



普通高等教育“十一五”国家级规划教材



“十二五”江苏省高等学校重点教材
编号：2015-1-038



“十三五”江苏省高等学校重点教材
编号：2018-1-038

材料科学研究 与测试方法

(第4版)

CAILIAO KEJUE YANJIU YU CESHI FANGFA

朱和国 尤泽升 刘吉梓 黄 鸣◎编著
沙 刚◎主审

校外借



东南大学出版社
SOUTHEAST UNIVERSITY PRESS



普通高等教育“十一五”国家级规划教材



“十二五”江苏省高等学校重点教材

编号:2015-1-038



“十三五”江苏省高等学校重点教材

编号:2018-1-038

材料科学研究与测试方法

(第4版)

朱和国 尤泽升 刘吉梓 黄 鸣 编著

沙 刚 主审



东南大学出版社

SOUTHEAST UNIVERSITY PRESS

· 南京 ·

内 容 提 要

本书首先介绍了晶体学基础知识,然后系统介绍了 X 射线的物理基础、X 射线衍射的方向与强度、多晶体 X 射线衍射分析的方法、X 射线衍射仪及其在物相鉴定、宏观应力与晶粒尺寸的测定、多晶体的织构分析、小角 X 射线散射、薄膜应力及厚度测定等方面的应用;介绍了电子衍射的物理基础、透射电子显微镜的结构与原理、衍射成像、运动学衬度理论、高分辨透射电子显微技术、扫描电镜、扫描透射电镜、电子背散射衍射及原子探针等;介绍了 AES、XPS、XRF、STM、AFM、LEED 等常用表面分析技术和 TG、DTA、DSC 等常用热分析技术的原理、特点及其应用;最后简要介绍了红外光谱、拉曼光谱和 ICP 等。书中研究和测试的材料包括金属材料、无机非金属材料、高分子材料、非晶态材料、金属间化合物、复合材料等。对每章内容作了提纲式的小结,并附有适量的思考题。书中采用了一些作者尚未发表的照片和曲线,同时在实例分析中还注重引入了一些当前材料界最新的研究成果。

本书可作为材料科学与工程学科本科生的学习用书,也可供相关学科与专业的研究生、教师和科技工作者使用。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学研究与测试方法 / 朱和国等编著. —4 版.

—南京:东南大学出版社,2019.9

ISBN 978-7-5641-8522-0

I. ①材… II. ①朱… III. ①材料科学—研究方法—高等学校—教材②材料科学—测试方法—高等学校—教材
IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2019)第 179416 号

材料科学研究与测试方法(第 4 版)

Cailiao Kexue Yanjiu Yu Ceshi Fangfa(Di-si Ban)

编 著 朱和国 尤泽升 刘吉梓 黄 鸣
出版发行 东南大学出版社
出 版 人 江建中
责任编辑 张 煦
社 址 南京市四牌楼 2 号 (邮编:210096)

经 销 全国各地新华书店
印 刷 江苏扬中印刷有限公司
开 本 787 mm×1092 mm 1/16
印 张 25.75
字 数 627 千
版 次 2019 年 9 月第 4 版
印 次 2019 年 9 月第 1 次印刷
书 号 ISBN 978-7-5641-8522-0
定 价 69.80 元

(本社图书若有印装质量问题,请直接与营销部联系。电话(传真):025-83791830)

第 4 版前言

当今科技进步突飞猛进,发展日新月异,竞争日趋激烈,核心在材料!对材料的科学研究与测试方法的合理选择是获得先进材料的核心环节。《材料科学研究与测试方法》是普通高等教育“十一五”国家级规划教材、“十二五”和“十三五”江苏省高等学校重点教材、2015 兵工高校优秀教材和中国 MOOC 网国家精品课程《材料研究方法》的选用教材。自 2016 年 9 月第 3 版以来,销量近 5 000 册,深受读者青睐,令作者欣慰。在江苏省教委高等学校重点教材修订项目基金资助下,结合新积累的教学经验、材料研究技术的最新进展和广大读者的宝贵建议,并参考国内外同类教材,拟对第 3 版进行以下修订:

1. 第 3 章:强化了结构因子 F_{hkl}^2 的推导与理解,增加各种不同正空间形态所对应的倒空间形态,从而加深对倒空间的理解,也为深刻理解电子衍射斑点花样的形态特征打下良好的基础。在 X 射线与原子、单胞和单晶体三者分别作用时,相位差计算中均出现矢量式 $\frac{s-s_0}{\lambda}$,补充解释了它们之间的区别与联系,并增加了洛伦兹因子的概念。以表的形式归纳总结了电子、原子、单胞、单晶、单相多晶、多相多晶对 X 射线衍射强度的各种影响及其对应的影响因子。

2. 第 4 章:增加了丝织构、面织构和板织构的示意图,补充丝织构的形成过程图,使其更直观形象。对丝织构 $I_\varphi-\varphi$ 曲线进行了补充说明,并增加了与其对应的极图。对板织构极图测定的反射法和透射法进行了全面修订和补充,统一了角度表征,增加了反射法和透射法绘制正极图的过程。补充了对反极图的解释、说明和举例,更换了欧拉角的表示符号,统一为 $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ 。补充了运用几何作图法和解析法共同确定不同欧拉角时的理想织构指数。

