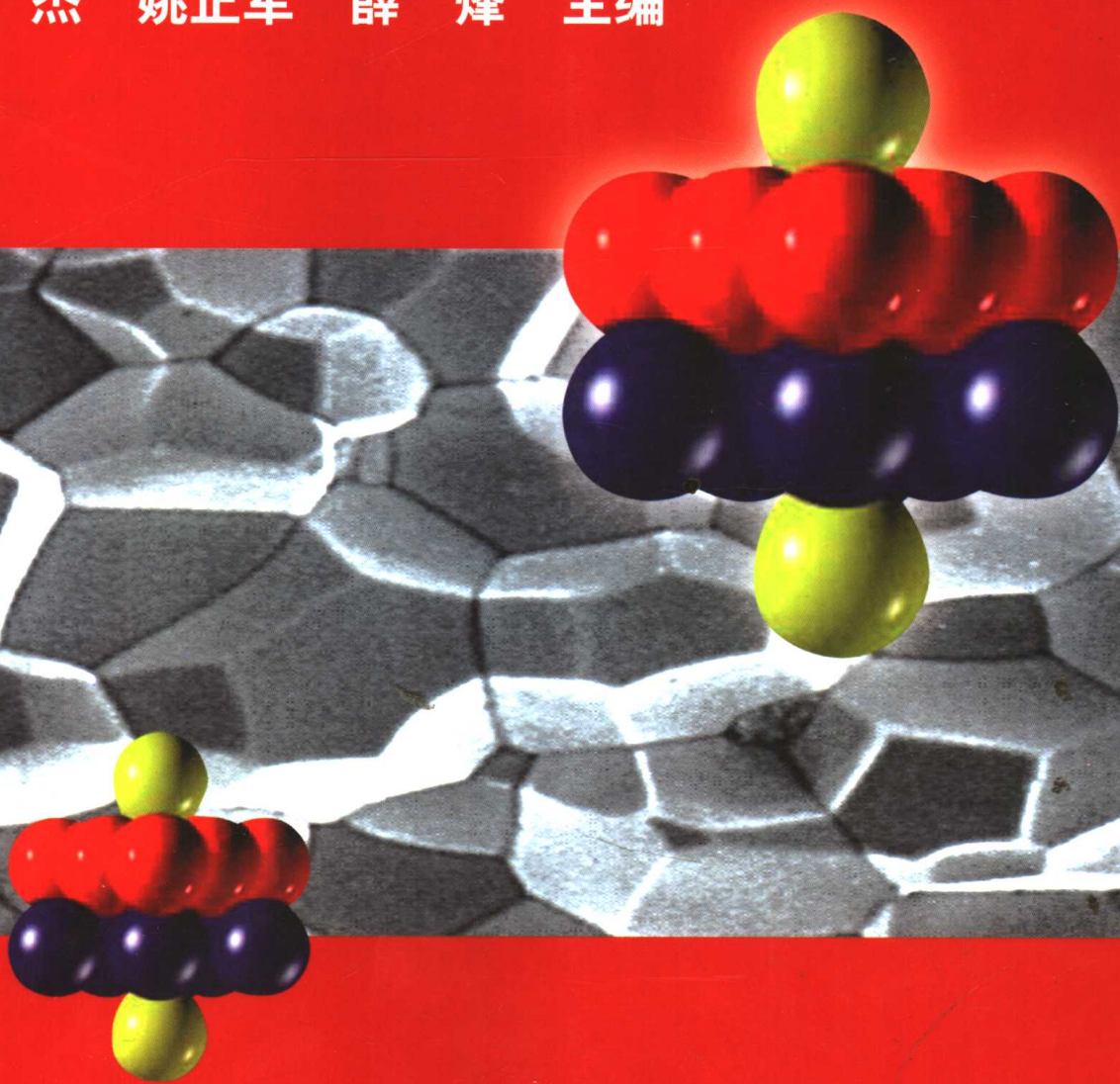


高 等 学 校 教 材

GAODENG XUOXIAO JIAOCAI

材料科学基础

● 陶 杰 姚正军 薛 烽 主编



化学工业出版社
教材出版中心

高 等 学 校 教 材

材料科学基础

● 陶 杰 姚正军 薛 烽 主编



化学工业出版社
教材出版中心

· 北 京 ·

图书在版编目(CIP)数据

材料科学基础/陶杰, 姚正军, 薛烽主编. —北京: 化学工业出版社, 2006. 2
高等学校教材
ISBN 7-5025-8310-6

I. 材… II. ①陶…②姚…③薛… III. 材料科学-高等学校-教材 IV. TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 014246 号

高等学校教材

材料科学基础

陶 杰 姚正军 薛 烽 主编

责任编辑: 杨 菁

文字编辑: 李 玥

责任校对: 凌亚男

封面设计: 于 兵

*

化学工业出版社 出版发行
教材出版中心

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

购书咨询: (010)64982530

(010)64918013

购书传真: (010)64982630

[http:// www. cip. com. cn](http://www.cip.com.cn)

*

新华书店北京发行所经销

化学工业出版社印刷厂印装

开本 787mm×1092mm 1/16 印张 32¼ 字数 862 千字

2006 年 3 月第 1 版 2006 年 3 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-8310-6

定 价: 65.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

前 言

本书为江苏省普通高校“十一五”精品立项教材，是在 1998 年国家教育部高等学校专业设置调整、高等教育办学层次普遍提升的背景下，根据材料科学与工程一级学科办学的基础课教学实际需要，结合多年来从事本门课程的教学实践和体会精心编写而成。其编写的原则是进一步融合金属学原理、无机非金属材料物理化学、高分子材料科学等学科的共性科学原理和方法，从教学要求出发，着重对基本概念和基础理论的阐述，力求教材内容的科学性、先进性和实用性，培养学生运用科学原理解决材料工程实际问题的能力。

