

材料科学与工程著作系列
HEP Series in Materials Science and Engineering

HEP
MSE

无机材料 晶体结构学概论

Introduction to Crystallogogy
of Inorganic Materials

毛卫民 编著

高等教育出版社

无机材料 晶体结构学概论

Introduction to Crystallography of
Inorganic Materials

毛卫民 编著

KUE GAILUN

WUJI CAIL

高等教育出版社·北京

图书在版编目(CIP)数据

无机材料晶体结构学概论 / 毛卫民编著. -- 北京 :
高等教育出版社, 2019.12
ISBN 978-7-04-052999-9

I. ①无… II. ①毛… III. ①无机材料-晶体结构-
高等学校-教材 IV. ①TB321

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2019)第 253828 号

无机材料晶体结构学概论

WUJI CAILIAO JINGTI JIEGOUXUE GAILUN

策划编辑 刘占伟 刘剑波 责任编辑 刘占伟 封面设计 姜磊 版式设计 王艳红
插图绘制 于博 责任校对 张薇 责任印制 尤静

出版发行 高等教育出版社
社 址 北京市西城区德外大街4号
邮政编码 100120
印 刷 涿州市星河印刷有限公司
开 本 787mm×1092mm 1/16
印 张 22.75
字 数 410千字
插 页 1
购书热线 010-58581118

咨询电话 400-810-0598
网 址 <http://www.hep.edu.cn>
<http://www.hep.com.cn>
网上订购 <http://www.hepmall.com.cn>
<http://www.hepmall.com>
<http://www.hepmall.cn>
版 次 2019年12月第1版
印 次 2019年12月第1次印刷
定 价 79.00元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换

版权所有 侵权必究

物料号 52999-00

前 言

改革开放 40 年以来，中国的材料工业取得了举世瞩目的成就。当前，中国几乎所有主要工程结构材料的产量和产能都稳居世界第一位。然而，从技术质量的角度来看，中国材料工业距离世界先进水平还有显著的差距。许多产品的技术含量和附加值偏低，一些重要的高技术、高附加值材料还需要大量进口。面对复杂多变的国际局势，我国只有把自身的工业体系做好、做强，才能立于不败之地。尤其在材料领域，要把长期以来片面追求短期效益和产能的高速发展模式转变为更多地基于科技创新的高质量、可持续发展模式。为此，需要培养更多的高素质研究生人才。这些人才不仅要支撑创新性基础材料的研究，还需更多地投身于创新型材料制造业相关技术的研发。

工程上的“材料”被定义为用以制造有用物件的物质；显而易见，在现代社会中人类生产和制造的材料比比皆是。绝大部分固体材料都属于晶体材料，因此作为晶体学重要组成部分的“晶体结构学基本原理”是一切工程专业，尤其是材料科学与工程专业必备的基础知识。同时，相关知识的工程应用也是推动材料科技发展的重要途径和手段。对于本科毕业后在材料科学与工程领域继续深造的研究生来说，更加需要完善而深入的材料晶体结构学理论与应用技术的支撑，以应对高新材料研究的严峻挑战以及科技创新发展的巨大需求。

然而，当前材料专业的研究生培养在晶体结构学课程教学方面却面临着种种难题，不容乐观。首先，各校招收的研究生来源于不同学校，具有不同的专业背景，因此具有明显不同的晶体结构学基础，即或有或无、或多或少、或深或浅。其次，即使新生的本科学习阶段涉及初步的晶体结构学知识，通常也只体现在镶嵌或依附于各种专业课程内若干学时的讲授。晶体结构学自身的关键概念和原则思路并未得到足够的重视，以致经常出现不严谨的阐述，并引起学生的误解，给后续的深入学习带来了障碍。例如，关于晶系普遍而典型的不严谨表述称：根据晶胞的 6 个参数把晶体归纳为七大晶系。于是，常见的习题为“判断单胞常数为 $a=b=c$ 且 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 的晶体所属晶系”时，“正确”的答案为：该晶体一定属于立方晶系。但是，单胞常数的约束条件只是判断晶系的必要条件之一，不是充分条件。在本科学习时通常不会涉及更深入的晶体结构分析，因此这类不严谨甚至错误的教学讲述并不会马上对学生产生影响。但进入研究生阶段后，作深入晶体结构分析时，以往不严谨的概念就会给学生带来很