3. 第 5 章:增加了六方结构的标准电子衍射花样的绘制,从而使体心、面心和六方三种常见结构的内容系统全面。

4. 第 6 章:增补金刚石消光点的二次衍射及体心和面心点阵不产生二次衍射的几何证明图,从而使二次衍射与超点阵中消光点再现之间的区别更加透彻明了。补充了刃型位错与螺旋型位错成像原理之间的区别与联系,以及三种常见位错不可见判据的汇总表。

5. 第 8 章:STEM 为 SEM 和 TEM 有机结合体,本章增加了三者之间的区别与联系。

6. 第 12 章:对电子背散射衍射进行了全面修订和补充,增加了 EBSD 在织构分析、三维取向成像和位错密度分析等方面的应用。

7. 新增原子探针显微分析一章,介绍了原子探针的基本原理、层析、脉冲模式及其应用。

8. 对 3 版的其他章节也进行了局部修订。

本书的修订改版力求内容更加系统丰富、叙述更加简明扼要,繁简结合,通俗易懂。全方位培养读者思考问题、分析问题和解决问题的能力。

本书由南京理工大学一线教师编著。全书共 13 章及附录:第 1~10 章及附录(朱和国,其中 §9.6 由梁宁宁撰写),第 11 章(尤泽升),第 12 章(黄鸣),第 13 章(刘吉梓),全书由朱和国教授统稿、沙刚教授主审。

本书广泛参考和应用了其他一些材料科学工作者的研究成果、资料和图片,第 4 版得到了

江苏省教委、南京理工大学教务处及材料学院徐锋院长的积极支持,东南大学吴申庆教授的热情鼓励,以及张继峰、邱欢、贾婷、朱成艳、伍昊等研究生的鼎力协助,在此表示深深的敬意和感谢!

由于作者水平有限,本书中定有疏漏和错误之处,敬请广大读者批评指正。

朱和国

2019.5 于南京

目 录

1 晶体学基础	1	2 X射线的物理基础	39
1.1 晶体及其基本性质	1	2.1 X射线的发展史	39
1.1.1 晶体的概念	1	2.2 X射线的性质	39
1.1.2 空间点阵的四要素	1	2.2.1 X射线的产生	39
1.1.3 布拉菲阵胞	2	2.2.2 X射线的本质	40
1.1.4 典型晶体结构	4	2.3 X射线谱	41
1.1.5 晶体的基本性质	7	2.3.1 X射线连续谱	42
1.1.6 准晶体简介	7	2.3.2 X射线特征谱	43
1.2 晶向、晶面及晶带	8	2.4 X射线与物质的相互作用	46
1.2.1 晶向及其表征	8	2.4.1 X射线的散射	46
1.2.2 晶面及其表征	9	2.4.2 X射线的吸收	47
1.2.3 晶带及其表征	11	2.4.3 吸收限的作用	50
1.3 晶体的宏观对称及点群	11	本章小结	51
1.3.1 对称的概念	11	思考题	52
1.3.2 对称元素及对称操作	11	3 X射线的衍射原理	53
1.3.3 对称元素的组合及点群	16	3.1 X射线衍射的方向	53
1.3.4 晶体的分类	17	3.1.1 劳埃方程	53
1.3.5 准晶体的点群及其分类	17	3.1.2 布拉格方程	55
1.3.6 点群的国际符号	19	3.1.3 布拉格方程的讨论	56
1.3.7 点群的圣佛利斯符号	19	3.1.4 衍射矢量方程	59
1.4 晶体的微观对称与空间群	20	3.1.5 布拉格方程的厄瓦尔德 图解	60
1.4.1 晶体的微观对称	20	3.1.6 布拉格方程的应用	61
1.4.2 晶体的空间群及其符号	22	3.1.7 常见的衍射方法	61
1.5 晶体的投影	23	3.2 X射线的衍射强度	63
1.5.1 球面投影	24	3.2.1 单电子对X射线的散射	63
1.5.2 极式网与乌氏网	26	3.2.2 单原子对X射线的散射	65
1.5.3 晶带的极射赤面投影	28	3.2.3 单胞对X射线的散射	67
1.5.4 标准极射赤面投影图(标准 投影极图或标准极图)	30	3.2.4 单晶体的散射强度与干涉 函数	72
1.6 倒易点阵	30	3.2.5 单相多晶体的衍射强度	75
1.6.1 正点阵	31	3.2.6 影响单相多晶体衍射强度的 其他因子	77
1.6.2 倒点阵(倒易点阵)	31	本章小结	80
1.6.3 正倒空间之间的关系	31	思考题	82
1.6.4 倒易矢量的基本性质	33	4 X射线的多晶衍射分析及其应用	84
1.6.5 晶带定律	34	4.1 X射线衍射仪	84
1.6.6 广义晶带定律	35		
本章小结	35		
思考题	37		

