

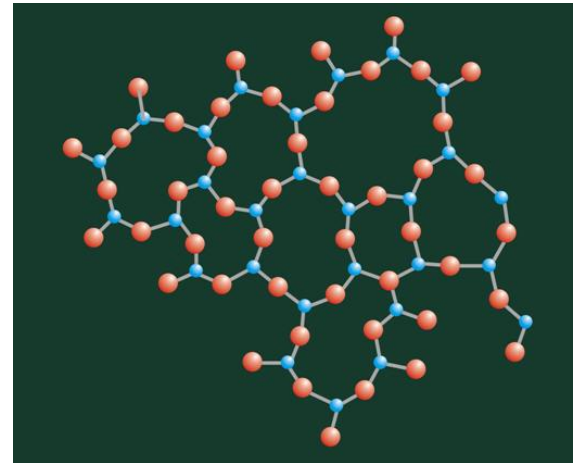
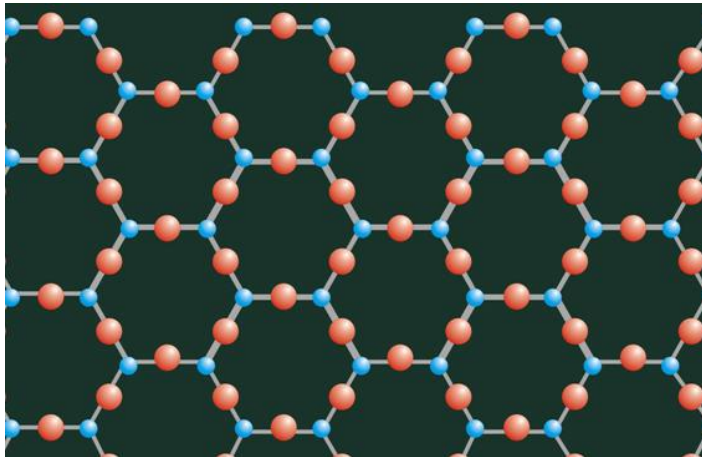
第二章 固体结构 (Solid Structure)

物质的聚集态：

气态 (Gas)、液态 (Liquid)、固态 (Solid)

固态：

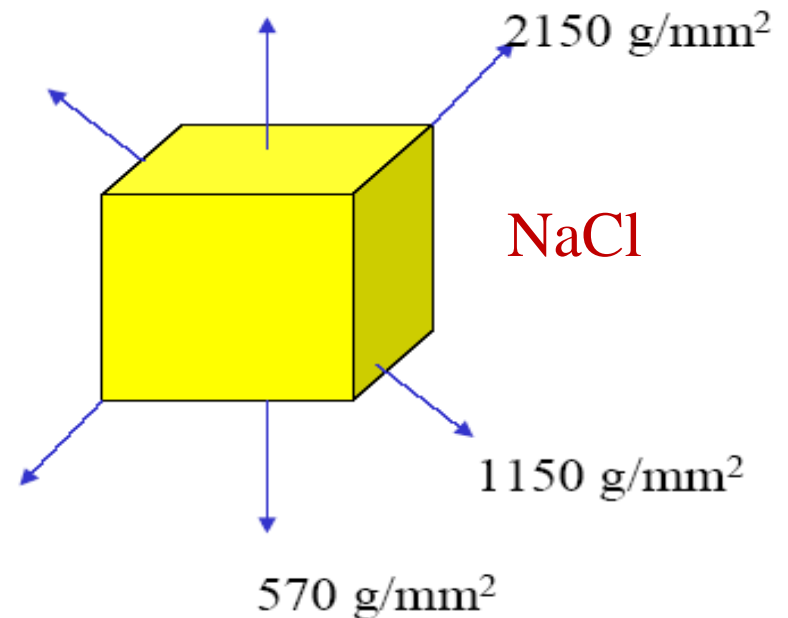
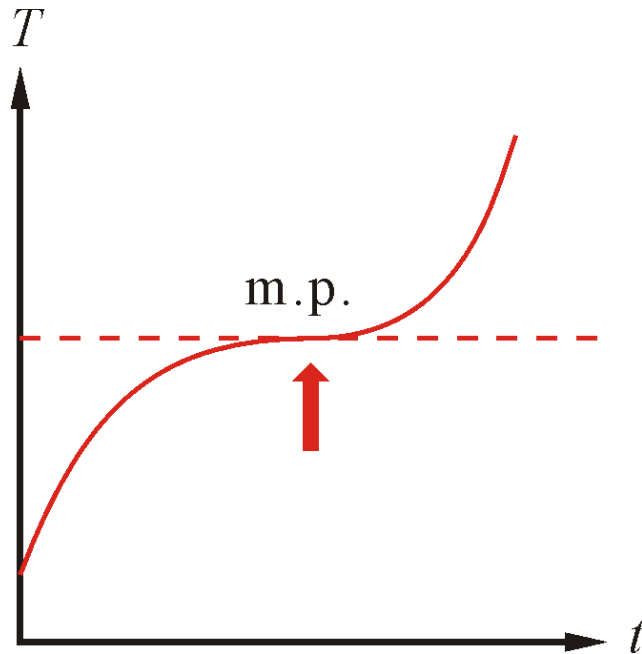
晶体 (Crystal)、非晶体 (Amorphous)

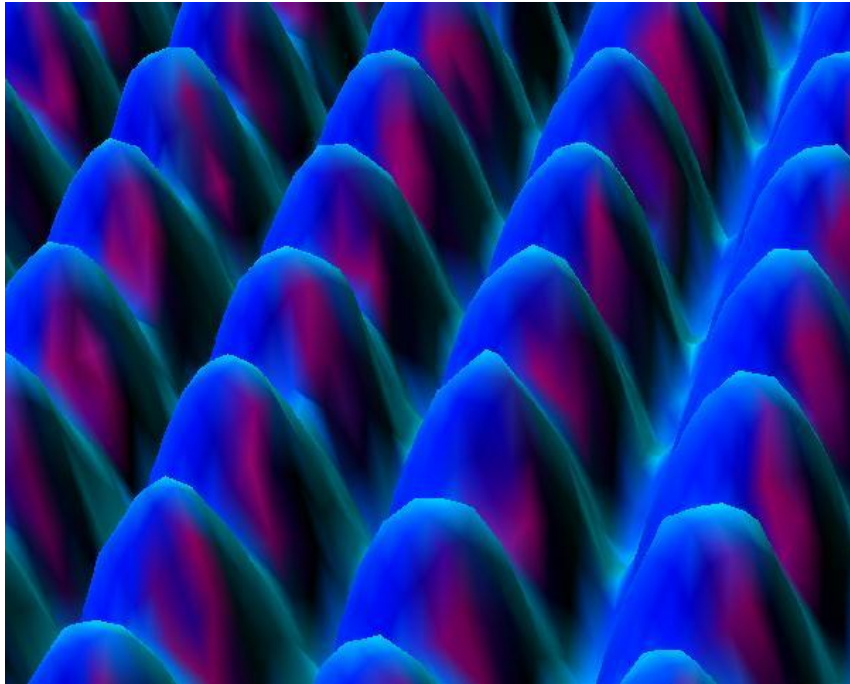
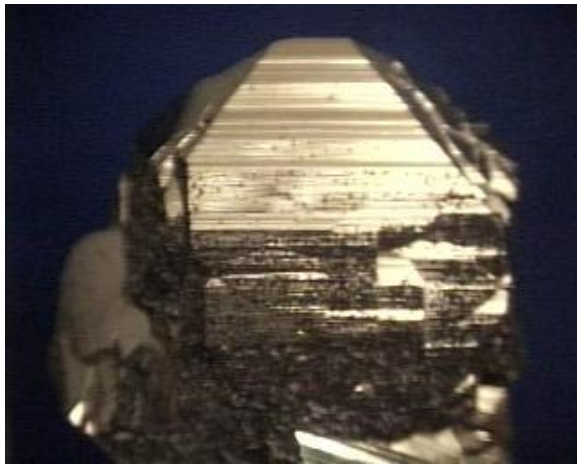


晶体结构与性能特点

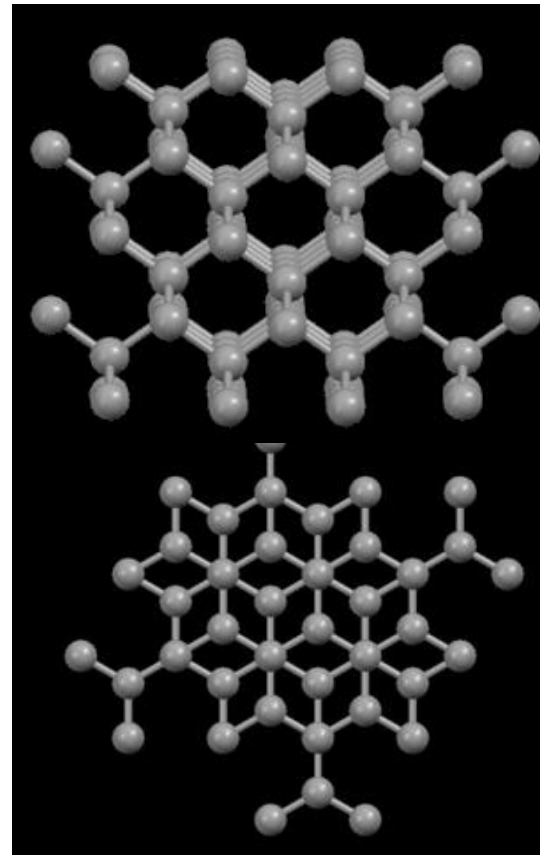
晶体结构的基本特征：原子（或分子、离子）在三维空间
呈周期性重复排列（periodic repeated array）
即存在长程有序（long-range order）

晶体性能上两大特点：固定的熔点（melting point），
各向异性（anisotropy）





Note the regular rows of Pt atoms.



**晶体的宏观
几何特征**

※ 1 晶体学基础

(Fundamentals of crystallography)

周期性结构二要素:

- (1) 周期性重复的内容——结构基元
- (2) 周期性重复的大小与方向，即平移矢量

周期性结构的研究方法——点阵理论:

将晶体中的结构基元(重复的内容)抽象为几何学中的点,这些点按一定的方式在空间重复排列形成点阵(由阵点组成)




一、晶体的空间点阵 (Space lattice)

1. 空间点阵的概念

将晶体中重复出现的最小单元作为**结构基元**，用一个数学上的点来代表，即可得到一个由无数几何点在三维空间排列成规则的阵列——**空间点阵**。

特征：每个阵点在空间分布必须具有完全相同的周围环境 (surrounding)

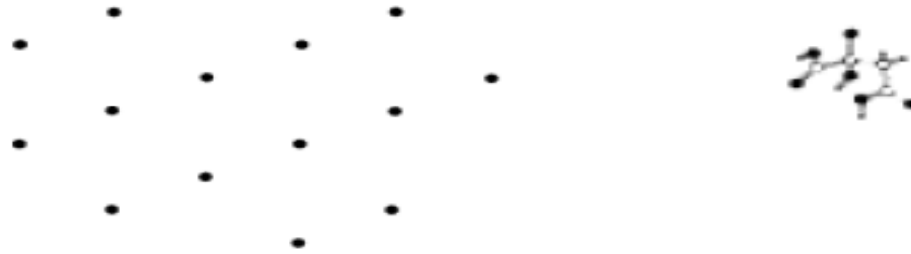
点阵必须具备的三个条件

- **点 阵**  由点阵点在空间排布形成的图形
- **阵 点**  由重复单位抽象出的几何学上的点
- **结构基元**  点阵点所代表的重复单位的具体内容

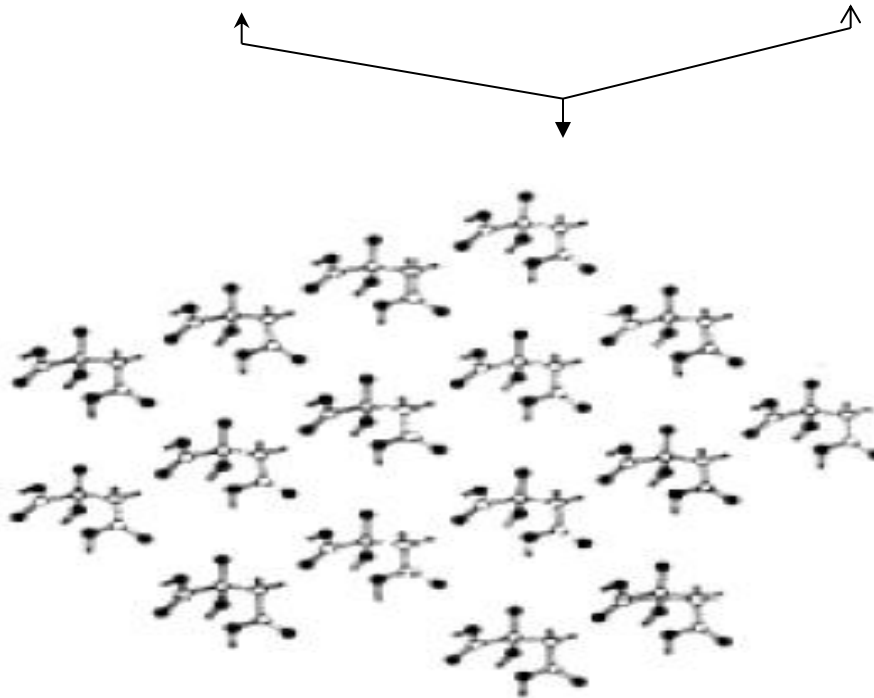
晶体结构 = 点阵 + 结构基元

晶体结构与点阵

lattice
点阵



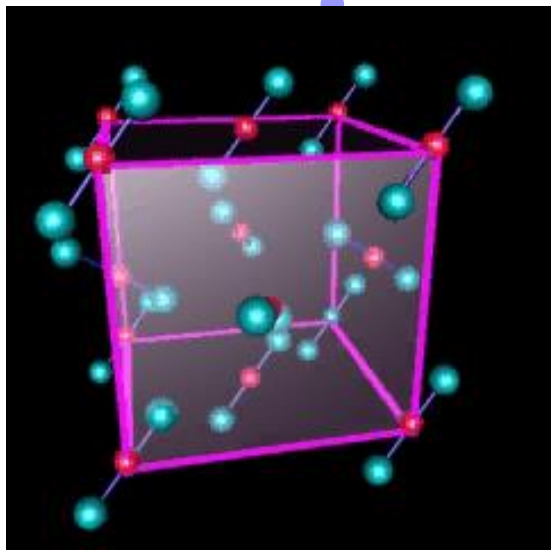
**structural
motif**
结构基元



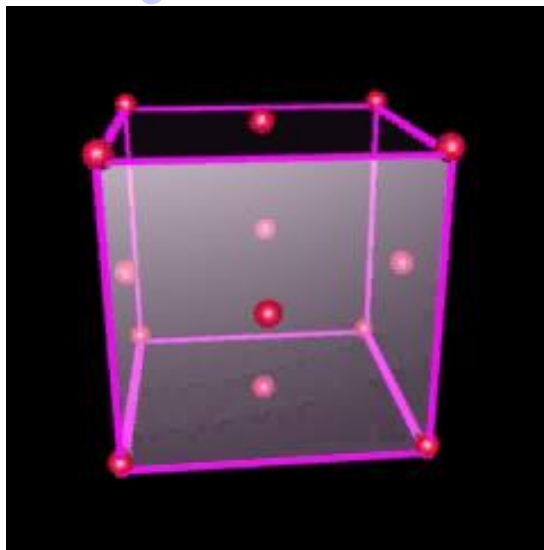
**Crystal
structure**
晶体结构

晶体结构 = 点阵 + 结构基元

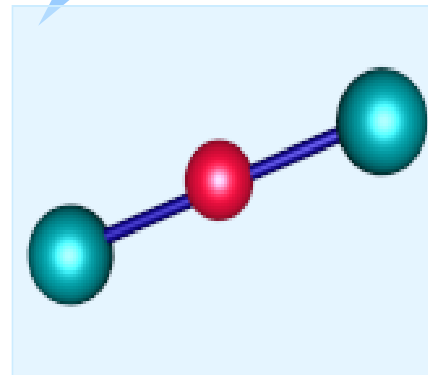
晶体结构



点阵



结构基元



点阵

直线点阵 ——

所有点阵点分布在一条直线上。

平面点阵 ——

所有点阵点分布在一个平面上。

空间点阵 ——

所有点阵点分布在三维空间上。

2. 晶胞 (Unit cells)

代表性的基本单元 (最小平行六面体) small repeat entities

选取晶胞的原则：

- I) 选取的平行六面体应与宏观晶体具有同样的对称性；
- II) 平行六面体内的棱和角相等的数目应最多；
- III) 当平行六面体的棱角存在直角时，直角的数目应最多；
- IV) 在满足上条件，晶胞应具有最小的体积

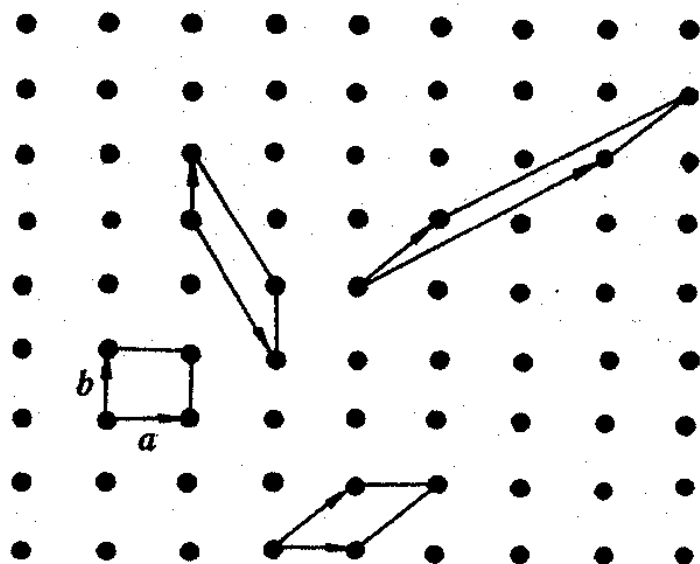
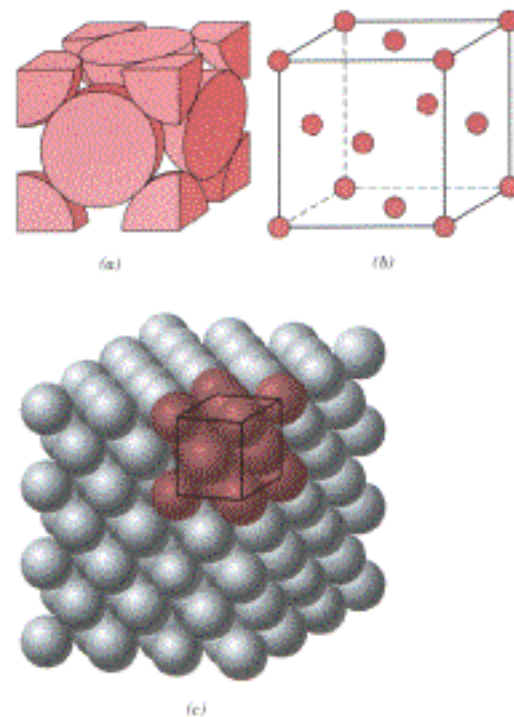
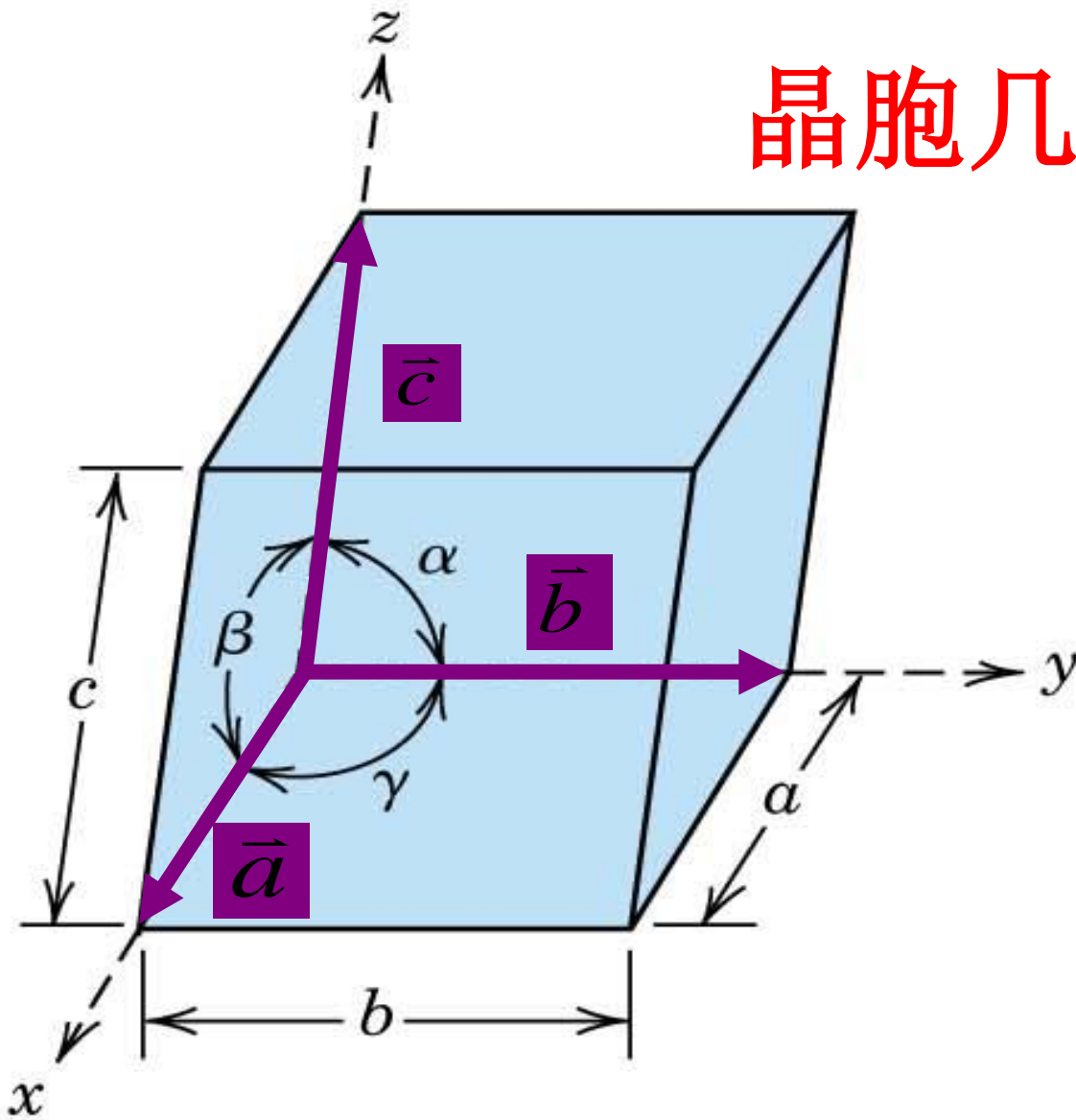


图 2.2 在点阵中选取晶胞



晶胞几何描述



描述晶胞：

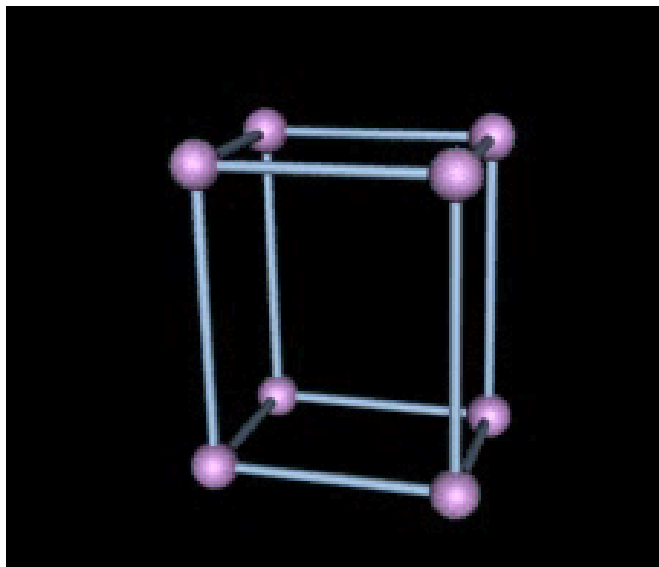
- 棱边（点阵常数）
- 晶轴间的夹角
- 点阵矢量

晶胞体积

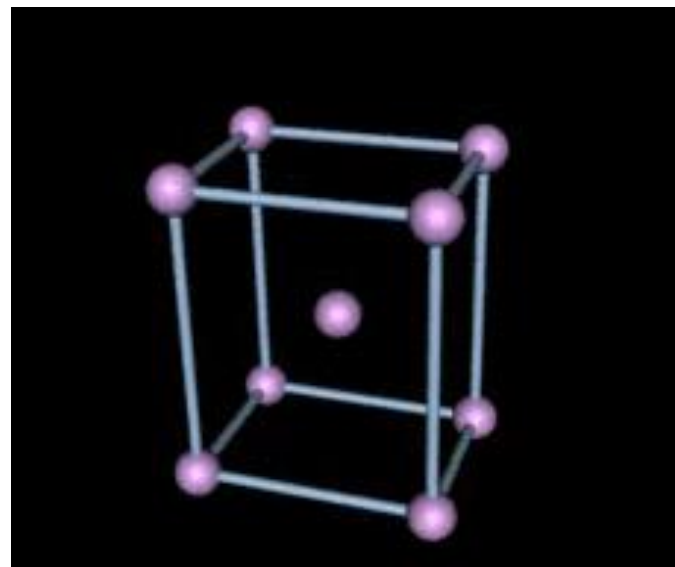
$$V = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})$$

简单晶胞（初级晶胞）：只在平行六面体每个顶角上有一阵点

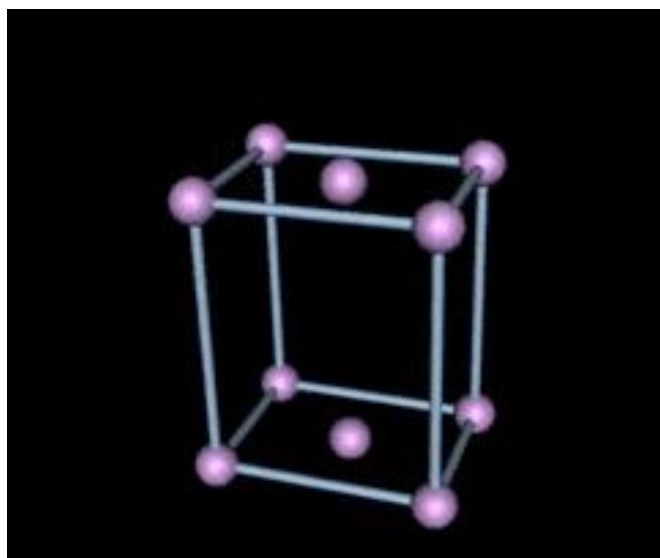
复杂晶胞：除在顶角外，在体心、面心或底心上有阵点



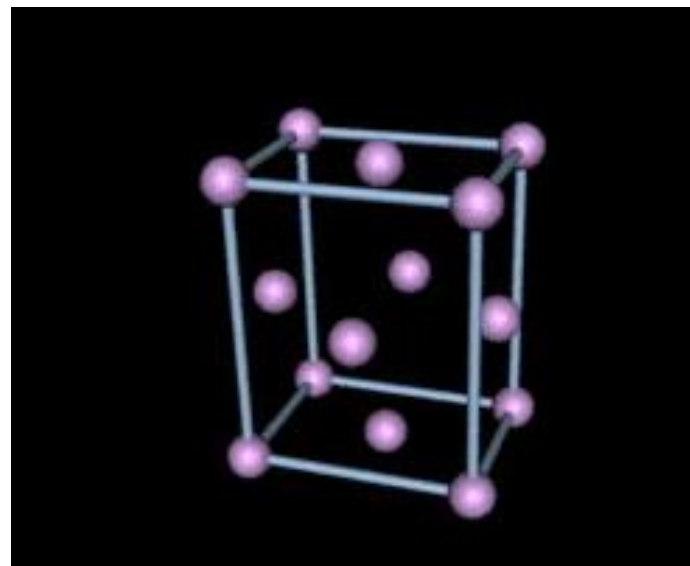
简单晶胞



体心晶胞



底心晶胞



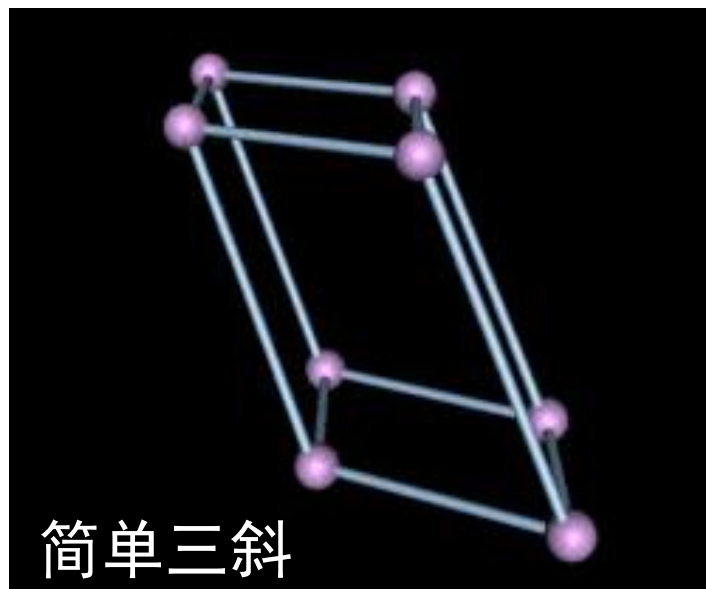
面心晶胞

3. 晶系与布拉菲点阵 (Crystal System and Bravais Lattice)

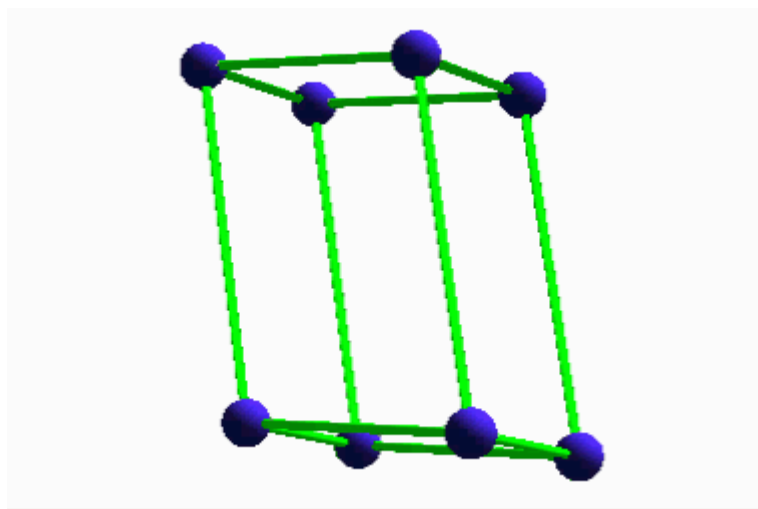
七个晶系, 14个布拉菲点阵

晶系	布拉菲点阵	晶系	布拉菲点阵
三斜 Triclinic $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$	简单三斜	六方 Hexagonal $a_1 = a_2 = a_3 \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	简单六方
单斜 Monoclinic $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	简单单斜 底心单斜	四方 (正方) Tetragonal $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单四方 体心四方
正交 Orthorhombic $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单正交 底心正交 体心正交 面心正交	菱方 Rhombohedral $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	简单菱方
		立方 Cubic $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单立方 体心立方 面心立方

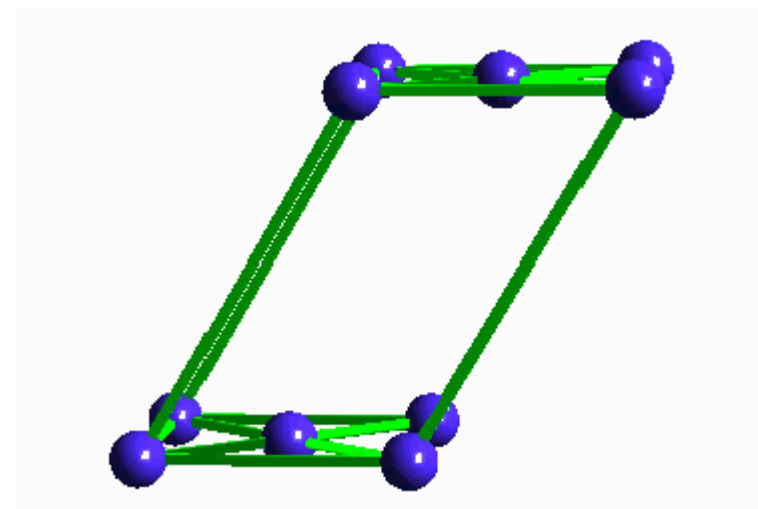
三斜 Triclinic
 $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$