大的困扰。再有，本科学习阶段通常不涉及利用晶体结构知识作更深入的晶体结构分析，因此所学的知识往往滞留在书本上，学生并没有真正掌握分析新材料中各种晶体结构参数的实际能力。另外，目前在众多发表的文献中作结构的衍射分析时常常用一套或多套符号标示衍射峰，其间既不给出衍射峰的晶体学指数，也不对衍射峰作强度分析。这些不可靠的分析手法和习惯不仅易使结果出现谬误，而且也会误导学生对晶体结构分析工作的理解。诸如上述问题无疑不利于满足高新材料研究在创新科技发展上的需求。

鉴于科技与工业发展对高素质材料专业人才的需求以及目前材料科学与工程学科在晶体结构学教学方面的状况和困扰，作者基于30年从事晶体结构学的教学经验和体会撰写了本教材，以奉献给材料学科的研究生、相关的教学工作者以及广大读者。面对选修本课程学生专业背景的巨大差异，本教材从零基础开始阐述晶体结构学的系统知识，主要涉及晶体的对称性、结构、取向与织构、缺陷等内容。教材特别注重各部分知识的衔接及连续性。内容的阐述模式可使没有相关基础的学生有机会简略地从头学习晶体结构学的基础原理，同时也注意使已有一定基础的学生能以新的形式从另一个角度理解和复习已学过的知识。本教材内容虽然没有进行大量的理论推导，但特别强化所讲述原理的科学严谨性，以纠正学生对相关知识的误解，使学生从宏观上更好地把握各种概念。晶体学及相关晶体结构学知识的本性决定了其许多内容会比较抽象，将给学生的理解带来一定的困难。本教材因此特别注意不专门追求晶体学理论自身的系统性，而是从材料科学与工程学科属于“工科”这一特征出发，尽量以实际可视的“去抽象化”方式完整地介绍相关内容，以降低学生抽象思考的负担。另一方面，为进一步满足工科专业对晶体结构学知识的实际应用需求，本教材尽量以工程实用化的形式把所阐述的各部分内容与实际应用结合在一起。总之，本教材力图体现从零开始、科学严谨、去抽象化、工程实用化等特点，尝试一定程度地满足材料工程制造业创新发展对人才培养的需求。

本教材规划的课程教学内容突出或强调了以下知识点或实用方法：介绍了X射线衍射和背散射电子衍射的技术原理和分析方法。全面提供了X射线衍射强度分析所需的各种参数，为借助本教材直接实现强度分析奠定了基础。阐述了7种晶系和14种点阵划分的本质依据，借以纠正现存的误解。突出了从晶体学晶系、点阵、点群、空间群等多种对称性的角度全面观察和理解晶体结构的重要性和必要性。阐述了X射线衍射强度的计算在晶体结构分析与单胞常数的确定、非典型原子位置坐标的确认、原子概率占位计算等方面的应用。举例介绍了未知物质晶体结构测定的思路。在多晶体织构分析原理的基础上介绍了若干织构定量计算的方法。简述了空位浓度及其热力学参数的测定方法。探讨了在透射电子显微镜观察的基础上如何判定位错的临界分切应力，以及位错

密度的测定原则及其不可靠性。简介了金属氧化膜引起表面位错聚集的计算及氧化膜因此承受应力的观念。分析了多晶体取向差分布密度在小角度取向差区域内可能存在的问题。

本教材讲述内容估计需用 40~50 学时，建议教学过程中配合适当的 X 射线衍射、X 射线极图测量、背散射电子衍射等分析实验。根据实际不同教学目的的需求，可在相关课程中适当地删减或调整教材内容。本教材设置了关键词索引，以便读者在学习过程中查阅相关的概念或表述。为了便于读者自学或复习，本教材每章都给出了思考题和练习题，并将参考答案附在书后，以供参考。