4.1.1	测角仪	84	5	电子显微分析的基础	151
4.1.2	计数器	86	5.1	电子波的波长	152
4.1.3	计数电路	88	5.2	电子与固体物质的作用	153
4.1.4	X射线衍射仪的常规 测量	89	5.2.1	电子散射	153
4.2	X射线物相分析	90	5.2.2	电子与固体作用时激发的 信息	155
4.2.1	物相的定性分析	90	5.3	电子衍射	159
4.2.2	物相的定量分析	96	5.3.1	电子衍射与X射线衍射的 异同点	159
4.3	点阵常数的精确测定	101	5.3.2	电子衍射的方向——布拉格 方程	160
4.3.1	测量原理	101	5.3.3	电子衍射的厄瓦尔德 图解	161
4.3.2	误差源分析	101	5.3.4	电子衍射花样的形成原理及 电子衍射的基本公式	162
4.3.3	测量方法	102	5.3.5	零层倒易面及非零层倒 易面	163
4.4	宏观应力的测定	106	5.3.6	标准电子衍射花样	164
4.4.1	内应力的产生、分类及其 衍射效应	106	5.3.7	偏移矢量	168
4.4.2	宏观应力的测定原理	106	本章小结	170	
4.4.3	宏观应力的测定方法	109	思考题	172	
4.4.4	应力常数K的确定	112	6	透射电子显微镜	173
4.5	微观应力的测定	114	6.1	工作原理	173
4.6	非晶态物质及其晶化后的衍射	115	6.2	分辨率	174
4.6.1	非晶态物质结构的主要 特征	115	6.2.1	光学显微镜的分辨率	174
4.6.2	非晶态物质的结构表征及其 结构常数	115	6.2.2	透射电子显微镜的 分辨率	175
4.6.3	非晶态物质的晶化	118	6.3	电磁透镜	177
4.7	多晶体的织构分析	120	6.3.1	静电透镜	177
4.7.1	织构及其表征	120	6.3.2	电磁透镜	177
4.7.2	丝织构的测定与分析	123	6.4	电磁透镜的像差	179
4.7.3	板织构的测定与分析	127	6.4.1	球差	179
4.8	晶粒大小的测定	139	6.4.2	像散	180
4.9	小角X射线散射	141	6.4.3	色差	180
4.9.1	小角X射线散射的 两个基本公式	141	6.5	电磁透镜的景深与焦长	182
4.9.2	小角X射线散射技术的 特点	143	6.5.1	景深	182
4.9.3	小角X射线散射技术的 应用	144	6.5.2	焦长	182
4.10	淬火钢中残余奥氏体的测量	144	6.6	电镜的电子光学系统	183
4.11	薄膜的测量	145	6.6.1	照明系统	183
4.11.1	薄膜厚度的测量	145	6.6.2	成像系统	186
4.11.2	薄膜应力的测量	146	6.6.3	观察记录系统	187
本章小结		146	6.7	主要附件	187
思考题		149	6.7.1	样品倾斜装置(样品台)	188

6.7.2	电子束的平移和倾斜装置	188	8.1.1	电子光学系统	253
6.7.3	消像散器	189	8.1.2	信号检测处理、图像显示和记录系统	254
6.7.4	光阑	189	8.1.3	真空系统	255
6.8	透射电镜中的电子衍射	190	8.2	扫描电镜的主要性能参数	255
6.8.1	有效相机常数	190	8.2.1	分辨率	255
6.8.2	选区电子衍射	191	8.2.2	放大倍数	256
6.9	常见的电子衍射花样	192	8.2.3	景深	256
6.9.1	单晶体的电子衍射花样	193	8.3	表面成像衬度	256
6.9.2	多晶体的电子衍射花样	195	8.3.1	二次电子成像衬度	257
6.9.3	复杂的电子衍射花样	196	8.3.2	背散射电子成像衬度	257
6.10	透射电镜的图像衬度理论	207	8.4	二次电子衬度像的应用	259
6.10.1	衬度的概念与分类	207	8.5	背散射电子衬度像的应用	261
6.10.2	衍射衬度运动学理论与应用	209	8.6	电子探针	262
6.10.3	非理想晶体的衍射衬度	215	8.6.1	电子探针波谱仪	262
6.10.4	非理想晶体的缺陷成像分析	216	8.6.2	电子探针能谱仪	264
6.11	透射电镜的样品制备	226	8.6.3	能谱仪与波谱仪的比较	266
6.11.1	基本要求	226	8.7	电子探针分析及应用	266
6.11.2	薄膜样品的制备过程	226	8.7.1	定性分析	266
本章小结	228	8.7.2	定量分析	268	
思考题	230	8.8	扫描透射电子显微镜	269	
7	薄晶体的高分辨像	232	8.9	扫描电镜的发展	271
7.1	高分辨电子显微像的形成原理	232	本章小结	272	
7.1.1	试样透射函数 $A(x, y)$	233	思考题	273	
7.1.2	衬度传递函数 $S(u, v)$	235	9	表面分析技术	274
7.1.3	像平面上的像面波函数 $B(x, y)$	237	9.1	俄歇电子能谱	274
7.1.4	最佳欠焦条件及电镜最高分辨率	239	9.1.1	俄歇电子能谱仪的结构原理	274
7.1.5	第一通带宽度 ($\sin \chi = -1$) 的影响因素	239	9.1.2	俄歇电子谱	275
7.2	高分辨像举例	245	9.1.3	定性分析	276
7.2.1	晶格条纹像	245	9.1.4	定量分析	277
7.2.2	一维结构像	247	9.1.5	化学价态分析	278
7.2.3	二维晶格像	248	9.1.6	AES的应用举例	278
7.2.4	二维结构像	249	9.1.7	俄歇能谱仪的最新进展	280
本章小结	251	9.2	X射线光电子能谱	280	
思考题	251	9.2.1	X射线光电子能谱仪的工作原理	280	
8	扫描电子显微镜及电子探针	252	9.2.2	X射线光电子能谱仪的系统组成	281
8.1	扫描电镜的结构	252	9.2.3	X光电子能谱及表征	283
			9.2.4	X光电子能谱仪的功用	285
			9.2.5	XPS的应用举例	287
			9.2.6	XPS的发展趋势	289
			9.3	X射线荧光光谱	290

