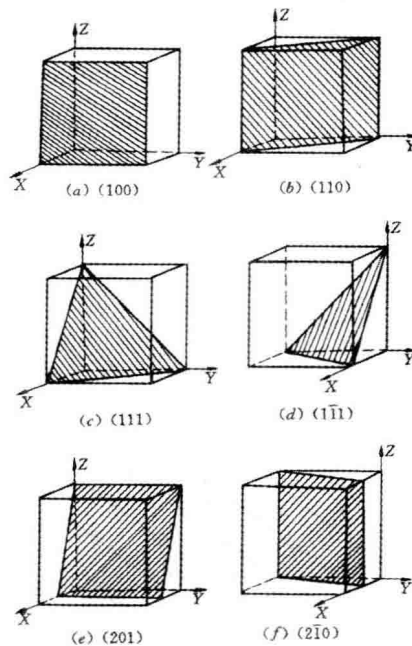


图 2-7 立方晶格的几个晶面示意图

用 (h_1, h_2, h_3) 来标记这个晶面系, 称为密勒指数。 $|h_1|, |h_2|, |h_3|$ 表示等距的晶面分别把