高等教育出版社邀请了若干评审专家，为本教材的撰写提供了宝贵的修改意见，这些意见已经体现在书稿中。在此，特向各位专家表示衷心的感谢。另外，内蒙古科技大学李一鸣博士为本教材的编写提供了全面的支持与配合，不仅提供了大量实验数据，还为本教材的顺利完成，尤其是工程实用化的推进提供了重要的支撑。本书的编写工作得到内蒙古自治区教育厅及内蒙古科技大学研究生优质课程项目“晶体学理论课程建设”的资助(资助号：902310511)，书中塑性变形晶体学部分内容的完成也得到国家自然科学基金的资助(项目号：51571024)，在此一并表示感谢。

由于作者学识水平有限，书中谬误在所难免，欢迎读者予以指正。

作者

2019年2月

目 录

第 1 章 晶体的基本对称结构及其 X 射线检测	1
1.1 晶体及其基本特性	2
1.1.1 晶体的基本概念	2
1.1.2 晶体的对称特征	4
1.1.3 晶体的基本共性	5
1.2 晶体的基本对称性	6
1.2.1 平移对称性与点阵理论	6
1.2.2 点对称性与点对称操作	9
1.2.3 晶体可能的旋转对称性	10
1.2.4 点对称操作的坐标变换及常用符号	11
1.2.5 7 种晶系的划分及其单胞边角关系的限制	14
1.2.6 14 种布拉维点阵	15
1.2.7 非晶体	19
1.3 晶体的晶向、晶面及其几何关系	19
1.3.1 晶向指数的常规表达方法	19
1.3.2 晶面指数的常规表达方法	21
1.3.3 六方晶系的晶向指数和晶面指数	22
1.3.4 晶面的多重性因子	25
1.3.5 晶面、晶向的几何关系	25
1.3.6 晶带定律	28
1.4 X 射线衍射的晶体学基础	29
1.4.1 布拉格方程	29
1.4.2 多晶体衍射强度	30
1.4.3 温度因子	32
1.4.4 吸收因子	34
1.4.5 结构因子	41
1.4.6 晶体点阵类型与系统消光	47
1.4.7 不同晶系的 X 射线衍射规律	48
本章重点	50

参考文献	50
思考题	51
练习题	51
第 2 章 晶体的对称特性	55
2.1 点群与平移群	56
2.1.1 数学上群的概念	56
2.1.2 晶体学点群与平移群	57
2.1.3 晶体学点群的简略推导	59
2.2 旋转群与中心对称劳厄群	75
2.2.1 点群中的旋转群与中心对称点群	75
2.2.2 X 射线衍射的中心对称定律	77
2.2.3 11 种劳厄群	78
2.2.4 晶体中心对称性的 X 射线衍射强度统计分布检验法	79
2.3 空间群简介	81
2.3.1 空间群的概念	84
2.3.2 非点式对称操作	85
2.3.3 点式空间群	96
2.3.4 非点式空间群与空间群的商群	101
2.3.5 空间群非点式基本操作造成的系统消光	103
2.3.6 空间群特征要略	106
2.3.7 国际表	112
2.3.8 用空间群描述真实晶体对称性	118
本章重点	120
参考文献	121
思考题	121
练习题	121
附录	126
附录 2.1 常用点对称操作的操作矩阵	126
附录 2.2 230 种空间群的符号	127
附录 2.3 与 11 种劳厄群对应的 120 种衍射群所涉及的 空间群及其消光规律	131
第 3 章 无机材料晶体结构的分析与检测	139
3.1 晶体结构概述与常见晶体结构	140
3.1.1 晶体结构的概念	140
3.1.2 单质晶体结构	141

