



国防科工委“十五”规划教材·材料科学与工程

材料科学基础

谢希文 过梅丽 编著

北京航空航天大学出版社

北京理工大学出版社 西北工业大学出版社
哈尔滨工业大学出版社 哈尔滨工程大学出版社

内容简介

本书系统扼要地阐述了材料科学的基本理论和知识,即材料的结构、组织与其性能、行为之间的关系。全书涉及的材料有金属、陶瓷、高聚物和复合材料,涉及的性能有力、电、磁、热和光。通过比较各种不同材料的共性与特性,揭示材料设计的基本原则。本书与《材料工程基础》共同构成材料科学与工程专业的公共基础课的教材。

本书各章末均附有习题与参考文献,有利于学生自学与拓宽知识面。

本书可作为高等院校材料科学及相关专业的教科书或主要参考书,也可供有关专业的工程技术人员自学和参考。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学基础/谢希文等编著. —北京:北京航空航天大学出版社,2005.9

ISBN 7-81077-612-6

I. 材… II. 谢… III. 材料科学 IV. TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 031434 号

材料科学基础

谢希文 过梅丽 编著

责任编辑 刘晓明

责任校对 戚 爽

北京航空航天大学出版社出版发行

北京市海淀区学院路 37 号(100083)

发行部电话:010-82317024 传真:010-82328026

<http://www.buaapress.com.cn> E-mail: bhpresse@263.net

北京市松源印刷有限公司印装 各地书店经销

*

开本:787×960 1/16

印张:22.25 字数:498 千字

2005 年 9 月第 1 版 2005 年 9 月第 1 次印刷

印数:3 000 册

ISBN 7-81077-612-6 定价:30.00 元

国防科工委“十五”规划教材编委会

(按姓氏笔画排序)

主 任：张华祝

副主任：王泽山 陈懋章 屠森林

编 委：王 祁	王文生	王泽山	田 蔚	史仪凯
乔少杰	仲顺安	张华祝	张近乐	张耀春
杨志宏	肖锦清	苏秀华	辛玖林	陈光禹
陈国平	陈懋章	庞思勤	武博祎	金鸿章
贺安之	夏人伟	徐德民	聂 宏	贾宝山
郭黎利	屠森林	崔锐捷	黄文良	葛小春



总 序

国防科技工业是国家战略性产业,是国防现代化的重要工业和技术基础,也是国民经济发展和科学技术现代化的重要推动力量。半个多世纪以来,在党中央、国务院的正确领导和亲切关怀下,国防科技工业广大干部职工在知识的传承、科技的攀登与时代的洗礼中,取得了举世瞩目的辉煌成就;研制、生产了大量武器装备,满足了我军由单一陆军,发展成为包括空军、海军、第二炮兵和其他技术兵种在内的合成军队的需要,特别是在尖端技术方面,成功地掌握了原子弹、氢弹、洲际导弹、人造卫星和核潜艇技术,使我军拥有了一批克敌制胜的高技术武器装备,使我国成为世界上少数几个独立掌握核技术和外层空间技术的国家之一。国防科技工业沿着独立自主、自力更生的发展道路,建立了专业门类基本齐全,科研、试验、生产手段基本配套的国防科技工业体系,奠定了进行国防现代化建设最重要的物质基础;掌握了大量新技术、新工艺,研制了许多新设备、新材料,以“两弹一星”、“神舟”号载人航天为代表的国防尖端技术,大大提高了国家的科技水平和竞争力,使中国在世界高科技领域占有了一席之地。十一届三中全会以来,伴随着改革开放的伟大实践,国防科技工业适时地实行战略转移,大量军工技术转向民用,为发展国民经济作出了重要贡献。

国防科技工业是知识密集型产业,国防科技工业发展中的一切问题归根到底都是人才问题。⁵⁰多年来,国防科技工业培养和造就了一支以“两弹一星”元勋为代表的优秀的科技人才队伍,他们具有强烈的爱国主义思想和艰苦奋斗、无私奉献的精神,勇挑重担,敢于攻关,为攀登国防科技高峰进行了创造性劳动,成为推动我国科技进步的重要力量。面向新世纪的机遇与挑战,高等院校在培养国防科技人才,传播国防科技新知识、新思想,攻克国防基础科研和高技术研究难题当中,具有不可替代的作用。国防科工委高度重视,积极探



