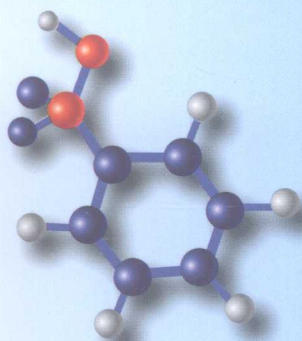




21世纪全国高等院校材料类**创新型**应用人才培养规划教材



MATERIALS

材料科学基础

主 编 张晓燕

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 基 础

主 编	张 晓 燕	
副 主 编	于 杰	卫 广 智
参 编	雷 源 源	鲁 圣 军
	田 琴	马 瑞
	万 明 攀	



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

内 容 简 介

本书全面系统地介绍了材料科学的基本问题,全书共分为11章,以金属材料为主,分析金属材料的成分、组织结构、加工工艺与性能之间的关系及其变化规律,其主要内容包括:金属的晶体结构、晶体缺陷、材料的形变、相图、扩散、凝固以及回复再结晶等,着重于基本概念和基本理论。在此基础上介绍陶瓷材料、高分子材料以及复合材料,为学习和研究各种材料提供了必要的基础知识。

本书既可作为材料科学与工程专业或相关专业大学本科生的教材,也可作为从事材料研究、生产及应用的科研人员和工程技术人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学基础/张晓燕主编. —北京:北京大学出版社,2009.8

(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 978-7-301-15565-3

I. 材… II. 张… 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(2009)第127583号

书 名:材料科学基础

著作责任者:张晓燕 主编

策 划 编 辑:童君鑫

责 任 编 辑:李 楠

标 准 书 号:ISBN 978-7-301-15565-3/TG·0002

出 版 者: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> <http://www.pup6.com>

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

电 子 邮 箱:pup_6@163.com

印 刷 者:三河市欣欣印刷有限公司

发 行 者:北京大学出版社

经 销 者:新华书店

787毫米×1092毫米 16开本 20.5印张 474千字

2009年8月第1版 2009年8月第1次印刷

定 价:32.00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

电子邮箱: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)	陈华辉 (中国矿业大学)
崔占全 (燕山大学)	杜彦良 (石家庄铁道学院)
杜振民 (北京科技大学)	耿桂宏 (北方民族大学)
关绍康 (郑州大学)	胡志强 (大连工业大学)
李楠 (武汉科技大学)	梁金生 (河北工业大学)
林志东 (武汉工程大学)	刘爱民 (大连理工大学)
刘开平 (长安大学)	芦笙 (江苏科技大学)
石海芳 (辽宁工程技术大学)	孙凤莲 (哈尔滨理工大学)
孙玉福 (郑州大学)	万发荣 (北京科技大学)
王春青 (哈尔滨工业大学)	王峰 (北京化工大学)
王金淑 (北京工业大学)	卫英慧 (太原理工大学)
伍玉娇 (贵州大学)	夏华 (重庆理工大学)
徐鸿 (华北电力大学)	余心宏 (西北工业大学)
张朝晖 (北京理工大学)	张光胜 (安徽工程科技学院)
张敏刚 (太原科技大学)	张锐 (郑州航空工业管理学院)
张晓燕 (贵州大学)	赵惠忠 (武汉科技大学)
赵莉萍 (内蒙古科技大学)	赵玉涛 (江苏大学)

前 言

能源、信息、材料被认为是 21 世纪国民经济的三大支柱，其中材料是各行各业的基础，可以说，没有先进的材料，就没有先进的工业、农业和科学技术。材料科学是研究材料的成分、组织结构、制备工艺与材料性能及应用之间相互关系的学科。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。由于某些新材料的出现，成功地推动了社会的进步，提高了人类的物质文明。人类文明的发展史，就是一部如何更好地利用材料和创造材料的历史。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。因此材料科学与工程专业担负着为国民经济建设培养新材料领域高级技术人才的使命。