3.1.3	AX 型化合物	144
3.1.4	AX ₂ 型化合物	145
3.1.5	AX ₃ 型化合物	149
3.1.6	离子晶体结构的一般规律	151
3.1.7	氧化物晶体结构示例	153
3.2	简单结构未知无机晶体的检测与分析实践	158
3.2.1	未知物相基础数据检测及其所属晶系的判断	159
3.2.2	Cr ₂ Al 晶体衍射线的指数化及其单胞常数的确定	162
3.2.3	Cr ₂ Al 晶体完整对称性的确定	165
3.2.4	Cr ₂ Al 晶体单胞内各原子的位置坐标	167
3.3	金属铀晶体结构参数的检测与确定	170
3.3.1	铀固溶体基础数据检测及其所属晶系的判断	170
3.3.2	铀固溶体晶体衍射线指数化标定及相应点阵参数	174
3.3.3	铀固溶体晶体完整对称性的确定	176
3.3.4	铀固溶体晶体单胞内各原子的位置坐标	178
3.4	有序结构与概率占位	180
3.4.1	典型与非典型有序结构的长程有序	180
3.4.2	占位概率与结构转变	183
3.4.3	拓扑密堆型化合物	185
3.4.4	有序结构占位概率的测定	186
	本章重点	189
	参考文献	189
	思考题	189
	练习题	190
第 4 章	无机晶体的取向特征及其检测技术	195
4.1	晶体的取向与多晶体织构	196
4.1.1	晶体取向的概念	196
4.1.2	非立方晶系的晶体取向	198
4.1.3	多晶体中的晶粒与织构的概念	200
4.1.4	多晶织构的普遍性及其利用	201
4.2	多晶体取向分布及其检测	202
4.2.1	取向与织构的极图表达	202
4.2.2	反极图	206
4.2.3	多晶体极图 X 射线测量原理	208
4.2.4	取向分布函数原理	209

4.2.5	背散射电子衍射技术及其检测晶体取向原理	211
4.3	织构的表达与定量分析	217
4.3.1	立方晶系与非立方晶系的取向空间	217
4.3.2	取向分布函数的表达方法	221
4.3.3	织构与宏观性质的定量关系及织构定量分析的概念	225
4.3.4	织构占有率的定量计算	227
	本章重点	231
	参考文献	231
	思考题	232
	练习题	232
第5章	无机材料中的晶体缺陷	235
5.1	晶体结构中的点缺陷	236
5.1.1	晶体点缺陷的类型与基本热力学	236
5.1.2	空位浓度的测量	237
5.1.3	自间隙原子的产生	238
5.1.4	有序结构的点缺陷特征	240
5.1.5	晶体结构中点缺陷的组态及点缺陷流引起的原子 再分布	242
5.1.6	点缺陷对晶体材料结构与物理性能的影响	245
5.2	晶体结构中的位错与弹性效应	248
5.2.1	晶体中的位错及其应力场	248
5.2.2	位错弹性应力场引起的位错能量	251
5.2.3	辐照下点缺陷与位错弹性场交互作用引起的缺陷 自组织及其对晶体的影响	255
5.3	晶体中位错的受力	258
5.3.1	位错在外应力场下的受力	258
5.3.2	位错的线张力	259
5.3.3	位错线承受的化学力	262
5.3.4	位错映像力	265
5.3.5	非自由表面附近位错的受力	267
5.4	晶体中的位错结构	270
5.4.1	典型晶体结构中的位错	271
5.4.2	单质晶体结构中全位错的分解	272
5.4.3	非单质晶体中的位错	278
5.5	塑性变形及晶体取向的变化	281

5.5.1	位错滑移造成的塑性变形及独立的滑移系	281
5.5.2	机械孪生造成的塑性变形	286
5.5.3	晶体取向在塑性变形过程中的变化	288
5.5.4	平面应变轧制引起取向变化的定量计算	290
5.5.5	晶体塑性变形时滑移系及孪生系的选择	291
5.6	晶体界面的取向差特征	294
5.6.1	晶界的自由度及取向差	294
5.6.2	取向差的计算方法	296
5.6.3	常规晶粒界面	297
5.6.4	重合点阵晶界及特殊晶界的取向差	299
5.6.5	多晶体晶界的取向差分布	301
	本章重点	303
	参考文献	304
	思考题	304
	练习题	305
	思考题与练习题参考答案	311
	第1章思考题参考答案	311
	第1章练习题参考答案	313
	第2章思考题参考答案	322
	第2章练习题参考答案	323
	第3章思考题参考答案	329
	第3章练习题参考答案	330
	第4章思考题参考答案	332
	第4章练习题参考答案	334
	第5章思考题参考答案	335
	第5章练习题参考答案	337
	索引	347