9.3.1	工作原理	290	10.4	热分析技术的新发展	327
9.3.2	结构组成	290	10.4.1	联用技术	328
9.3.3	应用	291	10.4.2	温度调制式差示扫描量热技术	329
9.4	扫描隧道电镜	292	10.4.3	动态热机械分析技术	329
9.4.1	STM的基本原理	292	本章小结		329
9.4.2	STM的工作模式	293	思考题		330
9.4.3	STM的特点	294	11	电子背散射衍射	331
9.4.4	STM的应用举例	294	11.1	基本原理	331
9.5	原子力显微镜	297	11.1.1	电子背散射衍射(EBSD)	332
9.5.1	原子力显微镜的工作原理	297	11.1.2	扫描电镜的透射菊池衍射	332
9.5.2	原子力显微镜的工作模式	298	11.2	EBSD 仪器简介	333
9.5.3	试样制备	299	11.3	EBSD 衍射谱标定与晶体取向确定	334
9.5.4	形貌成像的应用	299	11.3.1	EBSD 衍射谱标定	334
9.6	聚焦离子束	301	11.3.2	晶体取向确定	337
9.6.1	工作原理	301	11.4	EBSD 分辨率	339
9.6.2	离子束与材料的相互作用	302	11.5	EBSD 样品制备	340
9.6.3	聚焦离子束的应用	303	11.6	EBSD 的应用	341
9.7	低能电子衍射	305	11.6.1	取向衬度成像	341
9.7.1	低能电子衍射的基本原理	305	11.6.2	织构分析	342
9.7.2	低能电子衍射仪的结构与花样特征	306	11.6.3	晶粒取向差及晶界特性分析	342
9.7.3	LEED 的应用举例	307	11.6.4	物相鉴定	343
本章小结		309	11.6.5	晶格缺陷分析	344
思考题		310	11.6.6	三维取向成像	346
10	热分析技术	311	本章小结		347
10.1	热分析方法	311	思考题		347
10.1.1	热重分析法(TG)	311	12	原子探针显微分析	348
10.1.2	差热分析法(DTA)	312	12.1	原子探针技术的发展史	348
10.1.3	差示扫描量热法(DSC)	316	12.2	场离子显微镜	348
10.2	热分析测量的影响因素	317	12.2.1	场离子显微镜的结构原理	349
10.2.1	实验条件	318	12.2.2	场电离	349
10.2.2	试样特性	319	12.2.3	场离子显微图像	351
10.3	热分析的应用	320	12.3	原子探针	353
10.3.1	块体金属玻璃	320	12.3.1	场蒸发	353
10.3.2	硅酸盐	322	12.3.2	原子探针的基本原理	354
10.3.3	陶瓷反应合成	322	12.3.3	原子探针层析	355
10.3.4	内生型复合材料	323	12.3.4	原子探针脉冲模式	356
10.3.5	含能材料	325	12.3.5	原子探针样品制备	357
10.3.6	反应活化能的计算	326			

12.3.6 原子探针层析的应用	359	思考题	385
本章小结	362		
思考题	362		
13 光谱分析	363	附 录	386
13.1 红外光谱(Infrared Spectroscopy)		附录 1 常用物理常数	386
.....	364	附录 2 晶体的三类分法及其对称特征	386
13.1.1 基本原理	364	附录 3 32 种点群对称元素示意图	387
13.1.2 红外光谱与分子结构间的关系	366	附录 4 宏观对称元素及说明	388
13.1.3 红外吸收光谱仪	370	附录 5 32 种点群的习惯符号、国际符号及圣佛利斯符号	389
13.1.4 试样制备及处理	371	附录 6 质量吸收系数 μ_m	390
13.1.5 应用实例	372	附录 7 原子散射因子 f	391
13.2 拉曼光谱(Raman Spectroscopy)		附录 8 原子散射因子校正因子 Δf	392
.....	375	附录 9 粉末法的多重因素 P_{hkl}	392
13.2.1 基本原理	375	附录 10 某些物质的特征温度 Θ	392
13.2.2 拉曼光谱仪器和拉曼光谱术	377	附录 11 德拜函数 $\frac{\phi(\chi)}{\chi} + \frac{1}{4}$ 之值	393
13.2.3 拉曼光谱与红外光谱的比较	379	附录 12 应力测定常数	393
13.2.4 试样的准备与安置	379	附录 13 常见晶体的标准电子衍射花样	394
13.2.5 拉曼光谱在材料研究中的应用	380		
13.3 电感耦合等离子体原子发射光谱	382	参考文献	399
本章小结	385		

1 晶体学基础

1.1 晶体及其基本性质

1.1.1 晶体的概念

晶体是指其内部的原子、分子、离子或其集团在三维空间呈周期性排列的固体。而这些周期性排列的原子、分子、离子或其集团是构成晶体结构的基本单元,称为晶体的结构基元。如果将结构基元抽象成一个几何点,则可将晶体结构抽象成无数个在三维空间呈规则排列的点阵,该点阵又称空间点阵。图 1-1 即为一般晶体抽象而成的空间点阵。