材料科学是研究材料的成分、组织结构、制备工艺及材料性能及应用之间的相互关系的科学，其基本原理植根于凝聚态物理学、物理化学与合成化学。虽然各种材料的分支学科其学术背景不尽相同，其交叉融合需要一个历史过程，然而进入 21 世纪以来，随着科学技术的迅猛发展，学科之间的交叉融合正在加速进行，也促成了这门材料科学与工程专业本科生核心专业基础课——材料科学基础的日趋完善。

本教材的特点表现在：

1. 适应了新世纪对人才培养的新要求，打破传统各类小专业之间的条块分割，真正做到将金属材料、陶瓷材料、高分子材料以及复合材料四者有机结合起来，建立了更为宽广的基础知识体系，有关材料基础理论更全面、更系统、更实用；全书内容共性突出，个性分明；

2. 本书是在完成面向 21 世纪材料类大专教学内容和课程体系一系列改革的基础上编写的，能够反映当代教学改革的最新成果；

3. 本书能够体现当代材料领域所取得的最新理论与发展成果，如有关纳米材料及一些新型功能材料等内容；

4. 本书配有多媒体教学光盘 1 张，以丰富的二维三维动画、flash、图表、录像等将材料科学基础中大量抽象的、难于理解的或极其复杂的概念、原理形象直观地表达出来，非常有助于教师备课和学生学习；

5. 本书自编教材已印刷过两版，在南京航空航天大学及东南大学已试用过五届，获得了有关教师及学生们的宝贵意见，对此书正式出版有很大裨益；

6. 在结构编排方面突出教材编排的新颖性及易读性。教材适应面广，既适应于材料科学与工程一级学科本科生基础课教学使用，亦可作为相关专业工程技术人员的参考书。

本书由南京航空航天大学陶杰、姚正军，东南大学薛烽，合肥工业大学宫晨利、许少凡等教授编写。具体编写分工如下：南京航空航天大学姚正军编写第 1 章、第 2 章、第 4 章部分内容；合肥工业大学宫晨利编写第 3 章、第 6 章；合肥工业大学许少凡编写第 5 章；南京

航空航天大学陶杰编写第 7 章、第 8 章和第 10 章部分内容；东南大学薛烽编写第 8 章部分内容、第 9 章；南京航空航天大学苏新清编写了全书的高分子材料科学内容；南京航空航天大学李勇编写了书中的复合材料内容；南京航空航天大学向定汉、傅仁利编写了书中的陶瓷材料相关内容；南京航空航天大学汪涛、东南大学孙扬善、合肥工业大学吴玉程参与了本书的有关章节的审定和编写工作。全书由陶杰、姚正军和薛烽统稿，薛烽还绘制了本书中的大部分彩图。江苏省教育厅、南京航空航天大学对本书的编写和出版给予了大力支持，南京航空航天大学材料科学与技术学院的同事们对本书提出了许多有益的建议，研究生陶海军、季光明、季学来、周金堂等在本书的资料收集等方面付出了辛勤劳动，编者对这些单位和个人无私帮助和热情关怀表示衷心的感谢。

由于编者水平有限，书中难免存在缺点和错误，敬请读者批评指正。

编者

2006 年 2 月

目 录

第 1 章 晶体学基础	1
1.1 晶体的周期性和空间点阵	1
1.1.1 晶体与晶体学	1
1.1.2 晶体点阵与空间点阵	3
1.2 布拉菲点阵	5
1.3 晶向指数与晶面指数	8
1.3.1 晶向指数	8
1.3.2 晶面指数	9
1.3.3 六方晶系的晶向指数与晶面指数	11
1.4 晶面间距、晶面夹角和晶带定理	12
1.4.1 晶面间距	12
1.4.2 晶面夹角	13
1.4.3 晶带定理	13
1.5 晶体的对称性	14
1.5.1 宏观对称元素	14
1.5.2 32 种点群	16
1.5.3 微观对称元素	17
1.5.4 空间群	20
1.6 极射投影	21
1.6.1 参考球和极射投影	21
1.6.2 吴氏网	22
1.6.3 标准投影图	23
第 2 章 固体材料的结构	25
2.1 基础知识	25
2.1.1 原子结构	25
2.1.2 能级图和原子的电子结构	25
2.1.3 周期表与周期性	28
2.1.4 晶体中的原子结合	32
2.2 金属及合金相的晶体结构	36
2.2.1 元素的晶体结构	36
2.2.2 典型金属的晶体结构	37
2.2.3 合金相的晶体结构	47
2.3 陶瓷的晶体结构	69
2.3.1 概述	69
2.3.2 离子晶体结构	70
2.3.3 硅酸盐晶体结构	82