第 1 章

晶体的基本对称结构 及其 X 射线检测

本章提要

在引入晶体的概念、定义、特征的基础上，介绍了晶体的基本点对称性和平移对称性。以穷举法为基本原则论证了晶体可能的旋转对称性。阐述了用晶系和点阵表达晶体主要点对称特征和平移对称特征的原理。介绍了晶体中晶面、晶向的表达方式及其内在的几何关系。简介了反映 X 射线多晶体衍射规律的布拉格方程，以及影响衍射强度的多重性因子、角度因子、温度因子、吸收因子、结构因子和点阵消光规律等诸多因素。给出了多晶体衍射理论相对强度的计算方法，并简述了借助 X 射线衍射规律判断晶体所属晶系的原则。

我们周围的客观世界是由物质构成的，用以制造有用物件的物质称为材料。观察人类生存的物质环境可以发现，人们直接接触的物质世界与野外自然环境下的存在巨大差别。我们在衣、食、住、行过程中所接触的各种设施、器具、工具、用具都是用各种材料制造出来的。根据构成材料的不同物质及其化学成分和相应特性，可以大体将材料分为有机材料和无机材料两大类型，其中无机材料包括金属材料 and 无机非金属，是极为重要而广泛使用的工程材料^[1]。不同的无机材料在原子微观排列结构上存在各自不同的特征，因而也导致了不同的工程特性。

随着社会的进步和现代科技的发展，人们对工程材料性能的要求日益提高，各种新型材料及相关材料技术不断涌现。新材料的发展不仅越来越趋于多样化、高技术化，而且其微观结构越来越复杂，甚至其结构形态也突破了人们传统的认识范围。材料科学与技术的高速发展迫使人们不断地提高对材料及相应微观结构的认识水平。因此，在原有材料结构知识的基础上更深入、更全面地掌握材料结构方面的系统知识可以为推进材料科技的发展奠定更扎实的研究与探索的基础。

1.1 晶体及其基本特性

1.1.1 晶体的基本概念

利用现代高分辨电子显微镜可以直接观察许多固体物质内部原子的微观排列结构。图 1.1^[1-6] 给出了高分辨电子显微镜观察到的一些单质和化合物等不同物质内部原子排列的现象。在分析化合物时(如图 1.1d^[4]、e^[5]和 f^[6])，根据所观察到的一个个亮斑的尺寸、明暗程度、几何位置等参数以及对该物质的化学成分分析和电子显微镜原理可以判断出每种亮斑所对应的原子。观察发现，物质内部原子的排列通常存在着某种规律性，即原子排列不是杂乱无章的，而是以一定规则呈有顺序、周期性、长距离地重复排列，或称长程有序排列。研究表明，世界上绝大多数固体物质内部的原子都会呈现出长程有序排列的现象。

从化学组分的角度观察，组成物质最基本的单元为原子、离子、分子、原子团等，称为结构基元。无机晶体的结构基元通常含有一个或若干个原子态(游离态)或离子态(化合态)的原子，其尺寸非常小，往往低于 1 nm (1 nm = 10^{-9} m)。X 射线衍射的结果表明，由结构基元进行三维长程有序排列而构成的一切固体物质称为晶体，因此固体物质是否为晶体的主要依据在于其内部原子层面的微观粒子是否组成了三维长程有序排列的结构。晶体的诸如物理性