索,锐意改革,大力推进国防科技教育特别是高等教育事业的发展。

高等院校国防特色专业教材及专著是国防科技人才培养当中重要的知识载体和教学工具,但受种种客观因素的影响,现有的教材与专著整体上已落后于当今国防科技的发展水平,不适应国防现代化的形势要求,对国防科技高层次人才的培养造成了相当不利的影响。为尽快改变这种状况,建立起质量上乘、品种齐全、特点突出、适应当代国防科技发展的国防特色专业教材体系,国防科工委全额资助编写、出版 200 种国防特色专业重点教材和专著。为保证教材及专著的质量,在广泛动员全国相关专业领域的专家、学者竞投编著工作的基础上,以陈懋章、王泽山、陈一坚院士为代表的 100 多位专家、学者,对经各单位精选的近 550 种教材和专著进行了严格的评审,评选出近 200 种教材和学术专著,覆盖航空宇航科学与技术、控制科学与工程、仪器科学与技术、信息与通信技术、电子科学与技术、力学、材料科学与工程、机械工程、电气工程、兵器科学与技术、船舶与海洋工程、动力机械及工程热物理、光学工程、化学工程与技术、核科学与技术等学科领域。一批长期从事国防特色学科教学和科研工作的两院院士、资深专家和一线教师成为编著者,他们分别来自清华大学、北京航空航天大学、北京理工大学、华北工学院、沈阳航空工业学院、哈尔滨工业大学、哈尔滨工程大学、上海交通大学、南京航空航天大学、南京理工大学、苏州大学、华东船舶工业学院、东华理工学院、电子科技大学、西南交通大学、西北工业大学、西安交通大学等,具有较为广泛的代表性。在全面振兴国防科技工业的伟大事业中,国防特色专业重点教材和专著的出版,将为国防科技创新人才的培养起到积极的促进作用。

党的十六大提出,进入 21 世纪,我国进入了全面建设小康社会、加快推进社会主义现代化的新的发展阶段。全面建设小康社会的宏伟目标,对国防科技工业发展提出了新的更高的要求。推动经济与社会发展,提升国防实力,需要造就宏大的人才队伍,而教育是奠基的柱石。全面振兴国防科技工业必须始终把发展作为第一要务,落实科教兴国和人才强国战略,推动国防科技工业



走新型工业化道路,加快国防科技工业科技创新步伐。国防科技工业为有志青年展示才华,实现志向,提供了缤纷的舞台,希望广大青年学子刻苦学习科学文化知识,树立正确的世界观、人生观、价值观,努力担当起振兴国防科技工业、振兴中华的历史重任,创造出无愧于祖国和人民的业绩。祖国的未来无限美好,国防科技工业的明天将再创辉煌。

张华祝



前 言

为了拓宽学生的知识面,从 1988 学年开始,材料科学与工程导论成为北京航空航天大学材料科学与工程系(现为学院)学生的第一门不分专业的公共必修课,其中心内容就是阐明材料的性能与其成分、结构和加工工艺之间的关系,为学习以后的专业课程打好基础。1991 年 2 月,在原编讲义和教学实践的基础上,经过修改,由北京航空航天大学出版社正式出版了《材料科学与工程导论》。

为了适应新版教学计划并便于安排教学,著者将《材料科学与工程导论》一书分为《材料科学基础》和《材料工程基础》两书,内容分别偏重于材料科学部分和材料工程部分。《材料科学基础》与《材料工程基础》两书已分别于 1999 年 1 月和 1999 年 7 月由北京航空航天大学出版社出版。

《材料科学基础》第一版的第一、二、三、五、六章由宫声凯编写;绪论及第七、八章由谢希文编写;第四、九章由过梅丽编写;第十、十一、十二、十三章由田苒、过梅丽编写;第十四章由李荻、过梅丽编写。

作为国防科工委重点教材,本次修订时,仍以原书为基础,适当增加一些内容,以适应不同的教学要求。例如,在相图一章中,增加一节的篇幅简要介绍三元相图的一般规律和特点,使读者对三元相图有一个最初步的了解。这样,在读者没有深入学习三元相图以前(通常需要 12 学时左右),看到常见的三元相图垂直截面或等温截面时,能够知晓其含义和用途而不致感到束手无策。当然,这部分内容也可以略去不讲或留给读者自学。又如在金属和陶瓷的力学性能中,增加了金属的硬度一节,介绍了在产品检验中经常使用的硬度试验方法的原理,特别介绍了近几年国家标准(GB)和国际标准化组织的标准(ISO)对一些常用硬度试验方法的修订。由于一些高分子材料也可以用洛氏硬度试验测定其硬度,以及橡胶类高聚物材料可以采用压入法进行硬度测试,这些硬度试验方法也一并在这一节中介绍。