单斜 Monoclinic
 $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$

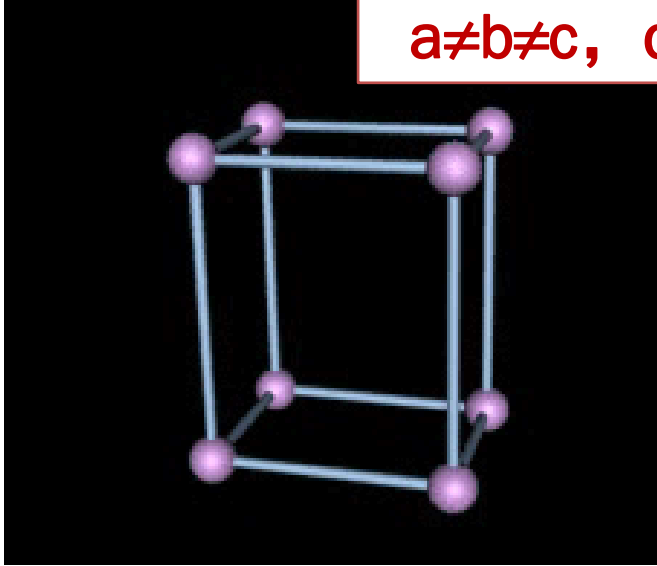


简单单斜

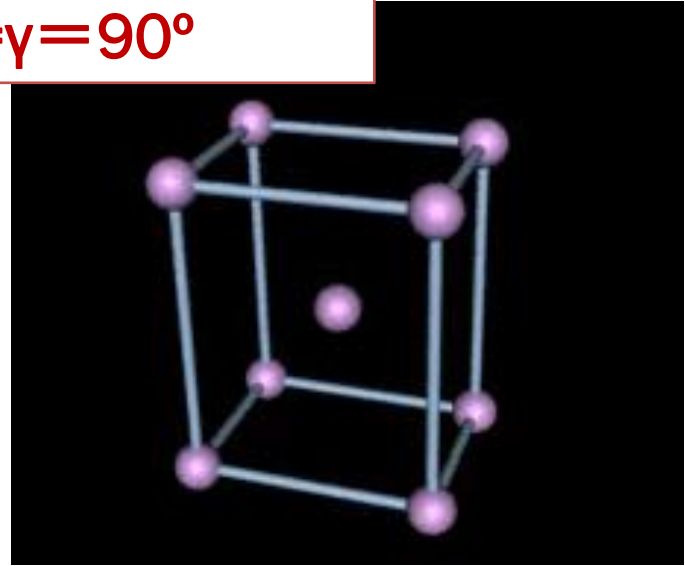


底心单斜

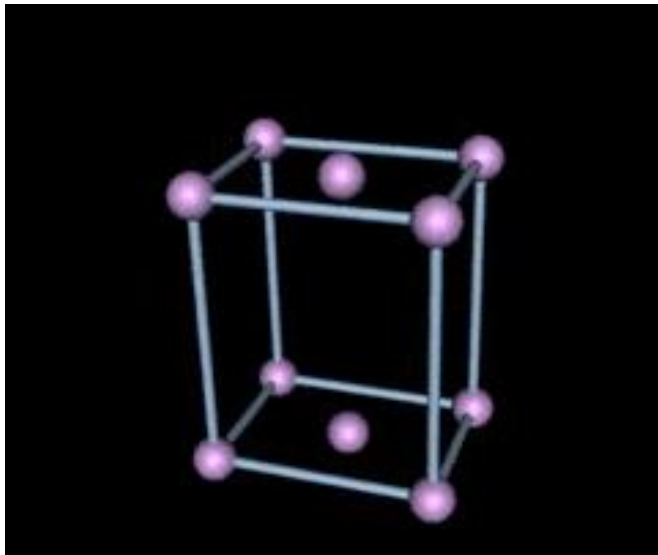
正交 Orthorhombic
 $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



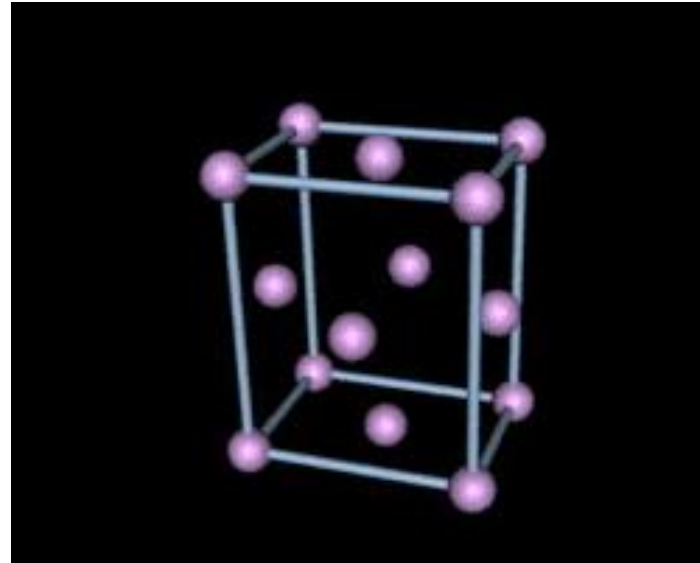
简单正交



体心正交

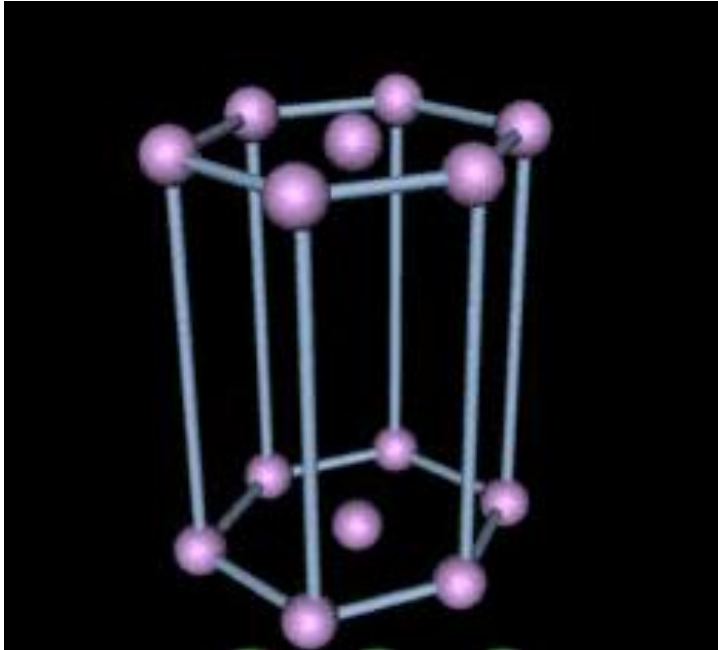


底心正交



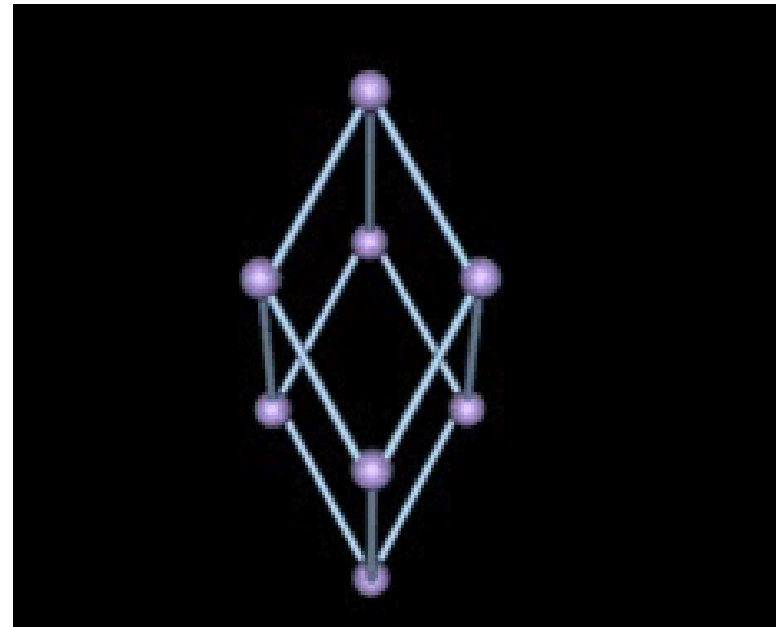
面心正交

六方 Hexagonal
 $a_1=a_2=a_3 \neq c$, $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$



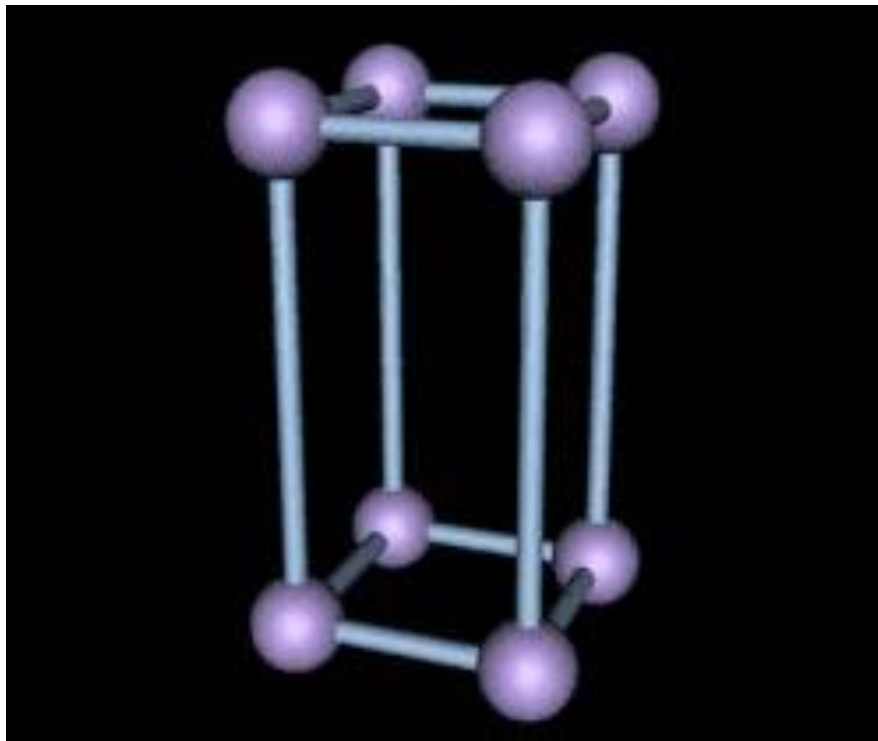
简单六方

菱方 Rhombohedral
 $a=b=c$, $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$

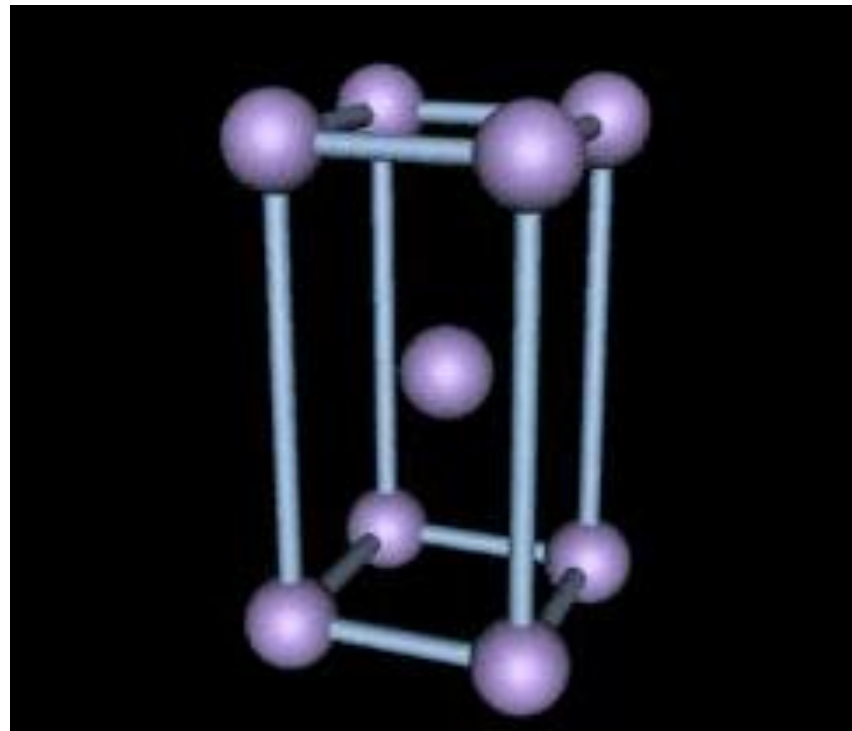


简单菱方

四方（正方）Tetragonal
 $a=b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



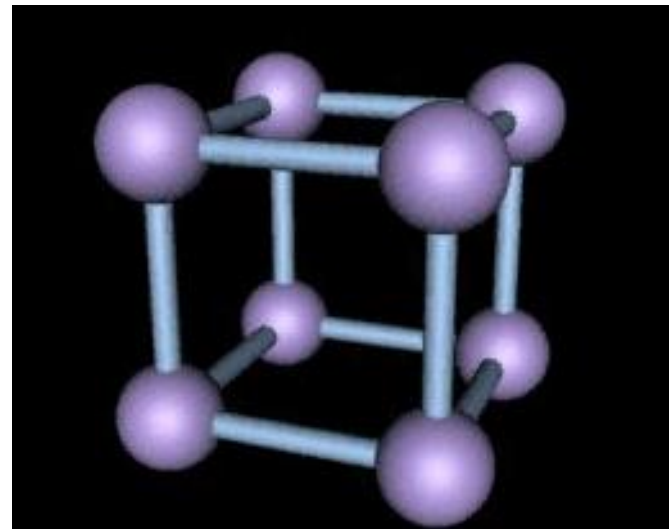
简单四方



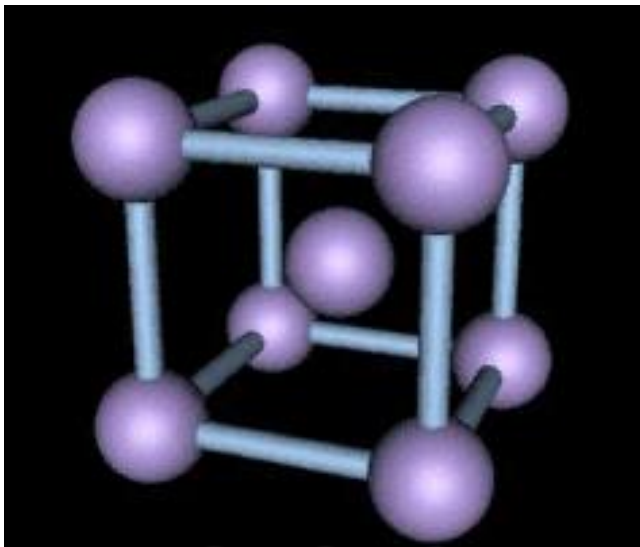
体心四方

立方 Cubic

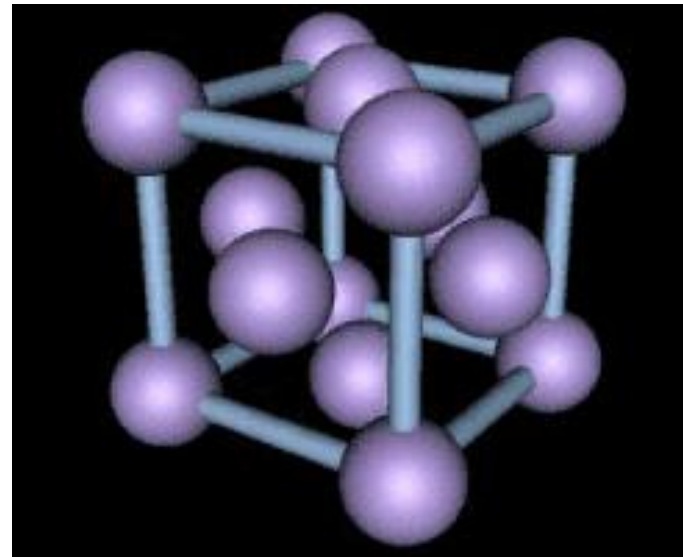
$$a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$



简单立方

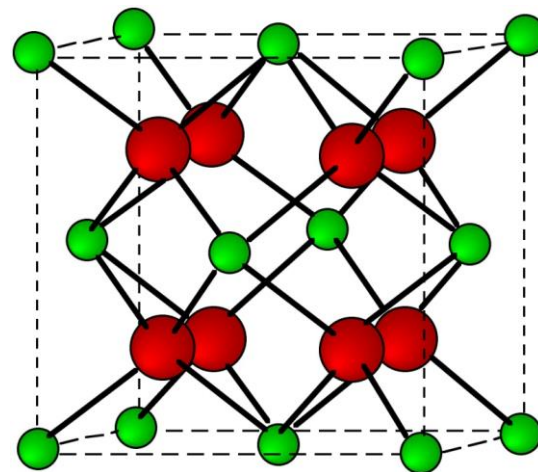
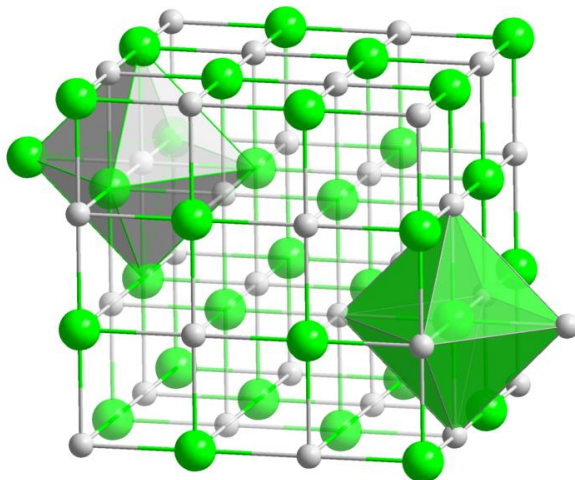
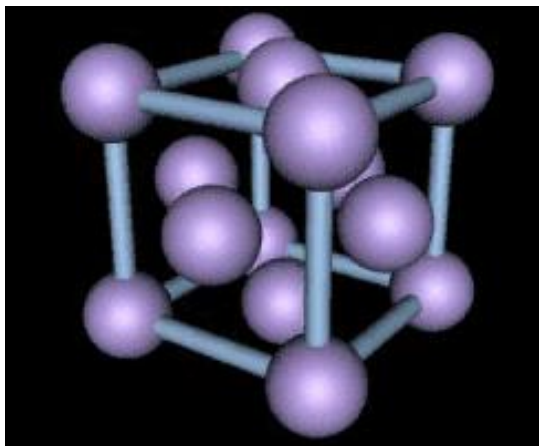


体心立方

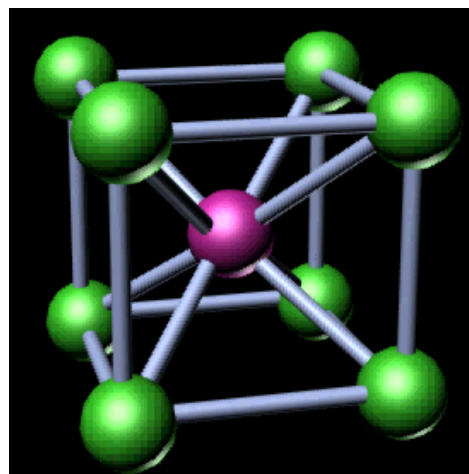
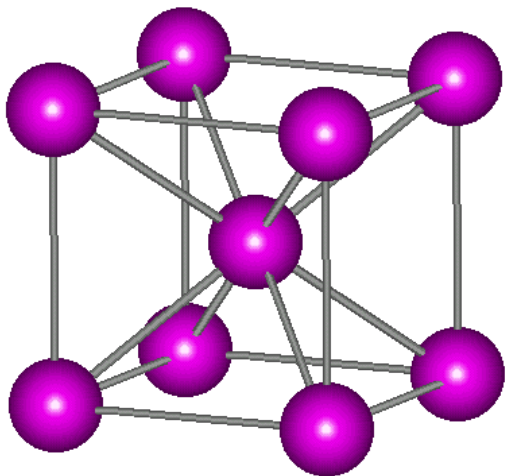


面心立方

4. 晶体结构与空间点阵

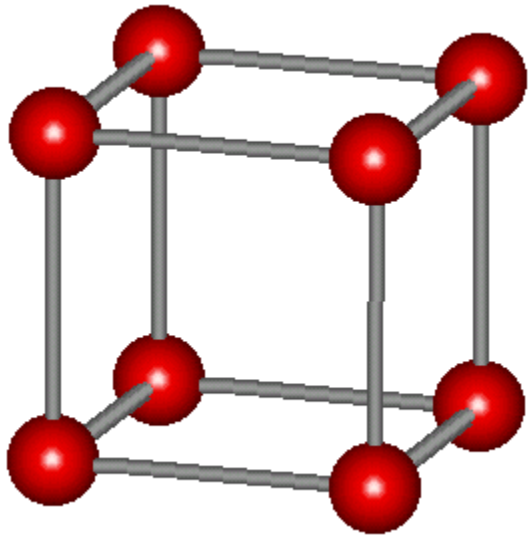


具有相同点阵的晶体结构（左：Cu；中：NaCl；右：CaF₂）



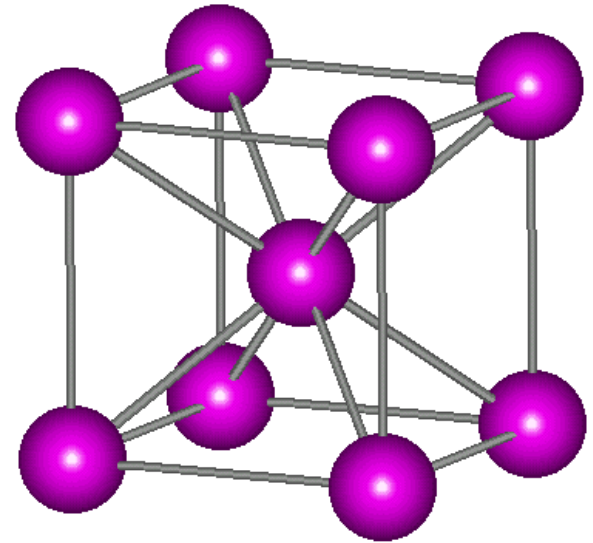
晶体结构相似而点阵不同（左：Cr；右：CsCl）

下列晶体结构如何抽象成点阵？



Mn

(立方简单)

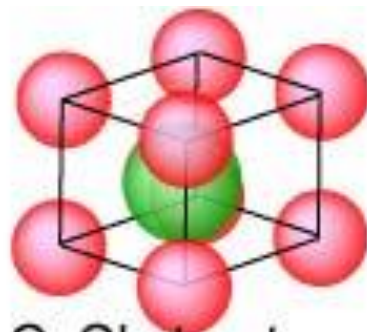


Li Na K Cr Mo W.....

(立方体心)

以上每一个原子都是一个结构基元，都可以抽象成一个点阵点。

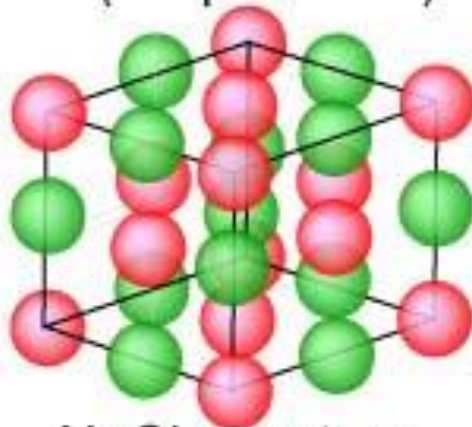
下列晶体结构如何抽象成点阵？



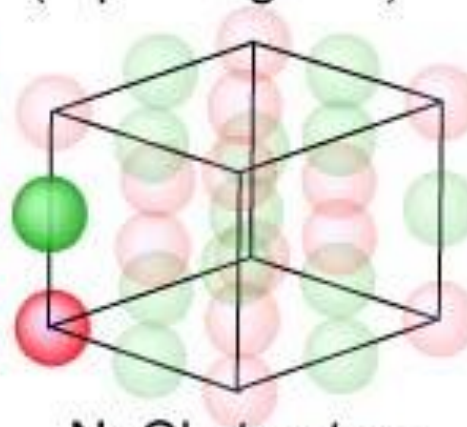
CsCl structure
(simple cubic)



CsCl structure
(repeating unit)



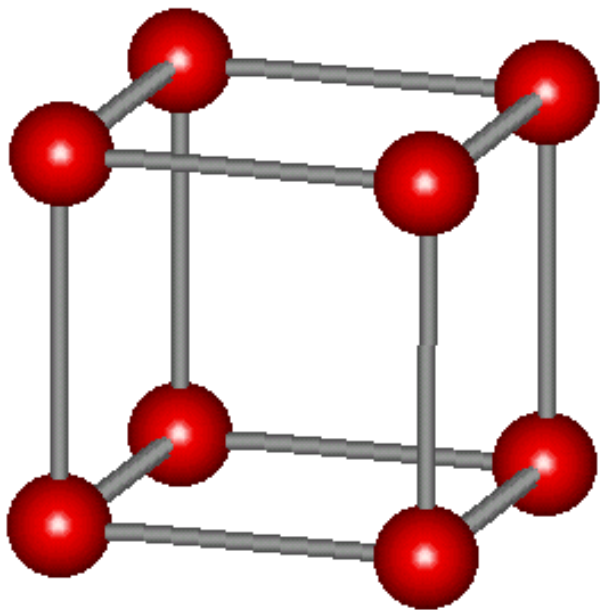
NaCl structure
(face centred cubic)



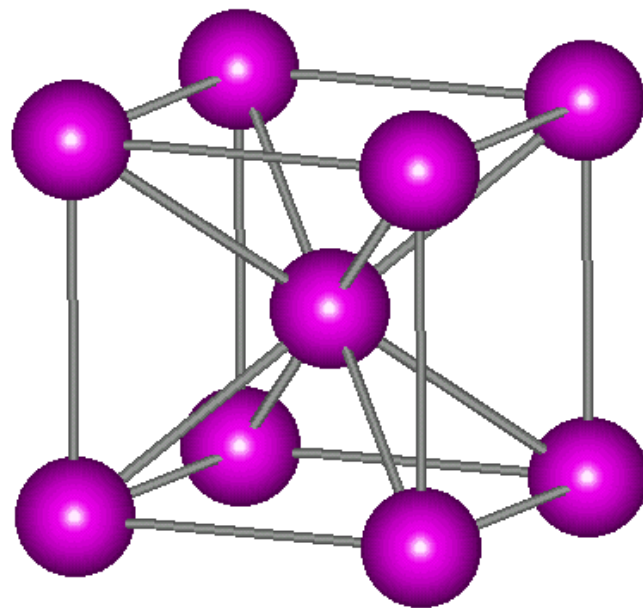
NaCl structure
(repeating unit)

结点位置的表示

点阵的结点位置是以它们的坐标值来表示的。



000,010,001,100,101,110,011,111

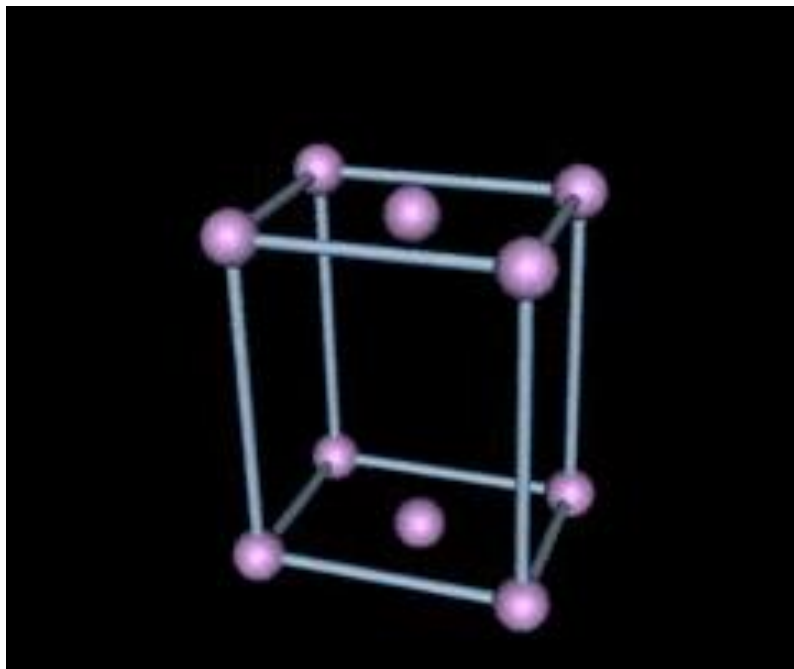


000,010,001,100,101,110,011,111

$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

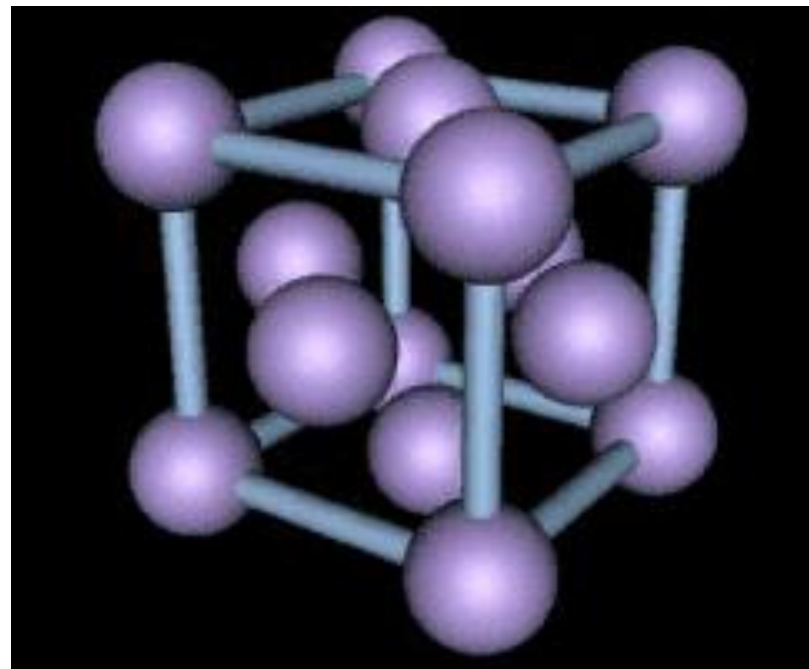
结点位置的表示

点阵的结点位置是以它们的坐标值来表示的。



000, 010, 001, 100, 101, 110, 011, 111

$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$



000, 010, 001, 100, 101, 110, 011, 111

$\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

$\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1, \frac{1}{2} 1 \frac{1}{2}, 1 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

二、晶向指数和晶面指数

(Miller Indices of Crystallographic Direction and Planes)