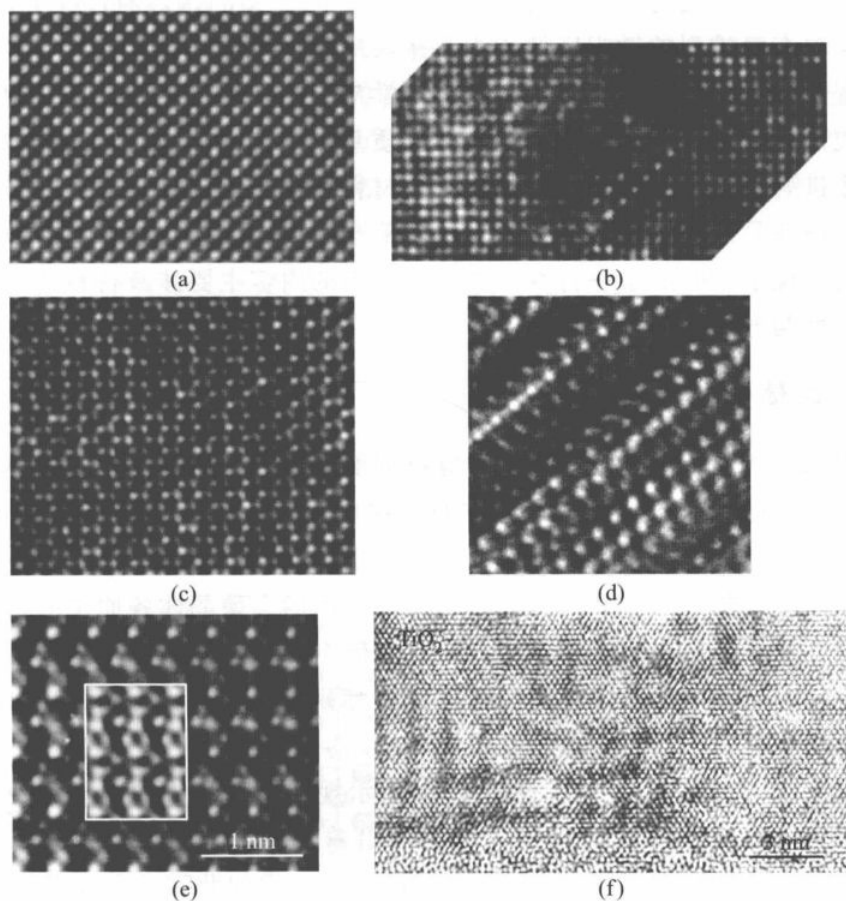


图 1.1 固体物质内部原子的规则排列现象：(a) $\text{Al}^{[1]}$ ；(b) $\text{Fe}^{[2]}$ ；(c) $\text{Si}^{[3]}$ ；
(d) $\text{SiC}^{[4]}$ ；(e) $\text{Al}_2\text{CuMg}^{[5]}$ ；(f) $\text{TiO}_2^{[6]}$

质、化学性质、几何形态等各种性质都与其内部长程有序的周期性结构紧密相连。

材料科学研究表明，地球上大部分固体物质都属于晶体。而且，在宇宙空间的其他天体上也普遍存在着晶体物质。分析飞落到地球上的陨石了解到，陨石基本上是由晶体组成的。晶体也普遍存在于有机乃至有生命的物质中，因此晶体的存在具有普遍性。

为促进材料科技的稳固发展，晶体学的相关内容成为材料科学与工程领域基础理论的重要组成部分。晶体学是以晶体为研究对象的一门自然科学。大多数工程材料内部的结构基元均呈三维长程有序排列，从而使材料具备了晶体特征。

但多数情况下实际晶体的结构基元并不能完美地实现以三维长程有序的方

式排列。在长程排列的一些微观局部存在着不同类型的偏离有序排列的现象。晶体中偏离有序排列的微观区域称为晶体缺陷。晶体缺陷的存在会明显影响材料的工程性能，因而相关原理也是材料科学与工程基本晶体结构理论中不可缺少的组成部分。长程有序的排列是晶体物质基本的特征，同时在其结构基元的长程有序排列中也包含着结构缺陷。工程材料结构基元三维长程有序排列导致了材料的一些晶体学本质特性，而晶体缺陷会造成材料在其晶体学本质特性基础之上又出现了不同的工程特性。由此，本书的内容主要涉及材料的晶体特性和缺陷特性两方面的内容。

1.1.2 晶体的对称特征

观察和分析晶体的三维周期性重复排列的现象时，通常需要对晶体实施某种平移、旋转或其他几何操作，相应的平移尺寸往往与结构基元的尺寸相当，非常小。因此通常把由极其大量的原子规则堆砌而成的宏观晶体看做三维无限大的物体。若对晶体实施某种几何操作，则操作后会使晶体各原子的位置发生变化。使各原子及其周围坐标空间内所有几何点的位置发生变化，则变化后晶体的结构状态与变化前正好相同的操作称为对称操作。对所有晶体都可以实施一定数量的对称操作，因此晶体具备对称性。