本书绪论、第一章至第九章仍由原编写人修订,最后五章均由过梅丽



修订。全书由谢希文、过梅丽任主编并由北京理工大学王富耻教授、北京航空航天大学路若英教授审阅。

限于作者的水平,对于书中的错误和不妥之处,欢迎使用本书的读者批评指正。

作 者

2003 年国庆于北航

绪 论

材料的领域是巨大和多样化的。随着人类在历史上的出现,材料也随之产生,人类文明进化时代就是以对某种材料的使用来划分的。当今,材料的领域十分广泛,从具有强烈火舌的吹氧炼钢炉到寂静的铜电解沉积;从规模巨大的钢材加工到珠宝业的手工作坊;从尺寸微小的电子器件芯片到摩天大厦;从日常使用的塑料食品袋到宇宙飞船的钛合金壳体;从明净的玻璃到碳黑;从液态汞到最硬的金刚石;从超导体到绝缘体;从可以在室温浇注的塑料到几乎难以熔化的耐火材料,可以说,材料是无处不在的。它在人们的日常生活中,在几乎所有的制造工业中,在科学和工程的多数研究和发展中,都起着重要的作用,并与能源和信息一起构成现代技术的三大支柱。

美国材料科学与工程调查委员会把材料定义为:“在机器、结构件、器件和产品中因其性能而成为有用的物质”。换句话说,材料是人们可用来制作物品的宇宙中物质的子集。

图 0.1 为在全球基础上的材料循环示意图。

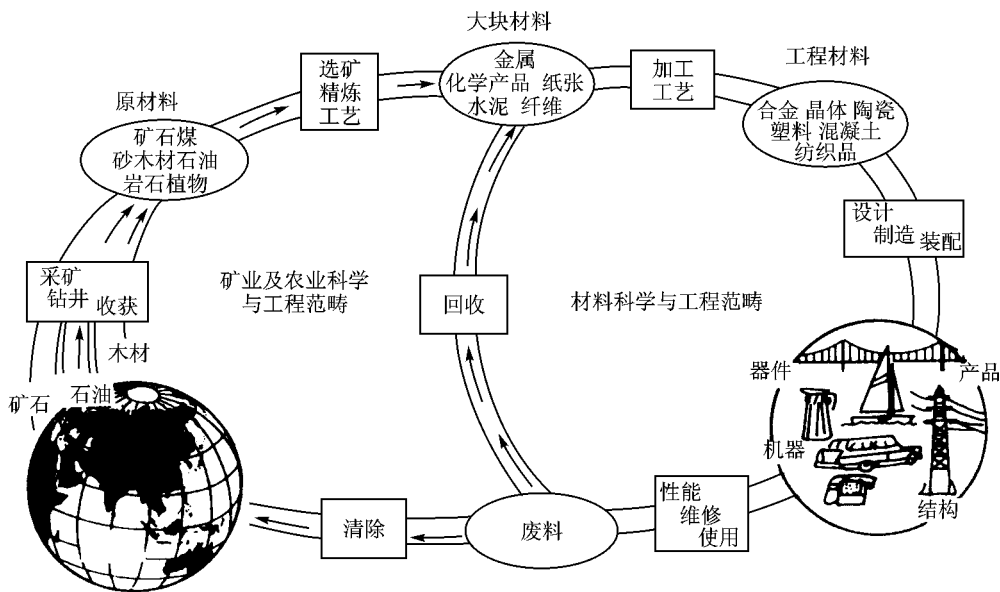


图 0.1 材料循环示意图

地球是人类现已利用的所有材料的来源和最终归宿。从地球上通过采矿、钻井和采伐得到的矿物、石油、木材等原材料,在经过选矿、精炼、提纯、制浆及其他工艺过程后,转化为工业



用材料,如金属、化工产品、纸张、水泥和纤维等。在随后的工艺过程中,这些材料又进一步被加工成工程材料,如晶体、合金、陶瓷、塑料、混凝土和纺织品等。通过设计、制造、装配等过程,再把工程材料做成有用的产品。当产品经使用达到其寿命后,又以废料的形式回到地球;或经过解体和材料回收,以基本材料的形式再次进入材料循环系统。