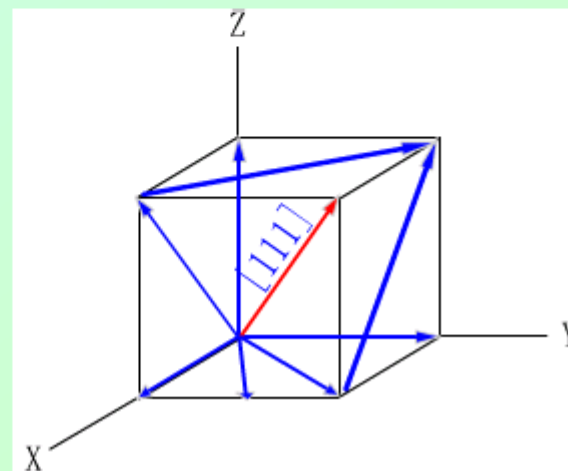
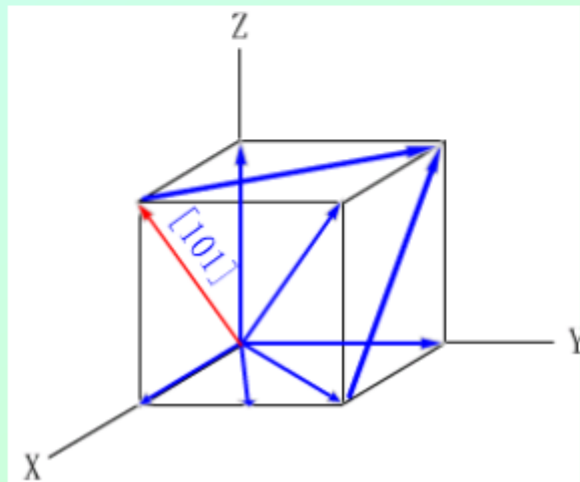
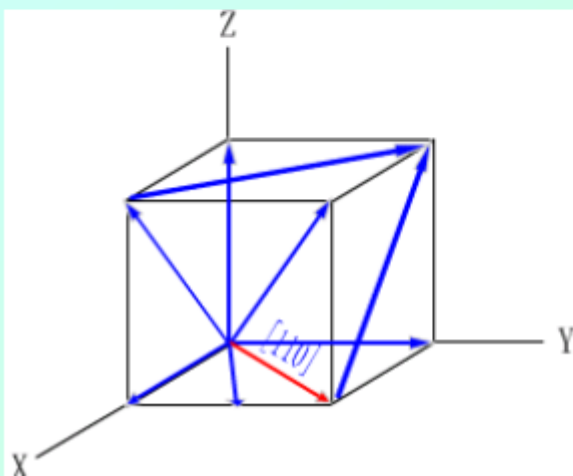
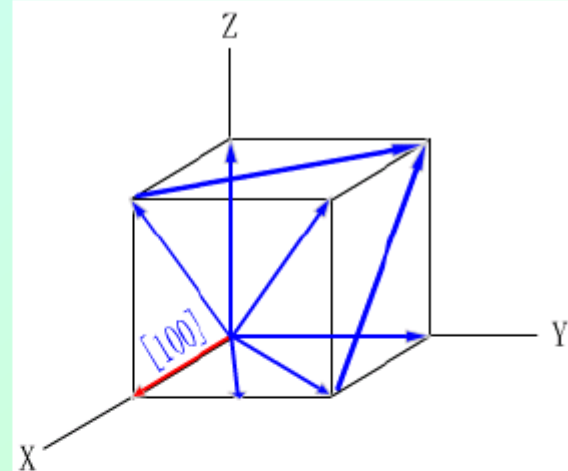
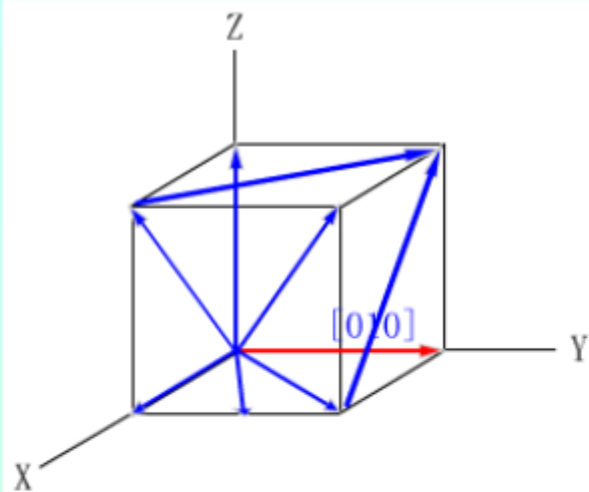
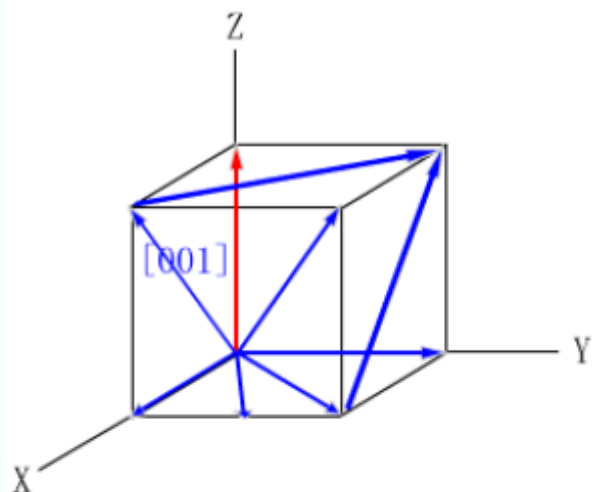
1. 阵点坐标 $\overline{op} = x\bar{a} + y\bar{b} + z\bar{c}$

2. 晶向指数 (Orientation index)

求法：

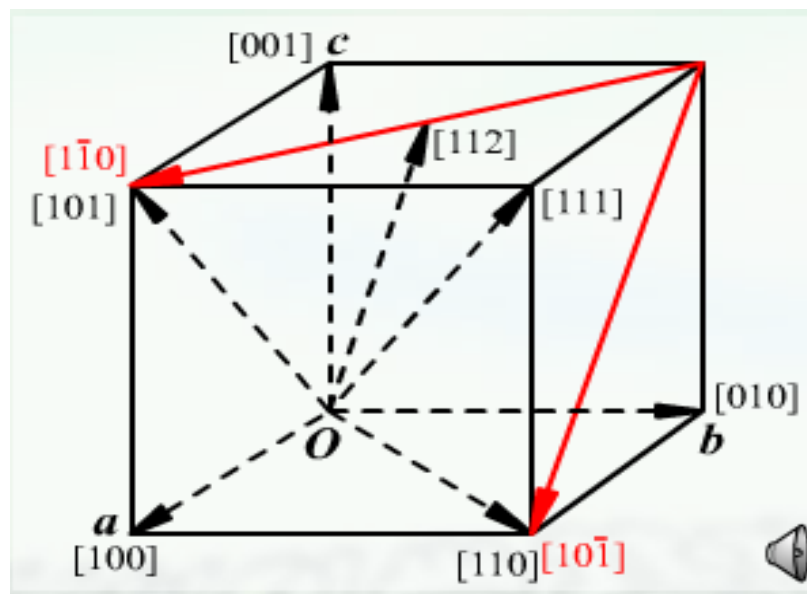
- 1) 确定坐标系
- 2) 过坐标原点，作直线与待求晶向平行；
- 3) 在该直线上任取一点，并确定该点的坐标 (x, y, z) ，若某一坐标值为负，则在其上加一负号。
- 4) 将此值化成最小整数 u, v, w 并加以方括号 $[u \ v \ w]$ 即是。
(代表一组互相平行，方向一致的晶向)

晶向举例

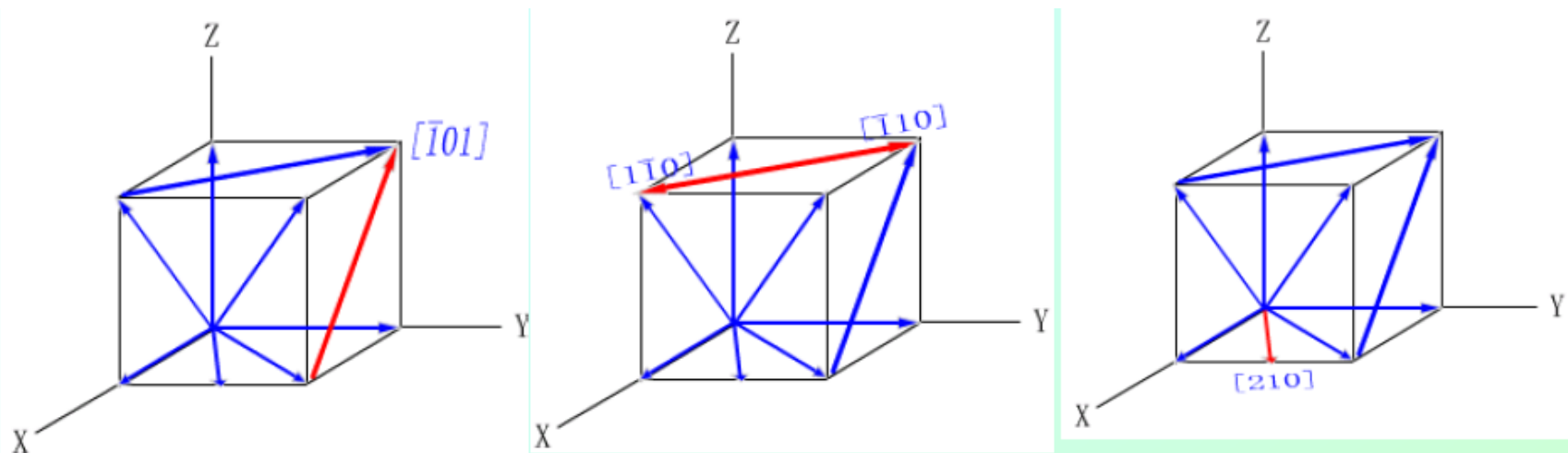


晶向指数的确定 2

1. 建立坐标系，结点为原点，三棱为方向，点阵常数为单位；
2. 在晶向上任两点的坐标 (x_1, y_1, z_1) (x_2, y_2, z_2) 。(若平移晶向或坐标，让在第一点在原点则下一步更简单)；
3. 计算 $x_2 - x_1$: $y_2 - y_1$: $z_2 - z_1$ ；
4. 化成最小、整数比 u : v : w ；
5. 放在方括号 $[uvw]$ 中，不加逗号，负号记在上方。



晶向族 $\langle u \ v \ w \rangle$ ：具有等同性能的晶向归并而成；



■ 考虑到空间点阵的平移对称性，晶向指数表示相互平行、方向一致的所有晶向；所指方向相反，则晶向指数中的数字相同但符号相反，如

$$[\bar{1}21] \quad [1\bar{2}\bar{1}]$$

晶体中因对称关系而等同的各组晶向可归并为一个晶向族，用 $\langle u \ v \ w \rangle$ 表示。

*** 指数看特征，正负看走向**

3. 晶面指数 (Indices of Crystallographic Plane)

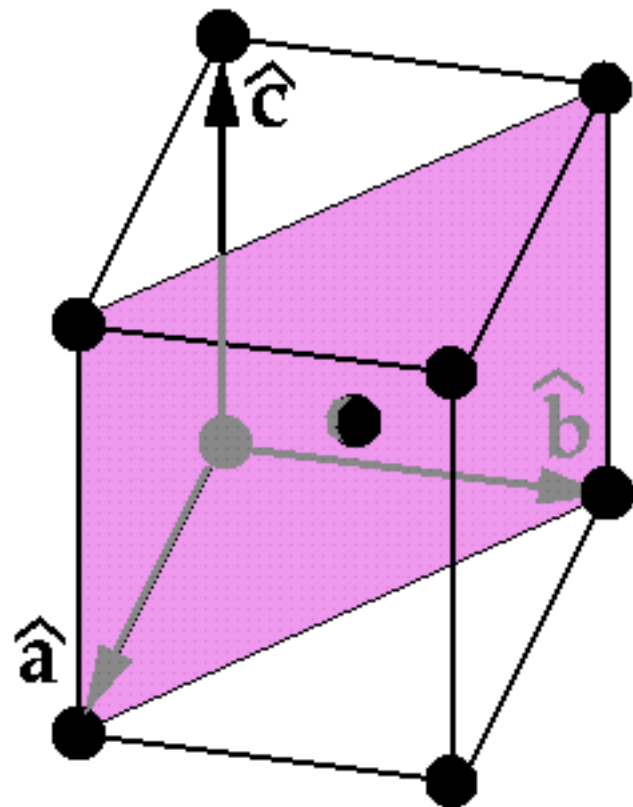
在点阵中由结点构成的平面称为**晶面**。

空间点阵划分为平面点阵的方式是多种多样的。

不同的划法划出的晶面(点阵面)的**阵点密度**是

不相同的。意味着不同面上的作用力不相同。

所以给不同面以相应的指标(hkl)。



为什么区分晶面？

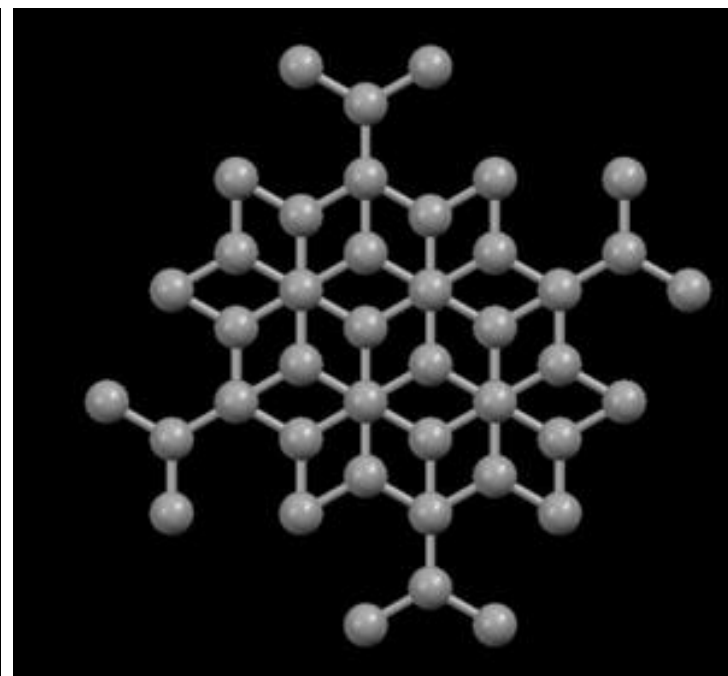
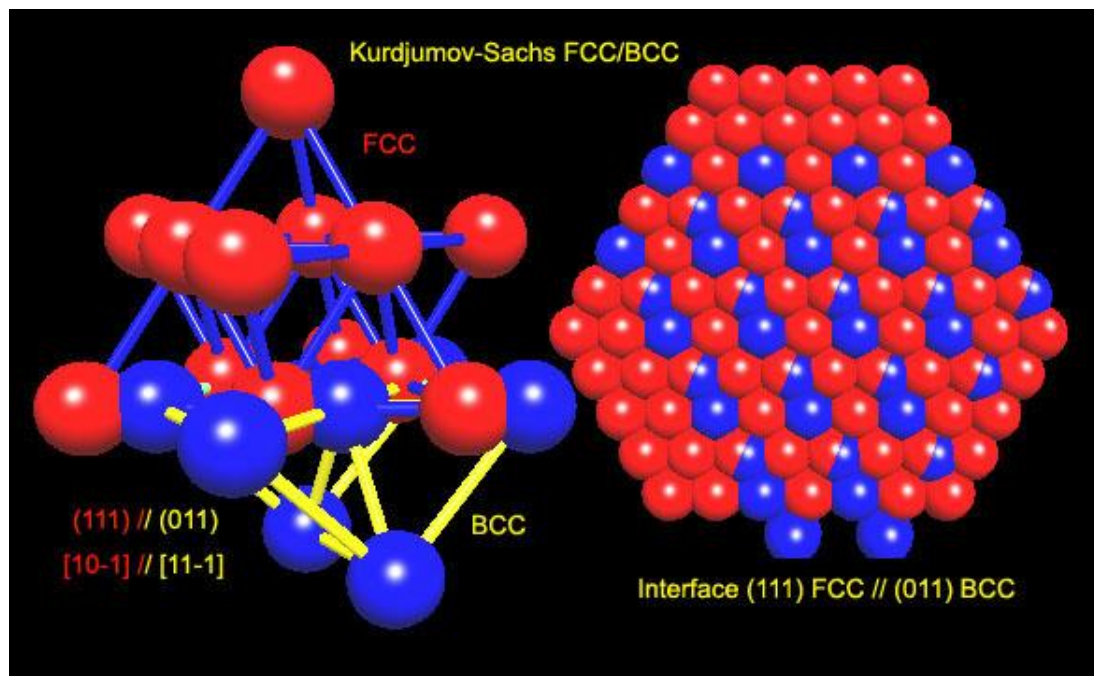
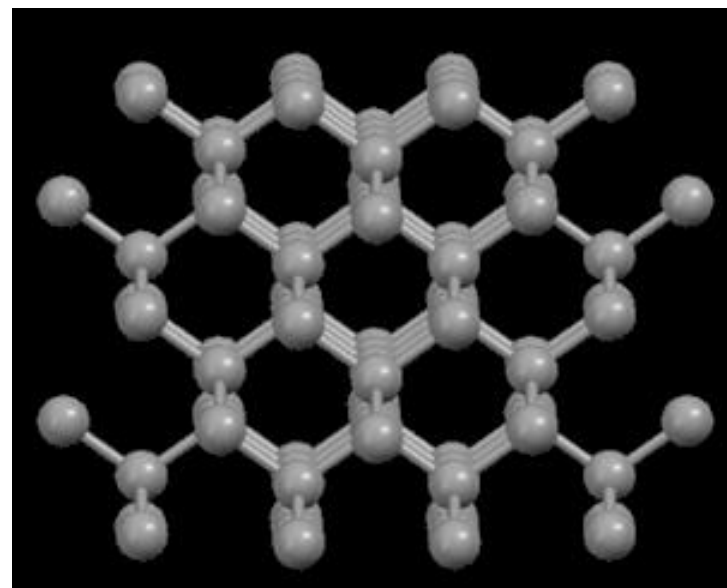
(A) 确定晶体结构

(B) 塑性变形

(C) 传输特性

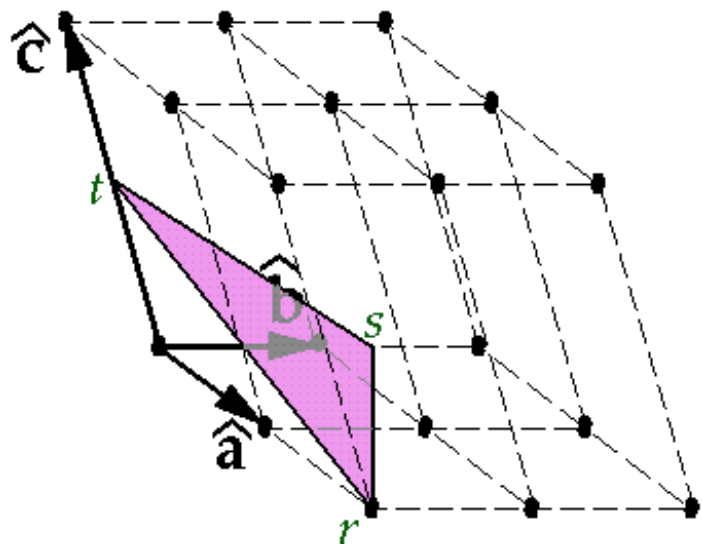
- 石墨: sp^2 面上热传导能力强

(D) 表述晶体学特征



如何确定晶面指数？

Example 1



Planes intersects axes at:

- a axis at $r=2$
- b axis at $s=4/3$
- c axis at $t=1/2$

如何标记这个面？

可能性1: 用括号 () 标记 (r s t)

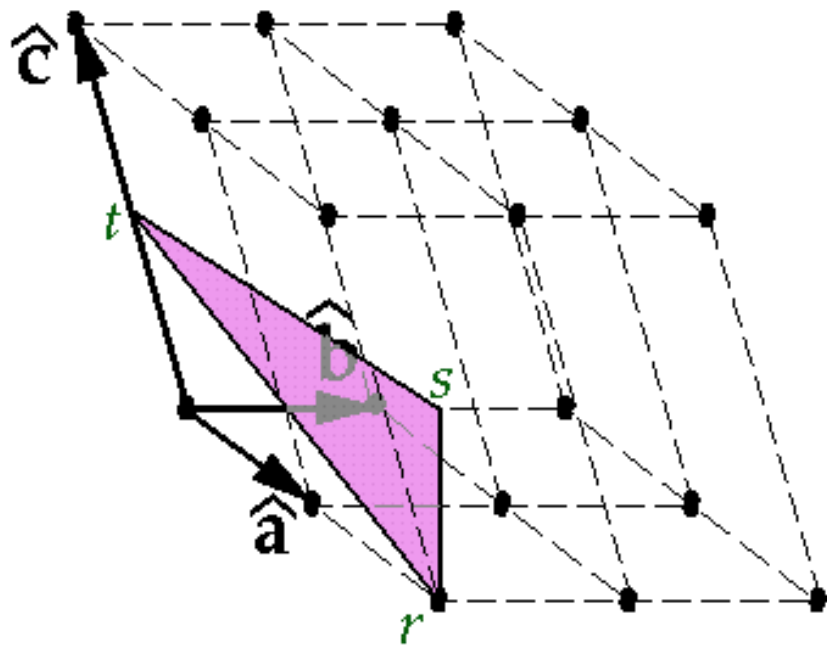
优点:

- r, s, t 特指晶体中的某晶面
- () 代表晶面指数, 和 [...] 区分

缺点:

- 当晶面与坐标轴平行时, 截距为 ∞ !
- 上述标记不方便.

如何确定晶面指数？ (2)



坐标轴上的截距:

- a axis at $r=2$
- b axis at $s=4/3$
- c axis at $t=1/2$



$$: \quad 1/r = 1/2, \quad 1/s = 3/4, \quad 1/t = 2$$



(238)

当晶面与某坐标轴平行时, 0

晶面指数的求法

- 1) 在所求晶面外取晶胞的某一顶点为原点 o ，三棱边为三坐标轴 x, y, z
- 2) 以棱边长 a 为单位，量出待定晶面在三个坐标轴上的截距。

若某一截距为负，则在其上加一负号。

- 3) 取截距之倒数，并化为最小整数 h, k, l 并加以圆括号 $(h \ k \ l)$ 即是。

(代表一组互相平行的晶面；指数相同符号相反晶面互相平行)

晶面指数的标记例1

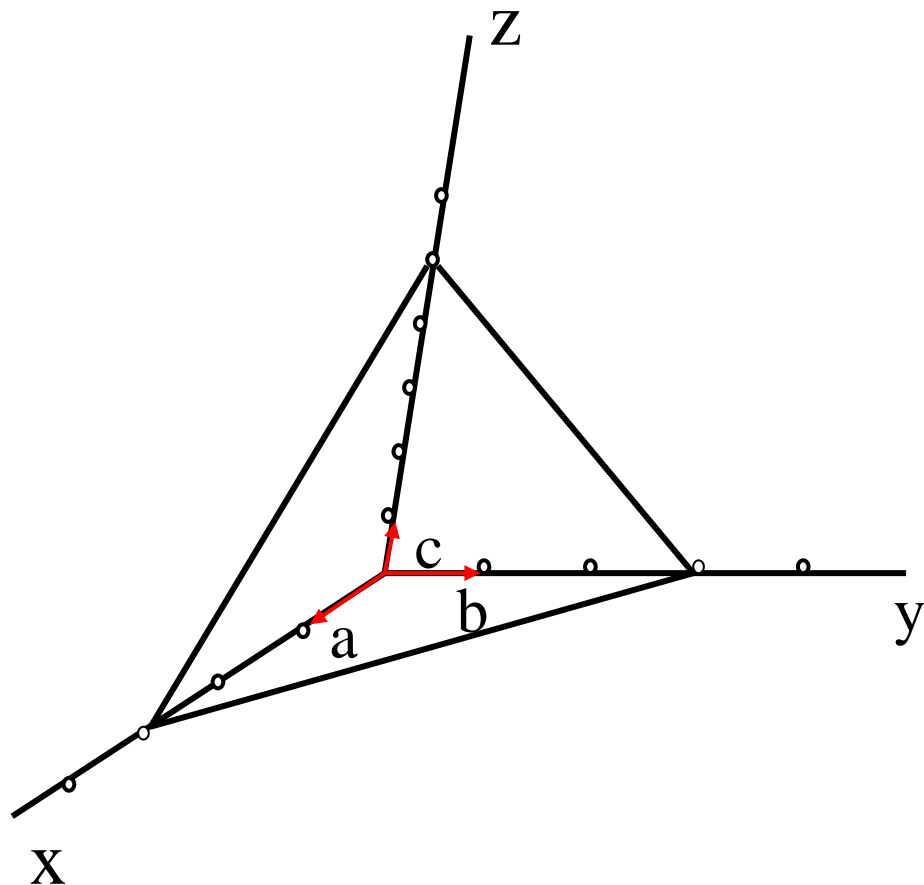
(1) 截距 r 、 s 、 t 分别为3, 3, 5

(2) $1/r : 1/s : 1/t = 1/3 : 1/3 : 1/5$

(3) 最小公倍数15,

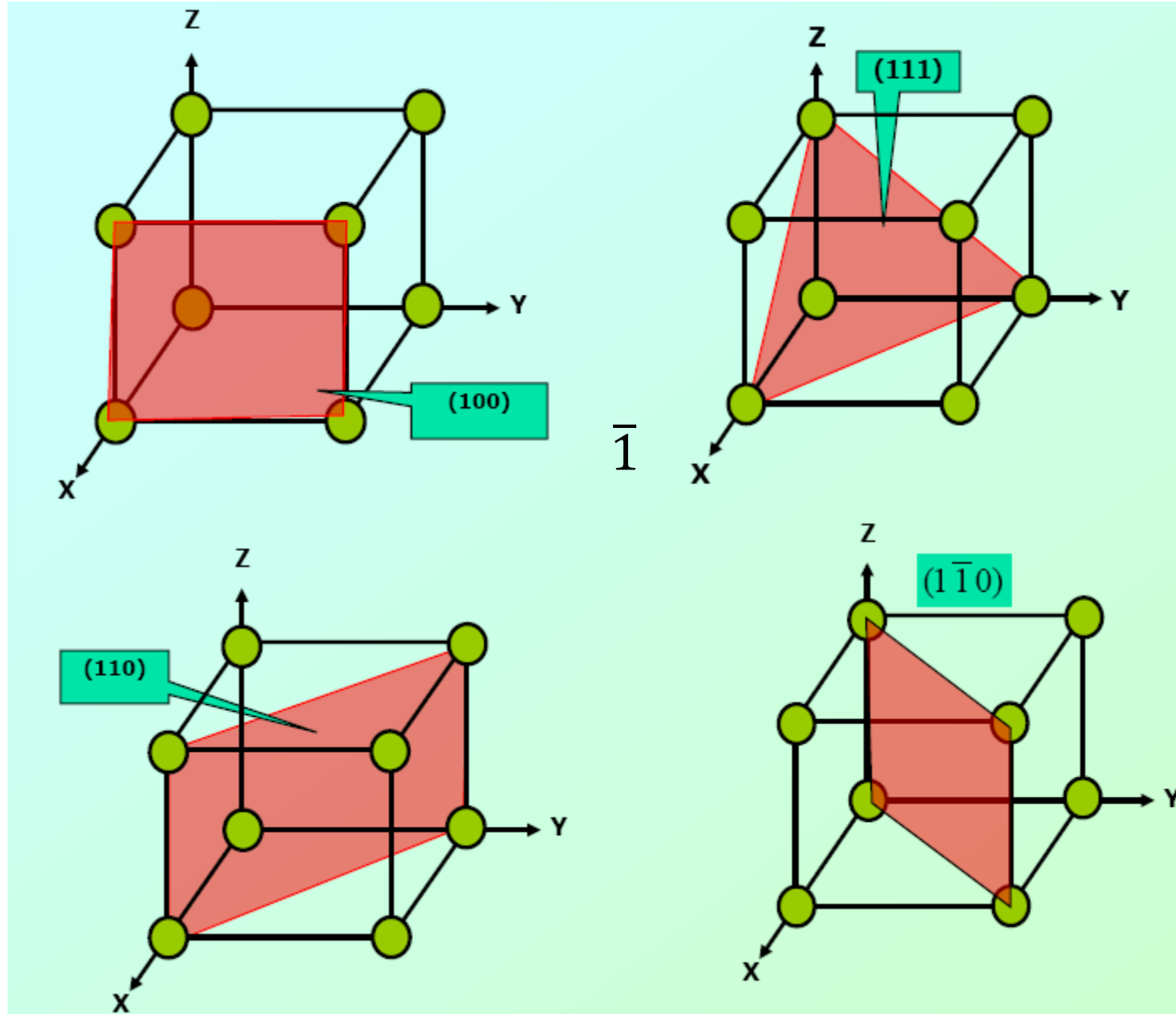
(4) 于是, $1/r$, $1/s$, $1/t$ 分别乘15得到5, 5, 3,

因此, 晶面指标为(553)。



我们说(553)晶面, 实际是指一组平行的晶面。

晶面指数的标记例2



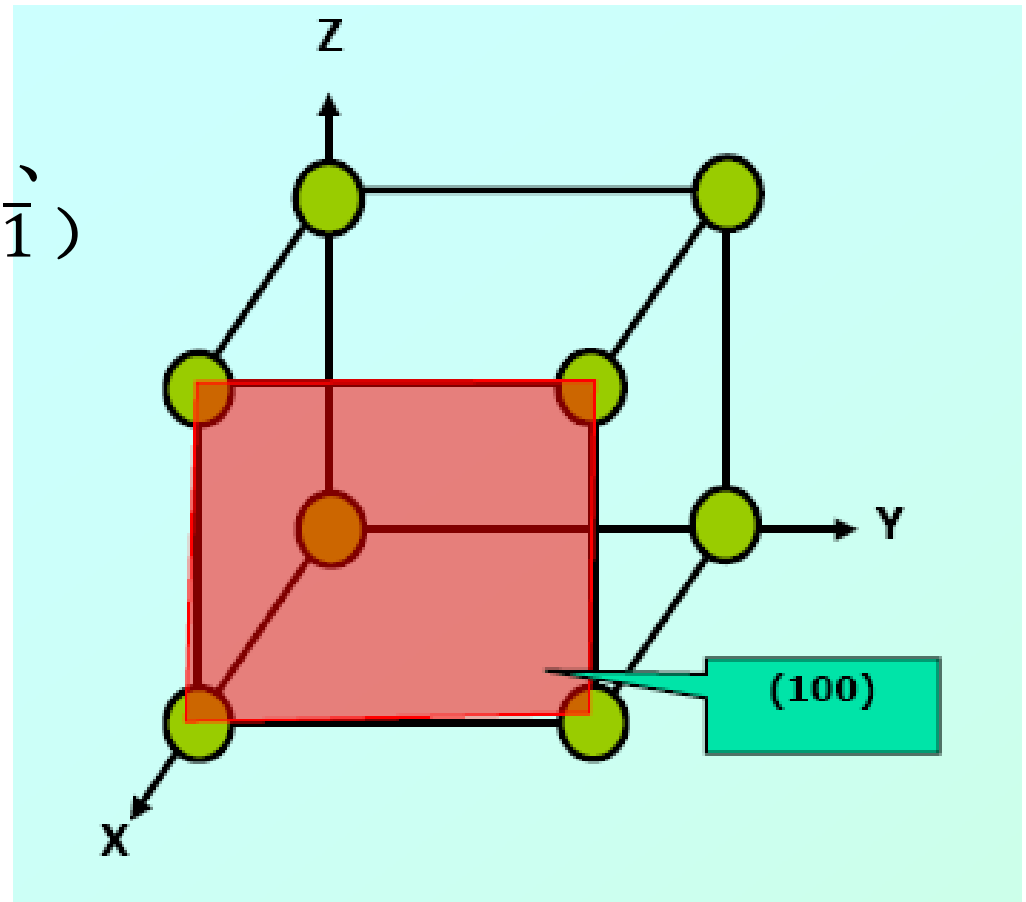
晶面族

- 晶面指数所代表的不仅是某一晶面，而是代表着一组相互平行的晶面。
- 在晶体内凡晶面间距和晶面上原子的分布完全相同，只是空间位向不同的晶面可以归并为同一晶面族，
以 $\{h\ k\ l\}$ 表示
- 晶面族代表由对称性相联系的若干组等效晶面的总和。
- 晶面族一经划定，所有接点都全部包含在晶面族中。
- 在立方晶系中，具有相同指数的晶向和晶面必定是相互垂直的。