本书是根据材料科学与工程一级学科办学的专业基础课教学实际需要，结合作者多年来从事本门课程的教学实践和体会，本着加强基础理论、淡化专业和拓宽口径的宗旨编写的，主要作为材料科学与工程专业的专业基础课教材。

本书是材料科学与工程专业本科生的一门重要专业基础课。以介绍材料的基础知识为目的，主要内容包括：材料的微观结构、晶体缺陷、材料的形变、相图、固体中原子的扩散、凝固以及再结晶等。本书着重于基本概念和基础理论，从材料的内部结构探讨其性质与行为，揭示材料结构与性能的内在联系及规律，为认识和改进材料的性能提供必备的基础知识。

随着我国现代化建设的不断发展，材料科学与工程的应用越来越广，它渗透到与材料制备、结构、性质和应用有关的许多领域，多学科性成为材料科学与工程的一种重要特征。未来科学技术的综合化趋势对人才培养提出了新的要求，材料专业的学生除了要熟悉金属材料外，还需要了解陶瓷材料、高分子材料和复合材料。为了建立更为宽广的基础知识体系，本书以金属材料为主，在此基础上介绍了陶瓷材料、高分子材料和复合材料，为学习和研究各种材料提供了必要的基础知识。

本书对材料科学基本概念和基本原理进行系统阐述，力求教材内容的科学性、简洁性和实用性，尤其在章节安排上，注意了本课程的系统性及其与相关课程的衔接。本书内容由 11 章组成：第 1~8 章为金属材料，包括晶体结构、晶体缺陷、形变、相图、扩散、凝固和再结晶；第 9 章为陶瓷材料，包括陶瓷结构、缺陷、相图和变形；第 10 章为高分子材料，包括概论、高分子结构和重要高分子材料等；第 11 章为复合材料，包括复合材料增强体、金属基复合材料、陶瓷基复合材料和聚合物基复合材料。

本书由张晓燕教授主编。本书的编写者为贵州大学张晓燕教授(第 4、5 章)，国家复合改性聚合物材料工程技术研究中心于杰教授(第 10.1、10.2、10.4 节)，贵州大学卫广智(第 2、3 章)，贵州大学雷源源(第 1 章和第 9 章，第 11 章)，贵州大学鲁圣军(第 10.3 节)，贵州大学田琴(第 6 章)，贵州大学马瑞(第 7 章)，贵州大学万明攀(第 8 章)。



在本书编写过程中，编者参阅引用了国内外相关优秀教材及文献资料，在此谨向相关著作者表示真诚的谢意！

由于编者水平有限，书中不当之处在所难免，恳请读者批评指正。

编 者

2009 年 6 月

目 录

第 1 章 金属的晶体结构	1	2.3.3 作用在位错上的力和位错 的运动	50
1.1 原子间的键合	2	2.3.4 位错的应力场及位错与 晶体缺陷间的交互作用	53
1.1.1 离子键	2	2.3.5 位错的分解与合成	61
1.1.2 共价键	3	2.4 材料中的面缺陷	64
1.1.3 金属键	3	2.4.1 固体表面	65
1.1.4 范德瓦尔斯键	4	2.4.2 固体界面	68
1.1.5 氢键	4	习题	75
1.2 晶体学基础	5	第 3 章 材料的形变	78
1.2.1 空间点阵	5	3.1 引言	79
1.2.2 晶向指数和晶面指数	9	3.2 金属材料的形变	79
1.2.3 晶体的对称性	13	3.2.1 金属形变基础	79
1.2.4 极射投影	16	3.2.2 金属的弹性形变	81
1.3 纯金属的晶体结构	19	3.2.3 滑移系统	82
1.3.1 三种典型的金属晶体 结构	19	3.2.4 单晶体的塑性形变	85
1.3.2 金属的多晶型性	25	3.2.5 多晶体的塑性形变	88
1.4 合金相结构	25	3.2.6 塑性形变对金属材料组织与 性能的影响	91
1.4.1 固溶体	25	习题	94
1.4.2 中间相	32	第 4 章 二元合金相图及其分类	96
习题	36	4.1 相图的基本知识	97
第 2 章 晶体缺陷	38	4.1.1 相平衡和相律	97
2.1 引言	39	4.1.2 二元相图的测定方法	98
2.2 点缺陷	39	4.1.3 杠杆定律	99
2.2.1 点缺陷的形成	39	4.2 匀晶相图及固溶体凝固	100
2.2.2 非化学计量结构缺陷	40	4.2.1 匀晶相图分析	100
2.2.3 点缺陷的平衡浓度	41	4.2.2 匀晶转变过程	101
2.2.4 点缺陷的运动	43	4.2.3 不平衡结晶过程	101
2.3 位错	43	4.3 共晶相图及其结晶过程	102
2.3.1 位错的基本类型和特征	44		
2.3.2 柏氏回路及柏氏矢量	46		