这样一来,材料循环很自然地就分为两个部分:图 0.1 左半部属于材料供应,主要是为了获得工业材料,它属于矿业及农业科学与工程范畴;图 0.1 右半部属于材料消耗,主要是在制造结构件、器件、机器及其随后的使用中对工程材料的消耗,它属于材料科学与工程范畴。

对于材料科学与工程,美国材料科学与工程调查委员会下的定义是:“材料科学与工程是关于将材料的成分、结构、加工工艺与其性能和用途联系起来的知识的开发和应用。”通常,材料科学部分更多地涉及到有关材料知识的开发,而材料工程部分则更多地涉及到有关材料知识的应用。

第二次世界大战以前,基础科学与工程的联系并不十分紧密,各有自己的科学体系。随着科学技术的发展,基础科学与工程联系日益紧密,甚至融为一体,并进而促进新学科的发展,缩短了从基础科学研究的新发现到付诸工业应用的周期。图 0.2 示意地表示出材料领域中固体科学与材料工程之间的结合随时间的变化。从图中可以看出,在 20 世纪 20 年代,固体科学和材料工程还是分离的;而在 20 世纪 40 年代,二者已开始有些交叉;到了 20 世纪 70 年代,二者大部分重叠,也就是在这个时期,开始形成了材料科学与工程这样一门新的学科。

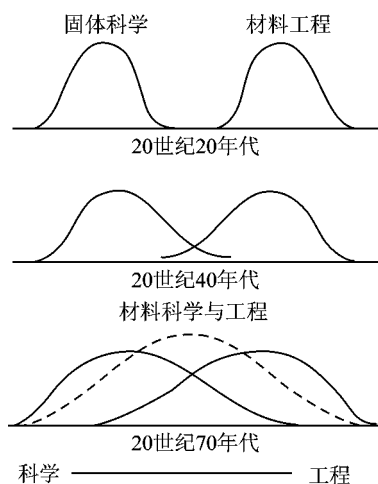


图 0.2 材料领域中科学与工程结合随时间的变化

在材料科学与工程的多学科领域中所包含的主要学科与亚学科有固体物理、固体化学、有机化学、高分子物理、高分子化学、冶金学和陶瓷学等。这个领域还包括合成化学、结构化学、理论化学、化学动力学以及化学工程、机械工程、电气工程、电子工程、土木工程、环境工程、航



空航天工程、核工程和生物医学工程等大部分工程学科。经济学和管理学等学科也和材料领域的主要活动有关。还应当强调指出的是,这些学科或亚学科和材料科学与工程领域的界限并不十分明显,而且还在不断地演化。因此,材料科学与工程就提供了一个良好的环境,使两个或更多的学科有目的地联合起来去解决一个材料方面的问题。这个问题可以是基础研究方面或是研究发展方面的,也可以是应用方面的。

下面举例说明材料科学与工程的学科间合作怎样成功地解决有涂层的不锈钢剃须刀片的研制问题。从1945年开始的10年中,美国一家以生产剃须刀而著称的 Gillette 公司成立了一个跨学科研究小组,开始对剃须刀片的性能和使用进行长远目标的研究。小组的成员由化学家(高分子化学、有机化学和物理化学方面的专家)、冶金学家、物理学家以及机械工程师和电子工程师组成。尽管当时还没有出现材料科学与工程这一新兴学科,但是此项研究的确是按照材料科学与工程的模式——多学科合作的模式进行的。

研究小组使用当时新研制成功的扫描电子显微镜来研究不同刀片材料在使用性能上的差别。这种批量生产的剃须刀片的刃口厚度只有数十 nm。这样小的尺寸在此之前是无法分辨的。研究表明,高碳钢刀片和不锈钢刀片的失效机制不同,前者是由于剃须时发生的化学腐蚀造成的。为了减少碳钢刀片刃口剃须时的损蚀,曾采用向刃口真空蒸镀上一薄层只有数十 nm 厚的金属涂层的防护方法。虽然其使用寿命得以延长,但是初始剃须质量有些降低。

研究中关键的一点是偶然观察到钢的表面上沉积了一薄层高聚物,这引起了研究人员的重视,决定附带进行一项试验,即能否使相对分子量大的高聚物在真空中的金属表面形成一连续涂层。所选用的高聚物为热稳定性极好的聚四氟乙烯(PTFE)。试验结果表明,有 PTFE 涂层的刀片,其切割能力有了改善,这正好和预期的结果相反。随后用这种刀片进行的剃须试验也表明,它比没有涂层的刀片有了改进。这是首次发现一个有涂层剃须刀片的剃须质量能超过磨得锋利的正常刀片。