晶面族

在立方晶系中， $\{100\}$ 晶面族

(100) 、 (010) 、 (001) 、
 $(\bar{1}00)$ 、 $(0\bar{1}0)$ 、 $(00\bar{1})$



晶面族

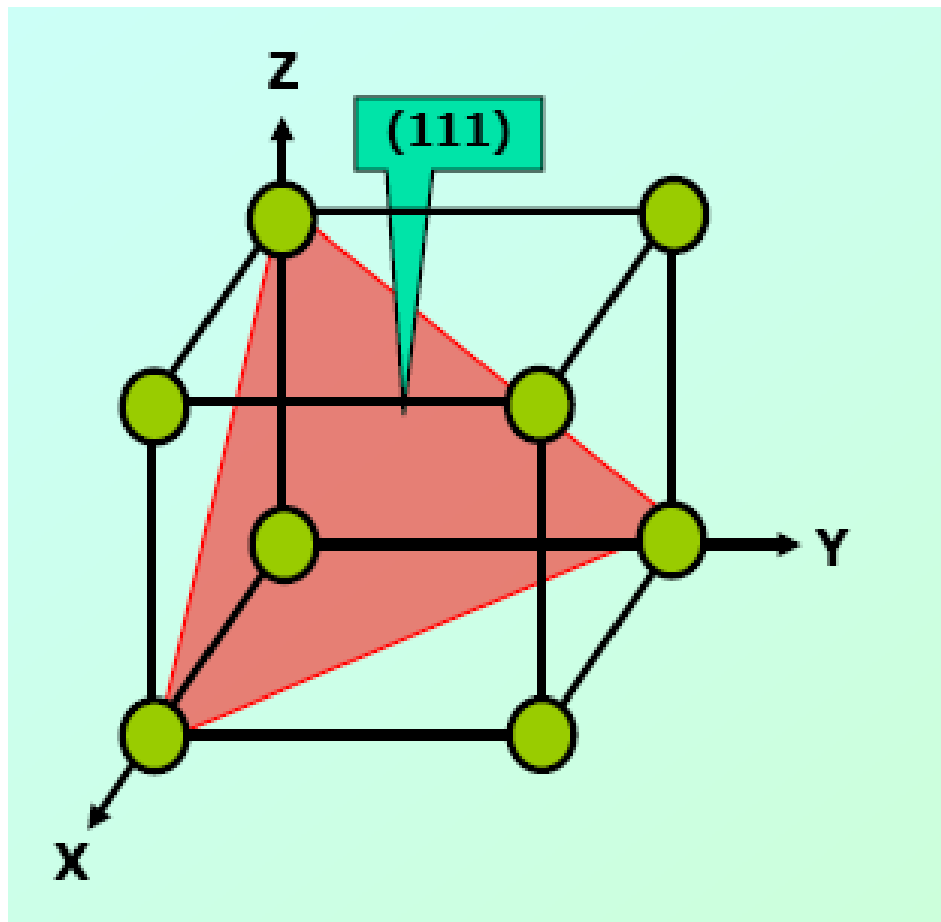
在立方晶系中， $\{111\}$ 晶面族

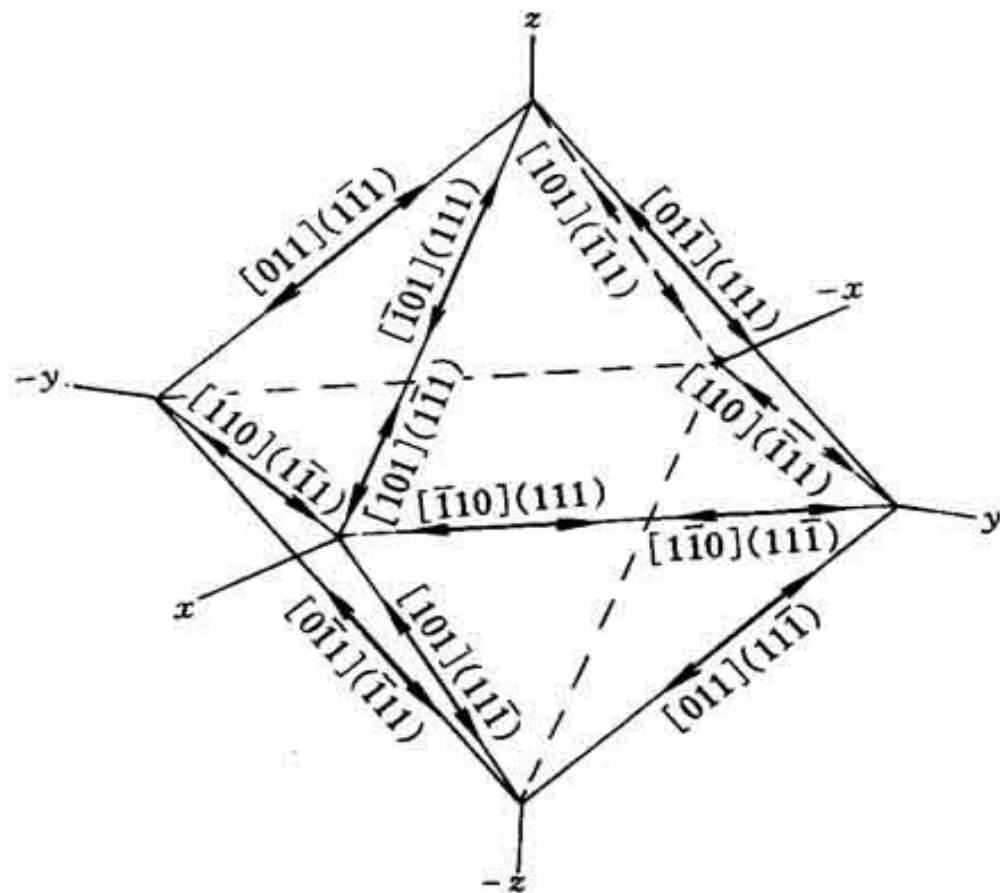
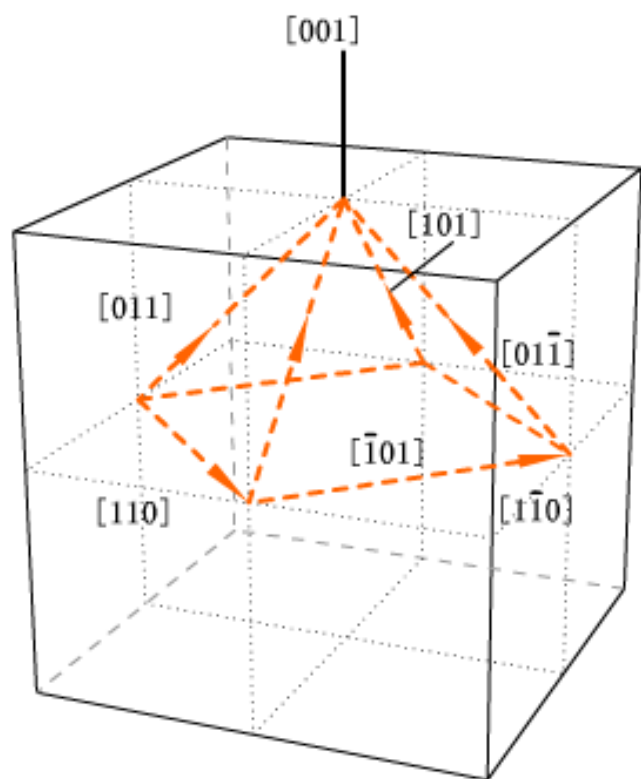
(111) $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$

$(\bar{1}11)$ $(1\bar{1}\bar{1})$

$(1\bar{1}1)$ $(\bar{1}1\bar{1})$

$(11\bar{1})$ $(\bar{1}\bar{1}1)$





晶面族 $\{110\}$?

晶面族 $\{123\}$?

晶面族 {h k l}：晶体学等价的晶面总合。

晶面族 {h k l} 中的晶面数：

a) h k l 三个数不等，且都 $\neq 0$ ，则此晶面族中有 $3! \times 4 = 24$ 组，如 {1 2 3}

b) h k l 有两个数字相等 且都 $\neq 0$ ，则有， $\frac{3!}{2!} \times 4 = 12$ 如 {1 1 2}

c) h k l 三个数相等，则有， $\frac{3!}{3!} \times 4 = 4$ 组，如 {111}

d) h k l 有一个为0，应除以2，则有 $\frac{3!}{2} \times 4 = 12$ 组，如 {1 2 0}

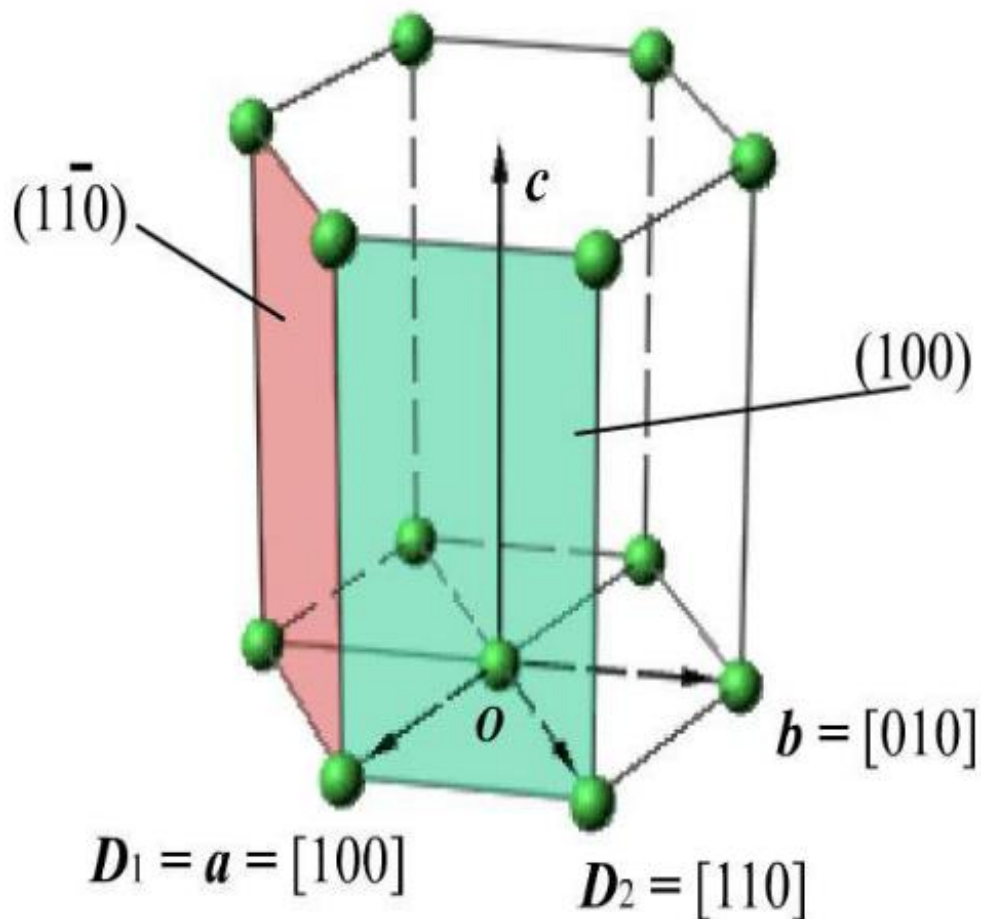
有二个为0，应除以 2^2 ，则有 $\frac{3!}{2!2^2} \times 4 = 3$ 组，如 {1 0 0}

例如：立方晶系中{100}晶面族包括六个晶面

(100)、(010)、(001)、(-100)、(0-10)、(00-1)

注意，在其他晶系中，通过数字位置互换而得到的晶面不一定属于同一晶面族，例如，正方晶系中 $a=b \neq c$ ，因此，{100}晶面族分为两组，一个包含(100) (010) (-100) (0-10) 晶面；另一个包含(001) (00-1) 两个晶面。

六方晶系指数

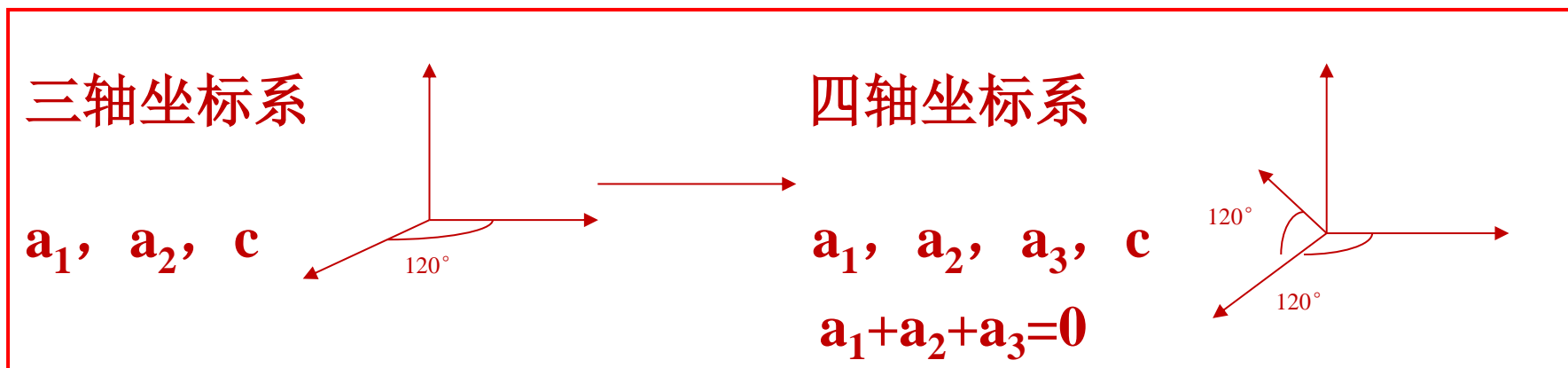


三轴坐标系：不能显示六方晶系的对称性，晶体学上等价的晶面和晶向，指数不同，往往看不出等价关系。

4. 六方晶系指数

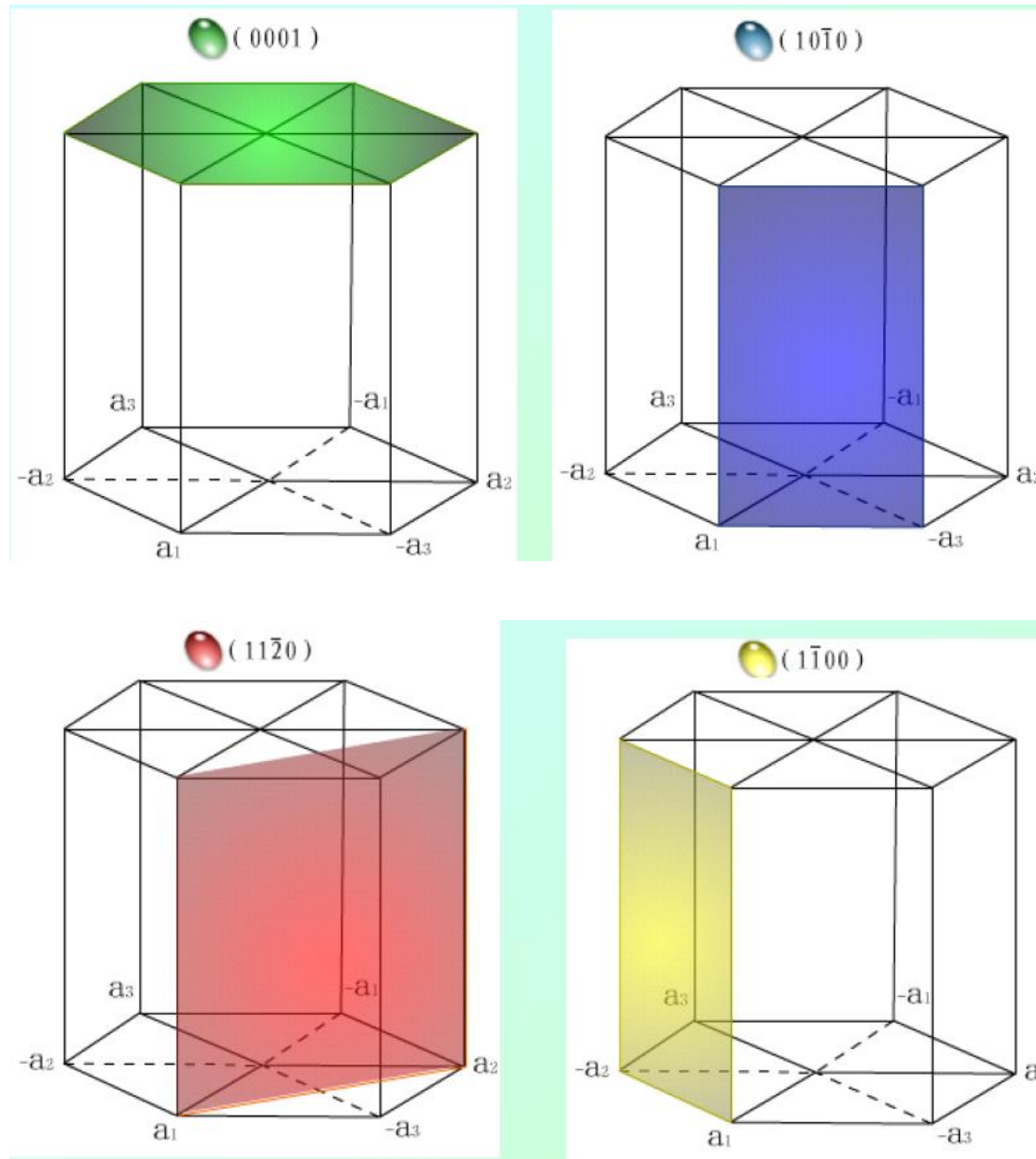
(Indices of hexagonal crystal system or hexagonal indices)

三轴坐标系： 不能显示六方晶系的对称性。

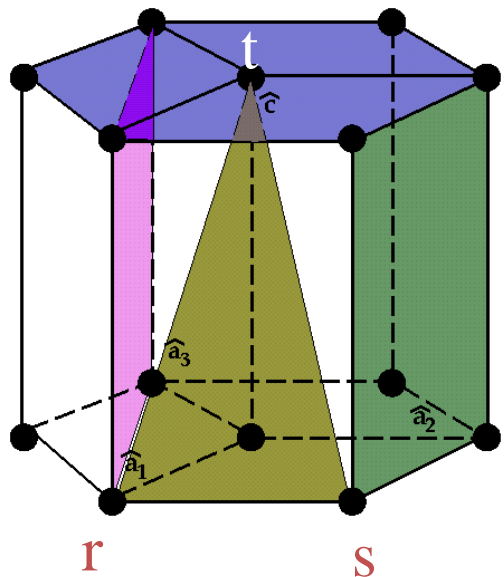


四轴坐标系： 晶面（晶向）指数的标定方法与前述相同。

晶面指数: $(h\ k\ i\ l)$ $i = -(h+k)$



HCP晶面指数的标记

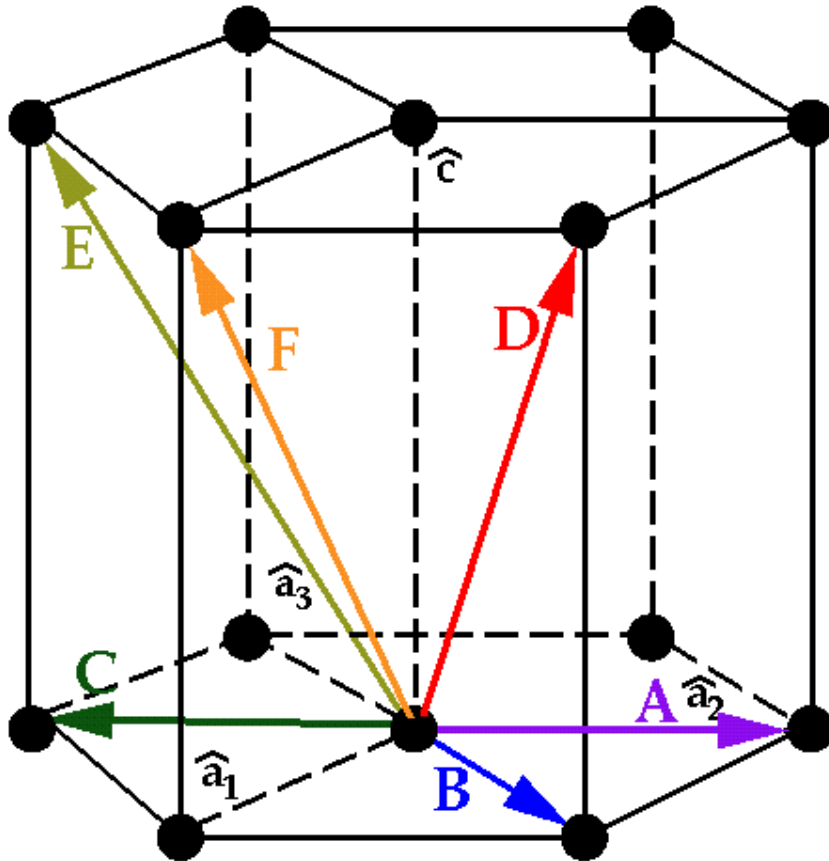


1. 截距 r, s, t
2. 截距倒数 $1/r, 1/s, \text{ and } 1/t$
3. 整数比
4. h, k, i, l ($i = -(h+k),$)
5. 晶面指数 $(h k i l)$.

例如:

1. 截距 a_1, a_3, c : $r=1, s=1, t=\infty$,
2. 截距倒数 $1/r = 1, 1/s = 1, 1/t = 0$.
3. 整数比.
4. $(h k i l) = (1 ? 1 0)$.
5. $i = -(h+k), k=-2. \quad (1\bar{2}10)$

晶向指数: $[u \ v \ t \ w]$ $t = -(u+v)$

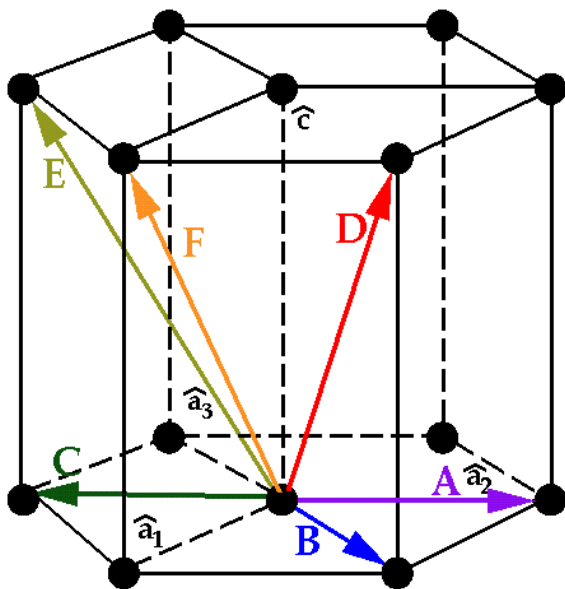


D矢量的晶向指数：

(1) $u=1, v=1, w=1$

(2) $t= -(u+v) = -2$

(3) $(1 \ 1 \ \bar{2} \ 1)$?



D矢量的晶向指数

- 投影D矢量 $[a_1 \ a_2 \ c]$: $u'=1$, $v'=1$, and $w'=1$.

$$u = \frac{1}{3}[2u' - v'] \quad v = \frac{1}{3}[2v' - u'] \quad w = w'$$

$$u = \frac{1}{3}[2(1) - 1] = \frac{1}{3} \quad v = \frac{1}{3}[2(1) - 1] = \frac{1}{3} \quad w = w' = 1$$

- 四坐标指数:

$$\left[\frac{1}{3} \ \frac{1}{3} \ \frac{2}{3} \ 1 \right]$$

$$[11\bar{2}3]$$

三指数系统



四指数系统

晶面指数: $(h \ K \ l)$



$(h \ k \ i \ l)$

$$i = - (h+k)$$

晶向指数: $[U \ V \ W]$



$[u \ v \ t \ w]$

$$U = u-t$$

$$u = (2U-V)/3$$

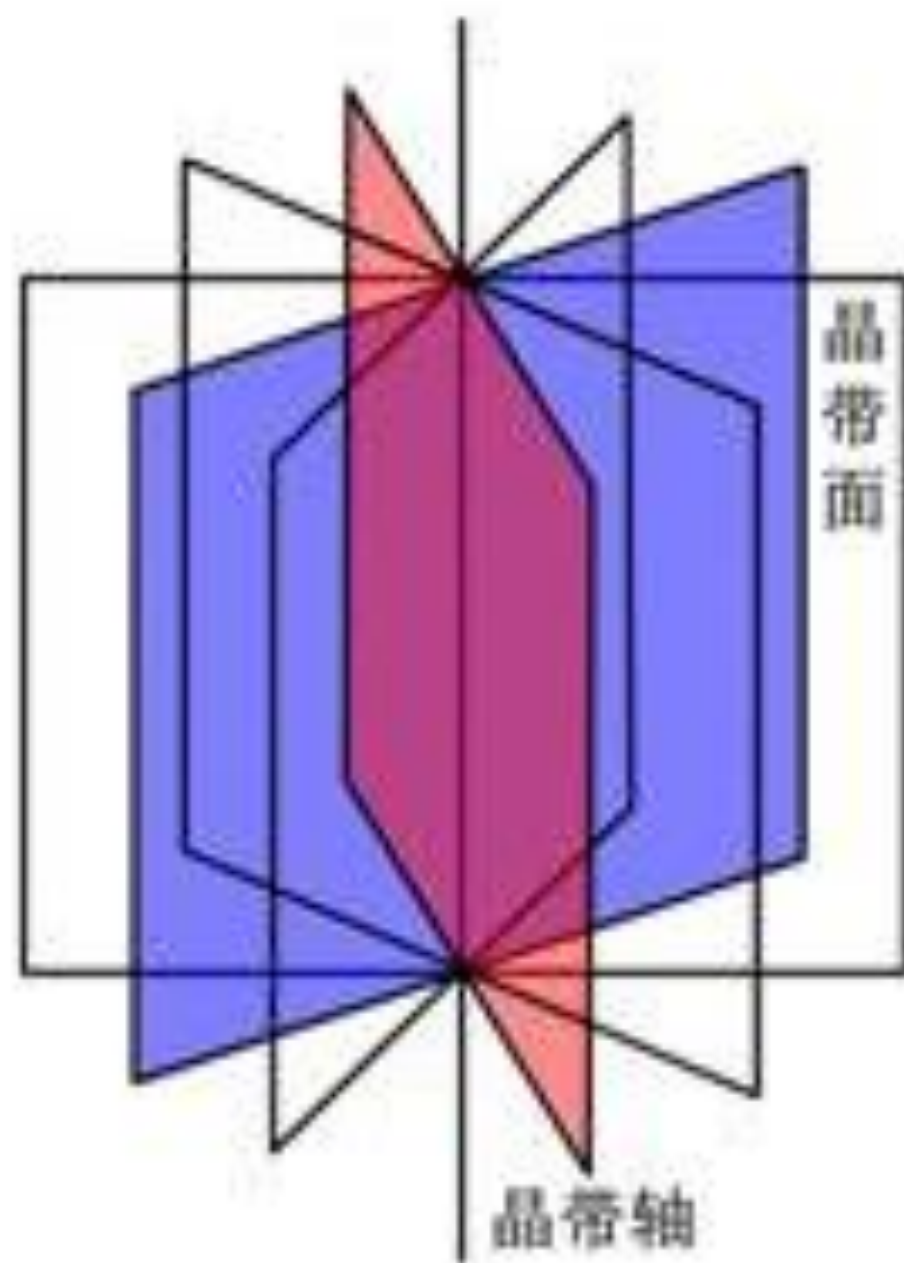
$$V = v-t$$

$$v = (2V-U)/3$$

$$W = w$$

$$t = - (u+v)$$

$$w = W$$



5. 晶带 (Crystal zone)

所有相交于或平行于某一晶向直线的晶面构成一个“晶带”

(crystal zone)

此直线称为晶带轴 (crystal zone axis)，所有的这些晶面都称为共带面。
晶带轴 $[u \ v \ w]$ 与该晶带的晶面 $(h \ k \ l)$ 之间存在以下关系

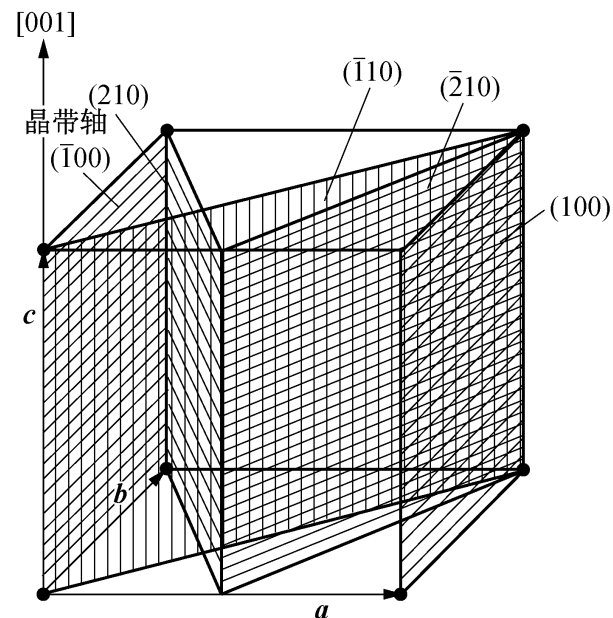
$hu + kv + lw = 0$ ———— 晶带定律 (对任何晶系都成立)

若有两个不平行的晶面 $(h_1 k_1 l_1)$ 和 $(h_2 k_2 l_2)$ ，则晶带轴的晶向指数 $[u \ v \ w]$

$$u:v:w = \begin{vmatrix} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} l_1 & h_1 \\ l_2 & h_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{vmatrix}$$

若有两个晶向 $(u_1 v_1 w_1)$ 和 $(u_2 v_2 w_2)$ ，
则二晶向所决定的晶面指数 (hkl) 为

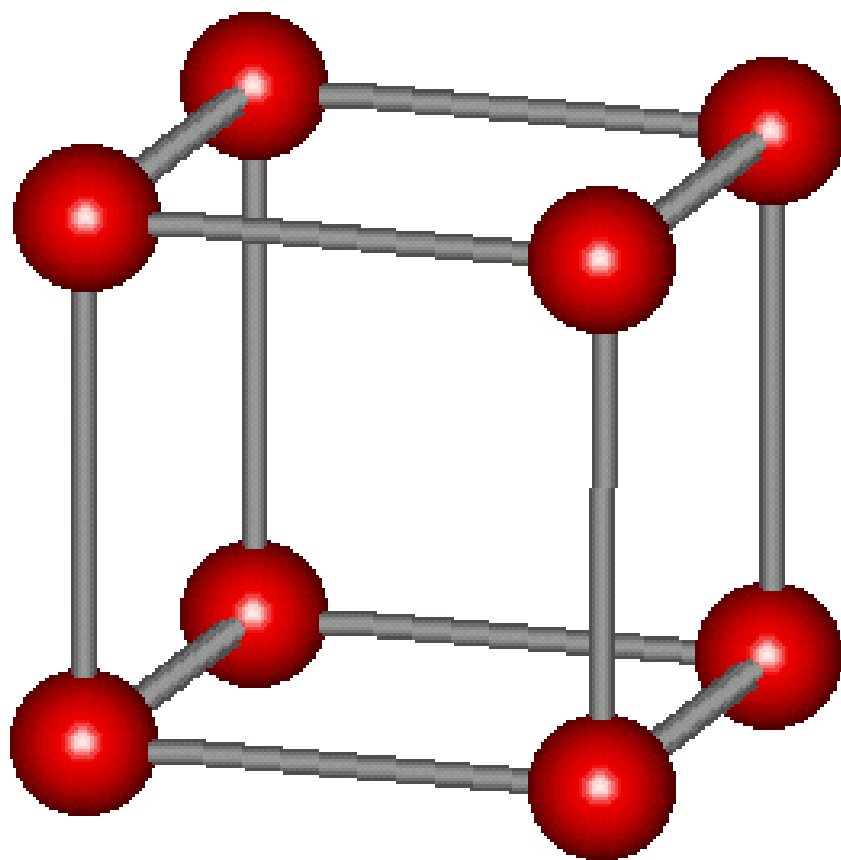
$$h:k:l = \begin{vmatrix} v_1 & w_1 \\ v_2 & w_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} w_1 & u_1 \\ w_2 & u_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} u_1 & v_1 \\ u_2 & v_2 \end{vmatrix}$$