2.3.4	同质异构现象	88
2.3.5	晶态与玻璃结构	89
2.4	高分子的链结构及聚集态结构	97
2.4.1	高分子链的组成和构造 (近程结构)	98
2.4.2	高分子链的构象 (远程结构)	102
2.4.3	高聚物的晶态结构	113
2.4.4	高聚物的非晶态、取向及液晶态结构	121
2.4.5	高分子合金的织态结构	125
2.5	复合材料的细观结构	127
2.5.1	复合材料及其组成	127
2.5.2	复合材料的细观结构	128
2.6	非晶、准晶和纳米晶	131
2.6.1	非晶态结构	131
2.6.2	准晶的结构	132
2.6.3	纳米晶的结构	135
第3章	固体中的扩散	138
3.1	扩散定律及其应用	138
3.1.1	扩散第一定律	138
3.1.2	扩散第二定律	139
3.1.3	扩散第二定律的解及其应用	140
3.2	扩散微观理论与机制	143
3.2.1	原子跳动和扩散距离	143
3.2.2	原子跳动和扩散系数	144
3.2.3	扩散的微观机制	146
3.2.4	扩散激活能	148
3.3	达肯方程	150
3.3.1	柯肯达尔效应	150
3.3.2	达肯方程与互扩散系数	151
3.4	扩散的热力学分析	153
3.4.1	扩散的驱动力	153
3.4.2	扩散系数的普遍形式	153
3.4.3	上坡扩散	154
3.5	影响扩散的因素	155
3.5.1	温度	155
3.5.2	成分	156
3.5.3	晶体结构	158
3.5.4	短路扩散	159
3.6	反应扩散	161
3.6.1	反应扩散的过程及特点	161
3.6.2	反应扩散动力学	163
第4章	凝固	165
4.1	液体的性能与结构	165
4.1.1	液态金属的结构	165

4.1.2 高分子溶液	166
4.2 金属的凝固与结晶	172
4.2.1 纯金属的凝固	172
4.2.2 固溶体合金的凝固	184
4.2.3 共晶合金的凝固	191
4.2.4 铸锭组织与凝固技术	194
4.3 陶瓷的凝固	204
4.4 聚合物的结晶	205
4.4.1 结晶动力学	206
4.4.2 结晶热力学	210
第5章 相图	212
5.1 相图基础知识	212
5.1.1 研究相图的意义	212
5.1.2 相图的表示方法	212
5.1.3 相图的建立	214
5.1.4 相图热力学基础	215
5.1.5 杠杆定律和重心法则	219
5.2 一元相图	222
5.2.1 纯铁的相图	222
5.2.2 水的相图	223
5.3 二元相图	223
5.3.1 二元匀晶相图	223
5.3.2 二元共晶相图	226
5.3.3 二元包晶相图	232
5.3.4 二元相图的分析与使用	235
5.3.5 实际二元相图举例	240
5.4 三元相图	253
5.4.1 两相平衡的三元相图	253
5.4.2 三相平衡的三元相图	259
5.4.3 四相平衡的三元相图	264
5.4.4 形成稳定化合物的三元相图	273
5.4.5 三元相图小结	274
5.4.6 实际三元相图举例	276
第6章 固态相变的基本原理	279
6.1 固态相变的分类与特征	279
6.1.1 固态相变的分类	279
6.1.2 固态相变的特征	281
6.2 相变热力学	284
6.2.1 热力学基本原理	284
6.2.2 固态相变的形核	286
6.3 相变动力学	295
6.3.1 扩散性长大	295
6.3.2 相变动力学方程	297

6.4 扩散型相变	298
6.4.1 固溶体的析出	298
6.4.2 共析转变	307
6.5 非扩散型相变	313
6.5.1 马氏体相变的基本特征	314
6.5.2 马氏体相变热力学	317
6.5.3 马氏体相变动力学	320
6.5.4 钢中马氏体的晶体结构	321
6.5.5 马氏体的组织形态	322
6.5.6 马氏体相变机制	324
6.5.7 马氏体的力学性能	325
6.6 过渡型相变	326
6.6.1 贝氏体转变的基本特征	326
6.6.2 贝氏体的组织形态	327
6.6.3 贝氏体的力学性能	329
第7章 晶体缺陷	331
7.1 点缺陷	331
7.1.1 空位与间隙原子	331
7.1.2 点缺陷的平衡浓度	332
7.1.3 点缺陷的移动	334
7.1.4 过饱和点缺陷	335
7.1.5 点缺陷对金属性能的影响	335
7.2 位错的基本知识	335
7.2.1 位错概念的产生	335
7.2.2 位错类型和柏氏矢量	337
7.3 位错的运动	342
7.3.1 位错的滑移	342
7.3.2 刃型位错的攀移	344
7.3.3 位错运动的 $\xi \times v$ 规则	345
7.3.4 位错的基本几何性质小结	346
7.4 位错的弹性性质	346
7.4.1 位错的应力场	346
7.4.2 位错的应变能	348
7.4.3 位错运动的动力与阻力	350
7.4.4 位错的线张力	351
7.4.5 位错间的相互作用	352
7.4.6 位错间的塞积	354
7.4.7 位错间的交割	355
7.4.8 位错与点缺陷的交互作用	358
7.5 位错的生成与增殖	360
7.5.1 位错密度	360
7.5.2 位错的生成	360
7.5.3 位错的增殖	360

7.6 实际晶体中的位错	363
7.6.1 实际晶体结构中的单位位错	363
7.6.2 堆垛层错	364
7.6.3 不全位错	365
7.6.4 位错反应	371
7.6.5 FCC 晶体中位错反应的一般表示: 汤普森四面体	373
7.6.6 位错反应举例	375
第8章 材料表面与界面	379
8.1 基础知识	379
8.1.1 物质表面	380
8.1.2 固体的表面自由能和表面张力	382
8.1.3 纯金属表面张力的估算	383
8.1.4 固液界面与润湿	384
8.1.5 固-固界面与黏附	385
8.2 晶体中的界面结构	385
8.2.1 界面类型与结构	385
8.2.2 界面能量	391
8.3 晶体中界面的偏聚与迁移	391
8.3.1 晶界平衡偏析	391
8.3.2 界面迁移驱动力	392
8.3.3 影响界面迁移的因素	393
8.4 界面与组织形貌	393
8.4.1 单相组织形貌	394
8.4.2 复相组织形貌	396
8.5 高聚物的表面张力与界面张力	398
8.5.1 表面张力与分子间的作用力	398
8.5.2 高聚物表面张力的影响因素	399
8.5.3 高聚物界面张力	403
8.6 复合体系的界面结合特性	406
8.6.1 复合材料界面的形成过程	406
8.6.2 树脂基复合材料的界面结构及界面理论	407
8.6.3 非树脂基复合材料的界面结构	408
8.6.4 复合材料界面破坏	410
8.7 材料的复合原理	412
8.7.1 复合材料力学性能的复合规律	413
8.7.2 复合材料物理性质的复合规律	414
第9章 金属材料的变形与再结晶	416
9.1 金属的应力-应变曲线	416
9.1.1 工程应力-应变曲线	416
9.1.2 真应力-真应变曲线	417
9.2 金属的塑性变形	418
9.2.1 单晶体的塑性变形	418
9.2.2 多晶体的塑性变形	428