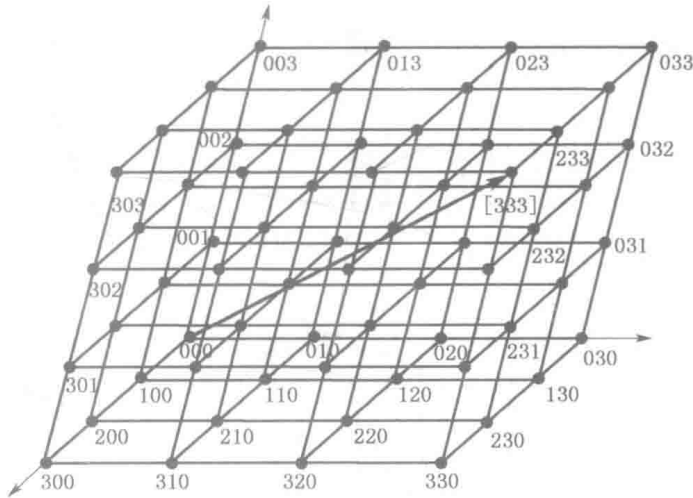


图 1-1 一般空间点阵

1.1.2 空间点阵的四要素

(1) 阵点 即空间点阵中的阵点。它代表结构基元的位置,是晶体结构的相当点,就其本身而言,仅具有几何意义,不代表任何质点。空间点阵具有无穷多个阵点。

(2) 阵列 即阵点在同一直线上的排列。任意两个阵点即可构成一个阵列,同一阵列上阵点间距相等,阵点间距为该方向上的最小周期,平行阵列上的阵点间距必相等,不同方向上的阵点间距一般不相等。空间点阵具有无穷多个阵列。

(3) 阵面 即阵点在同一平面上的分布。任意不在同一阵列上的三阵点即可构成一个阵面。单位阵面上的阵点数称面密度,相邻阵面间的垂直距离称面间距,平行阵面上的面密度和面间距均相等。空间点阵具有无穷多个阵面。

(4) 阵胞 即在三维方向上两两平行并且相等的六面体。是空间点阵中的体积单元。

空间点阵可以看成是这种平行六面体在三维方向上的无缝堆砌。注意：①阵胞有多种选取方式，主要反映晶体结构的周期性；②当阵点仅在阵胞的顶角上，一个阵胞仅含一个阵点，代表一个基元时，该阵胞又称物理学原胞，原胞的体积最小，三维基矢设为 a_1 、 a_2 、 a_3 。

1.1.3 布拉菲阵胞

为了同时反映晶体结构的周期性和对称性，通常按以下原则选取阵胞：

- (1) 反映晶体的宏观对称性；
- (2) 尽可能多的直角；
- (3) 相等的棱边和夹角尽可能多；
- (4) 满足上述条件下，阵胞体积尽可能最小。

按以上原则选取阵胞时，法国晶体学家布拉菲(A. Bravais)通过研究发现空间点阵的阵胞只有 14 种，此时阵点不仅可在阵胞的顶点，还可在阵胞的体内或面上，阵胞的体积也不一定为最小，可能是原胞体积的整数倍。布拉菲阵胞又称晶胞，或惯用胞，或结晶学原胞。图 1-2 为 14 种布拉菲阵胞，三维基矢设为 a 、 b 、 c 。