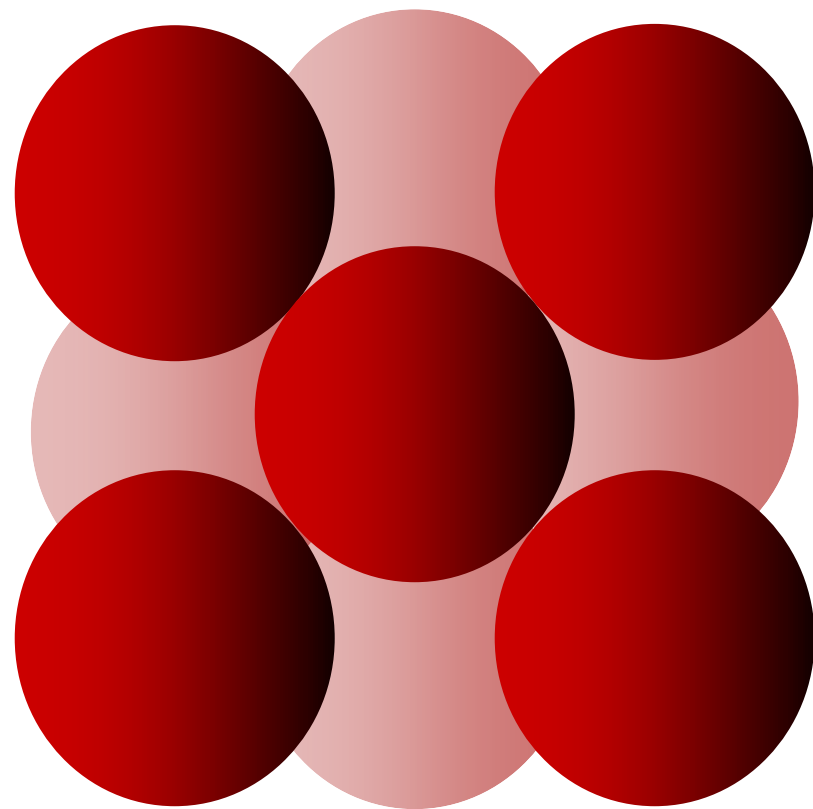
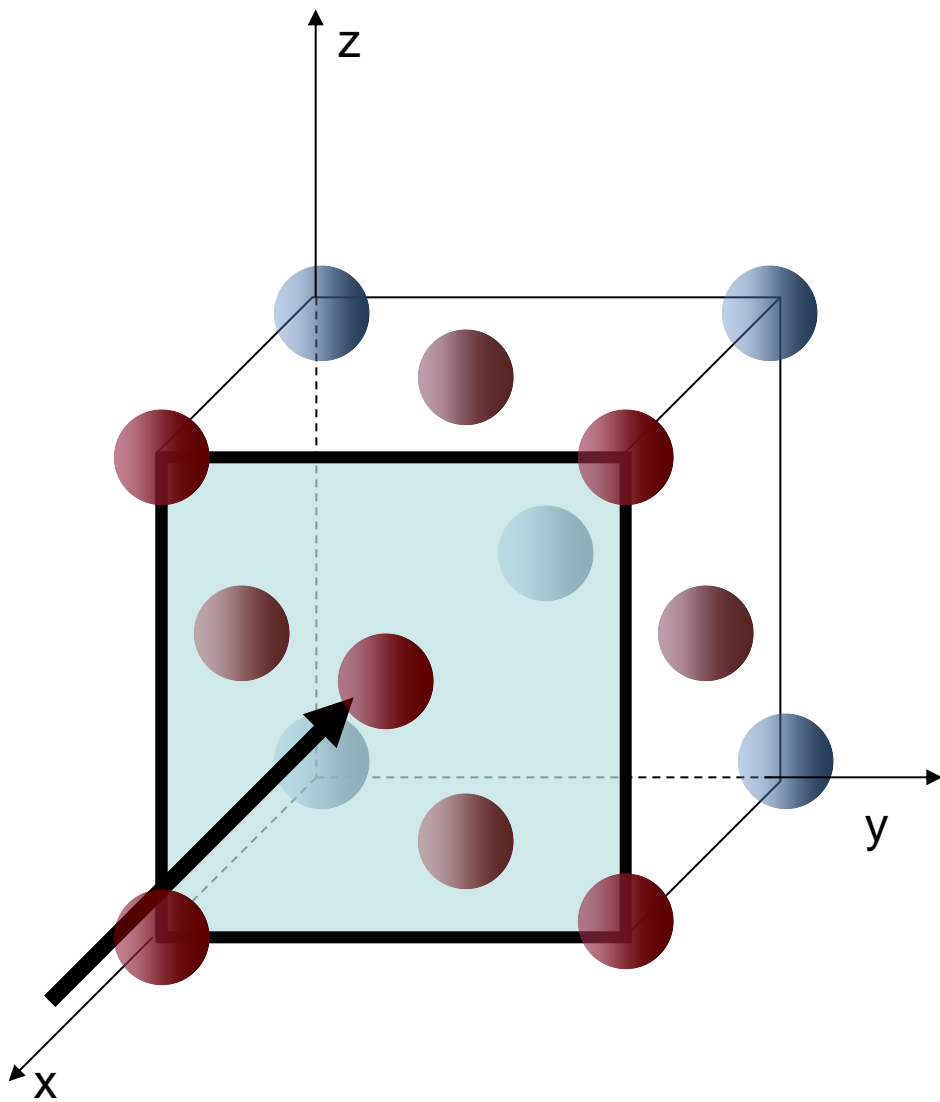
$$\begin{vmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{vmatrix} = 0, \text{ 则三个晶轴同在一个晶面上}$$

$$\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{vmatrix} = 0, \text{ 则三个晶面同属一个晶带}$$

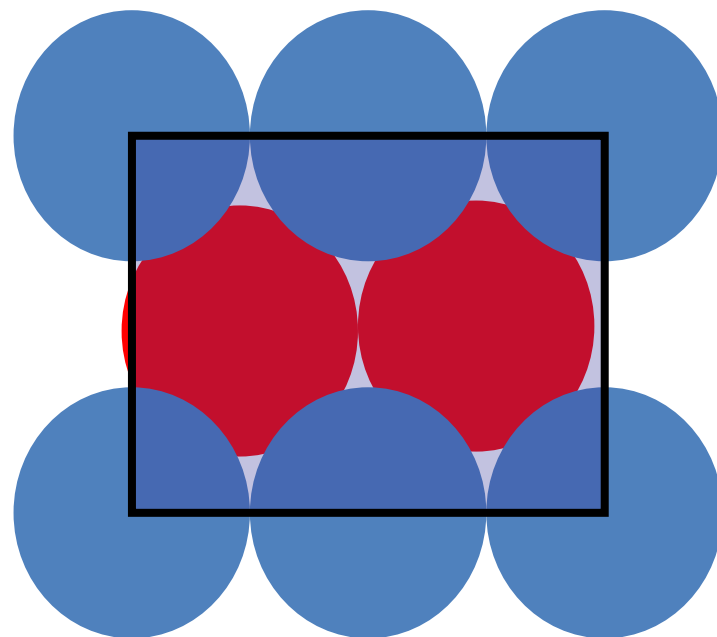
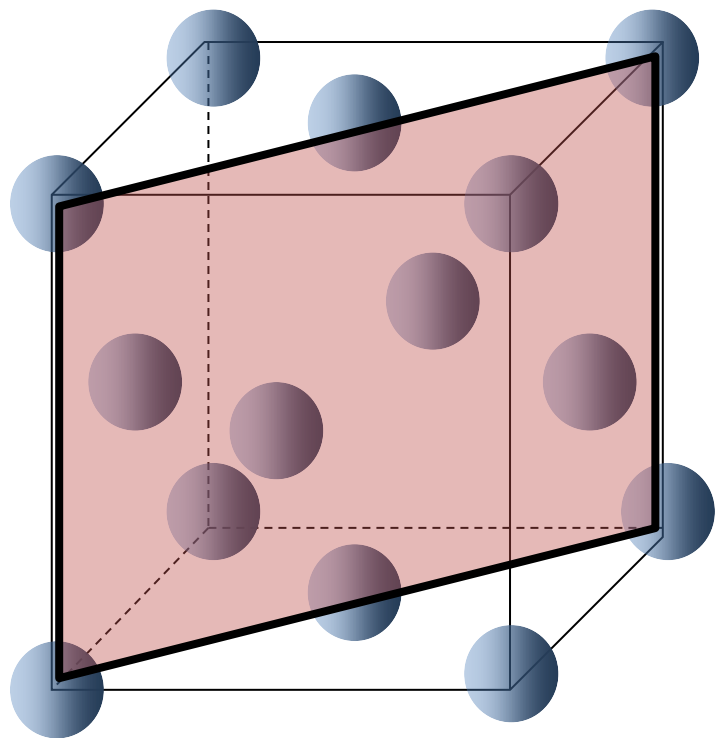
思考题：立方晶系中画出 $[001]$ 为晶带轴的所有晶面。



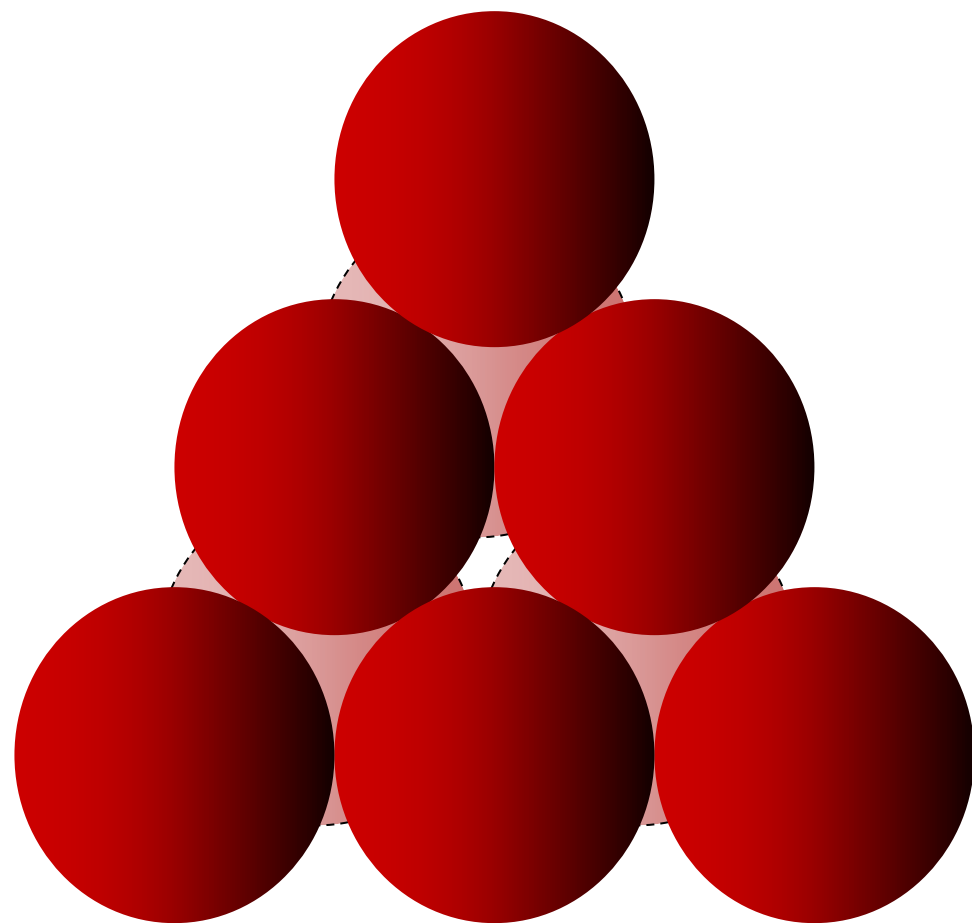
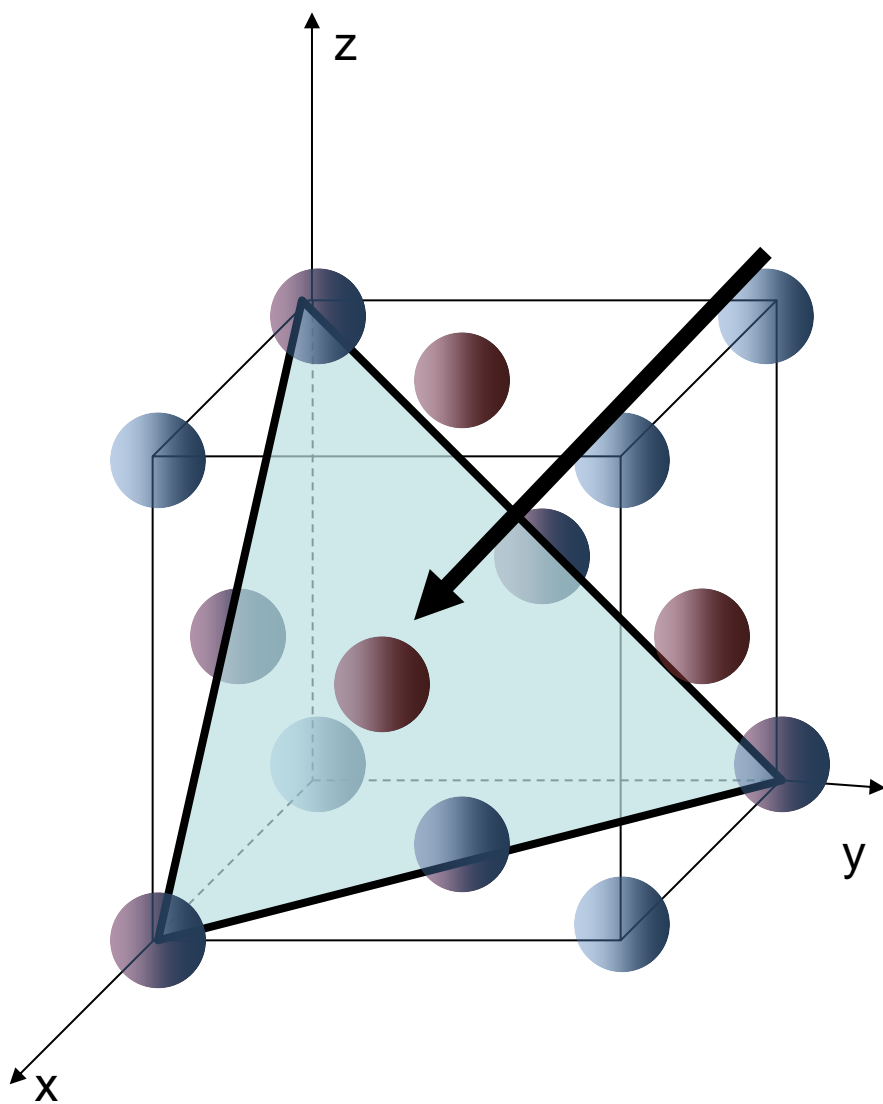
6. 晶面原子排列



(100)



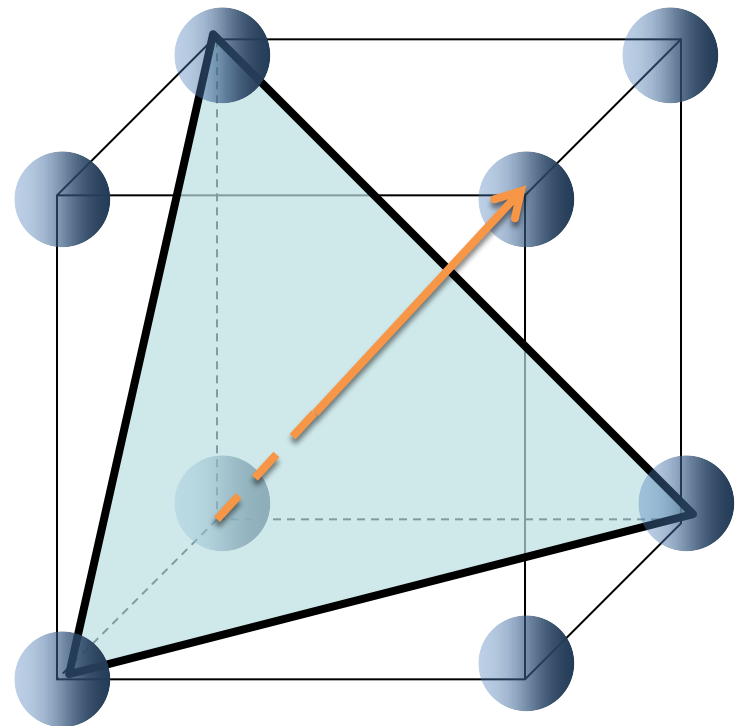
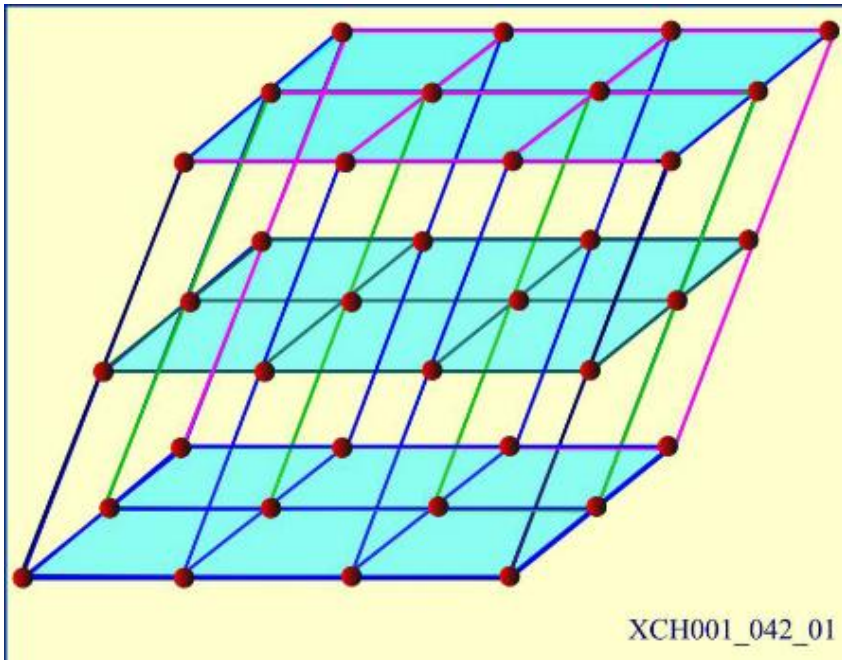
(110)

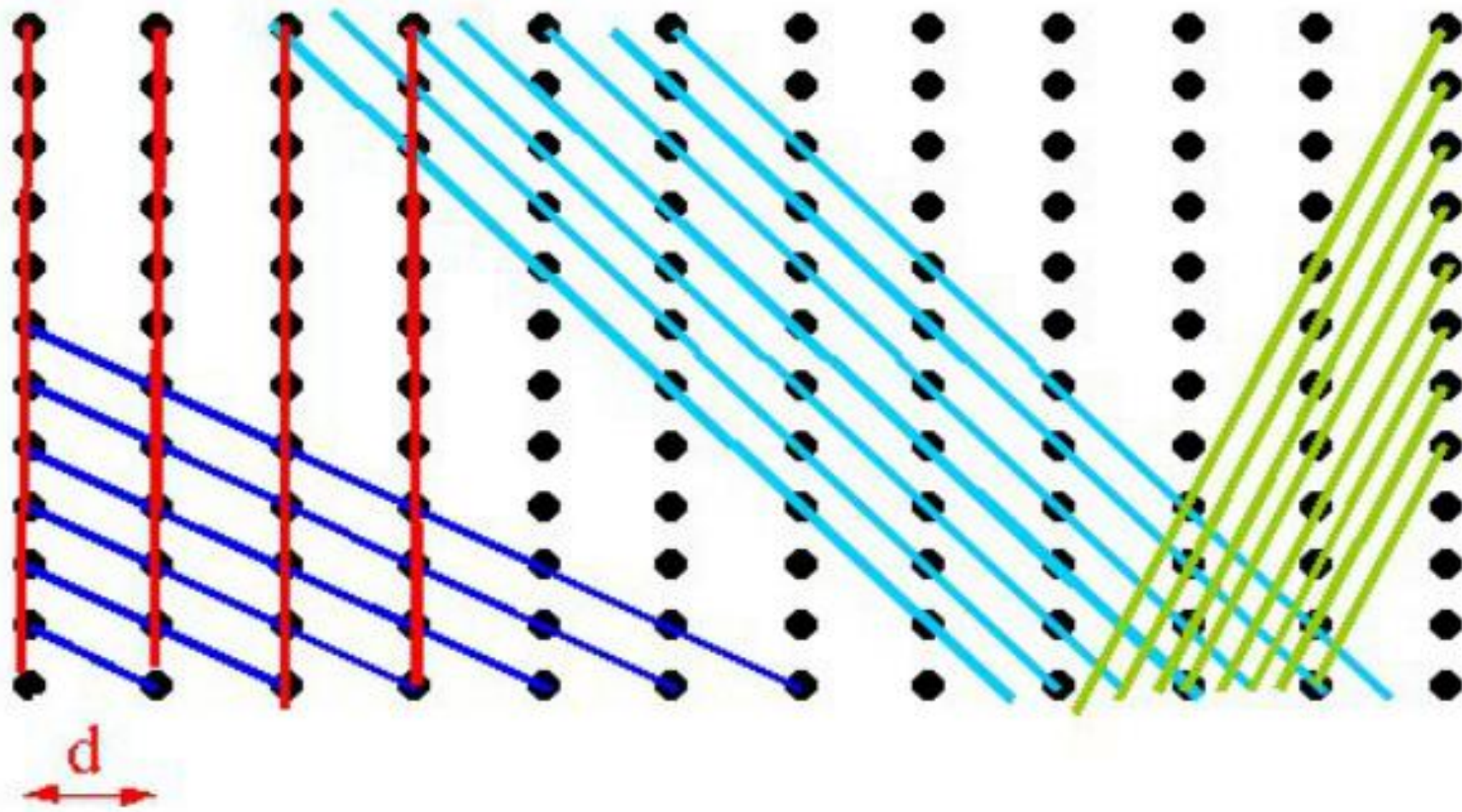


(111)

7. 晶面间距 (Interplanar crystal spacing)

两相邻平行晶面间的垂直距离—晶面间距，用 d_{hkl} 表示
从原点作 $(h\ k\ l)$ 晶面的法线，则法线被最近的 $(h\ k\ l)$ 面所交截的距离





正交晶系

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}$$

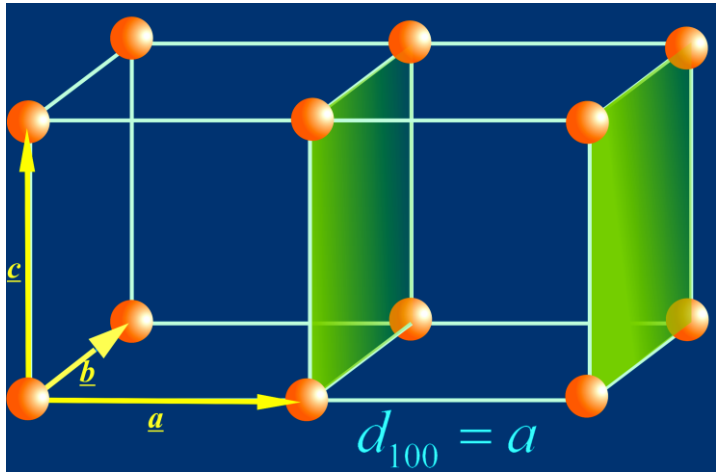
立方晶系

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

六方晶系

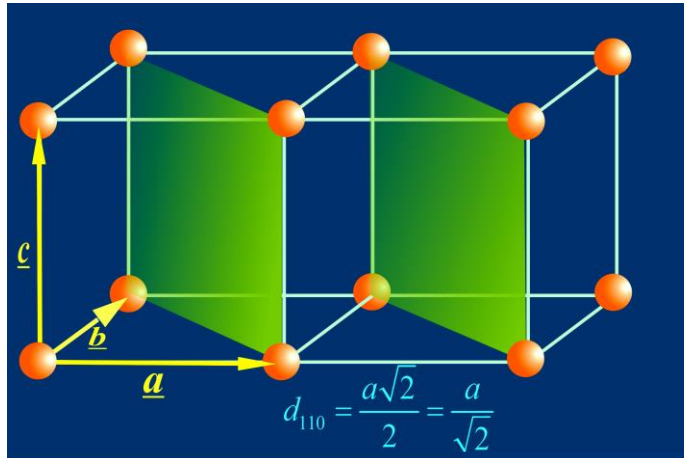
$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \left(\frac{l}{c} \right)^2}}$$

通常，低晶面指数的面间距较大，高晶面指数的反之。

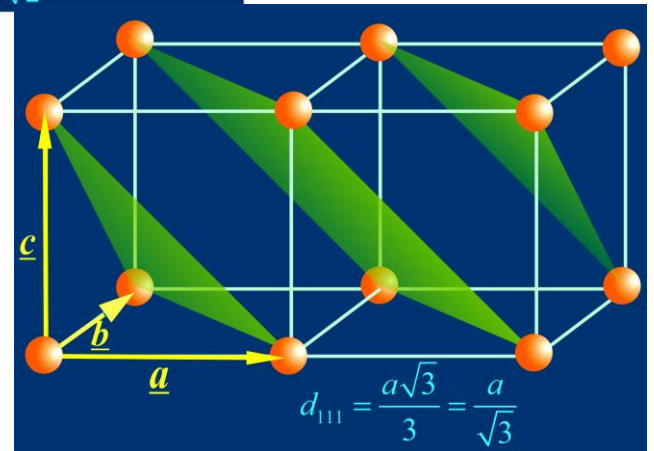


$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = a$$

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{a}{\sqrt{2}}$$



$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

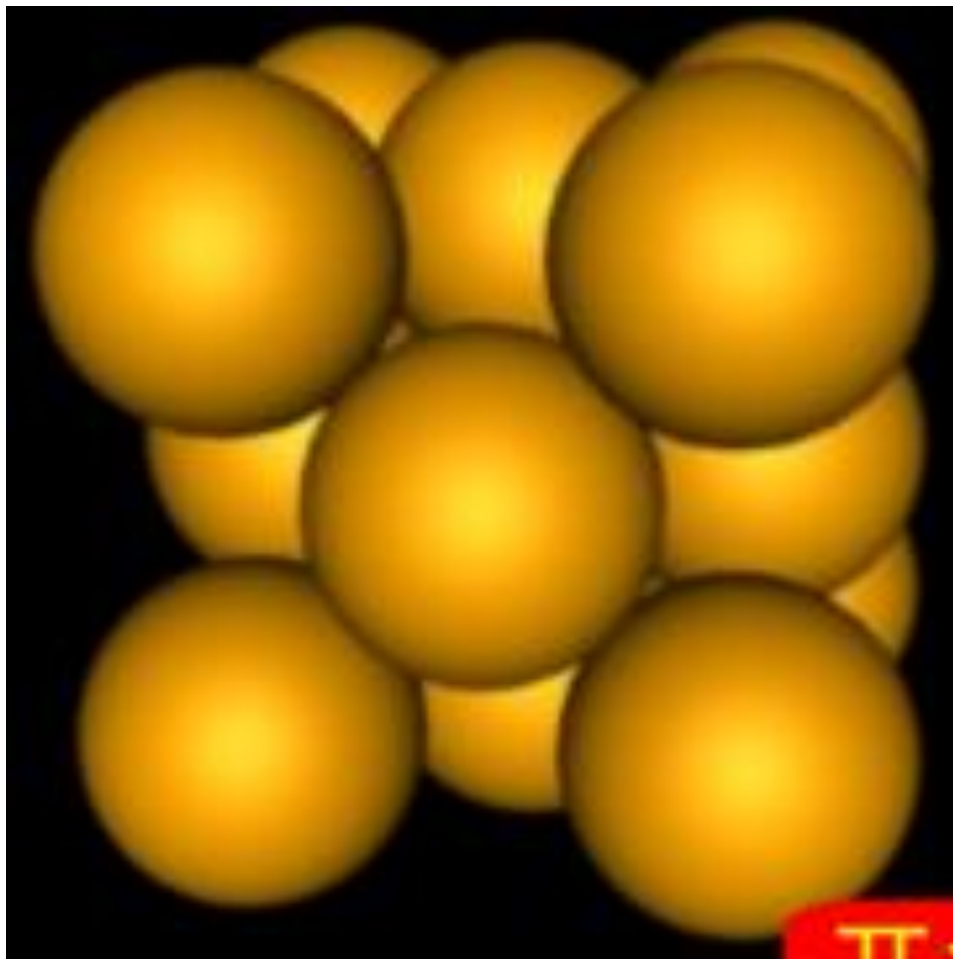


思考题：面心立方晶体的（100），（110），（111）等晶面的面间距和面致密度，并指出晶面间距最大的面。

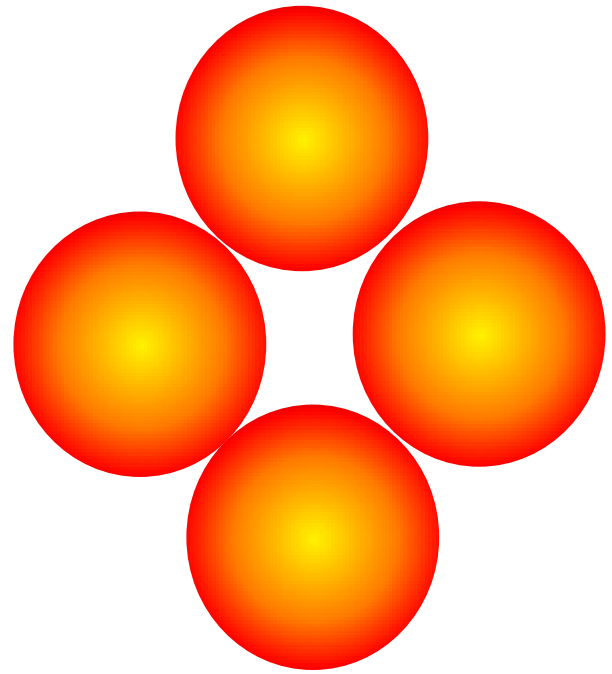
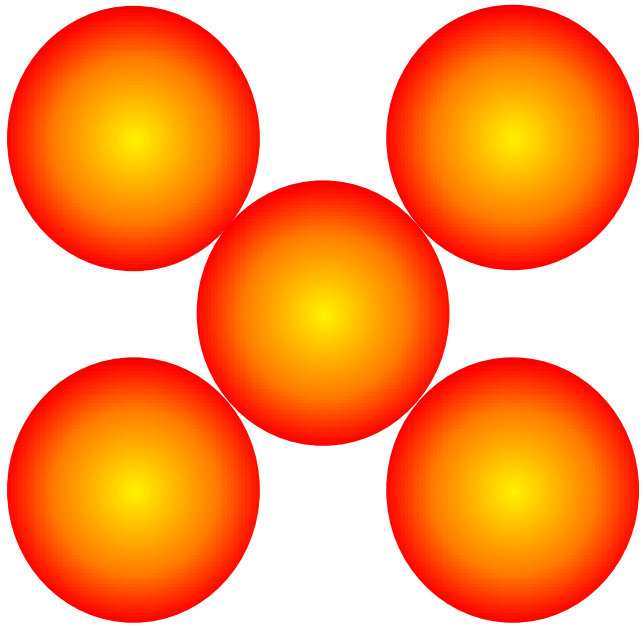
提示1：附加面

提示2：面致密度

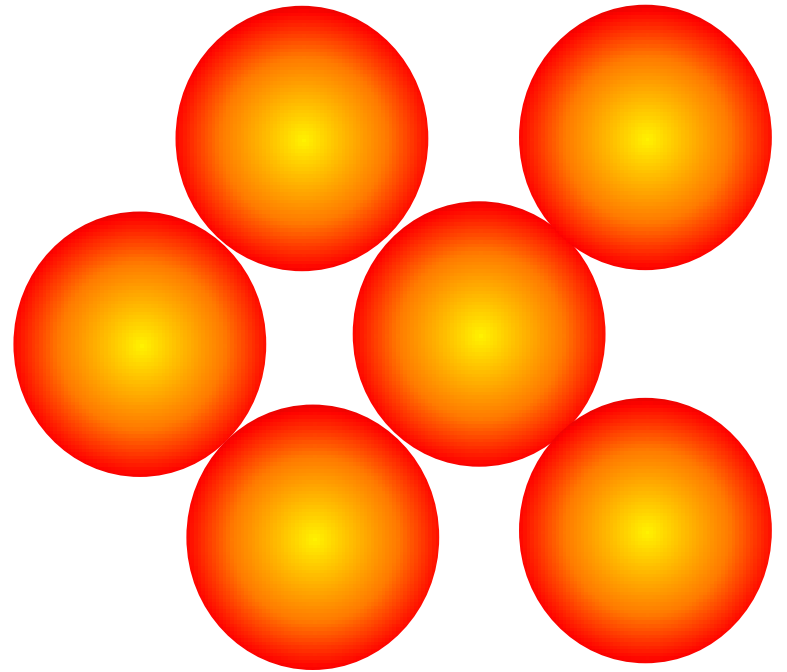
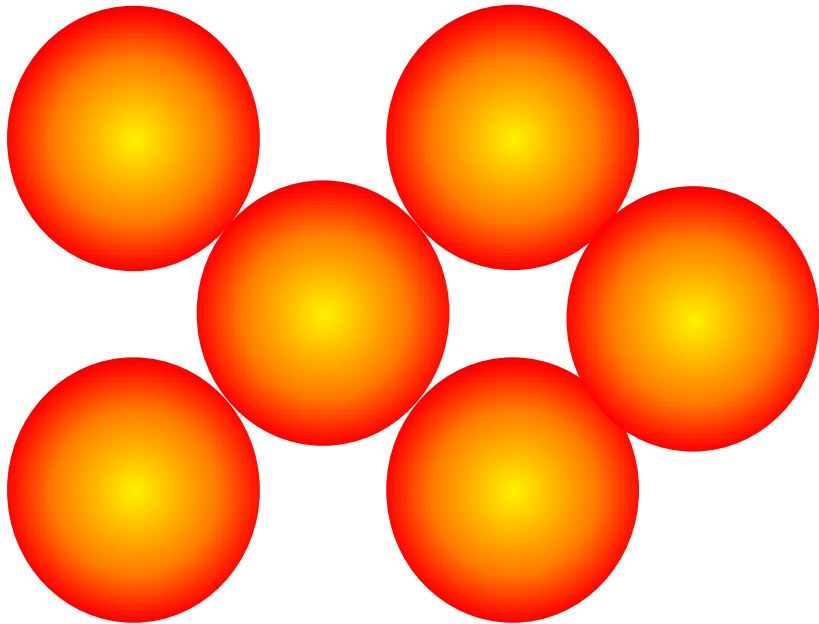
$$k = \frac{A \times \pi r^2}{a^2}$$