9.2.3 合金的塑性变形与强化	431
9.2.4 变形后的组织与性能	436
9.3 回复与再结晶	440
9.3.1 冷变形晶体的回复	441
9.3.2 冷变形金属的再结晶	443
9.3.3 再结晶后的晶粒长大	449
9.3.4 再结晶织构与退火孪晶	451
9.4 金属的热变形、蠕变与超塑性	452
9.4.1 晶体的热变形	452
9.4.2 蠕变	454
9.4.3 超塑性	457
第 10 章 非金属材料的应力-应变行为与变形机制	458
10.1 陶瓷的弹性变形	458
10.1.1 陶瓷的弹性变形与弹性模量	458
10.1.2 显微结构对弹性模量的影响	458
10.2 陶瓷材料的塑性	459
10.2.1 单晶陶瓷的塑性	460
10.2.2 多晶陶瓷的塑性	461
10.2.3 非晶体陶瓷的变形	462
10.3 陶瓷材料的强度	463
10.3.1 陶瓷材料的断裂与断裂强度	463
10.3.2 陶瓷材料的弯曲强度	466
10.3.3 陶瓷材料的压缩强度	467
10.3.4 影响陶瓷材料强度的因素	467
10.4 高聚物的分子运动与转变	469
10.4.1 分子运动的特点与材料的力学状态	469
10.4.2 玻璃态与晶态的分子运动	472
10.4.3 玻璃化转变及影响因素	473
10.4.4 高分子流动性质	475
10.5 高聚物的高弹性	476
10.5.1 高弹态与分子结构	476
10.5.2 能弹性与熵弹性	477
10.6 高聚物的黏弹性	478
10.6.1 黏弹性现象	478
10.6.2 黏弹性与力学松弛	479
10.6.3 黏弹性的温度依赖性-时温等效原理	484
10.7 高聚物的应力-应变行为	486
10.7.1 高聚物的塑性及屈服	486
10.7.2 聚合物的断裂与强度	489
附录 材料科学基础专业词汇	494
参考文献	501

第1章 晶体学基础

晶体与非晶体之间的主要差别在于它们是否具有点阵结构,即组成晶体的原子、离子、分子或配位离子等都具有长程的有序排列。晶体的各种性质,无论是物理、化学方面的性质,或是几何形态方面的性质,都与其内部点阵结构紧密相联系。晶体之所以被广泛应用,其原因就在于它们具有和非晶体材料不同的一系列特性。由于近代科学技术的迅速发展,使得晶体学广泛地向化学、固体物理学、固体电子学、材料科学、分子生物学等学科渗透,而这种相互渗透的结果不仅促进了各学科本身的进一步发展,而且往往揭示出新的效应,开拓出新的领域,从而推动了整个科学技术的向前发展。

1.1 晶体的周期性和空间点阵

1.1.1 晶体与晶体学

人们对晶体的认识是从认识自然晶体开始的。对晶体的认识经历了一个由感性到理性、由宏观到微观、由现象到本质的过程,这种认识过程是随着人们对自然界认识的不断深入而发展的。

最初,人们认为,凡是具有规则几何外形的天然矿物,均称为晶体,但在今天看来,这个定义显然是不够严谨的。尽管晶体的实际外形是千变万化的,但影响晶体外形的主要因素只有两个方面,即晶体的内部结构与晶体生长的物理化学条件。若将一个外形不规则的晶体放入生长液中,在适宜的条件下,使其自由生长,最终将形成具有规则几何外形的晶体。晶体的这种性质是受其内部结构规律所支配的,晶体规则的几何外形是晶体内部结构规律的外在反映。

X射线衍射的结果表明,一切固体物质,不论其外形及透明度如何,不论是单质还是化合物,是天然的还是人工合成的,只要是晶体,它的结构基元(原子、分子、离子或配位离子等)都具有长程有序的排列。玻璃、石蜡和沥青等,虽然也都是固体的物质,但它们的结构基元仅具有短程有序的排列(即一个结构基元在微观小范围内,与其邻近的几个结构基元间保持着有序的排列),而没有长程有序的排列,这些固体物质均称为非晶体。由于非晶体不能自发地生长成规则的几何外形,因而非晶体固体又称为无定形体。但晶体与无定形体之间要划分一绝对的界限也是困难的。有些物质(有机高聚物)的性质介于晶体与无定形体之间,其结构基元的排列具有一维或二维近似长程有序,处于这种状态的物质,称为液晶,或简称液晶。液晶是介于固态和液态之间的各向异性的流体,是一种具有特定分子结构的有机化合物凝聚体。通常固态有机晶体被加热后变成各向同性的透明液体。但某些固体有机物加热至 T_1 温度后变成黏稠状而稍有些浑浊的各向异性液体(即为液晶);若再加热至 T_2 温度则变成各向同性的透明液体。液晶物质的分子基本是细长的,最早发现的液晶是胆留醇苯甲酸酯 $C_{27}H_{45}O \cdot CO \cdot C_6H_5$, 其 T_1 温度是 146°C , T_2 温度是 178.5°C 。人们可以利用液晶的物理及化学性质,广泛应用的液晶显示器具有如下特点:电力消耗低、显示鲜明、分辨率高、可靠性高、品质优良、成本低、光电效应快(0.1s)以及热稳定性好等。