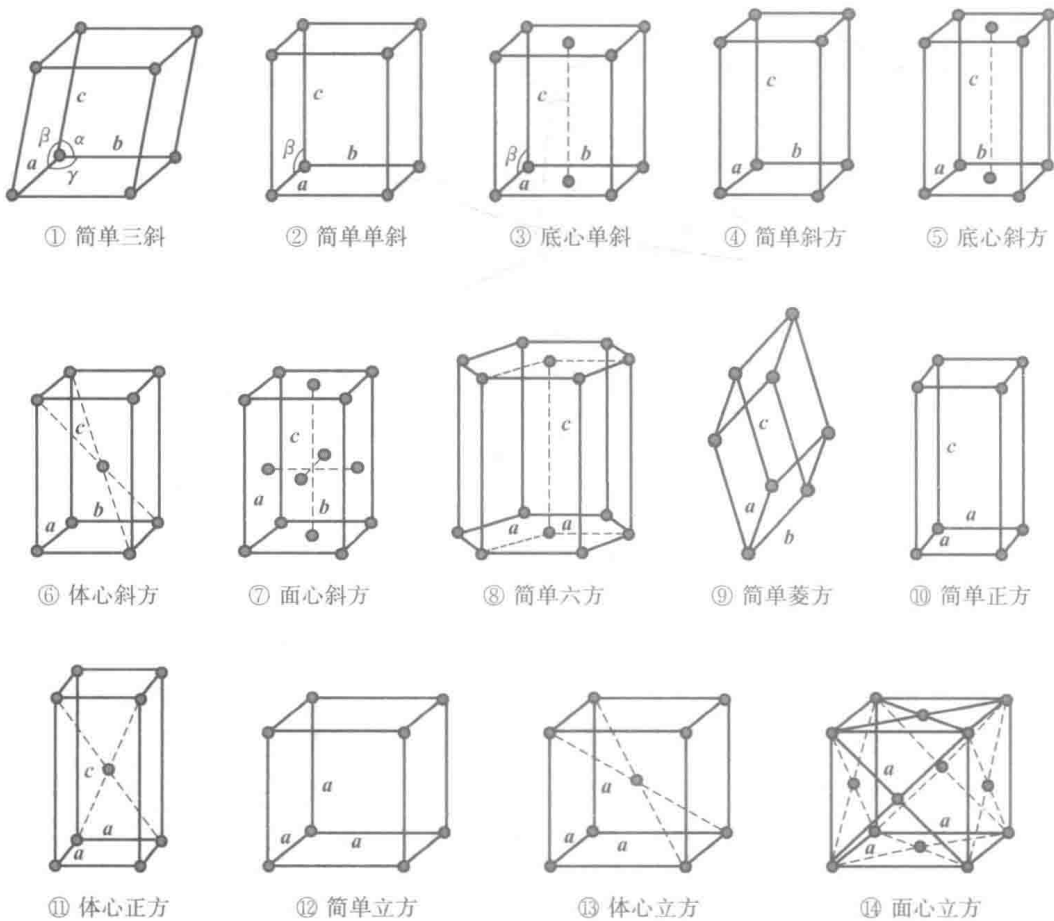


图 1-2 布拉菲点阵示意图

晶胞的形状与大小用相交于某一顶点的三个棱边上的点阵周期 a 、 b 、 c 以及它们之间的夹角 α 、 β 、 γ 来表征，其中 α 、 β 、 γ 分别为 b 与 c 、 c 与 a 、 a 与 b 的夹角。 a 、 b 、 c 、 α 、 β 、 γ

称为晶格常数。

14种布拉非阵胞根据点阵参数的特点分为立方、正方、斜方、菱方、六方、单斜及三斜七大晶系。根据阵点在阵胞中的位置特点又可将其分为简单(P)、底心(C)、体心(I)和面心(F)四大点阵类型。

(1) 简单型。阵点分布于六面体的8个顶点处,符号为P。

(2) 底心型。阵点除了分布于六面体的8个顶点外,在六面体的底心或对面中心处仍分布有阵点,符号为C。

(3) 体心型。阵点除了分布于六面体的8个顶点外,在六面体的体心处还有一个阵点,符号为I。

(4) 面心型。阵点除了分布于六面体的8个顶点外,在六面体的6个面心处还各有一个阵点,符号为F。

各点阵如表1-1所示。

表 1-1 晶系及点阵类型

晶系	点阵参数	布拉非点阵	点阵符号	阵胞内阵点数	阵点坐标
立方晶系	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单立方	P	1	000
		体心立方	I	2	$000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
		面心立方	F	4	$000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
正方晶系	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单正方	P	1	000
		体心正方	I	2	$000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
斜方晶系	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单斜方	P	1	000
		体心斜方	I	2	$000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
		底心斜方	C	2	$000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$
		面心斜方	F	4	$000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
菱方晶系	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	简单菱方	R	1	000
六方晶系	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	简单六方	P	1	000
单斜晶系	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	简单单斜	P	1	000
		底心单斜	C	2	$000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$
三斜晶系	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	简单三斜	P	1	000

注意:

① 空间点阵是为方便研究晶体结构而进行的一种数学抽象,反映了晶体结构的几何特征,它不能脱离具体的晶体结构而单独存在。

② 空间点阵的阵点仅具几何意义,并非具体的质点,它可以是结构基元的质心位置,也

可以是结构基元中任意等价的点。

③ 晶体的结构复杂、种类繁多,但从中抽象出来的空间点阵只有 14 种。

④ 晶体结构=空间点阵+结构基元。

⑤ 原胞包含一个基元,而非一个原子。

⑥ 一种点阵可代表多种晶体结构。结构基元可以由一个或多个等同质点的不同的形式进行排列和结合。

1.1.4 典型晶体结构

晶体结构根据其对应点阵的特点,可分为简单点阵和复式点阵两类。简单点阵即点阵结构仅有一种结构形式,常见的有简单立方、体心立方和面心立方 3 种;而复式点阵则是由两种同类或异类原子形成的点阵结构套构而成,常见的有密排六方结构、金刚石结构、NaCl 结构、CsCl 结构以及闪锌矿结构等。

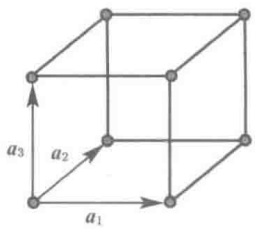


图 1-3 简单立方

1) 简单立方(sc)结构

图 1-3 为简单立方示意图。简单立方的边长为 a ,基矢为 a 、 b 、 c , $a = b = c$,阵点仅在立方体的 8 个顶点上,体内无阵点,每个阵点为其周围 8 个阵胞共有,单个阵胞拥有 $8 \times 1/8 = 1$ 个阵点,或 1 个结构基元。当结构基元为原子时,该原胞含有一个原子,其坐标为 $(0, 0, 0)$,每个原子占有的体积为 a^3 。简单立方阵胞也是该点阵的一种原胞。该原胞的三维基矢 a_1 、 a_2 、 a_3 分别与阵胞基矢 a 、 b 、 c 相等。即

$$\begin{cases} a_1 = a \\ a_2 = b \\ a_3 = c \end{cases} \quad (1-1)$$

原胞体积 = 阵胞体积 = $a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = abc = a^3$ 。

2) 体心立方(bcc)结构

体心立方的边长为 a ,阵点除了在 8 个顶点外,立方体的体心还分布有一个阵点,每个阵胞含有 2 个阵点,当结构基元为原子时,则该阵胞含有 2 个原子,坐标分别为 $(0, 0, 0)$ 和 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 。原胞选取如图 1-4 所示,原胞基矢 a_1 、 a_2 、 a_3 与阵胞基矢的关系为