4.3.1 共晶相图	102	5.4.2 组元在固态有限溶解, 具有 共晶转变的相图	148
4.3.2 共晶系典型合金的平衡结晶 过程及其组织	103	5.5 三元合金相图实例分析	154
4.3.3 共晶系典型合金的非平衡 结晶及其组织	107	5.5.1 Fe-C-Si 三元系的变温 截面	154
4.4 包晶相图及其合金凝固	109	5.5.2 Fe-C-Cr 三元系的等温 截面	155
4.4.1 包晶相图	109	5.6 三元相图小结	157
4.4.2 包晶合金的平衡结晶 过程及其组织	110	习题	160
4.4.3 包晶合金的不平衡 结晶过程	111	第6章 固体金属中的扩散	162
4.5 其他类型的二元合金相图	112	6.1 表象理论	163
4.6 二元相图的分析和使用	116	6.1.1 菲克第一定律	163
4.6.1 二元合金相图分析 方法	116	6.1.2 菲克第二定律	163
4.6.2 根据相图推测合金 的性能	118	6.1.3 菲克第二定律的应用	164
4.7 铁碳相图	119	6.1.4 互扩散	169
4.7.1 铁碳相图的组元与 基本相	119	6.1.5 反应扩散	171
4.7.2 Fe-Fe ₃ C 相图分析	121	6.2 扩散的热力学分析	172
4.7.3 铁碳合金的平衡结晶过程 及组织	123	6.2.1 扩散驱动力	172
4.7.4 含碳量对铁碳合金平衡 组织和性能的影响	129	6.2.2 扩散原子迁移率	172
习题	131	6.3 扩散的微观机理	173
第5章 三元合金相图	132	6.3.1 扩散机制	173
5.1 三元合金相图的表示方法	133	6.3.2 晶体中原子的跳动 与扩散系数	175
5.2 三元系平衡相的定量法则	135	6.3.3 扩散激活能	177
5.2.1 直线法则和杠杆定律	135	6.4 影响扩散的因素	178
5.2.2 重心定律	136	6.4.1 温度	178
5.3 三元匀晶相图	137	6.4.2 晶体结构	179
5.3.1 相图的空间模型	137	6.4.3 成分	179
5.3.2 固溶体合金的结晶 过程	137	6.4.4 应力	181
5.3.3 三元相图的截面图及 投影图	138	习题	181
5.4 三元共晶相图	141	第7章 金属和合金的凝固	183
5.4.1 组元在固态下完全不溶的 共晶相图	141	7.1 纯晶体的凝固	184
		7.1.1 液态金属的结构	184
		7.1.2 纯金属的凝固过程	184
		7.1.3 凝固的热力学条件	185
		7.1.4 晶核的形成	186
		7.1.5 晶核的长大	191
		7.2 合金的凝固	195