这一发现导致了对用做剃须刀片刃口涂层的碳氟化合物的全面研究。在初始研究中发现,相对分子量大的 PTFE 沉积到刀片的刃口后降解为相对分子量较小、熔点较低和结晶度较高的材料。于是,研究小组开始致力于合成相对分子量能够得到精细控制的碳氟化合物。

商业用大相对分子量 PTFE 的另一个主要问题是颗粒尺寸较大以及熔体的粘度很高。这种聚合物颗粒在远高于其熔点的温度下流动性不好,难以形成无气孔的膜,致使最终形成的 PTFE 膜的厚度达 $1\text{ }\mu\text{m}$ 甚至更厚。这样的膜厚对于初始剃须质量是不利的,必须经过“试运转”,将膜磨薄以后才能达到最佳剃须质量。

为了克服这一缺点,研究小组又设法寻找一种 PTFE,使其在热压结时熔化的颗粒能自由地流动和聚集。所试验过的 PTFE,相对分子量低的只有 1 000,高的可达几百万。相对分子量非常小的 PTFE 能自由地流动,但刀片上膜的使用寿命低。后来发现,相对分子量从 30 000~200 000 的材料形成膜时具有所期望的熔体流动性能,而且刀片的剃须寿命还出人



意料地超过相对分子质量非常大的商用 PTFE。用上述相对分子质量范围的 PTFE 可以得到更薄的(厚度为 $0.1\sim 0.2\ \mu\text{m}$)无气孔膜,而且从最初使用就具有优异的剃须质量。由于这种聚合物的流动性有所改善,在成批生产时,膜的厚度更容易得到控制。研究还表明,经过数次剃须后,PTFE 涂层一直存留在刀片最终刃口附近。

对于剃须刀片近期的研究工作是研制合金涂层来强化刃口,在这里,电子显微分析技术和物理冶金学起了主要作用。所使用的合金是具有超点阵的金属间化合物,将其涂敷在刃口,再涂敷以 PTFE,就使刀片具有优异的使用寿命。在当时,用 X 射线衍射技术测定块状 Cr_3Pt 的有序超点阵结构并不困难,但是要测定刃口上 Cr_3Pt 薄膜的晶体结构就非常困难了。然而,使用电子显微镜和细致的电子衍射分析,证实这层厚度仅有 $30\sim 50\ \text{nm}$ 的气相沉积涂层具有 A15 型的有序晶体结构,其晶粒异常细小并具有点阵缺陷。 Cr_3Pt 的维氏显微硬度(使用 136° 金刚石棱锥体压头测得)超过 1 400,而通常的 PTFE 涂层刀片的硬度范围只有 $550\sim 650$ 。

通过以上实例可以看出,对于一个市场需求量很大的小小剃须刀片,为了提高它的性能和寿命,也需要在材料科学与工程领域内经过多学科研究人员的共同努力才能得以实现。

材料科学与工程的多学科性和跨学科性,使得原来按材料种类如金属、陶瓷、高聚物等划分的学科,彼此之间的界限已不那么分明了。

当今,来自火箭、导弹、飞机、宇宙飞船、核能和通信等领域的新要求,使科学和技术的许多部门都承担了新的挑战,这些挑战都是决定进展的要素,而材料方面的影响又往往首当其冲。最先进的技术成就对材料某些性能提出的要求已达到极为苛刻的程度,同时还要求材料具有合理的稳定性和成型性。这一点与传统的老材料可以交换地用于多种目的是极不相同的。

在材料科学与工程(现在也称为材料科学技术)领域工作的科学技术人员应该勇于接受挑战,作出无愧于我们时代的新贡献!

参考文献

- 1 Morris Cohen. Ed. Materials Science and Engineering: Its Evolution, Practice and Prospects. Materials Science and Engineering, 1979,37(1):1~102

第一篇

材料的结构

第一章 晶体学基础

人们通过对天然矿物外部形态的观察发现,绝大多数的天然矿物常具有独特的规则几何多面体的外形,即其外表多为平整的面所包围,同时还具有由两个面相交的直线和直线会聚的夹角。人们将这种天然生成的固体称为晶体,称其平面为晶面,称其直线为晶棱,称晶棱会聚的夹角为角顶。

然而,晶体并非仅仅局限于这种天然生成的固体。金属和合金在一般条件下都是晶体,一些陶瓷材料是晶体,高聚物在某些条件下也是晶体。本章主要阐明晶体的基本概念、晶体的结构及其表征方法等;此外,也将阐述非晶体、准晶及液晶的基本概念。