在实际晶体中，结构基元均按着理想、完整的长程有序的排列是不可能的，而晶体中总是或多或少地存在着不同类型的结构缺陷，因此就形成了长程有序中的无序成分，当然，长程有序还是基本的。晶体结构基元的长程有序排列包含着结构缺陷。

地球上大部分固体物质都是晶体结构的，在其他天体上也不断地进行着晶体形成和破坏的演变过程，甚至在整个宇宙中，也广泛的存在着晶体物质，如飞落到地球上的陨石基本上也是由晶体组成的。晶体也存在于有生命的物质中，所以在探索生命起源的研究中，也日益显示其重要作用。如蛋白质是形成动物组织的主要物质。早在 20 世纪 60 年代，我国的科学工作者首次用人工方法生长出世界上第一块纯净的蛋白质晶体，并出色地测定了它的晶体结构，使得晶体结构的测定工作和生物的活动过程在微观尺度上联系起来。

晶体中原子的周期排列促成晶体具有一些共同的性质：均匀性，即晶体不同部位的宏观性质相同；各向异性，即在晶体中不同方向上具有不同的性质，如表 1-1 所示；有限性，即晶体具有自发地形成规则几何外形的特性；对称性，即晶体在某些特定方向上所表现的物理化学性质完全相同以及具有固定的熔点等，而固态非晶体自液体冷却时，尚未转变为晶体就凝固了，它实质是一种过冷的液体结构，往往称为玻璃体，故液-固之间的转变温度不固定。

表 1-1 单晶体的各向异性

类 别	弹性模量/MPa		拉伸强度/MPa		延伸率/%	
	最大	最小	最大	最小	最大	最小
Cu	191000	66700	346	128	55	10
α -Fe	293000	125000	225	158	80	20

晶体与非晶体在一定的条件下可以相互转化，如玻璃调整其内部结构基元的排列方式可以向晶体转化，称为退玻璃化或晶化。晶体内部结构基元的周期性排列遭到破坏，也可以向非晶体转化，称为玻璃化或非晶化。含有放射性元素的矿物晶体，由于受到放射性蜕变时所发出的 α 射线的作用，晶体结构遭到破坏而转化为非晶矿物。

当晶体内部的结构基元为长程有序排列且处于平衡位置时，其内能为最小。对于同一物质的不同凝聚态来说，晶体是最稳定的。因此，晶体玻璃化作用的发生，必然与能量的输入或物质成分的变化相关联。但晶化过程却完全可以自发产生，从而转向更加稳定的晶态。

一块晶体中，若其内部的原子排列的长程有序规律是连续的，则称为单晶体。若某一固体物质是由许许多多的晶体颗粒所组成，则称之为多晶体。晶粒间的分界面，称为晶面或界面。多晶体和单晶体一样具有 X 射线衍射效应，有固定的熔点，但显现不出晶体的各向异性（如果多晶内晶粒排布是随机的话）。多晶的物理性质不仅取决于所包含晶粒的性质，而且晶粒的大小及其相互间的取向关系也起着重要的作用。工业上所用的大多数金属和合金都是多晶体。

晶体学是一门研究晶体的自然科学。它研究晶体的成核与生长过程；研究晶体的外部形态和内部结构；研究实际晶体结构与其物理性质的相互关系等。如今它也被广泛地应用于自然科学和应用科学领域中，它与化学、物理学、冶金学、材料科学、分子生物学和固体电子学等学科关系十分密切。

晶体学开始是从研究自然界矿物晶体而发展起来的，最初，晶体学是矿物学的一个分支，随着人们对晶体观察研究的深化，发现晶体分布范围大大超出矿物晶体范畴，从而使晶体学由矿物学中解脱出来，单独成为一门学科。尤其到 19 世纪，德国学者赫塞尔推导出晶体外形对称性的 32 种点群；在此基础上，前苏联晶体学者费道罗夫又首先导出描述晶体结构的 230 种空间群，从而使晶体结构的点阵理论基本成熟。但是一直到 19 世纪末，点阵理

论未能被实验所证实。

1912 年，德国科学家劳厄（Max Van Laue）成功地发现了 X 射线晶体的衍射现象，具体地证实了晶体结构点阵理论的正确性，这一开创性成果奠定了近代晶体学的基础，由于劳厄这一实验成果，因而便兴起了一门新的学科——X 射线晶体学。随后，在化学中出现了结晶化学。1913 年，英国晶体学家布拉格父子（W. H Bragg、W. L Bragg）提出了 X 射线衍射的最基本公式——布拉格公式，开始了晶体结构分析的工作。到 20 世纪 40 年代，各类有代表性的无机物和不大复杂的有机物的晶体结构，大多数已得到测定，并总结出原子间的键长、键角和分子构型等重要科学资料。20 世纪 60 年代，人们成功地测定了蛋白质大分子晶体结构。它标志着晶体结构分析工作已达到新的水平。近二十年来，研究者又采用了电子学和计算数学中的新技术与新成就，使晶体结构分析测定的精度、速度和广度得到了更进一步的提高。