晶面上原子的排列



晶面上原子的排列



上述公式仅适用于简单晶胞, 对于复杂晶胞则要考虑附加面的影响

面心立方 当 (hkl) 不为全奇、偶数时, 有附加面:

$$d_{hkl} = \frac{1}{2} \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \text{ 如 } \{1\ 0\ 0\}, \{1\ 1\ 0\}$$

体心立方 当 $h+k+l = \text{奇数}$ 时, 有附加面:

$$d_{hkl} = \frac{1}{2} \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \text{ 如 } \{1\ 0\ 0\}, \{1\ 1\ 1\}$$

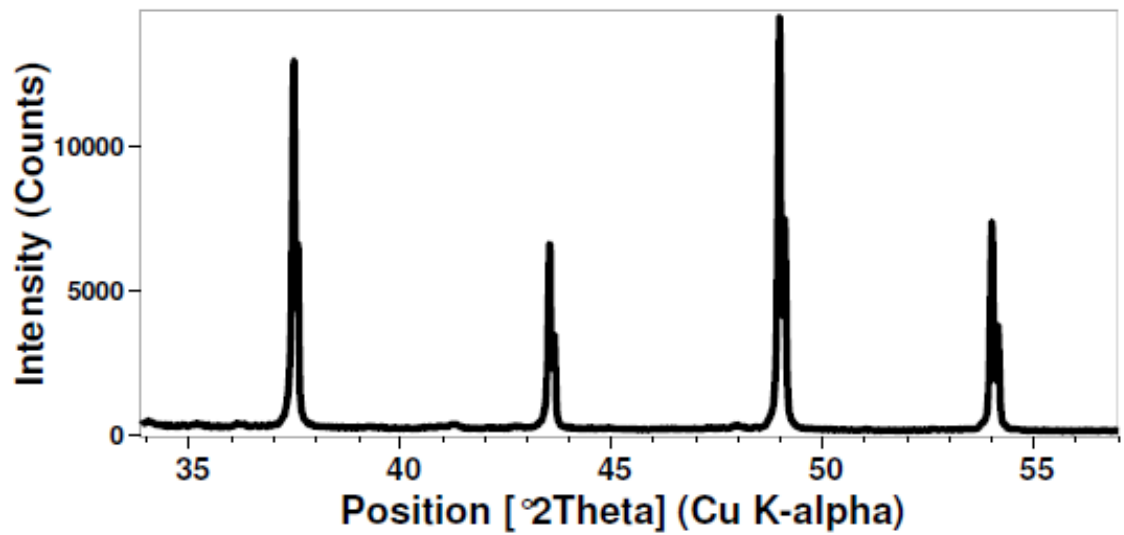
六方晶系

当 $h+2k=3n$ ($n=0,1,2,3,\dots$), $l = \text{奇数}$, 有附加面:

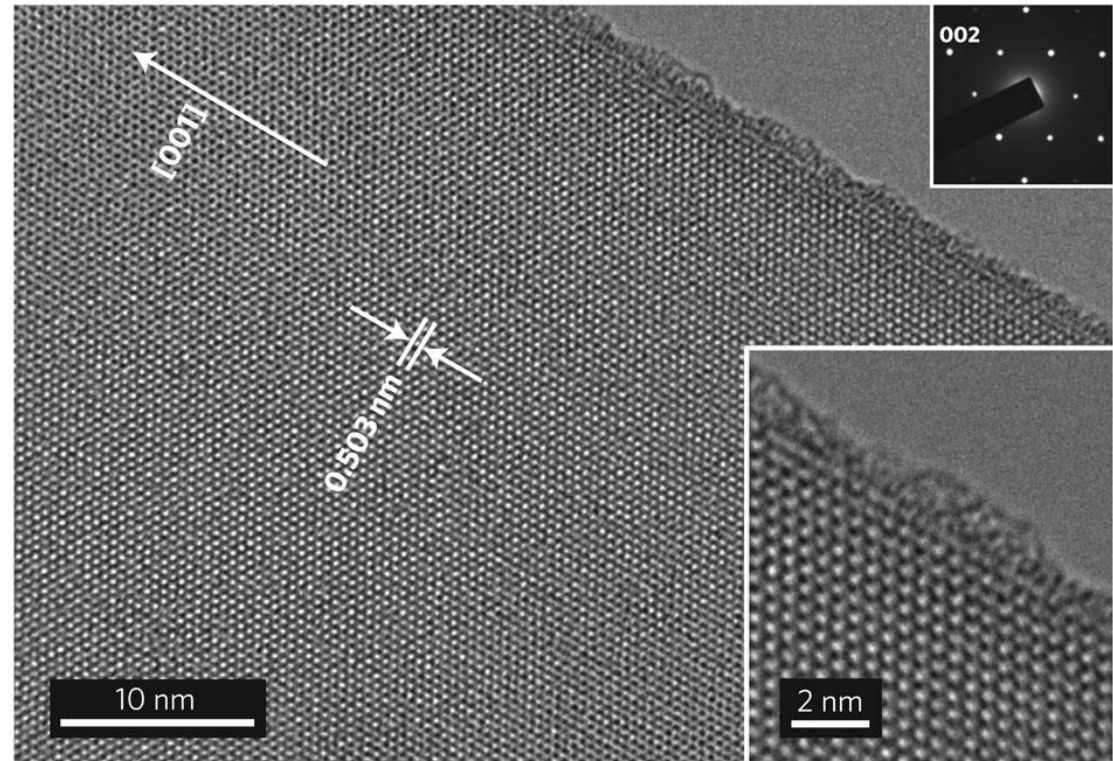
$$d_{hkl} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \left(\frac{1}{c} \right)^2}}, \text{ 如 } \{0\ 0\ 0\ 1\} \text{ 面}$$

Bragg's Law:

$$d_{hkl} = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}$$



- XRD, HRTEM可测得晶面间距;
- 物相分析。



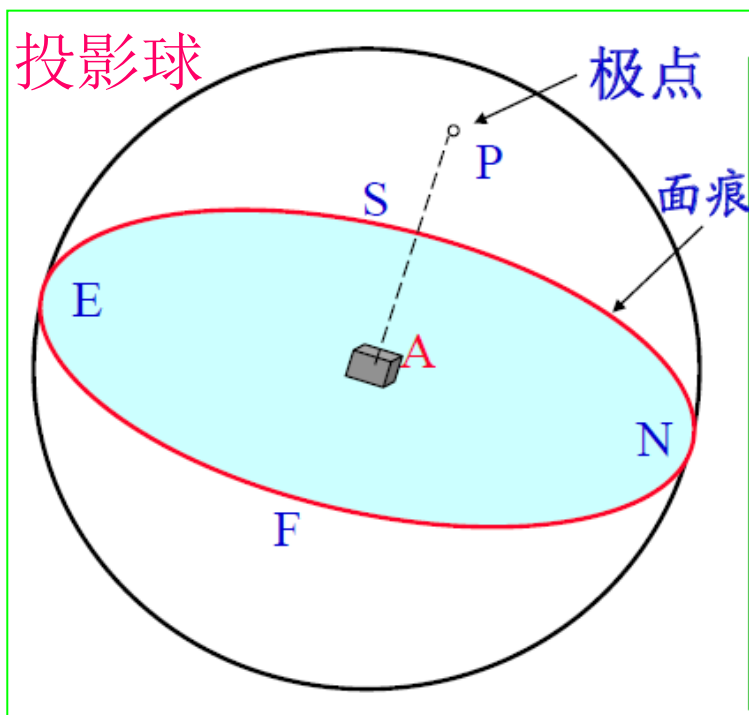
α -B

四、极射投影 Stereographic projection

晶向或晶面间的关系是三维空间的立体关系，用立体图形来表示很不方便。通过**投影**办法可以将这些关系在二维平面图中表示出来。

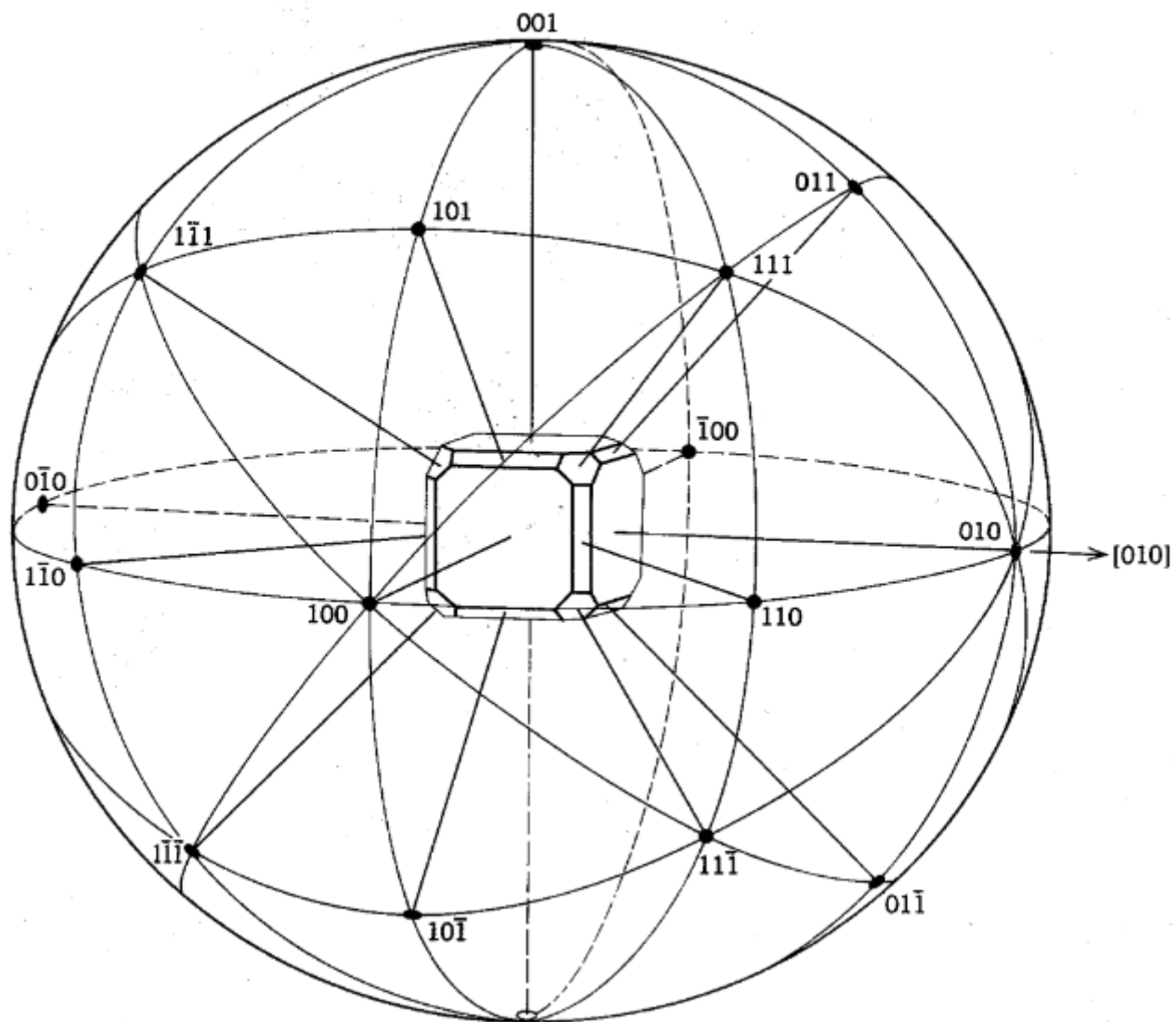
晶体 \longrightarrow 投影球中 \longrightarrow 球面投影 \longrightarrow 平面投影

(1) **球面投影** 过一晶体的中心，以任意半径作一参考球（参考球比晶体大得多），并由球心作各晶面的法线及晶向的方向线，将它们投影在参考球上，这种表达方式就叫做球面投影。



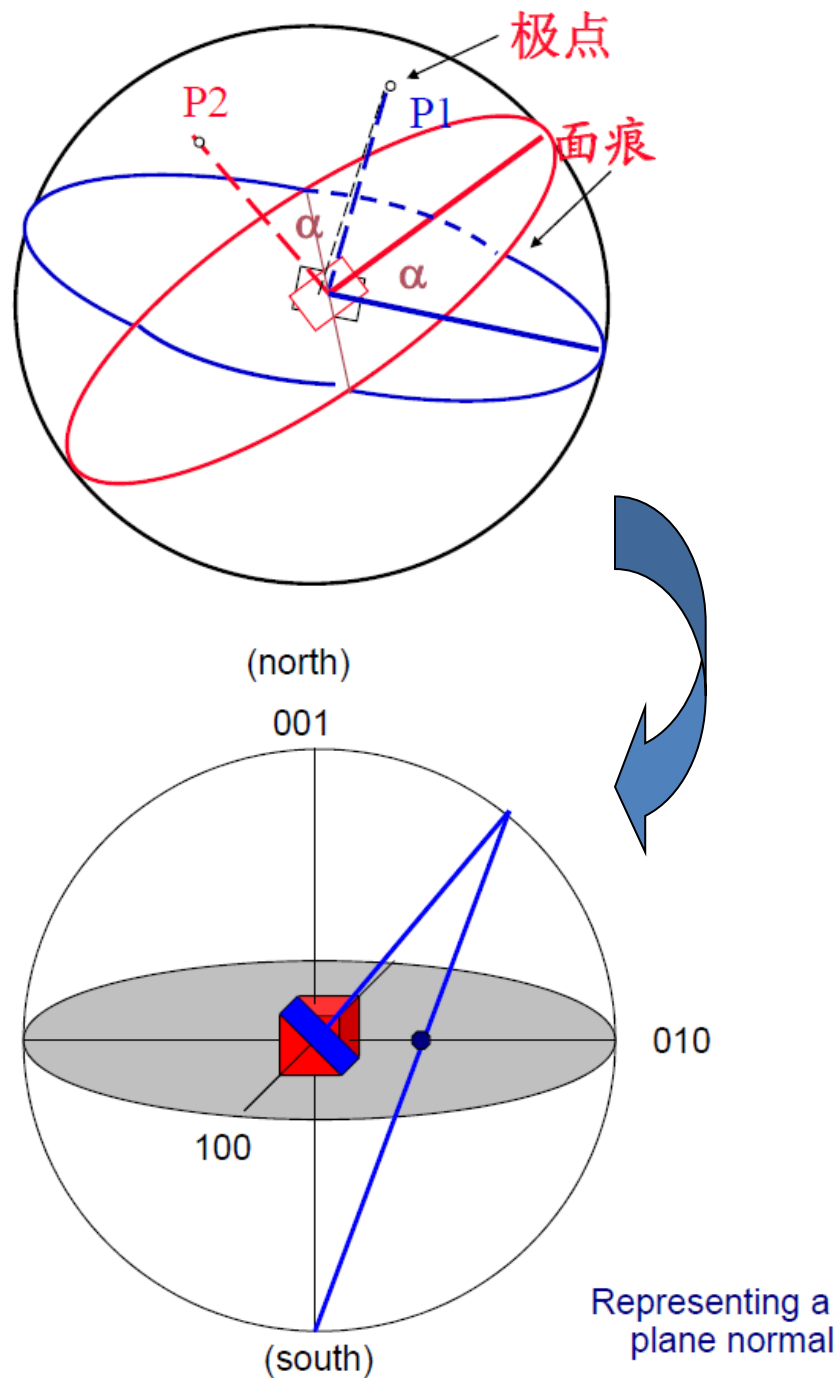
- ❑ 晶向与参考球相交的点称之为**迹点**；
- ❑ 晶面法线和球面的交点可以表示该晶面，交点称为**极点**；
- ❑ 晶面延展后和参考球相交为一个大圆，表示该晶面在参考球上的**面痕**或者迹径；

晶面在球上的投影



■ 上述极点（右图中实际上是两个晶面）在球面上，任然是三维，通过两个极点来求两个晶面的夹角还是很困难。

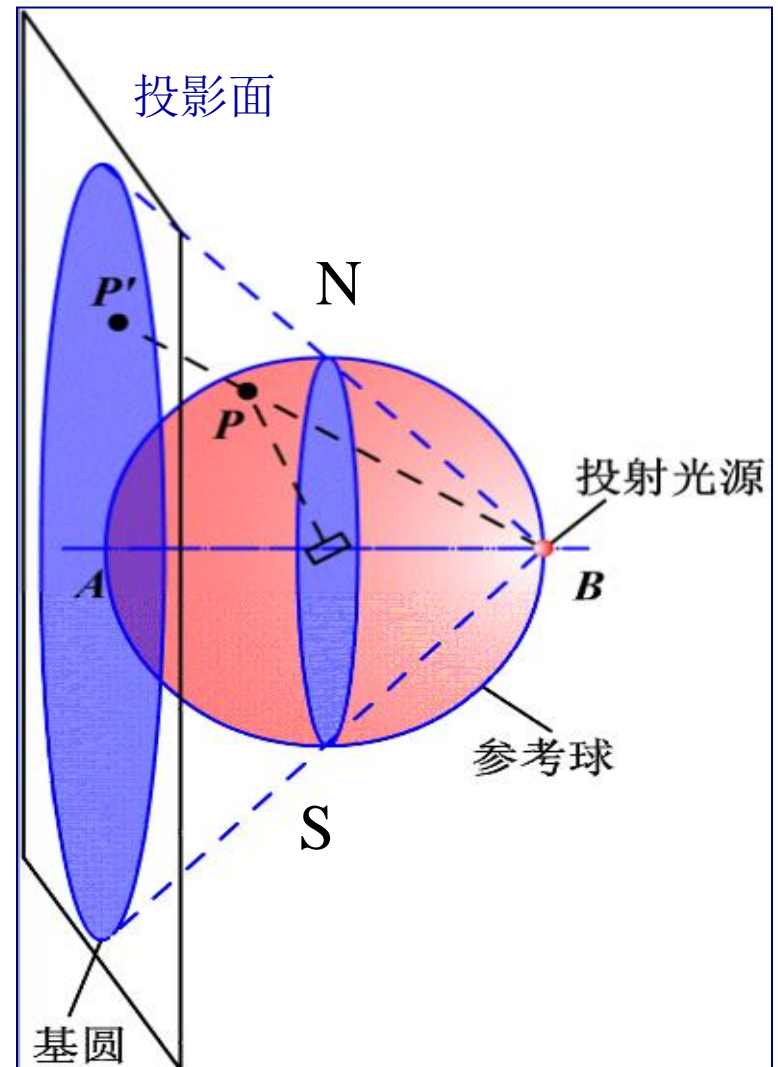
■ 通过投影的办法，把三维球面上的极点转换到二维平面上来。从而非常方便地研究晶面、晶向及它们的相对关系。



(2) 极射投影（其原理就是对极点的投射）

以B点作为投射点（观测点或投射光源），连接B点与左半球面的极点（如P点），则连线与投影面的交点（如P'点）即代表晶面的投影。

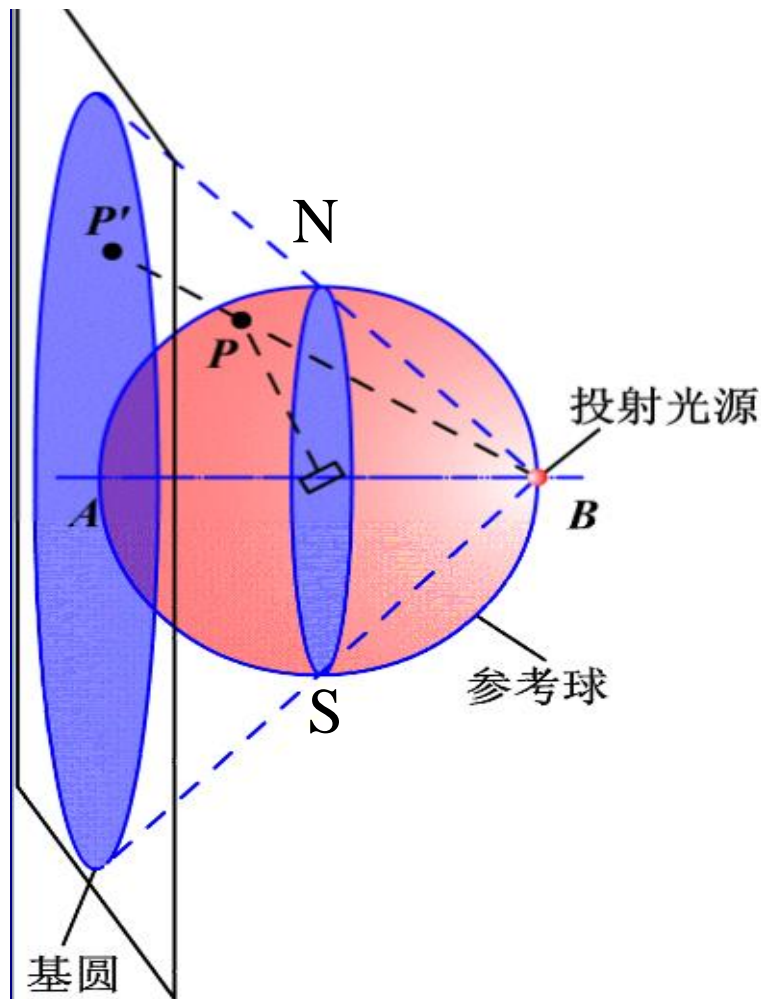
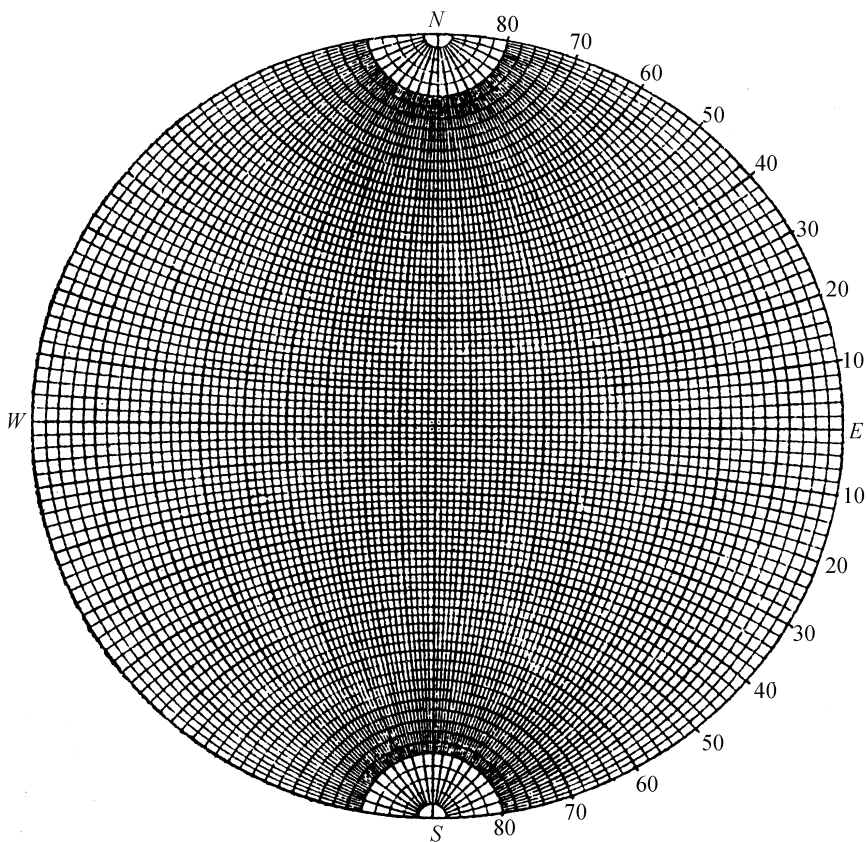
- 过球心且与AB垂直的平面，在球面上形成一个直径与球半径相等的圆，为**大圆**。大圆的投影为**基圆**。
- 左半球球面上极点的极射投影点都分布在**基圆内**。
- 投影面移至B点并以A点为投影点，将右半球面上的极点投影至B处的投影面，冠以负号。
- 两张极射投影图重叠，就包括所有极点。
- 如果投影面与赤道面重合则称为**极射赤道投影**。其它方式称为**极射平面投影**，

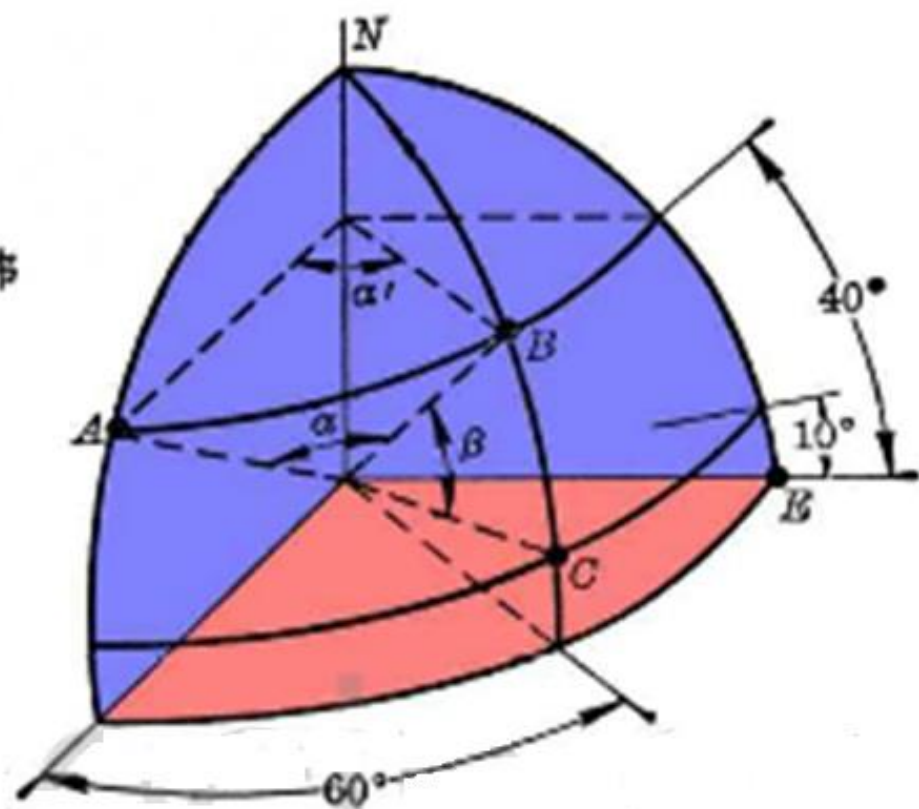
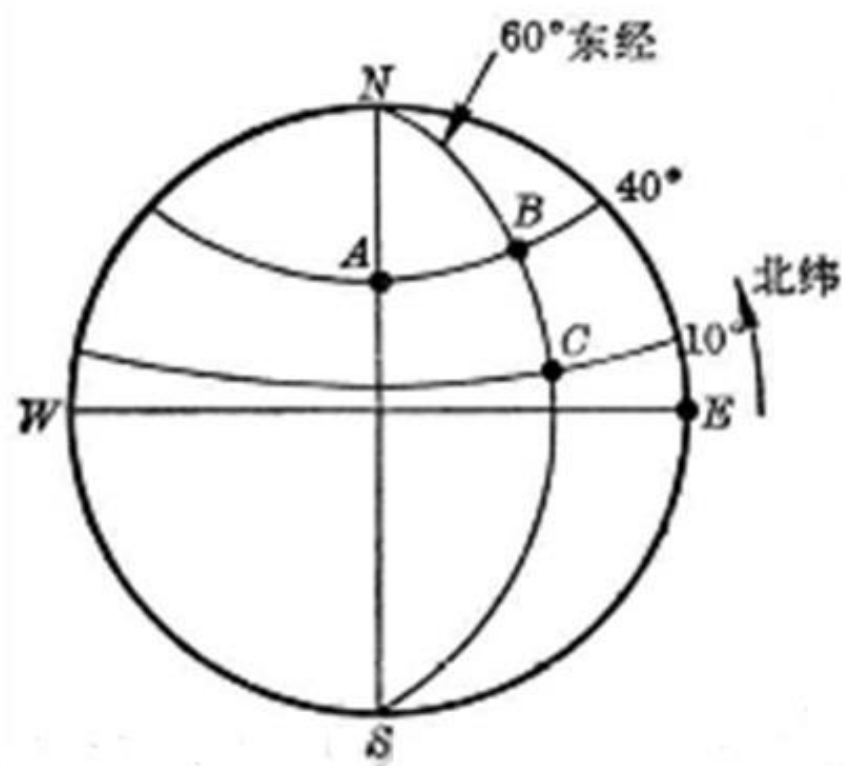


(3) 乌尔夫网 (Wulff Net)

为了解决极射投影的测量工具，创造了乌尔夫网。

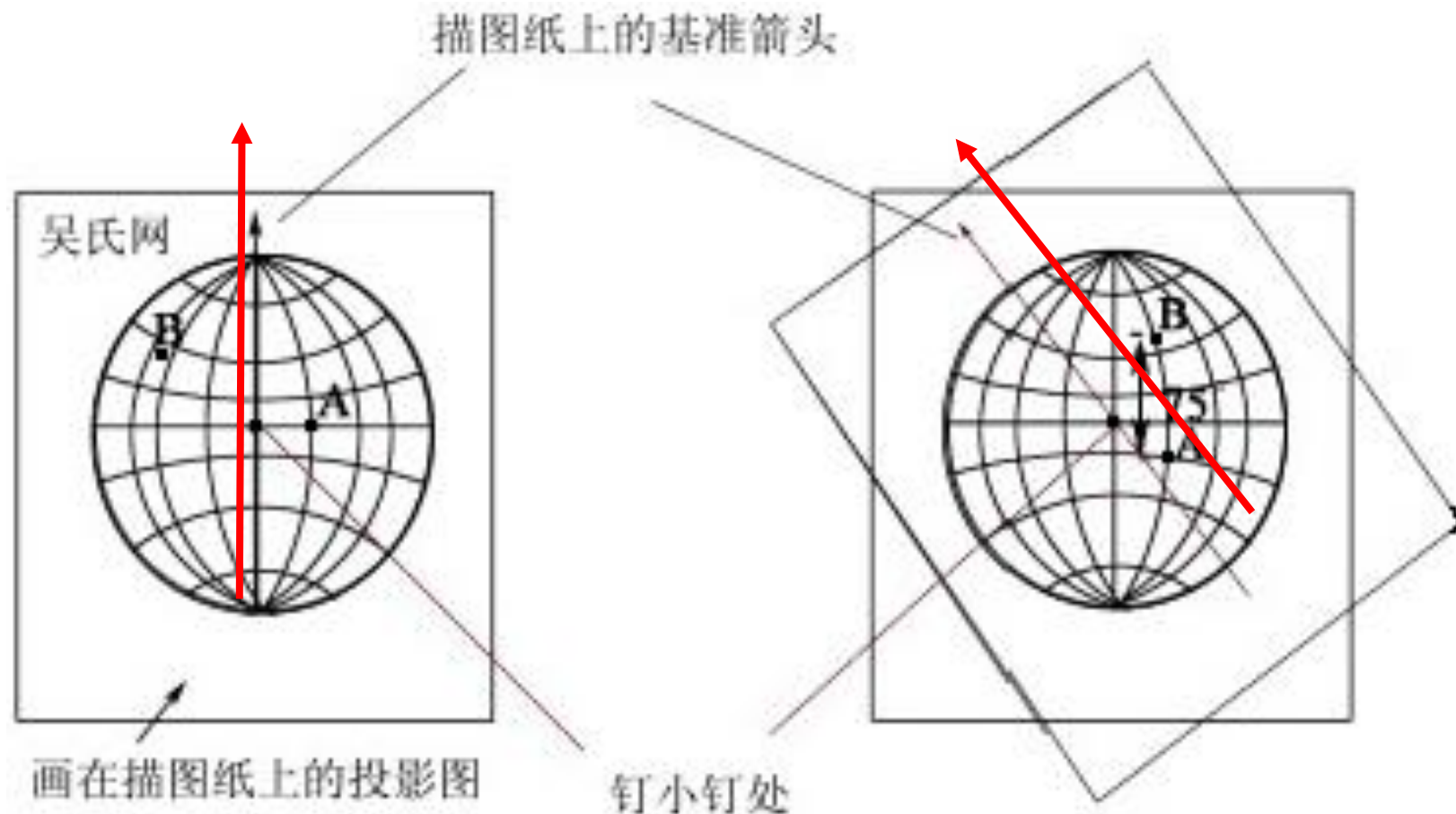
- **经线**：参考球空间每隔 2° 等分且以NS轴为直径的一组大圆投影
- **纬线**：垂直于NS轴且按 2° 等分球面空间的一组一组大圆投影