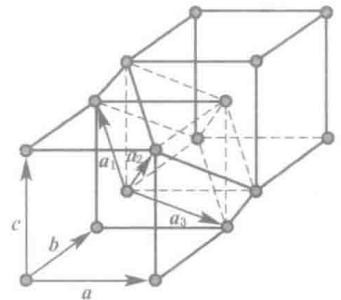


图 1-4 体心立方结构及其原胞

$$\begin{cases} a_1 = \frac{1}{2}(-a + b + c) \\ a_2 = \frac{1}{2}(a - b + c) \\ a_3 = \frac{1}{2}(a + b - c) \end{cases} \quad (1-2)$$

原胞体积为 $a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = \frac{1}{2}a^3$,为体心立方阵胞的一半。晶体结构为体心立方的常见

元素有 Mo、W、Li、Na、K、Cr、 α -Fe 等。

3) 面心立方(fcc)结构

面心立方的边长为 a ，除了 8 个顶点有阵点外，6 个面的中心均有一个阵点，每个阵胞含有 4 个阵点，其坐标分别为 $(0, 0, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ 、 $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 。该阵胞的原胞选取如图 1-5 所示，原胞基矢 a_1 、 a_2 、 a_3 与阵胞基矢 a 、 b 、 c 的关系为

$$\begin{cases} a_1 = \frac{1}{2}(b+c) \\ a_2 = \frac{1}{2}(c+a) \\ a_3 = \frac{1}{2}(a+b) \end{cases} \quad (1-3)$$

原胞的体积为 $a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = \frac{1}{4}a^3$ ，仅为阵胞体积的 $\frac{1}{4}$ 。晶体结构为面心立方的常见元素有 Al、Cu、Au、Ag、 γ -Fe 等。

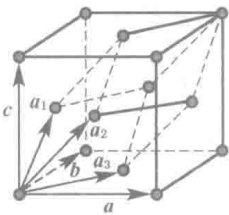


图 1-5 面心立方结构及其原胞

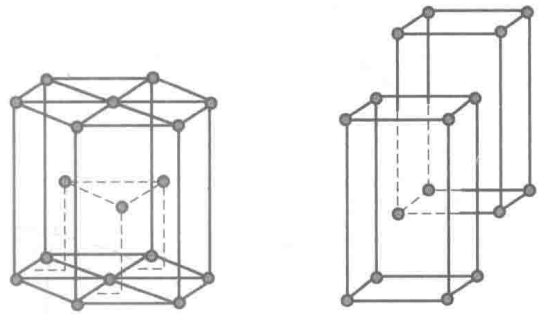


图 1-6 密排六方结构

4) 密排六方结构

通常由六棱柱表示。底边边长为 a ，阵点位于上下正六边形的中心和 6 个顶点处，另 3 个位于六棱柱的中截面上，其在底面上的投影处于相隔三角形的重心处，共含六个阵点。顶角、底心上的阵点与中截面上阵点的周围环境不同，因而密排六方结构可看成是由 3 个单位平行六面体组成，每个平行六面体又由两个简单六面体套构而成，故密排六方结构是复式格子。结构基元由两个原子组成。原胞的选取可与晶胞相同，为平行六面体，原胞含有一个基元，共两个原子，其坐标分别为 $(0, 0, 0)$ 和 $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$ 。具有密排六方结构的元素有 Mg、Be、Cd、Zn 等。

5) NaCl 结构

NaCl 的晶体结构如图 1-7 所示，是典型的离子晶体，每个基元由一个 Na^+ 和一个 Cl^- 组成，晶胞共有 4 个基元 8 个离子， Na^+ 分布于立方体的顶角和六个面的面心，形成面心立方结构， Cl^- 的分布也构成了面心立方结构，沿棱边平移半个棱边长。因此，NaCl 晶体的空间点阵是由 Na^+ 和 Cl^- 两个面心立方结构沿棱边平移半个棱边长套构而成。其空间点阵为面心立方。原胞的选取可等同于面心立方，若以 Na^+ 的面心立方选基矢，则平行六面体的顶点为 Na^+ ，而六面体的体心为 Cl^- ，原胞含有一个基元（一个 Na^+ 和一个 Cl^- ），其坐标分

别为 $(0, 0, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ，见图 1-7(b)。具有 NaCl 晶体结构的还有 KCl、AgBr、PbS 等。

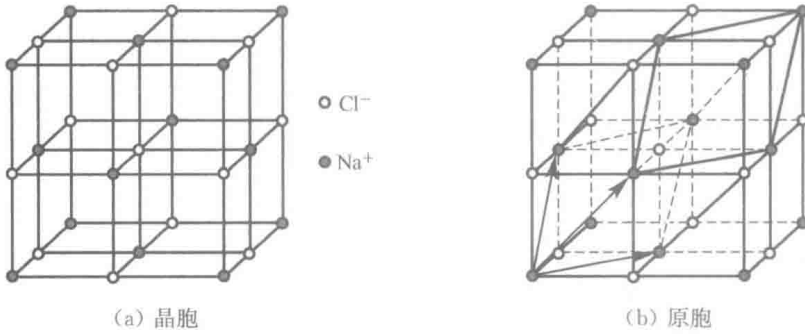


图 1-7 NaCl 结构

6) CsCl 结构

晶胞如图 1-8 所示。Cl⁻和 Cs⁺分别位于立方体的顶角和体心，每个晶胞含有一个基元，Cl⁻和 Cs⁺分别构成简单立方结构，并沿立方体的空间对角线平移 1/2 的长度套构而成。其空间点阵为简单立方。该点阵的原胞选取可同于晶胞，含有一个基元(一个 Cl⁻和一个 Cs⁺)。当 Cl⁻的坐标为 $(0, 0, 0)$ 时，则 Cs⁺的坐标为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ，或相反。常见的还有 TiBr、AlTi、BeCu 等。