7.2.1 平衡分配系数	195	9.2.1 离子晶体的结构规则	228
7.2.2 平衡凝固	195	9.2.2 陶瓷的晶体结构	230
7.2.3 非平衡凝固	196	9.3 陶瓷的晶体缺陷	239
7.2.4 固溶体合金凝固时溶质 的再分配	198	9.3.1 点缺陷	239
7.2.5 合金凝固中的成分 过冷	202	9.3.2 位错	241
7.3 铸锭的组织与缺陷	205	9.4 陶瓷材料的相图	242
7.3.1 铸锭三晶区	205	9.4.1 $\text{SiO}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3$ 相图	242
7.3.2 铸锭的缺陷	207	9.4.2 $\text{CaO} - \text{SiO}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3$ 三元 相图	243
习题	209	9.5 陶瓷材料的变形	244
第8章 回复与再结晶	210	9.5.1 陶瓷晶体的塑性变形	244
8.1 冷变形金属在加热时的组织 与性能变化	211	9.5.2 非晶体陶瓷的变形	246
8.1.1 显微组织的变化	211	9.5.3 陶瓷增韧	248
8.1.2 冷变形金属中的储存能 的变化	211	习题	249
8.1.3 性能的变化规律	212	第10章 高分子材料	251
8.2 回复	213	10.1 高分子材料概述	252
8.2.1 回复过程中微观结构的 变化	213	10.1.1 高分子材料的基本 概念	252
8.2.2 回复动力学	214	10.1.2 高分子材料的分类	253
8.3 再结晶	215	10.2 高分子材料的制备	255
8.3.1 形核与长大	216	10.2.1 连锁聚合	255
8.3.2 再结晶动力学曲线	217	10.2.2 逐步聚合反应	259
8.3.3 再结晶温度及其影响 因素	219	10.2.3 高分子共混物的制备	260
8.3.4 再结晶晶粒大小的 控制	220	10.3 高分子材料的结构	264
8.3.5 再结晶后的晶粒长大	221	10.3.1 分子的链结构	264
8.4 金属的热加工	222	10.3.2 高分子材料的聚集态 结构	266
8.4.1 动态回复和动态 再结晶	223	10.3.3 高分子材料共混物的 形态结构	273
8.4.2 热加工后金属的组织与 性能	224	10.4 高分子材料的性能和断裂	275
习题	224	10.4.1 高分子材料的力学 性能	275
第9章 陶瓷材料	226	10.4.2 高分子材料的断裂	279
9.1 陶瓷材料概论	227	10.4.3 高分子材料的耐热 性能	283
9.2 陶瓷的晶体结构	228	习题	284
		第11章 复合材料	286
		11.1 复合材料概论	287
		11.1.1 复合材料的发展概况	287



11.1.2 复合材料的命名和分类	287
11.2 复合材料的增强体	288
11.2.1 增强体的概念	288
11.2.2 增强体的分类及原理 ...	289
11.3 金属基复合材料	295
11.3.1 金属基复合材料的种类和性能	296
11.3.2 金属基复合材料的制造工艺	299
11.4 陶瓷基复合材料	300
11.4.1 陶瓷基复合材料的种类	300
11.4.2 陶瓷基复合材料的性能特征	303
11.5 聚合物基复合材料	305
11.5.1 聚合物基复合材料的种类和性能特点	305
11.5.2 几种常用的纤维增强体	306
11.5.3 热固性和热塑性聚合物基复合材料	311
习题	313
参考文献	315

第 1 章

金属的晶体结构



本章教学要点

知识要点	掌握程度	相关知识
原子间的键合	熟悉原子间结合键分类及其特点，重点掌握金属键	元素性质、原子结构和该元素在周期表中的位置三者之间的关系； 元素的电负性
空间点阵	掌握空间点阵的概念、特点，以及与晶体结构的联系与区别	晶胞的选取以及点阵常数。 七大晶系； 14 种布拉菲点阵
晶向指数和晶面指数	掌握晶面、晶向指数的标定方法。若给出晶体中具体的晶向、晶面时会标注“指数”；若给出具体的“指数”时，能在三维空间图上找出其位置	晶向族和晶面族的含义； 晶带轴的求法； 晶面间距和晶面夹角
三种典型的金属晶体结构	熟悉三种典型金属晶体结构（bcc、fcc、hcp）的晶体学特点	金属的多晶型性
合金相结构	掌握固溶体和中间相的分类及其结构特点	合金以及相的基本概念