应用：测两个任意极点之间的夹角

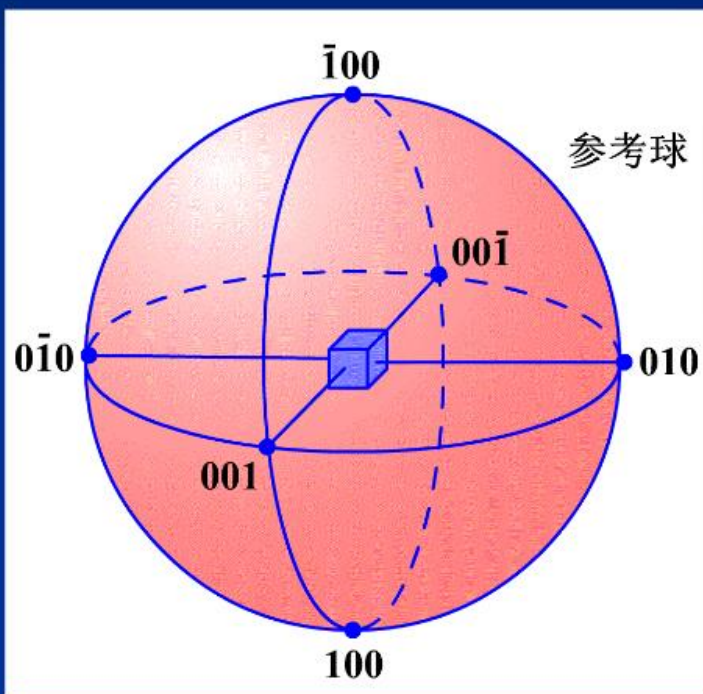
（将基圆直径一样的乌尔夫网与投影中心钉在一起，转动乌尔夫网，使两个极点落在同一经线上，读出纬度差即可。



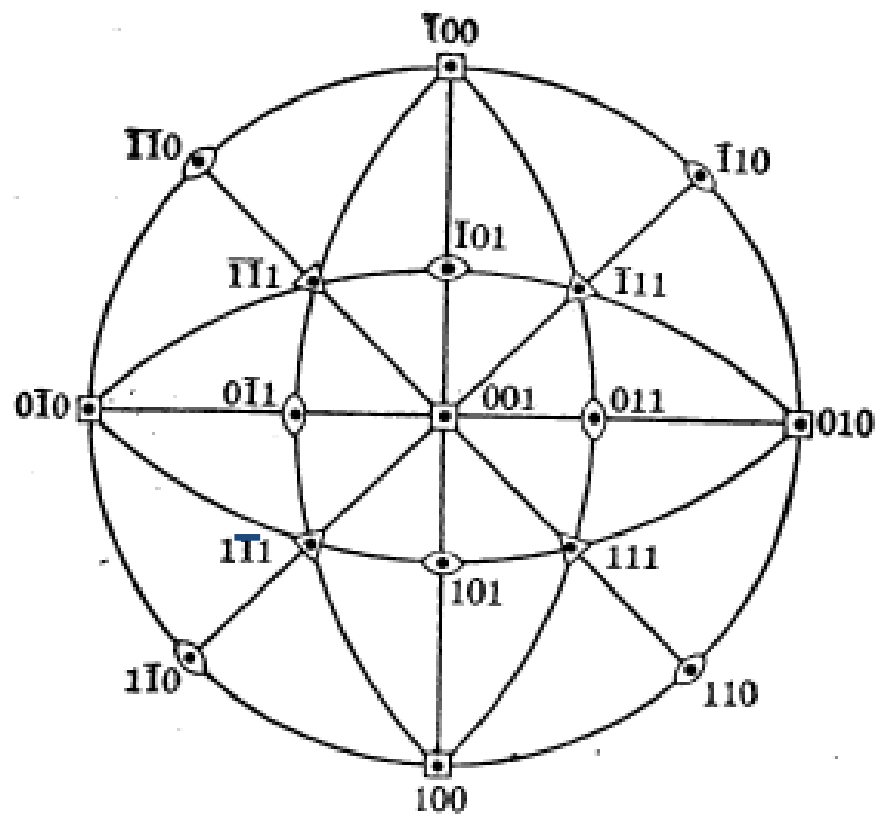
只有两极点位于乌尔夫网经线或赤道上才能正确度量晶面、晶向间夹角

(4) 标准投影:

以晶体的某个晶面//投影面作出全部主要晶面的极射投影, 称为标准投影。
如立方晶系 (001) 标准投影图。

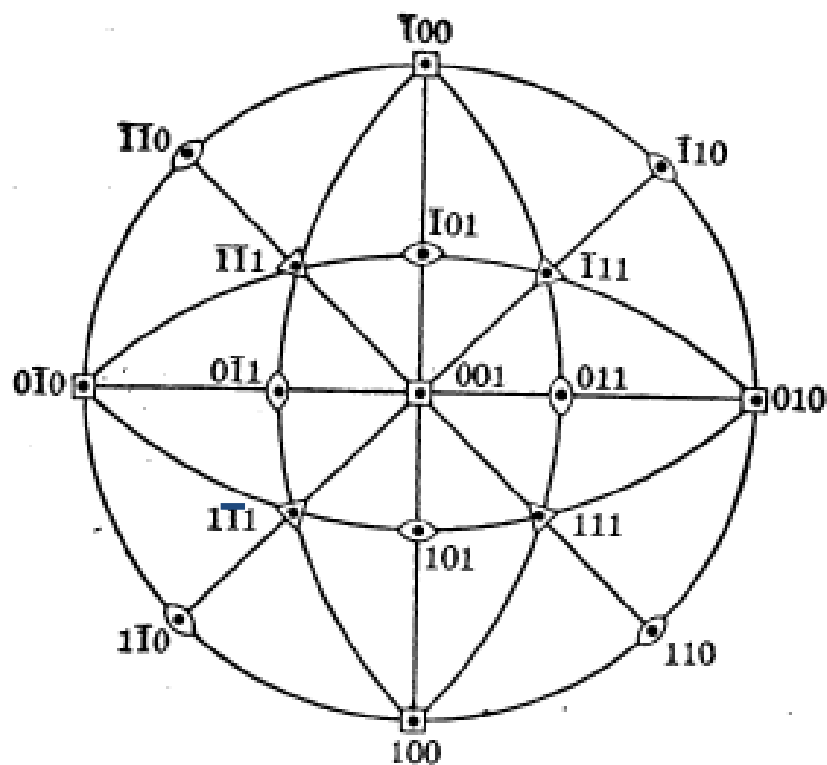


参考球和立方晶体的球面投影



立方晶体 (001) 标准投影图

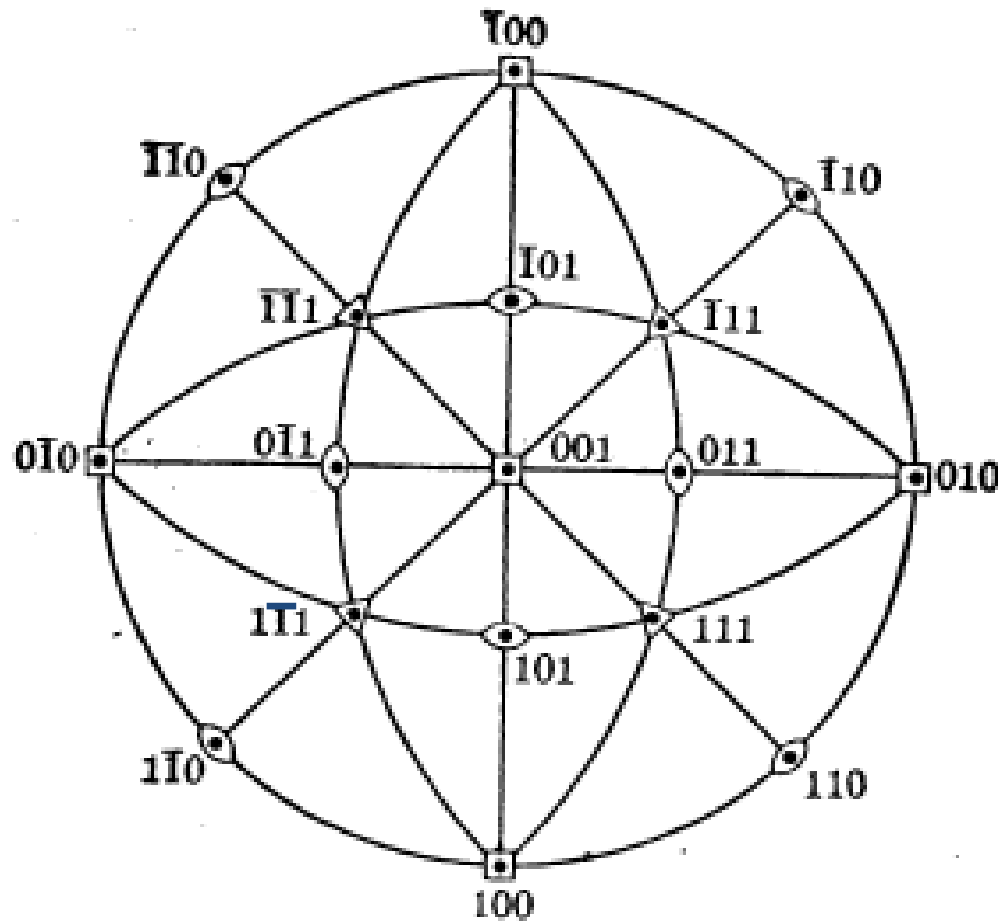
立方晶体 (001) 标准投影图



- 标准投影图中的点既代表晶面，又代表晶向。
- 同一晶带各晶面的法线位于同一平面上，各晶面的极点一定位于参考球的同一大圆上，投影图上各个投影点也位于同一大圆上
- 由于晶带轴与其晶面的法线是相互垂直的，所以可以根据晶面所在的大圆求出该晶带的晶带轴。

(100), ($\bar{1}\bar{1}1$), ($0\bar{1}1$), ($\bar{1}\bar{1}1$), ($\bar{1}00$) 等同于位于经线上的圆，属于同一晶带，应用乌尔夫网在赤道线上向右量出 90° ，晶带轴为 $[011]$ 。

思考题：晶向指数 $[123]$ 的极射投影点在图中那个区域？

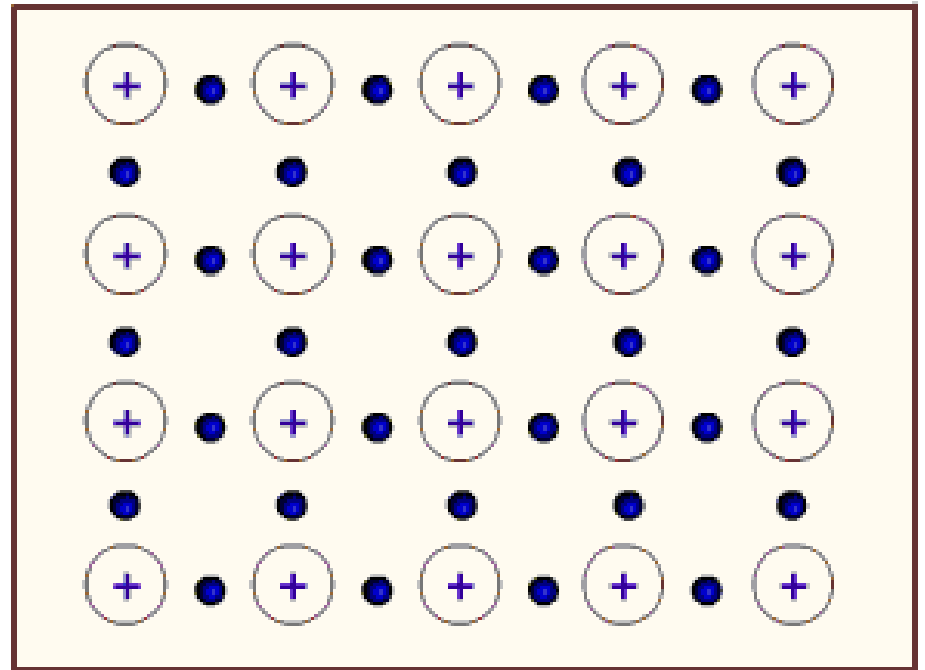
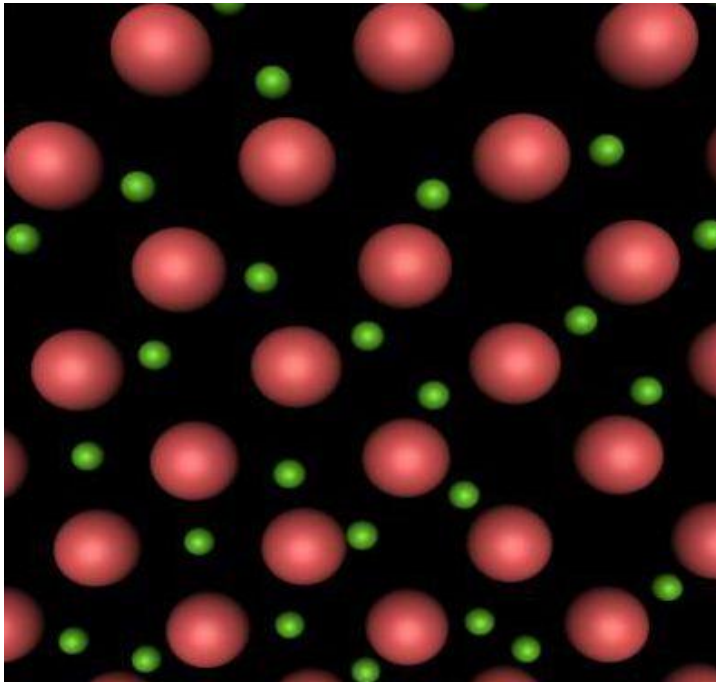


立方晶体（001）标准投影图

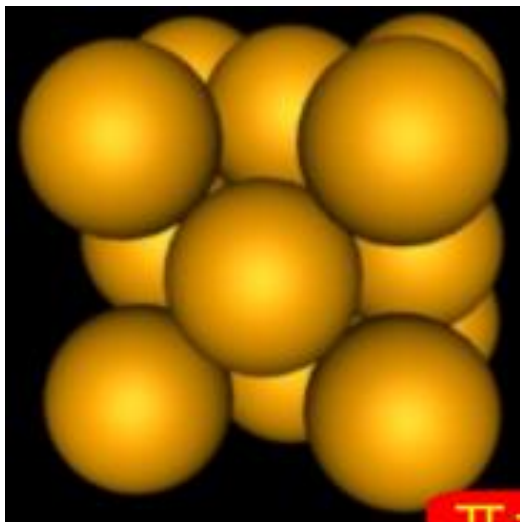
※2 金属的晶体结构 (Crystal Structure of Metals)

金属键：金属中自由电子与金属正离子之间构成键合称为金属键

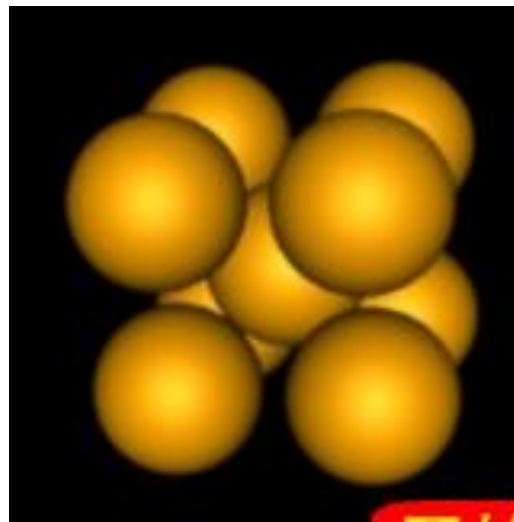
特 点：无饱和性又无方向性，形成低能量密堆结构，构成高度对称性的简单晶体。



常见金属晶体结构 { 面心立方结构 (FCC) face-centred cubic lattice (A1)
体心立方结构 (BCC) body-centred cubic lattice (A2)
密排立方结构 (HCP) hexagonal close-packed lattice (A3)



面心立方结构
Cu, Al, Ni, Au, Ag, Pt



体心立方结构
Cr, V, Mo, Ta, Nb, W



密排六方结构
Mg, Zn, Cd, α -Ti

晶胞中的原子数 (Number of atoms in unit cell)

$$N = N_i + \frac{N_f}{2} + \frac{N_c}{8}$$

点阵常数 (lattice parameters) a , c

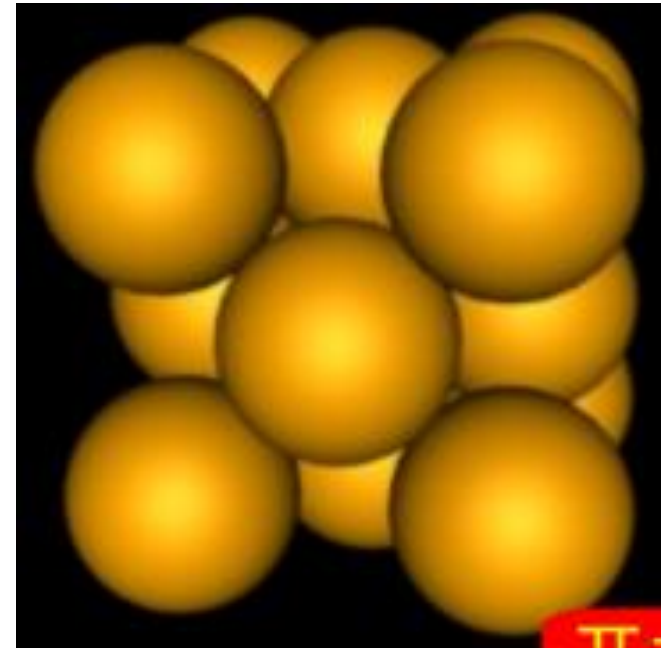
原子半径 (atomic radius) R

配位数 (coordination number) N

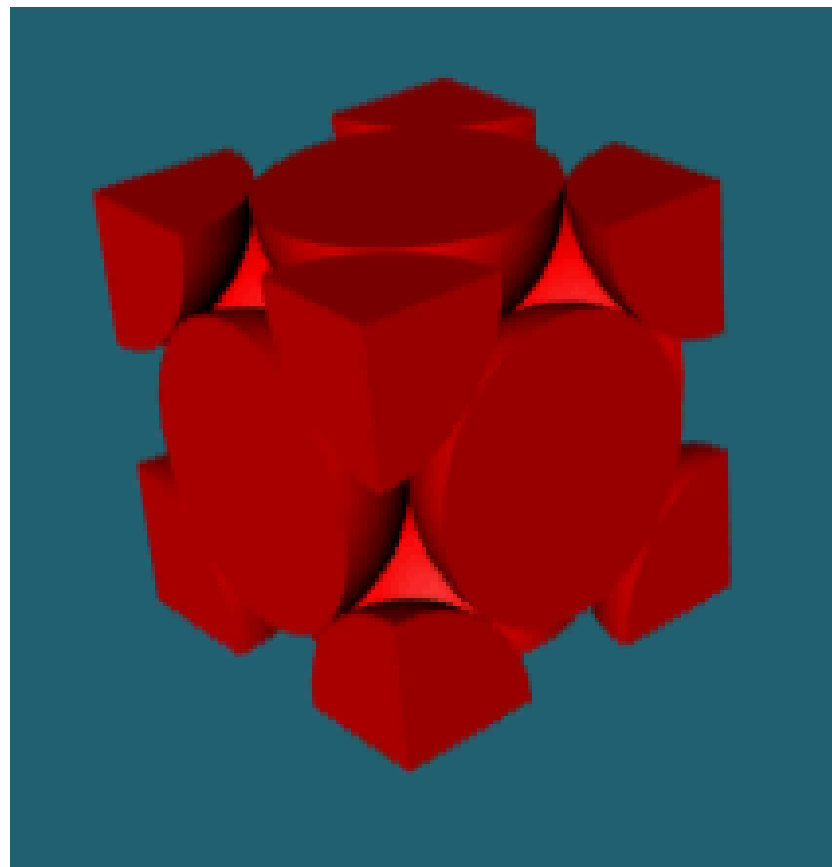
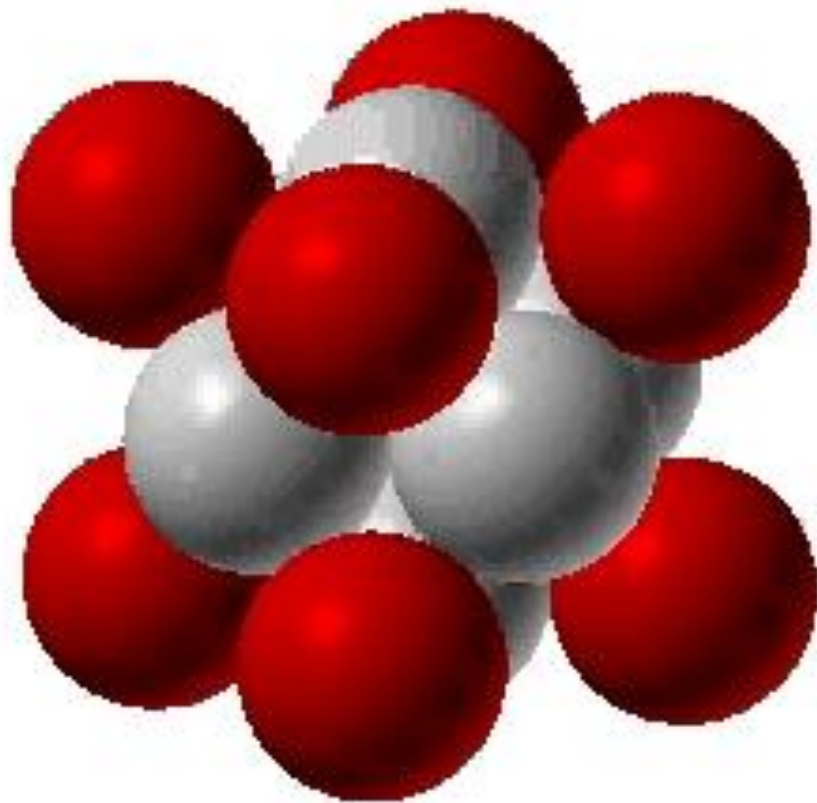
致密度 (Efficiency of space filling)

$$K = \frac{nv}{V} = \frac{n \frac{4}{3} \pi R^3}{V}$$

轴比 (axial ratio) c/a



面心立方 A1



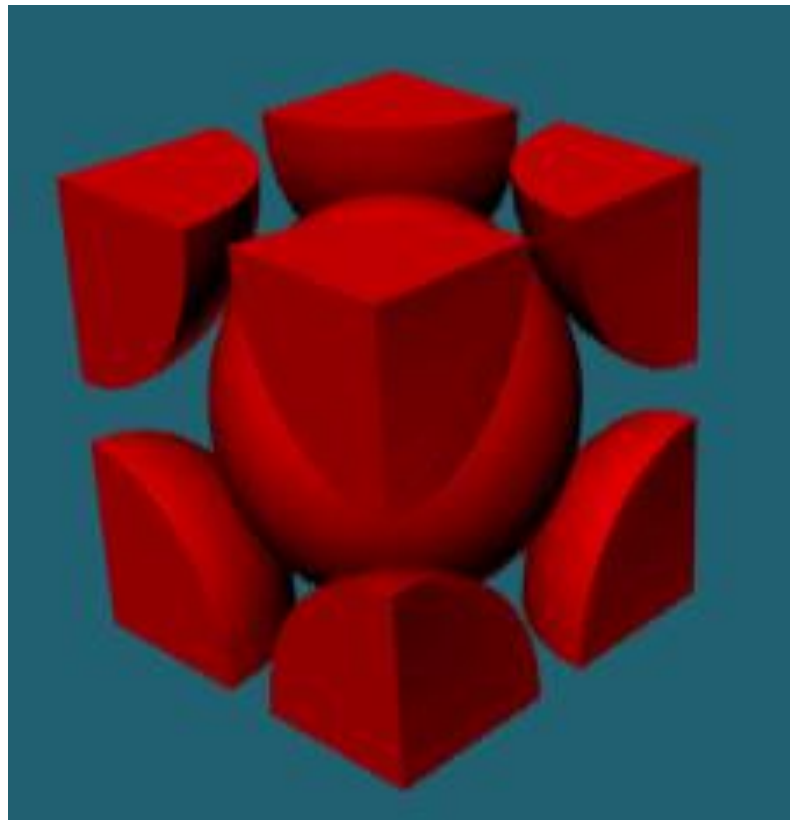
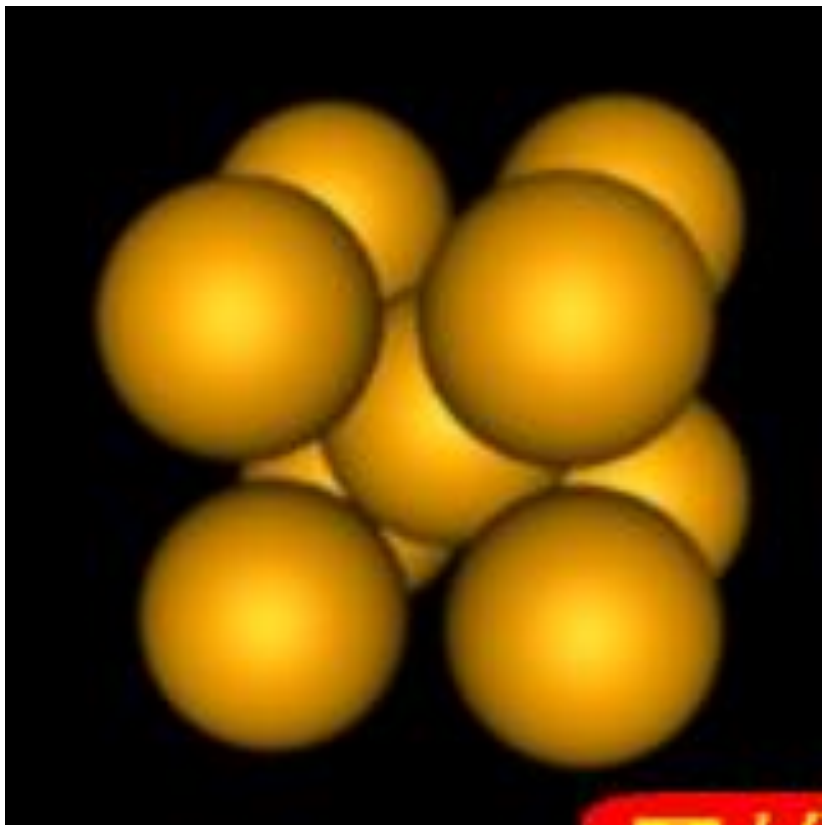
晶胞中的原子数： $6 \times 1/2 + 8 \times 1/8 = 4$

配位数：12

原子半径： $R = \frac{\sqrt{2}a}{4}$

致密度：0.74

体心立方 A2



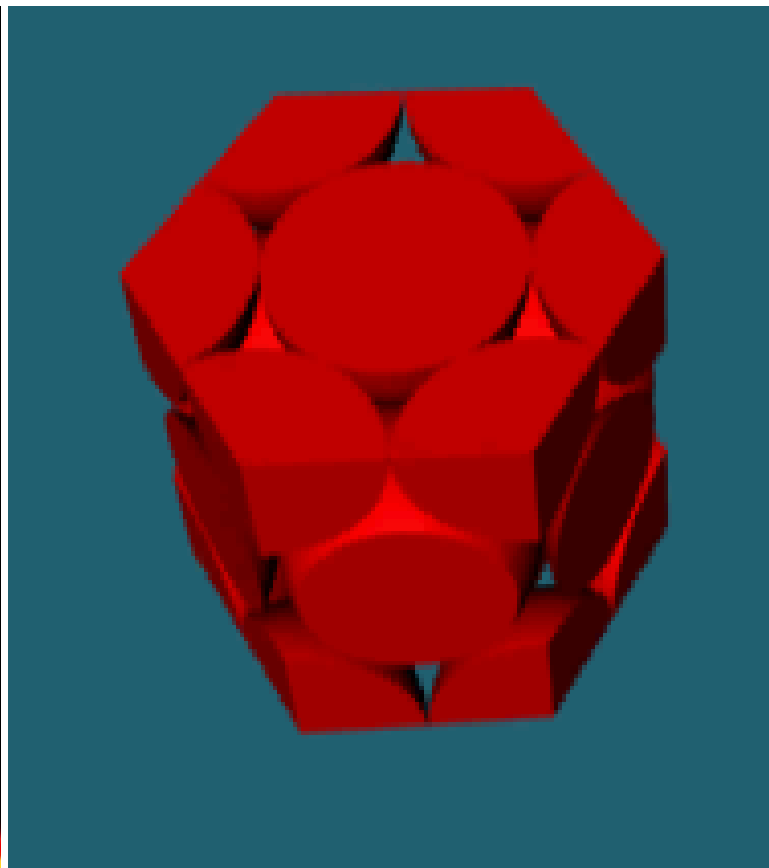
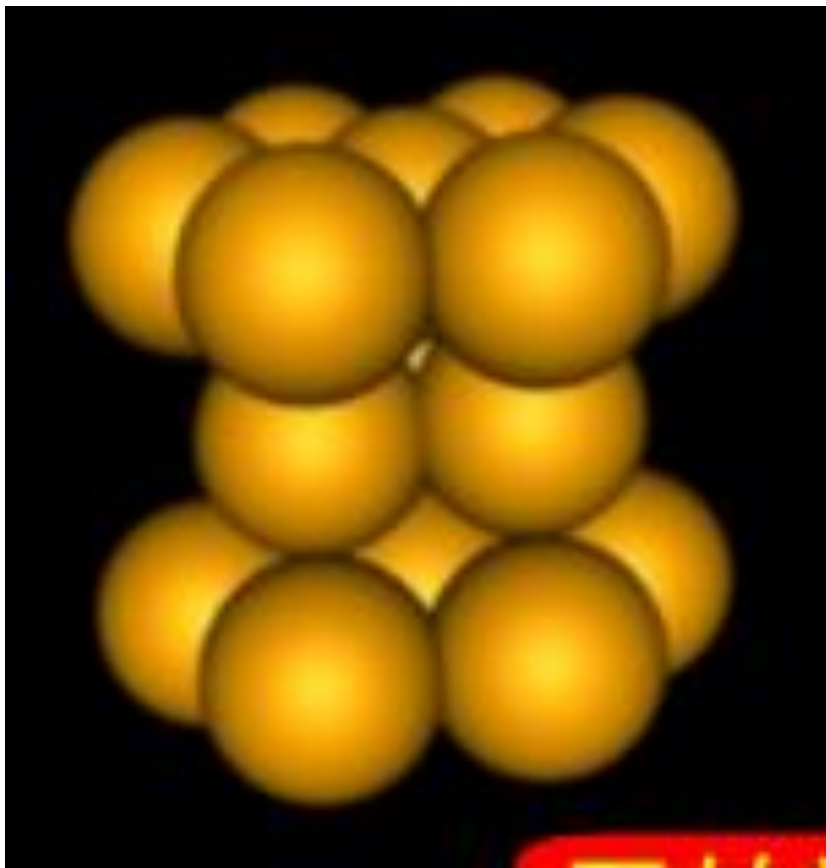
晶胞中的原子数： $1 + 8 \times 1/8 = 2$