1.1 晶 体

晶体并不是绝对地具有规则几何多面体的外形,多面体的几何外形不是晶体的本质,而只是晶体内部某种本质因素所具有的规律性在晶体外表上的一种反映。20 世纪初通过 X 射线对晶体的内部结构进行研究发现,一切晶体的内部质点(分子、原子或离子等)都在空间有规则地排列着。

图 1.1 所示是食盐(NaCl)的晶体结构。从图 1.1 中可以看出, Na^+ 和 Cl^- 在三维空间交错排列。它们在不同的方向上,都按照一定的间距重复出现。这种规则的排列,使得食盐晶体能够形成规则的几何外形。反之,未表现出规则几何外形的食盐晶体,并非内部质点排列不规则,而是由于在其生长过程中,受某些外界因素影响所致。

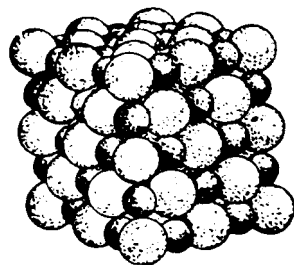


图 1.1 食盐(NaCl)的晶体结构

上述情况适用于所有晶体,所不同的只是不同的晶体其



内部质点的种类不同、排列方式不一或质点间距不同。可以说,内部质点在三维空间周期性重复的排列是晶体结构最突出的特点,是晶体同晶体以外的其他固体最根本的区别。

晶体的这种周期性结构,使其具有某些共同的基本性质。

1. 晶体的自限性

晶体均具有自发地形成封闭的几何外形能力的性质。晶体的这种性质决定于晶体内部结构的周期性。这是由于晶体在生长过程中自发地形成晶面,晶面相交成为晶棱,晶棱会聚成顶点,从而形成具有多面体的外形,把它们自身封闭起来。

必须指出,由于晶体在生长时受到空间的限制,自然生长和人造矿物晶体中呈现规则的几何多面体外形的不多。不过,如果条件许可,让它们继续生长时,还是可以自发地形成规则的几何多面体外形的。

2. 晶体的均匀性

一切晶体内部各个部分的宏观性质是相同的,例如有着相同的化学组成、相同的密度等。晶体的均匀性来源于晶体中原子周期排布的周期很小,宏观观察分辨不出微观的不连续性。

气体、液体和玻璃体也具有均匀性,这是由于原子杂乱无章地分布,其均匀性来源于原子分布的统计规律。

3. 晶体的各向异性

在晶体中,不同的方向上具有不同的物理性质,如电导率、折光率和机械强度等在不同的方向上存在着差异。晶体的这种特性,是由于在晶体内部原子的周期性排列结构中,不同方向上原子或分子的排列情况不同,因而反映出物理性质的各向异性。

晶体的各向同性和各向异性,说明了晶体在相同方向上具有相同的性质,而在不同方向上便具有不同的性质。这是一个问题的两个方面,它既说明了晶体内部构造的均一性,又说明了在均一性的内部构造中,包括着在不同的方向上构造不相同这一异向性。

4. 晶体的对称性

晶体的理想外形和晶体的内部结构以及晶体的物理化学性质都有特有的对称性。晶体的对称性是由于晶体内部质点作有规则排列造成的。根据空间点阵规律,在任一晶体结构中的任一行列方向上,总是存在着一系列为数无限的作周期性重复排列的等同点,这本身就表现出一种对称性,所以说对称性在晶体中是普遍存在的。晶体外部形态的对称性,是晶体的宏观对称;晶体的内部构造,也具有对称性,这种对称性是晶体的微观对称。

5. 晶体的稳定性

与具有相同化学成分,但处于不同状态下的物体(如气体、液体、非晶态固体)相比,晶体是最稳定的,即在相同的热力学条件下,晶体的内能最小。

上述晶体的特性是由晶体内部原子或分子排列的周期性所决定的,是各种晶体所共有的,是晶体的基本特性。



1.2 晶体结构与空间点阵

一个理想晶体可以看成是由一个基本单位在空间按一定的规则周期性无限重复构成的。晶体中所有基本单位的化学组成相同,空间结构相同,排列取向相同,周围环境相同。这种基本单位称为基元(motif)。基元可以是单个原子,也可以是一组相同或不同的原子。许多金属晶体结构的基元就是单个原子,如铝、铁、铜等;而结构复杂的 $\alpha\text{-Mn}$,其基元中含有26个原子。值得注意的是,结构基元不同于化学组成的基本单位,如聚乙烯的化学组成的基本单位为 $-\text{CH}_2-$,而结构基元却为 $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ 。