以图 1.1a 中的晶体为例，设图 1.2a 所示规则排列晶体的原子为一个无限大的区域。对该晶体作几何操作，使晶体沿着图中左上侧（显示两个原子间距）的矢量所指示的方向平行移动一个矢量距离，或如此移动若干整数倍的该矢量距离（图 1.2b），若只观察始终保持不动的黑色框线所围住的有限区域，则可以发现黑色框线内的原子排列结构状态在操作前后没有发生任何变化，因此这种几何操作就是一种对称操作。上述实施的几何操作为平移，所以这种对

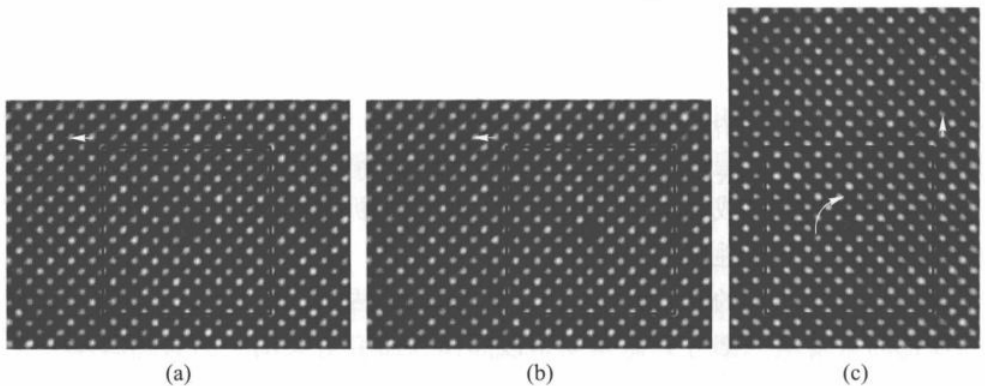


图 1.2 晶体的对称操作：(a) 无限大晶体中的有限局部；(b) 平移对称操作；
(c) 旋转对称操作

称操作称为对称平移操作。设一个轴线垂直图 1.2b 所示的原子面，并穿过黑色框线内中心部位的方形黑色符号。如果对该晶体再作几何操作，使原子面绕穿过方形黑色符号的轴线顺时针转 90° (图 1.2c)；若仍只观察始终保持不动的黑色框线所围住的有限区域，则可以发现黑色框线内的原子排列情况结构状态在操作前后还是没有发生任何变化，因此这种几何操作也是一种对称操作。由于所实施的几何操作为旋转，这种对称操作称为对称旋转操作。对任何晶体都可以实施平移对称操作和旋转对称操作，因此晶体一定具备平移对称性和旋转对称性。