近代科学的许多领域的进展都和近代晶体学密切相关。除了物理、化学等基础学科外，一些尖端科学技术，如自动化技术、红外遥感技术、电子计算机技术和空间技术等，都各有它所需要的特殊晶体材料。因此材料科学在较大程度上得力于晶体结构理论所提供的观点与知识。各种材料，不管它是金属、合金材料、陶瓷材料、高聚合物材料，还是单晶材料，它们都存在着内部结构、物相组成和结构与性能关系等问题，即它们有个共同相关的问题，这种问题就是近代晶体学中需要研究和解决的问题。通过这个问题的解决，就可以把晶体材料和应用联系起来了。可以说，近代晶体学是材料科学的基础之一。

1.1.2 晶体点阵与空间点阵

晶体结构是指组成晶体的结构基元（分子、原子、离子、原子集团）依靠一定的结合键结合后，在三维空间作有规律的周期性的重复排列方式。由于组成晶体的结构基元不同，排列的规则不同，或者周期性不同，所以它们可以组成各种各样的晶体结构，即实际存在的晶体结构可以有无限多种。应用 X 射线衍射分析法，我们可以测定各种晶体的结构，但由于晶体结构种类繁多，不便于对其规律进行全面地系统性研究，故人为地引入一个几何模型，用科学的抽象建立一个三维空间的几何图形（即空间点阵），以此来描述各种晶体结构的规律和特征。下面我们举例分析如何将晶体结构抽象为空间点阵，并说明它们之间的关系。

NaCl 是由 Na^+ 和 Cl^- 所组成。人们实际测定出在 NaCl 晶体中 Na^+ 和 Cl^- 是相间排列的，NaCl 晶体结构的平面图形和平面图形分别如图 1-1、图 1-2 所示。所有 Na^+ 的上下、前后、左右均为 Cl^- ；所有 Cl^- 的上下、前后、左右均为 Na^+ 。两个 Na^+ 之间的周期分别为 0.5628nm 和 0.3978nm，即不同方向上周期不同。两个 Cl^- 之间的周期亦如此。可以发现，每一个 Na^+ 中心点在晶体结构中所处的几何环境和物质环境都是相同的， Cl^- 也同样如此。我们将这些在晶体结构中占有相同几何位置且具有相同物质环境的点都称其为等同点。除 Na^+ 中心点和 Cl^- 中心点之外，尚存在很多类等同点，例如 Na^+ 和 Cl^- 相接触的 X 点也是一类等同点。但 Na^+ 中心点、 Cl^- 中心点和 X 点彼此不是等同点。如果将晶体结构中某一类等同点挑选出来，它们有规则地、周期性重复排列所形成的空间几何图形即称为空间点

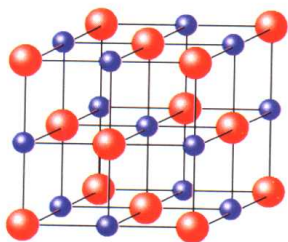


图 1-1 NaCl 结构空间图形

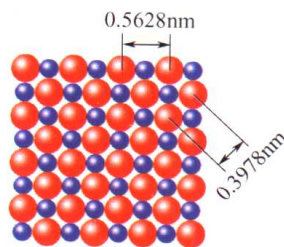


图 1-2 NaCl 结构平面图形

阵，简称点阵。构成空间点阵的每一个点称之为结点或阵点。由此可知，每一个阵点都是具有等同环境的非物质性的单纯几何点，而空间点阵是从晶体结构中抽象出来的非物质性的空间几何图形，它很明确地显示出晶体结构中物质质点排列的周期性和规律性。

我们也可以这样理解空间点阵和晶体结构的关系：如果在空间点阵的每一个阵点处都放上一个结构基元，这个结构基元可以由各种原子、离子、分子或原子集团所组成，则此时空间点阵就变为晶体结构。由于结构基元可以是各种各样的，所以不同的晶体结构可以属于同一空间点阵，而相似的晶体结构又可以分属于不同的空间点阵。例如 Cu、NaCl、金刚石为三种不同的晶体结构，但它们均属于同一空间点阵类型——面心立方点阵。其中，组成金刚石结构的虽然都是碳原子，但●和●两类碳原子不属于同种等同点，它们的几何环境不相同，如图 1-3 所示。反之，如果将●—●看作是一个结构基元，在面心立方点阵的每个结点上放上一个结构基元●—●，则构成金刚石结构。在图 1-4 中，铬是体心立方点阵，而氯化铯属于简单立方点阵。由此看来，晶体结构和空间点阵是两个完全不同的概念，晶体结构是指具体的物质粒子排列分布，它的种类有无限多；而空间点阵只是一个描述晶体结构规律性的几何图形，它的种类却是有限的。二者关系可以表述为：

$$\text{空间点阵} + \text{结构基元} \longrightarrow \text{晶体结构}$$

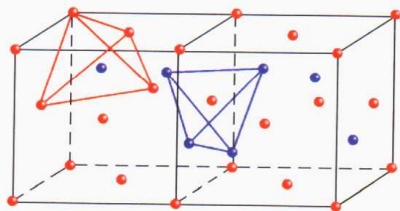


图 1-3 金刚石结构中不等同的两类碳原子

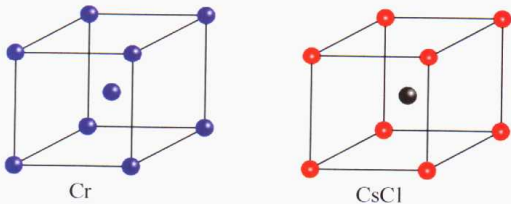


图 1-4 结构相似的不同点阵

在研究晶体材料时，还常常应用晶体点阵的概念。当把空间点阵的结点不再当作单纯的几何点而作为物质质点的中心位置，此时它仍然是一个规则排列的点阵，但其意义发生了变化，从单纯的几何图形变成了具有物质性的点的阵列，称其为晶体点阵。晶体点阵是晶体结构的一种理想形式，它忽略了原子的热振动和晶体缺陷，突出了构成晶体的物质质点的对称性和周期性。图 1-5 所示是几种晶体点阵的平面图 (a)、(b)、(c) 和它们的空间点阵 (d)。