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晶体中原子(分子或离子)的排列方式有关,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 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。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,这就是由于碳原子之间具有不同的键合方式。

根据结合键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(或称一次键),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(或称二次键),包括范德瓦尔斯键和氢键。下面一一介绍。

1.1.1 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,使两者都得到稳定的电子结构,从而降低了体系的能量,此时金属元素和非金属元素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。所以这种结合的基本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,而内层电子数为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。

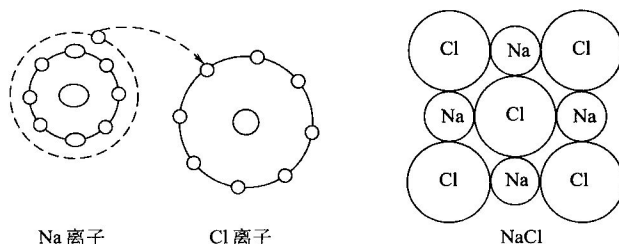


图 1.1 NaCl 的离子键

一般离子晶体中正负离子静电引力较强,所以有较高熔点。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。

1.1.2 共价键

所谓共价键，就是由两个或多个电负性相差不大的原子间通过共用电子对而形成的化学键。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，相邻原子间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。一般来说，两个相邻原子只能共用一对电子，一个原子的共价键数，即可以与它成共价结合的原子数最多只能等于 $8 - N$ （ N 表示这个原子最外层电子数），所以共价键具有明显的饱和性。此外，在形成共价键时，为使电子云达到最大限度的重叠，共价键还有方向性，例如，在金刚石中，每一个碳原子周围都有4个碳原子各成一定角度和它相邻。

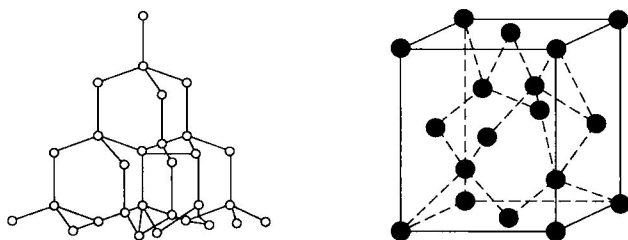


图1.2 金刚石的原子结合(圆点代表C原子)

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。

1.1.3 金属键

典型金属原子结构的特点是，其最外层电子数很少，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中而形成电子云。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合称为金属键。如图1.3所示，绝大多数金属均以金属键方式结合，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。

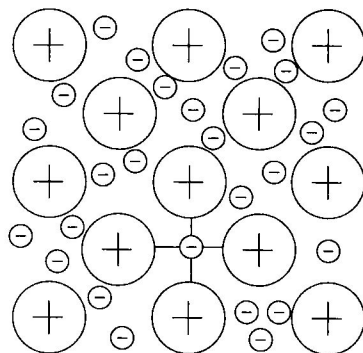


图1.3 金属键示意图

根据金属键的这些本质特征，可以解释固态金属的一些特性。例如，在外电场作用下，金属中的自由电子能沿着电场方向作定向运动，形成电流，从而使金属显示出良好的导电性。自由电子的运动和正离子的振动使金属具有良好的导热性。随着温度的升高，正离子(或原子)本身振幅增大，阻碍电子的通过，使电阻升高，因而金属具有正的电阻温度系数。由于自由电子很容易提高可见光的能量，而被激发到较高的能级，当它跳回到原来



的能级时，将所吸收的可见光能量重新辐射出来，从而使金属不透明具有金属光泽。此外，由于金属键没有饱和性和方向性，所以当金属的两部分发生相对位移时，金属的正离子始终被包围在电子云中，金属键仍旧保持，故金属能经受变形而不断裂，使其具有良好的延展性。

1.1.4 范德瓦尔斯键

原子或离子结构中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所引起。电子壳层的非对称移动可以引起动态偶极，偶极之间的相互作用可以产生弱的吸引力，范德瓦尔斯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，如图 1.4 所示。这种很弱的范德瓦尔斯键在性质上是一种静电键。这种偶极波动在所有固体中都有，但范德瓦尔斯结合仅对很少的化