1.1.3 晶体的基本共性

晶体都具有其结构基元三维长程有序排列的这一共有特性(图 1.1)使得所有晶体都会呈现一些基本的共同性质(参见图 1.3)。

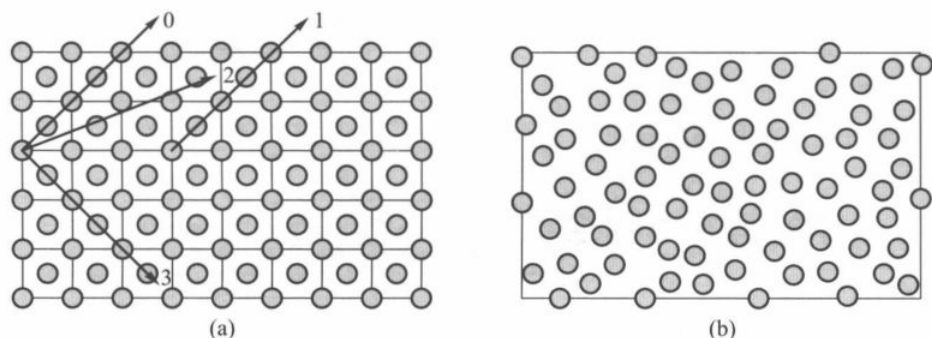


图 1.3 观察结构基元长程有序排列(a)造成基本共性及非长程有序排列(b)示意图

如果借助微观平移的方式在不同部位观察宏观无限大晶体的某性质时发现其性质相同，则反映了晶体该性质的平移对称性，也称为均匀性。当观察晶体某性质的方向从图 1.3a 中的方向 0 平移到方向 1 时，该方向上原子排列的规则不变，如排列密度不变，因而所观察的性能不变。然而，若改变观察宏观性质的方向，如从图 1.3a 中的方向 0 偏转到方向 2 时原子排列的规则发生改变，如排列密度改变，因而所观察的各种性能也会改变，称为各向异性。另外，晶体具有自发地形成规则几何外形的特征，称为自限性。不同晶体学平面作为表面时会因原子排列密度、键性质的不同而造成不同的表面能；物质热力学自发过程会造成晶体尽可能以低表面能的晶面作为表面，进而形成了规则的几何外形。当观察晶体某性质的方向从图 1.3a 中的方向 0 转换到方向 3 时，方向 3 上原子排列的规则与方向 1 相同，如排列密度相同，因而所观察的物理、化学等性能不变或相同，反映出相关性能的旋转对称性。晶体三维长程有序排列的

特性使得其结构中原子间的键合类型单一，或只存在有限的几种键能。当温度上升造成某类结合键不能维持而遭破坏时，晶体中这一类的结合键会同时全部被破坏，使得晶体原子在特定温度点因可以实现互相流动而转变成液体；因此所有晶体都会有固定的熔点。

在一定的条件下，晶体内部的结构基元可以转化成非长程有序排列的状态，从而使其结构特征发生质的变化。如含有放射性元素的矿物晶体，会受到放射性蜕变时所发生的 α 射线的辐照作用，使晶体有序结构遭到破坏，称为玻璃化或非晶化。常规玻璃内的结构基元并不呈现长程有序排列(图 1.3b)，但在特点条件下玻璃内部结构的结构基元也可以被调整成长程有序排列的方式，称为退玻璃化或晶化。激冷凝固可造成金属固体无法获得长程有序结构，但在高温下长时间加热又可以使其结构基元转变成长程有序状态。当晶体内部的结构基元为长程有序排列时，其内能最小。因此，对于同一物质的不同凝聚态来说，晶态是最稳定的。晶体的玻璃化过程必然与能量的输入或物质成分的变化相关联；而晶化过程却可以自发产生，从而转向更加稳定的晶态。由此可见，晶化是自发过程而非晶化是非自发过程。与无序排列相比，结构基元的长程有序排列会明显减小所需的排列空间(图 1.3)，因而使其密度升高。

1.2 晶体的基本对称性

1.2.1 平移对称性与点阵理论

在材料学领域通常会选取特定的晶体学方法表达晶体的平移对称性。设想一个由 A、B 两种原子构成的一维周期性排列的晶体如图 1.4a 所示，晶体中原子通常沿一维排列成直线。同类原子排列的周期长度为 a ，即最近邻 A 原子间的间距和最近邻 B 原子间的间距都是 a 。A、B 原子沿直线周期性排列的特点可以抽象成间距为 a 且排列成直线的一系列几何点(图 1.4b)。把长度为 a 的矢量 \mathbf{a} 沿直线以平移量 a 为步长不断重复平移就可以构造出由这些几何点组成的直线，其中矢量 \mathbf{a} 为最小的平移单元。如果把该晶体扩展成由 A、B、C 3 种原子构成的二维周期性排列的晶体(图 1.4c)，原子沿另一维空间的周期长度为 b ，且 \mathbf{a} 方向与 \mathbf{b} 方向的夹角为 γ ；则同类原子沿二维平面排列的周期长度分别是 a 和 b 。A、B、C 原子沿二维平面周期性排列的特点可以抽象成间距分别为 a 、 b 且排列成平面的一系列几何点(图 1.4d)。把长度为 a 和 b 的矢量 \mathbf{a} 和 \mathbf{b} 所组成的平行四边形在平面上分别以平移量 a 、 b 为步长沿矢量 \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 方向不断重复平移并组合排列，就可以构造出由这些几何点组成的平面，其中矢量 \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 及其夹角 γ 组成的平行四边形为最小的平移单元。同理，如果把该晶