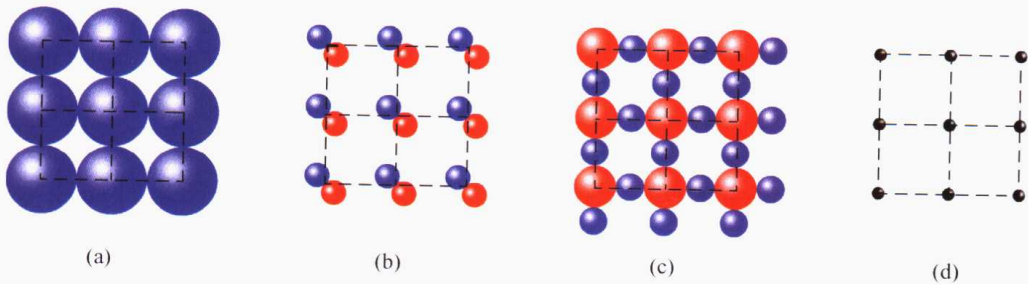


图 1-5 几种晶体点阵的平面图 (a)、(b)、(c) 和它们的空间点阵 (d)

图 1-6 (a) ~ (e) 所示分别为 γ -Fe、金刚石、NaCl、 CaF_2 、ZnS 五种晶体的晶体结构、空间点阵和结构基元，尽管它们的晶体结构完全不同，但是它们的点阵类型相同，都是面心立方。

一个空间点阵若用不在同一平面上的三个方向的平行直线束串接起来，就称之为空间格子，如图 1-7 所示。空间格子中每个点称之为格点。在一般文献中，空间点阵和空间格子通常不加区别。