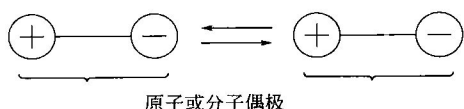


图 1.4 极性分子间的范德瓦尔斯力示意图

合物才是重要的，往往在原来具有稳定的电子结构的原子及分子之间起主要作用，例如，具有满壳层结构的惰性气体元素，或已形成共价结合的分子等，它们结合成晶体时，每个原子或分子基本上保持原来的电子结构。

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。

1.1.5 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。

氢键具有饱和性和方向性，可以存在于分子内或分子间。由氢键结合的 HF、H₂O 及 NH₃ 的熔点和沸点都比范德瓦尔斯键结合的 CH₄ 和 Ne 等高得多。由氢键结合的物体，其液态稳定范围较宽；而范德瓦尔斯键结合的物质，液态的稳定范围较窄。

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。例如金属主要是金属键结合，但也会出现一些非金属键，如过渡族元素，它们的原子结合中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 就给出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	
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
Hg	金属键	68	0.7	-39
Al		324	3.4	660
Fe		406	4.2	1538
W		849	8.8	3410

(续)

物 质	键 合 类 型	键 能		熔融温度/℃
		kJ/mol	eV/原子、离子、分子	
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

1.2 晶体学基础

决定晶体结构类型的内在因素是原子（分子、离子）间结合键的类型以及键的强弱。金属晶体的结合键是金属键，由于金属键没有方向性，使金属内部的原子趋于紧密排列，构成高度对称性的简单晶体结构。本章在介绍晶体学基本知识的基础上，着重讨论金属中3种典型的晶体结构。

1.2.1 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 1.5 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，每个阵点不一定代表一个原子，也就是说，每个阵点可能代表一群原子。但每个阵点都是等同的，周围环境都必须相同。

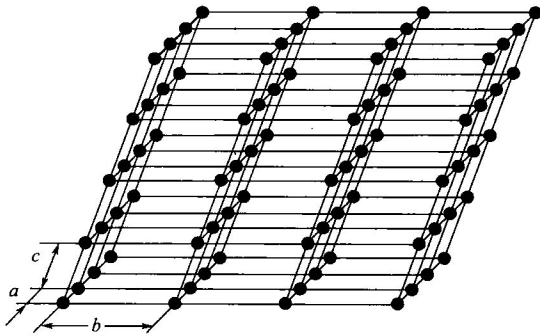


图 1.5 空间点阵的一部分

2. 晶胞

由于各阵点的周围环境相同，空间点阵具有周期性、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)排列的规律性就更为简单明了。但注意，同一空间点阵可因选取方式不同而得到不相同的晶胞，如图 1.6 所示。如何正确选取晶胞呢？其选取原则是：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,亦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3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3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。实际上,采用3个点阵矢量 $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{b}$ 、 $\mathbf{c}$ 来表示晶胞更为方便。这3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3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,即

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

式中, $\mathbf{r}_{uvw}$ 为从原点到某一阵点的矢量; u 、 v 、 w 分别为沿3个点阵矢量的平移量,亦即该阵点的坐标。

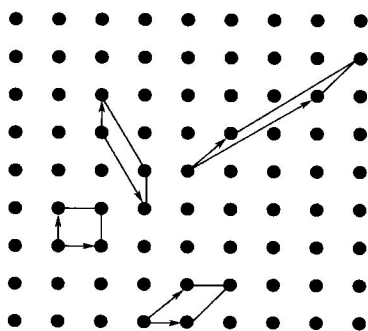


图 1.6 在点阵中选取晶胞

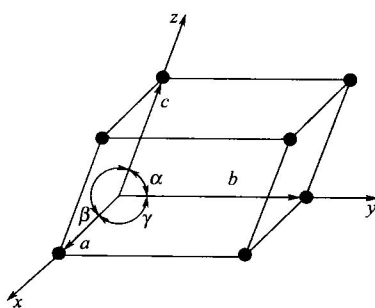


图 1.7 晶胞、晶轴及点阵矢量

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。

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,为了方便研究,引入了“空间点阵”概念,那么点阵究竟有多少种?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(A. Bravais)于1848年用数学方法证明空间点阵只能有14种,故这