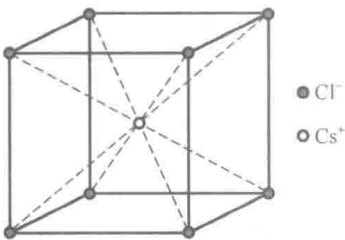


图 1-8 CsCl 结构

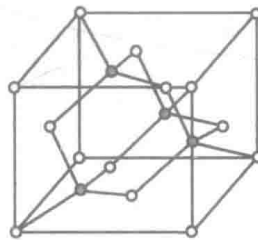


图 1-9 闪锌矿结构

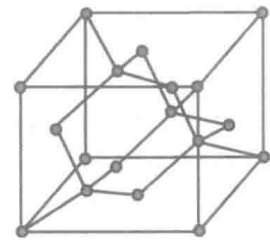


图 1-10 金刚石结构

7) 闪锌矿结构

闪锌矿结构如图 1-9 所示。两种异类原子分别构成面心立方结构，并沿空间对角线方向平移 1/4 的长度套构而成，晶胞中含有 4 个基元。闪锌矿结构的空点阵为面心立方。原胞的选取可同于面心立方，每个原胞中含有一个基元(两个异类原子)。具有闪锌矿结构的还有 CuF、CuCl、AgI、ZnS、CdS 等。

8) 金刚石结构

金刚石结构如图 1-10 所示。是由两套面心立方沿空间对角线平移 1/4 的长度套构而成，晶胞共有 8 个同类原子，其坐标分别为： $(0, 0, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ 、 $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 、 $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ 、 $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$ 、 $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$ 、 $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ 。金刚石结构的空点阵为面心立方，原胞的选取也可同于面心立方，每个原胞中含有一个基元(两个同类原子)，具有金刚石结构的还有 Si、Ge、Sn 等。

1.1.5 晶体的基本性质

晶体的基本性质是指一切晶体所共有的性质,由晶体内部质点排列的周期性决定。基本性质如下:

1) 均匀性

是指同一晶体的各个不同部位均具有相同性质的特性。换言之,在晶体中任取两个形状、大小和取向均相同的,且微观足够大、宏观足够小的体积元,它们的性质均相同。这是由晶体内部质点排列的周期性,同一晶体的不同部位具有相同的质点分布所决定的。注意:①均匀性不是晶体独有的特性,液体和气体也具有均匀性,但其均匀性来源于原子分子热运动的随机性;②晶体的均匀性不含有各向同性,而气体、液体的均匀性含有各向同性。

2) 异向性

是指晶体的性质因方向的不同而有所差异的特性。这是由于同一晶体的不同方向上的质点排列一般是不同的,因而晶体的性质随测试方向的不同而有所不同。例如单晶石英的弹性模量和弹性系数在不同测试方向上具有不同的数值。再如蓝宝石,在平行于晶体延长方向上的硬度(5.5 GPa)远小于其垂直方向上的硬度(6.5 GPa),故蓝宝石又称二硬石。

3) 对称性

是指晶体中的相同部分(几何要素如晶面、晶棱、顶点等)或性质在不同方向或位置上有规律地重复出现的特性。该特性与晶体的异向性不矛盾,它是由晶体内部质点排列的对称性决定的。

4) 自限性

是指晶体在一定条件下能自发地形成封闭的凸几何多面体的特性。凸几何多面体的平面为晶面,晶面的交棱为晶棱,晶棱的会聚为顶点,且三者数量上符合欧拉定律:晶面数+角顶数=晶棱数+2。该特性是晶体内部质点的规则排列在外形上的反映,因此晶面、晶棱、角顶分别对应于点阵中的阵面、阵列和阵点。

5) 最小内能

是指晶体在相同的热力学条件下,与同种物质的非晶体相(非晶体、准晶体、液体、气体)相比,具有最小内能的特性。内能包括质点的动能和势能(位能)。动能是由质点的热运动决定的,与其热力学条件(温度、压力等)相关,因此它不是可比量。势能是由质点间的相对位置与排列决定的,是比较内能大小的参量。晶体内部的质点规则排列是各质点间的引力与斥力相平衡的结果,晶体内的质点均已达到平衡位置,其势能最小,因而晶体具有最小内能。无论使质点间的距离增大或缩小,均会导致质点间的相对势能增大。

6) 稳定性

是指晶体在相同的热力学条件下,相同化学组成的同种物质,晶体与非晶体相比最为稳定。这是由晶体具有最小的内能,晶体内的质点均在其平衡位置所决定的。非晶体有自发向晶体转变的趋势,但晶体不可能自发地转变成其他物态(非晶体)。

此外,晶体还具有固定的熔点,在一定的条件下能对 X 射线产生衍射效应等性质。晶体具有这些基本性质,均源于其内部质点排列的周期性。

1.1.6 准晶体简介

质点排列长程有序,但无周期重复的物质称为准晶体。准晶体虽无周期性,但有准周期