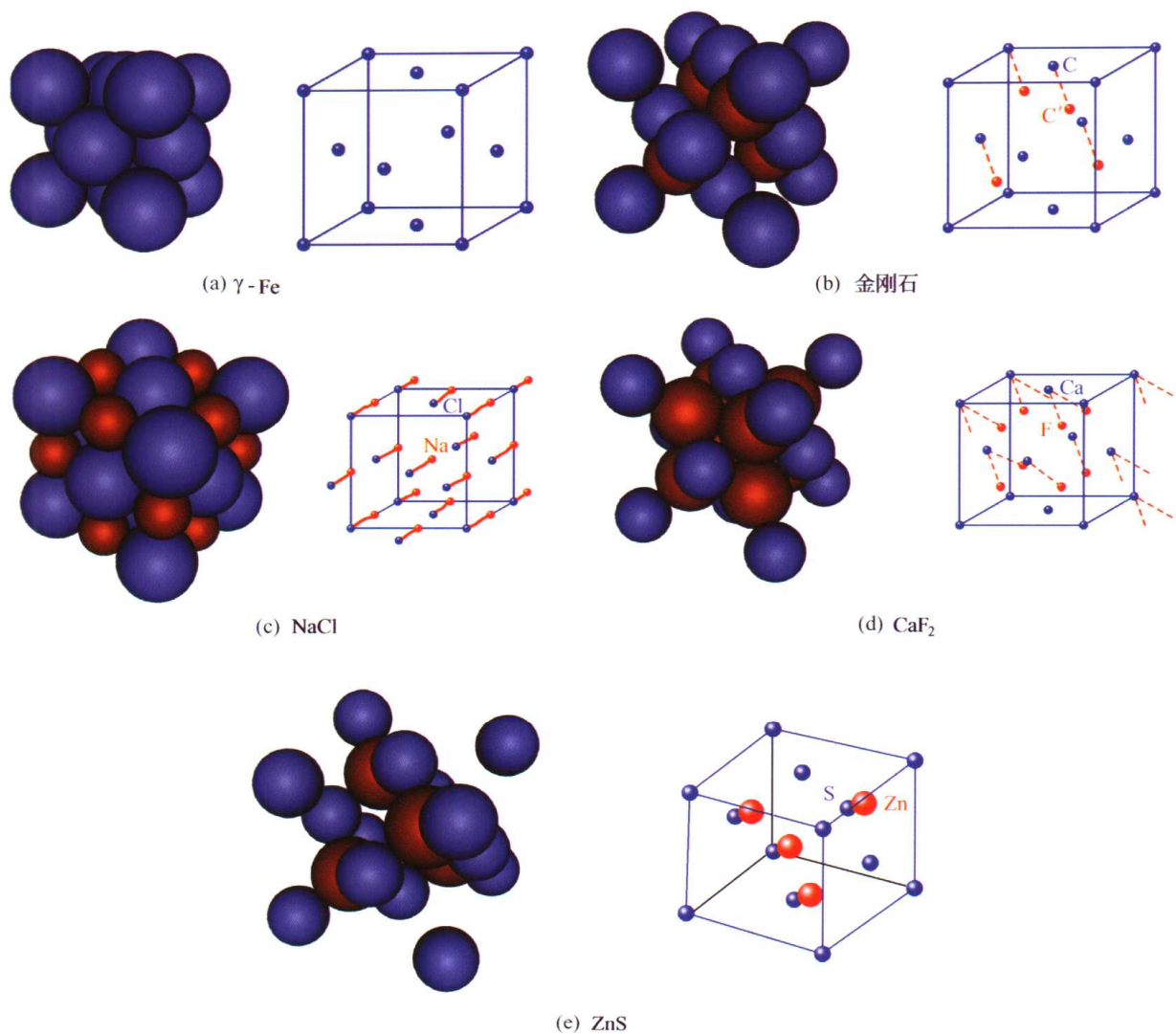


图 1-6 五种晶体结构的点阵分析

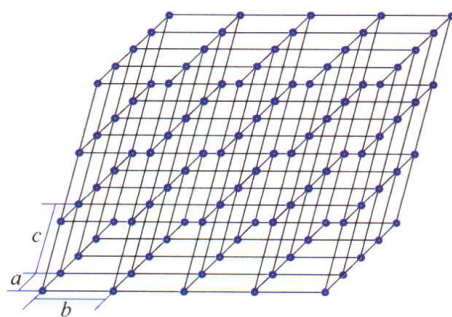


图 1-7 空间格子

1.2 布拉菲点阵

空间点阵到底有多少种排列形式？按照“每个阵点的周围环境相同”的要求，在这样一个限定条件下，法国晶体学家布拉菲（A. Bravais）曾在 1848 年首先用数学方法证明，空间点阵只有 14 种类型。这 14 种空间点阵以后就被称为布拉菲点阵。

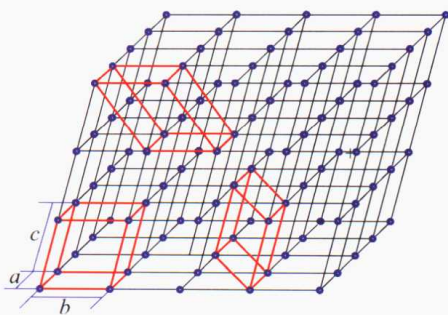


图 1-8 空间点阵及晶胞的不同取法

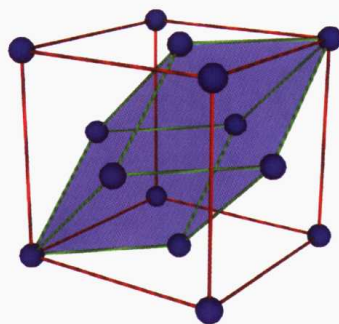


图 1-9 面心立方点阵中的固体物理单胞

空间点阵是一个三维空间的无限图形，为了研究方便，可以在空间点阵中取一个具有代表性的基本小单元，这个基本小单元通常是一个平行六面体，整个点阵可以看作是由这样一个平行六面体在空间堆砌而成，我们称此平行六面体为单胞。当要研究某一类型的空间点阵时，只需选取其中一个单胞来研究即可。在同一空间点阵中，可以选取多种不同形状和大小的平行六面体作为单胞，如图 1-8 所示。一般情况下，单胞的选取有以下两种选取方式。

(1) 固体物理选法 在固体物理学中，一般选取空间点阵中体积最小的平行六面体作为单胞，这样的单胞只能反映其空间点阵的周期性，不能反映其对称性。如面心立方点阵的固体物理单胞并不反映面心立方的特征，如图 1-9 所示。

(2) 晶体学选法 由于固体物理单胞只能反映晶体结构的周期性，不能反映其对称性，所以在晶体学中，规定了选取单胞要满足以下几点原则（如图 1-10 所示）：

- ① 要能充分反映整个空间点阵的周期性和对称性；
- ② 在满足①的基础上，单胞要具有尽可能多的直角；
- ③ 在满足①、②的基础上，所选取单胞的体积要最小。

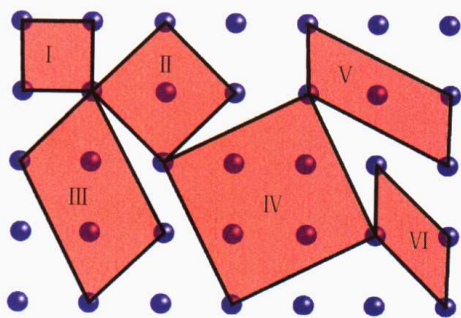


图 1-10 晶体学选取晶胞的原则

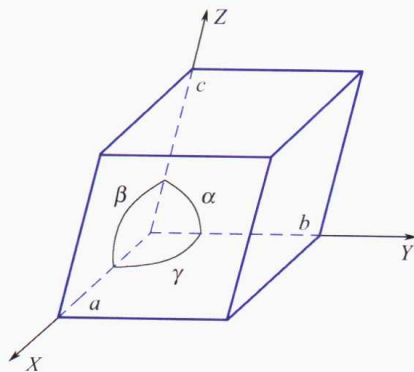


图 1-11 单晶胞及晶格参数

根据以上原则，所选出的 14 种布拉菲点阵的单胞（见图 1-12）可以分为两大类。一类为简单单胞，即只在平行六面体的 8 个顶点上有结点，而每个顶点处的结点又分属于 8 个相邻单胞，故一个简单单胞只含有一个结点。另一类为复合单胞（或称复杂单胞），除在平行六面体顶点位置含有结点之外，尚在体心、面心、底心等位置上存在结点，整个单胞含有一个以上的结点。14 种布拉菲点阵中包括 7 个简单单胞，7 个复合单胞。

根据单胞所反映出的对称性，可以选定合适的坐标系，一般以单胞中某一顶点为坐标原点，相交于原点的三个棱边为 X 、 Y 、 Z 三个坐标轴，定义 X 、 Y 轴之间夹角为 γ ， Y 、 Z 之间夹角为 α ， Z 、 X 轴之间夹角为 β ，如图 1-11 所示。单胞的三个棱边长度 a 、 b 、 c 和它们之间夹角 α 、 β 、 γ 称为点阵常数或晶格参数。6 个点阵常数，或者说 3 个点阵矢量 a 、 b 、 c