14 种空间点阵称为布拉菲点阵。其晶胞如图 1.8 所示，它们分属 7 个晶系，见表 1-3。

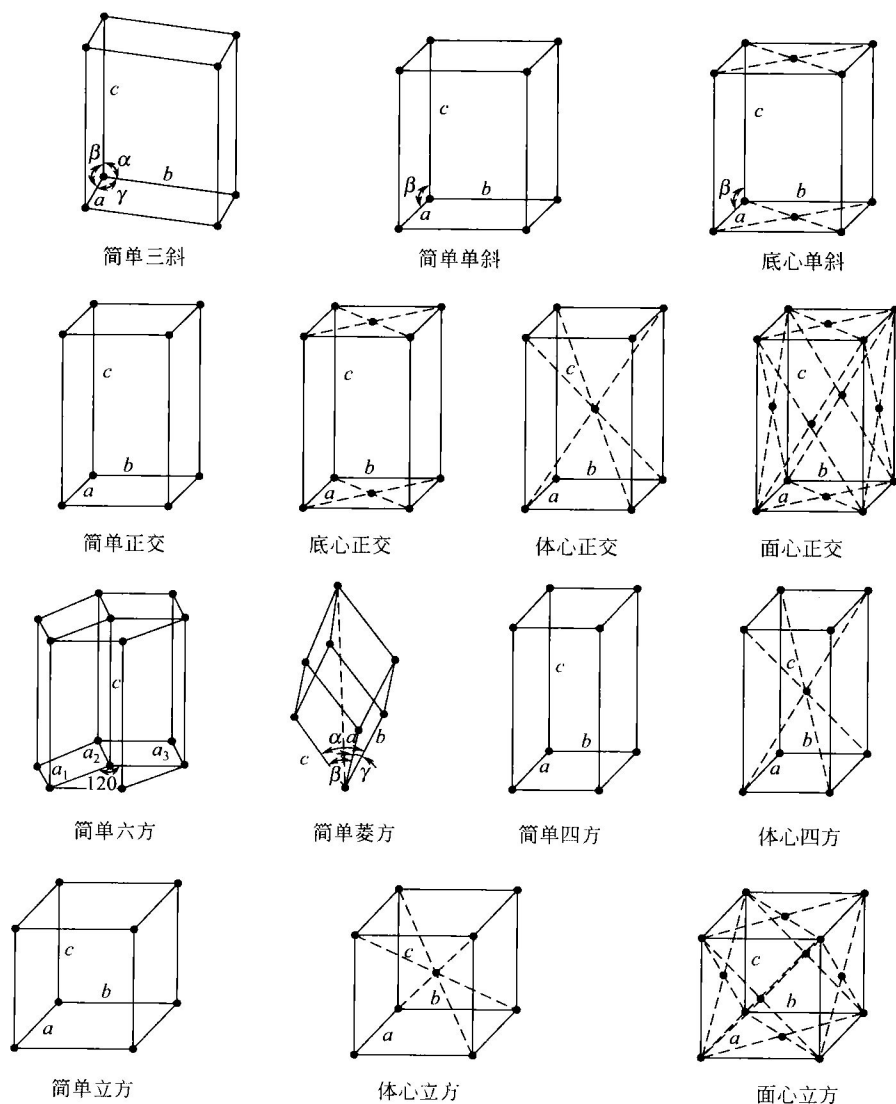


图 1.8 14 种布拉菲点阵

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	单斜	简单菱方	菱方
底心单斜		简单四方	四方
简单正交	正交	体心四方	
底心正交		简单立方	立方
体心正交		体心立方	
面心正交		面心立方	