若将每个基元抽象成一个几何点,即在基元中任意规定一点,然后在所有其他基元的相同位置也标出一点,则这些点的阵列就构成了该晶体的点阵(lattice)。点阵是一个几何概念,是按周期性规律在空间排布的一组无限多个的点,每个点都具有相同的周围环境,在其中连接任意两点的矢量进行平移时,能使点阵复原。一维、二维及三维周期排列的点分别为直线点阵、平面点阵及空间点阵(一维、二维或三维点阵)。图1.2(a),(b),(c)给出了三种不同的二维周期重复图形,这三个图形的基元各不相同,但具有相同的平面点阵,如图1.2(d)所示。

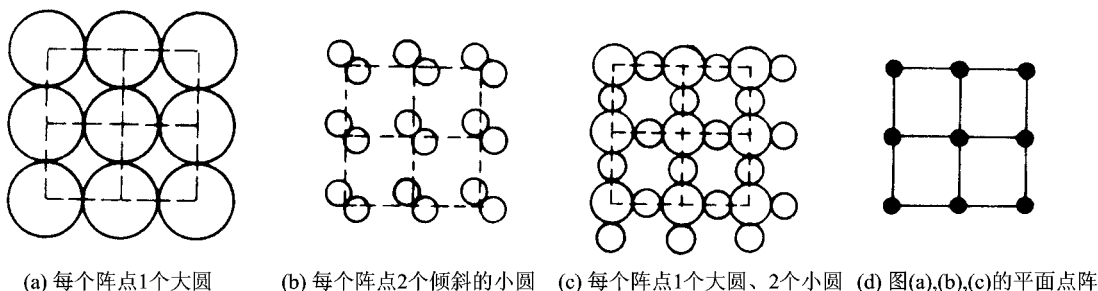


图 1.2 三种二维周期重复图形及其平面点阵

如果给出晶体基元的原子种类、数目、排列情况以及该晶体的空间点阵,则这个晶体的结构也就完全确定了。换句话说,如果把基元放在空间点阵中每一个阵点的相同位置上,就可以得到该晶体结构。因此,晶体结构、基元和空间点阵间的关系,可以示意地表示为

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

应当注意到,上式并不是一个数学关系式,而只是用来表示这三者之间的关系。

1.3 点阵的描述

如果点阵只能用画在纸上的点的阵列来描述,那将是非常不便的,特别是对于三维空间点



阵就更加困难。空间点阵可以用平移矢量 r 来描述。选择任一阵点为原点,连接三个不相平行的邻近的点阵点间的矢量作为平移基矢 a, b, c ,则有

$$r = ua + vb + wc$$

式中, u, v, w 为任意整数。当 u, v, w 中的两个为零时是直线点阵,一个为零时是平面点阵。

图 1.3 给出了一个空间点阵及其平移基矢 a, b, c ,图中所示的点阵平移矢量 r 可以表示为

$$r = 2a + b + c$$

可以把空间点阵按平行六面体划分为许多形状和大小相同的网格,称其为点阵晶胞。划分平行六面体点阵晶胞的 Bravais 法则是:应反映点阵的对称性,晶胞直角尽量多,且包含阵点的点数最少。为了反映对称性,晶胞中的阵点数可大于 1。含有一个阵点的晶胞称为初基晶胞或简单晶胞;含有两个或两个以上阵点的称为非初基晶胞。只有初基晶胞的三个棱边才能构成平移基矢。

为了表示晶胞的形状和大小,可将晶胞画在空间坐标上,坐标轴(又称晶轴)分别与晶胞的三个棱边重合,坐标的原点为晶胞的一个顶点,坐标轴的顺序按右螺旋规则(也可以按左螺旋规则,本书采用右螺旋规则)。晶胞的棱边长以 a, b, c 表示,棱间夹角以 α, β, γ 表示,如图 1.4 所示。棱边长 a, b, c 和棱间夹角 α, β, γ 六个参数称为点阵常数。

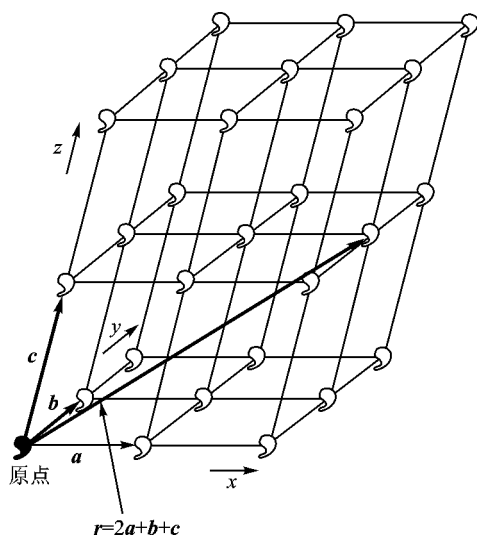


图 1.3 空间点阵及其平移基矢

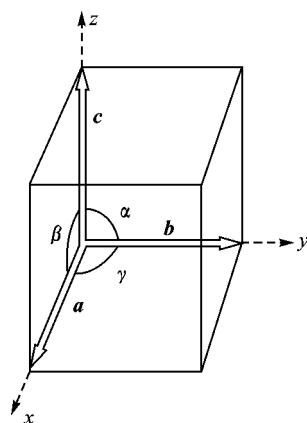


图 1.4 晶胞的空间坐标表示法

可以用直线把晶体的周期性划分为一个个平行六面体,它能生动地显示出晶体结构的周期性规律。点阵和点阵晶胞有着相同的意义,都是从实际晶体结构中抽象出来的。它们是用



来表示晶体周期性结构规律的一种理想模型。

如果在点阵晶胞中,标出相应晶体结构中基元各原子的位置,则可得到构成晶体的基本结构单位。这种平行六面体的基本结构单位叫晶胞(unit cell)。晶胞有两个要素:一个要素是晶胞的大小和形状,由点阵常数 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ 规定;另一个要素是晶胞内部各个原子的位置坐标,由原子坐标参数 (x, y, z) 表示。坐标参数的意义是指由晶胞原点指向原子的矢量 r , 用单位矢量 a, b, c 表达,即

$$r = xa + yb + zc$$

知道了这两个基本要素,就知道相应晶体的空间结构了。

值得注意的是:通常把点阵晶胞和结构晶胞都称为晶胞,但要注意这二者是有区别的。当晶体结构的基元只包含一个原子时,结构晶胞与点阵晶胞的结点数目完全一样。但对于前者,结点代表晶体中原子所在的位置;而对于后者,结点则代表空间点阵中的阵点位置。

1.4 14 种空间点阵 (Bravais 点阵)

根据晶体的对称特点,可将晶体分为 7 个晶系:

- ① 三斜晶系(triclinic 或 anorthic) $a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ 。
- ② 单斜晶系(monoclinic) $a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ (第二种定向,晶体学常用);
 $a \neq b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$ (第一种定向)。
- ③ 正交晶系(orthorhombic) $a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ (又称斜方晶系)。
- ④ 菱方晶系(rhombohedral) $a = b = c; \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ (又称三方晶系)。
- ⑤ 正方晶系(tetragonal) $a = b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ (又称四方晶系)。
- ⑥ 六方晶系(hexagonal) $a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$ 。
- ⑦ 立方晶系(cubic) $a = b = c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ (又称等轴晶系)。

如 1.3 节所述,可以选取晶胞来表示各晶系的点阵。如果只需反映点阵的周期性,则晶胞取初基的,即最小体积的平行六面体就可以了。对于简单晶胞,平均一个晶胞只含有一个阵点。但除了周期性外,空间点阵还有一定的对称性。为了能同时反映对称性,在选取晶胞时,则不得不放弃初基的要求,即晶胞体积不一定最小。此时在面心或体心位置也可有阵点,这些晶胞称为有心晶胞,可由初基(用 P 表示)进行“加心”操作得到,它们组成的点阵称为有心点阵。加心操作以不破坏点阵条件为原则,要求既能保持晶系不变,又能产生新的对称性,且与原点阵有区别。这样只有三种加心操作,即加底心(A, B 或 C 面)、加面心(F)和加体心(I)。

法国晶体学家 Bravais(1811—1863 年)于 1850 年用数学方法推导出空间点阵只能有 14 种,即 7 种初基点阵和 7 种有心点阵,合称为 14 种空间点阵(Bravais 点阵)。图 1.5 为 14 种空间点阵的晶胞。表 1.1 给出了每种晶胞的名称和所属晶系、棱边及夹角关系、Pearson 符号以及晶胞阵点数。