配位数： 8

原子半径： $R = \frac{\sqrt{3}a}{4}$

致密度： 0.68

密排立方 A3



晶胞中的原子数： $12 \times 1/6 + 2 \times 1/2 + 3 = 6$

配位数：12

原子半径： $R = \frac{a}{2\sqrt{2}}$

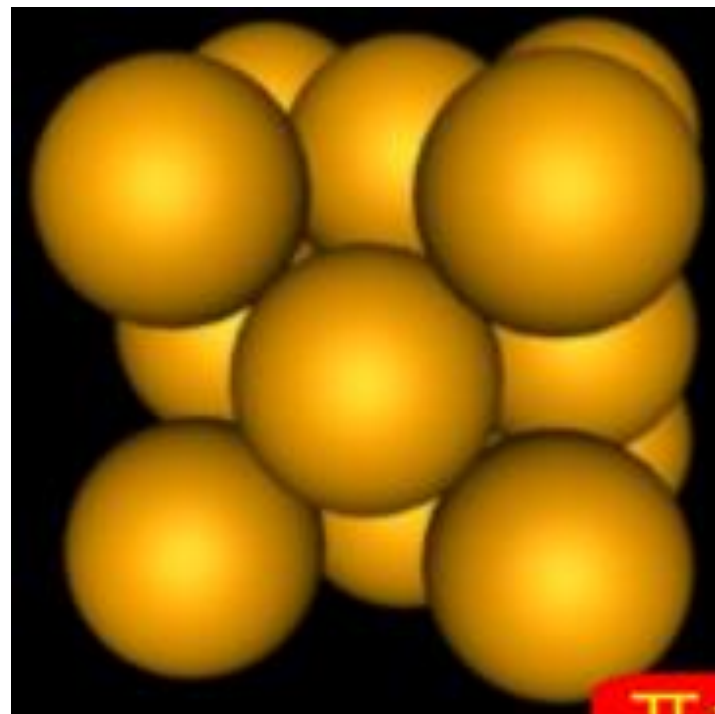
致密度：0.74

思考题：镍（Ni）原子半径为 $r=0.1243\text{ nm}$ ，
试问镍的晶格常数和密度。

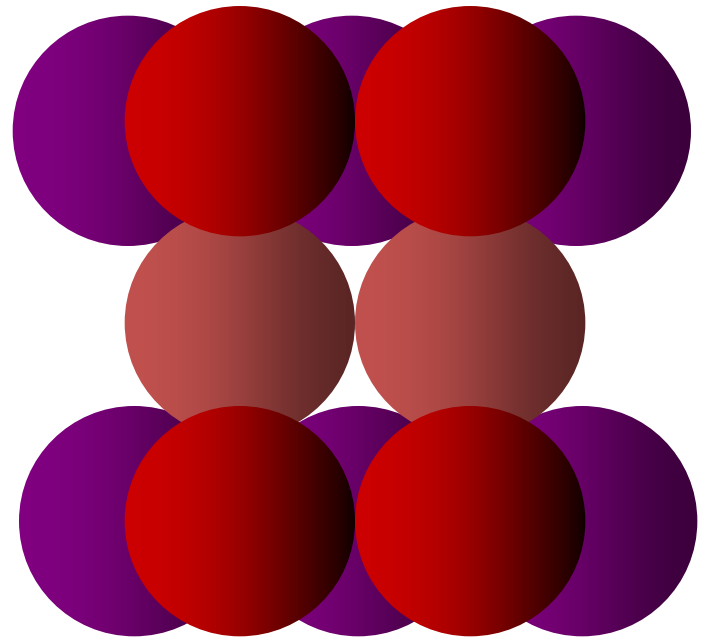
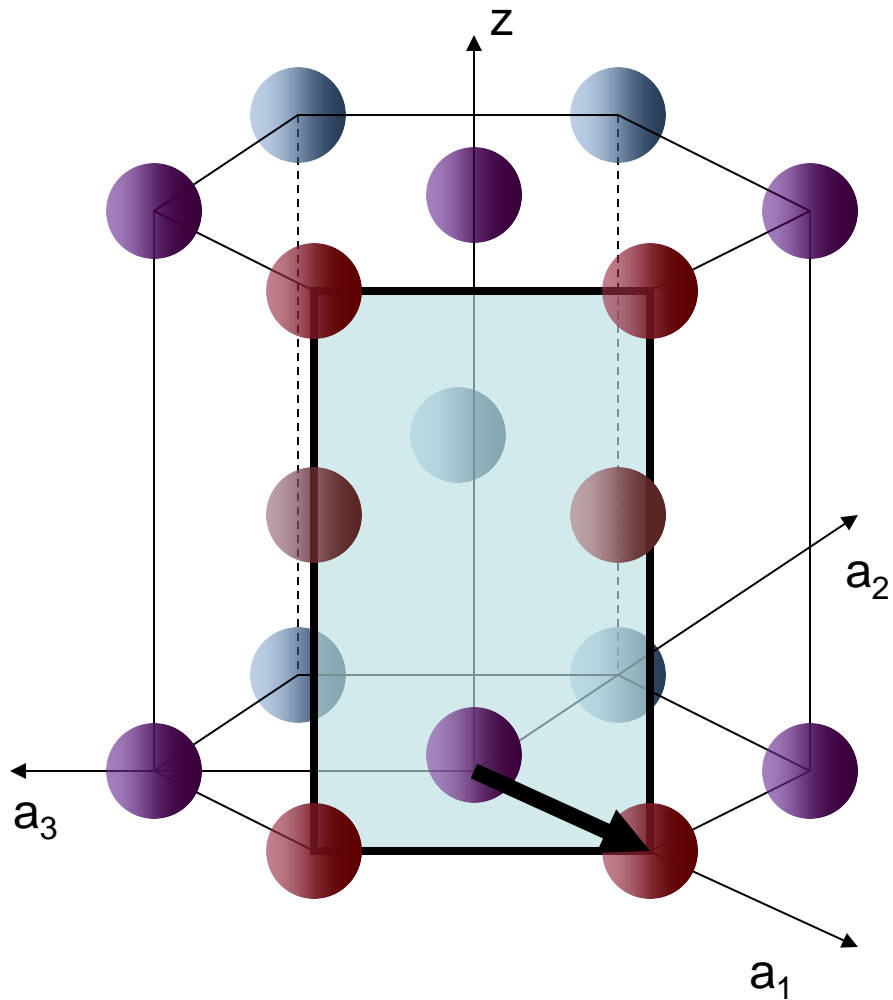
提示：

1) 晶体类型

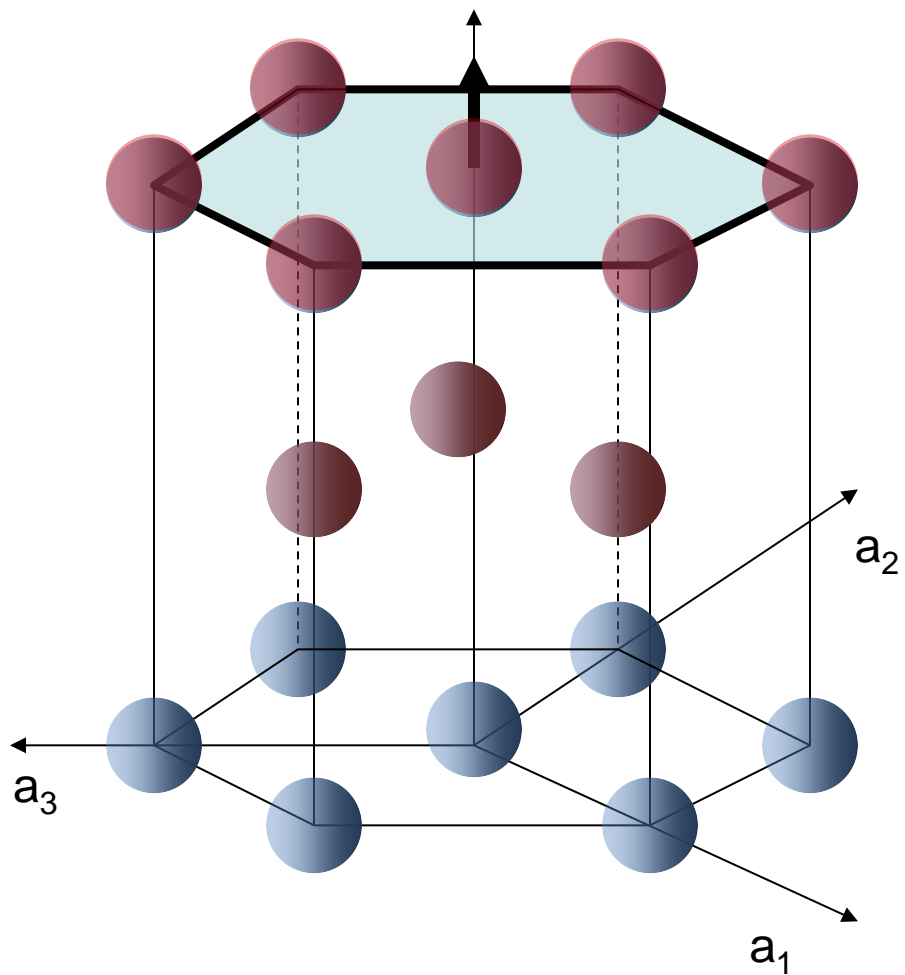
2) Ni的原子量58.69



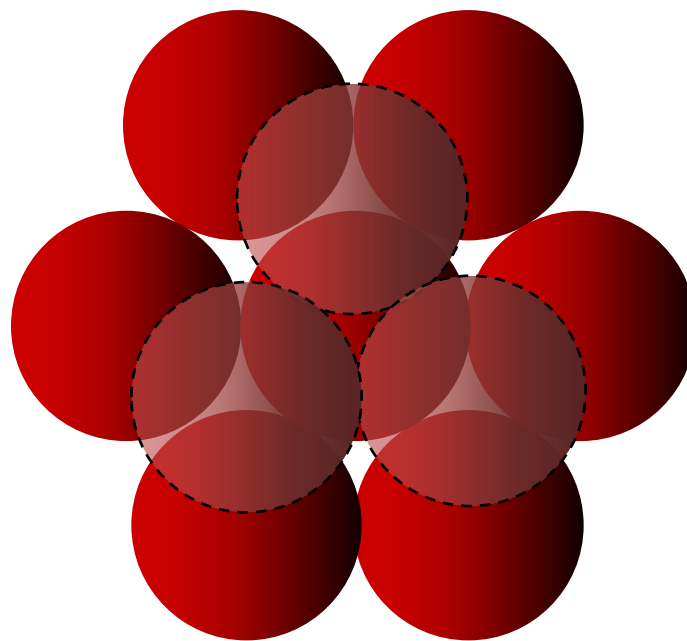
密排六方晶面原子排列

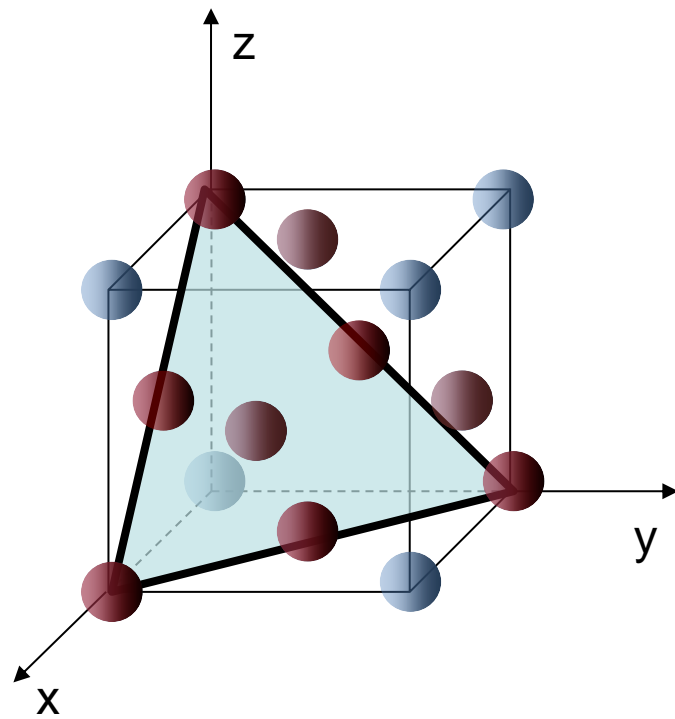


$$(1\bar{1}00)$$

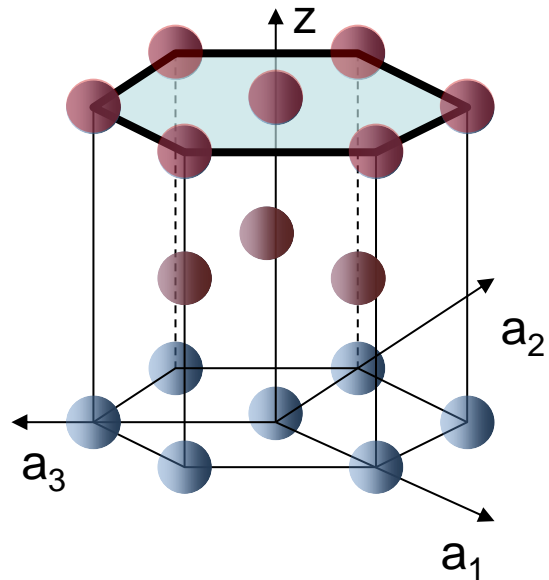
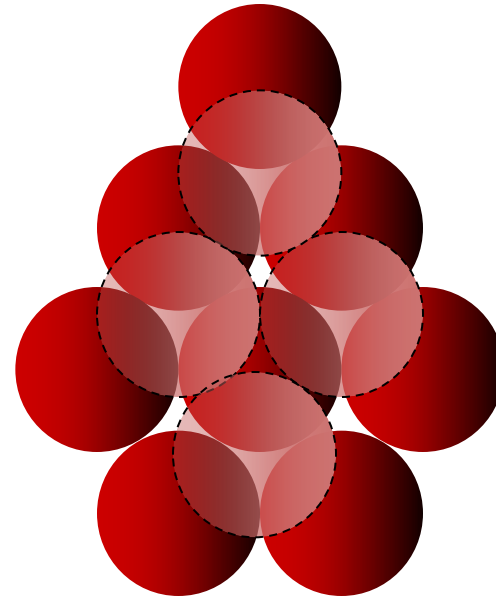


plane = (0001)

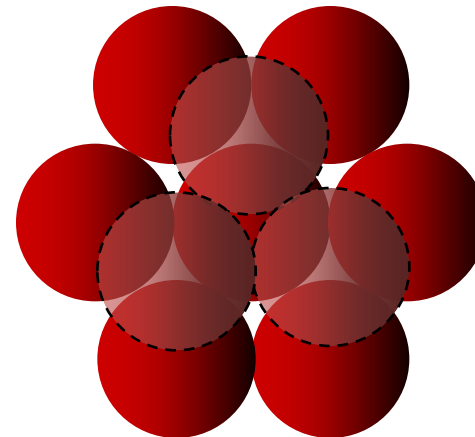




$(1\ 1\ 1)$ plane of FCC



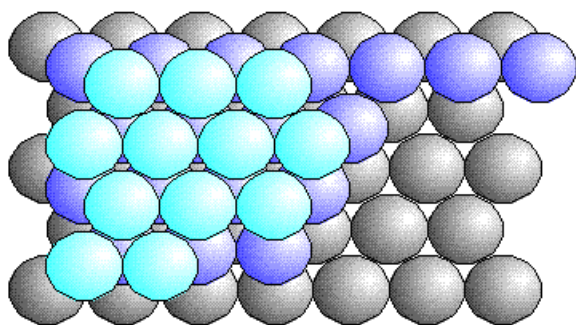
$(0\ 0\ 0\ 1)$ plane of HCP



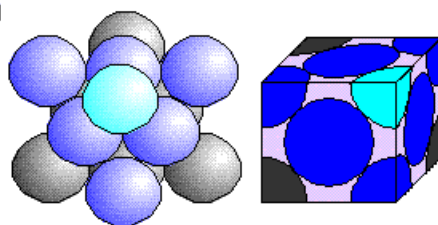
堆垛 (Stacking)

密排结构 (close-packed crystal structure)

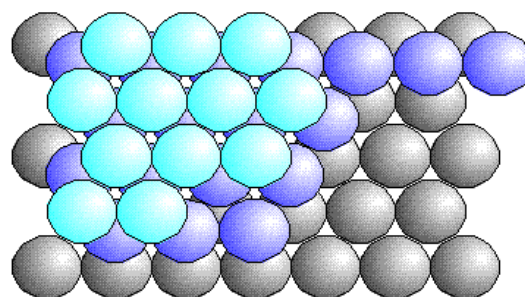
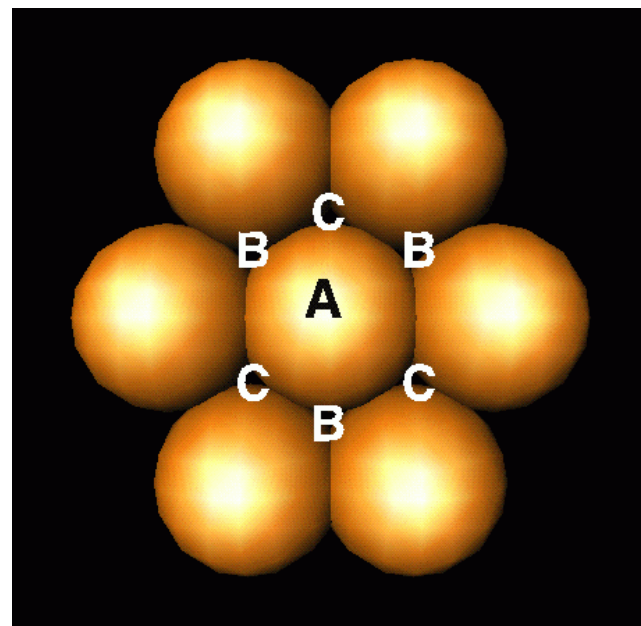
最密排面 (close-packed plane of atoms)



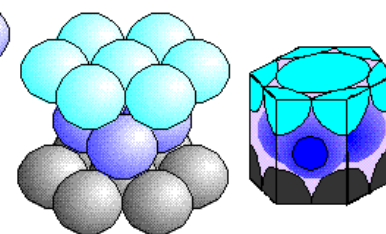
ABC Layer Stacking



Cubic Unit Cell

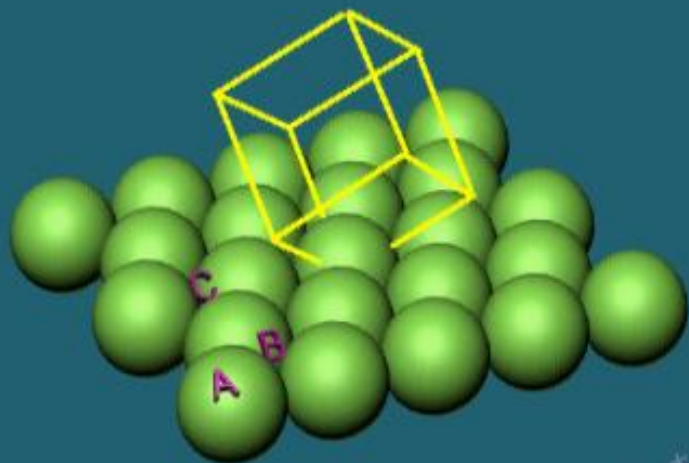


ABAB Layer Stacking



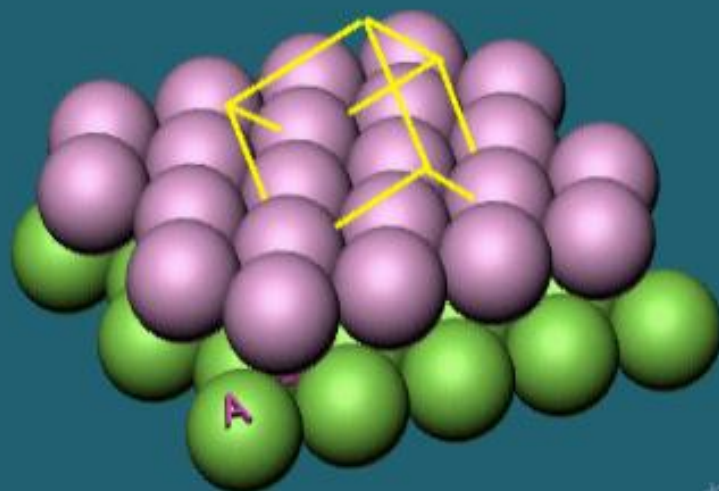
Hexagonal Structure

A层
C层
B层
A层



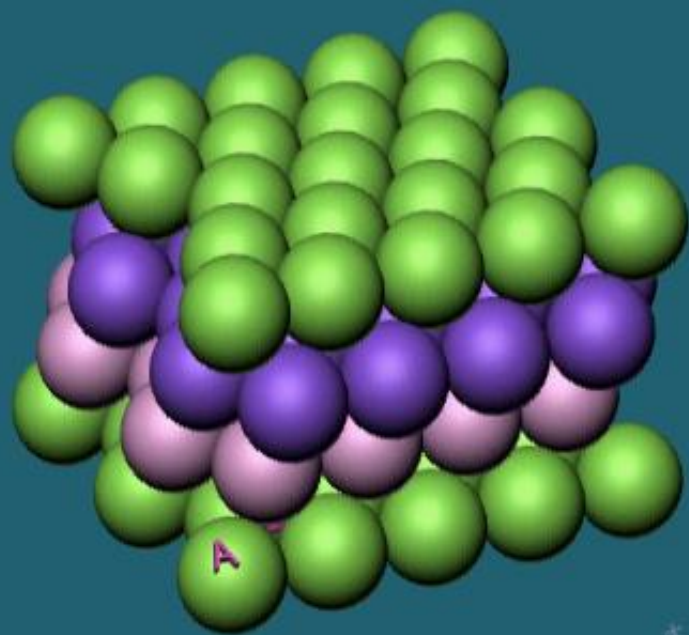
水
奇

A层
C层
B层
A层



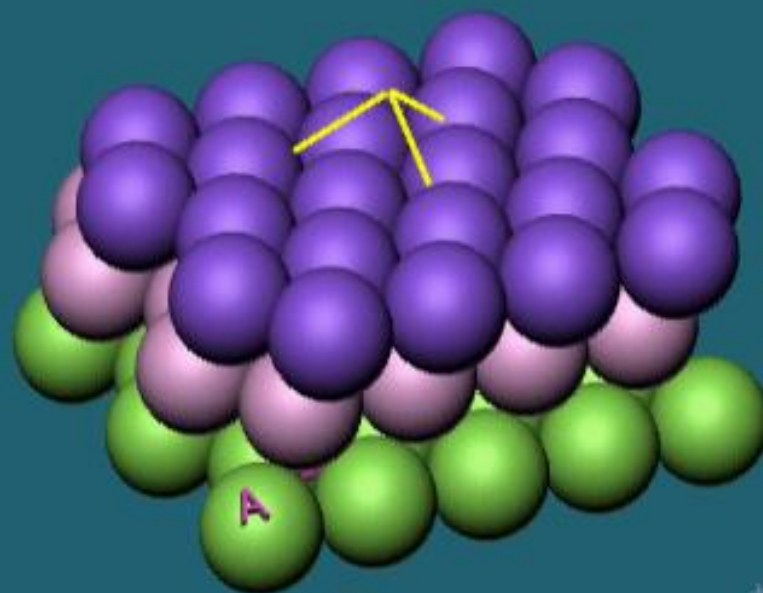
水
奇

A层
C层
B层
A层



水
奇

A层
C层
B层
A层

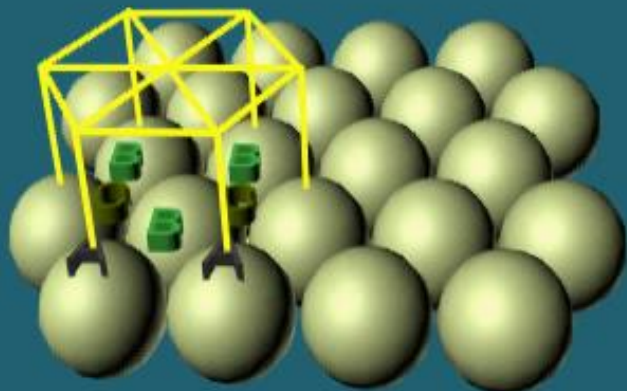


水
奇

A层

B层

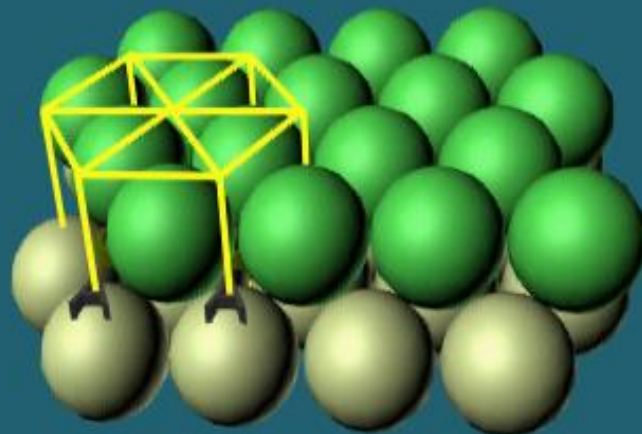
A层



A层

B层

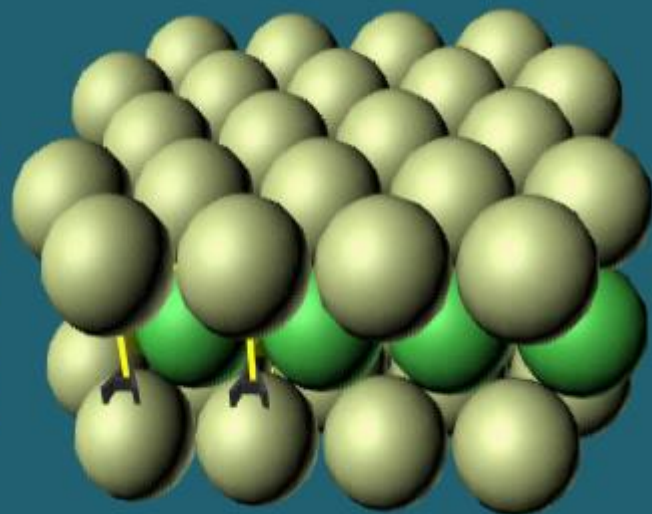
A层

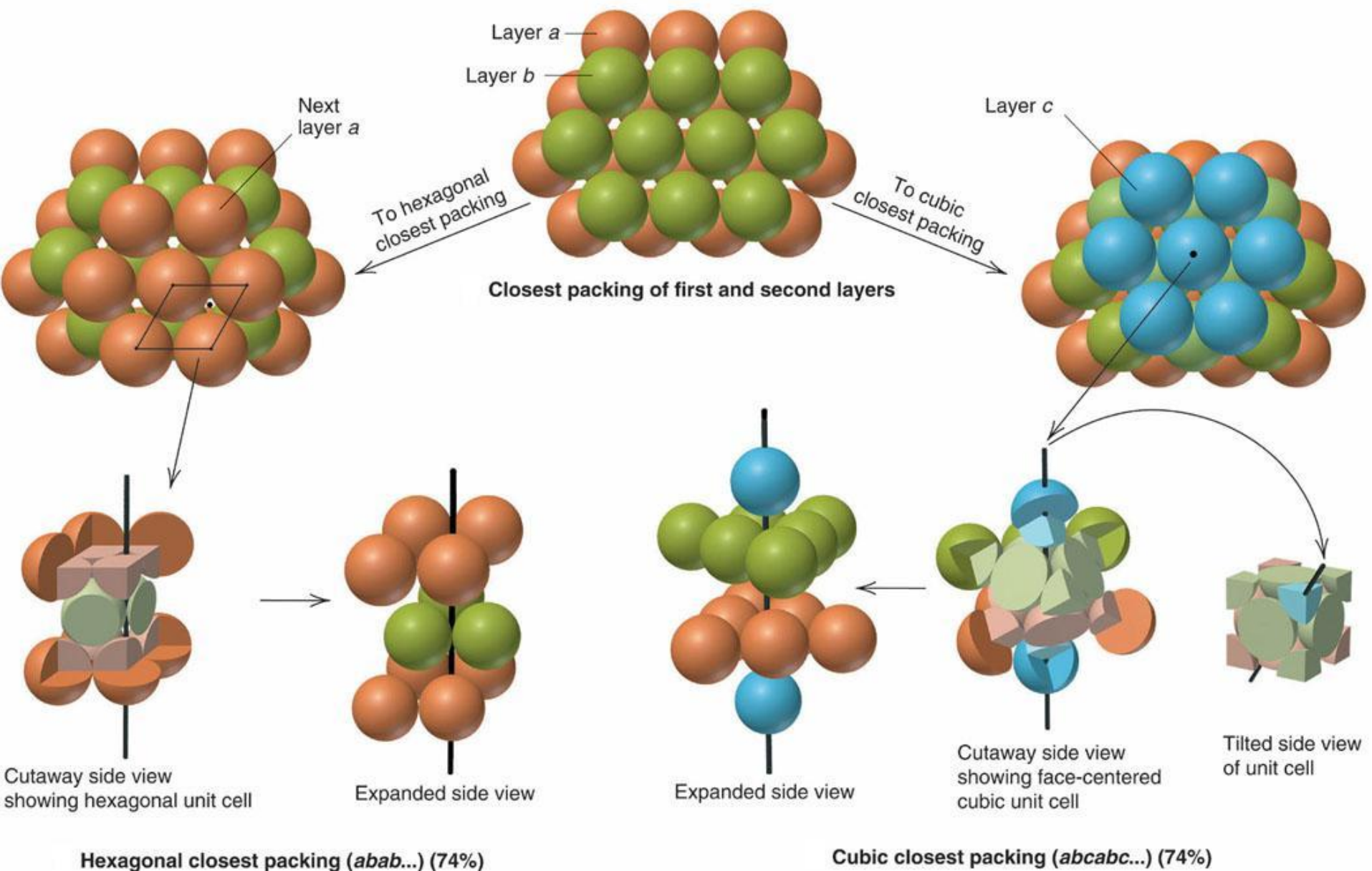


A层

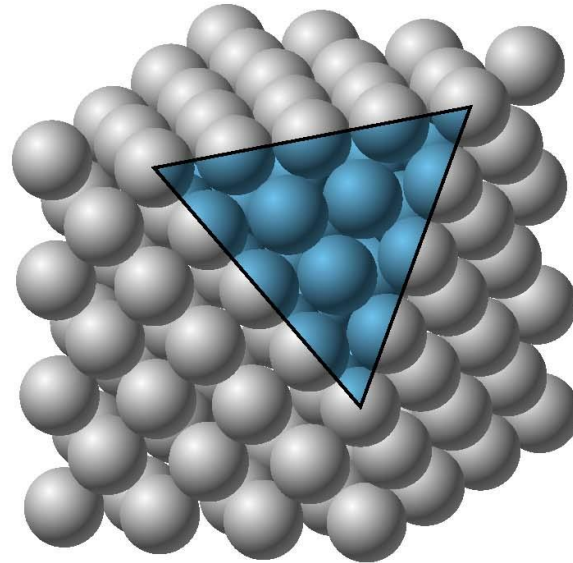
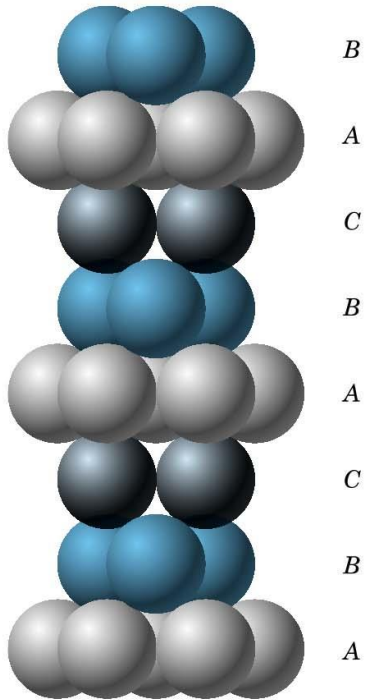
B层

A层

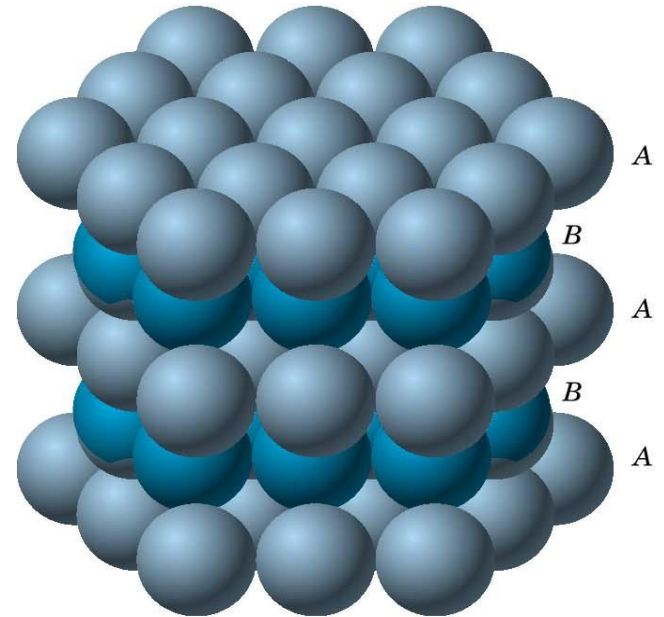




FCC



HCP



FCC $\{1\ 1\ 1\}$ ABCABCABC

HCP $\{0\ 0\ 0\ 1\}$ ABABABAB

间隙 (Interstice)

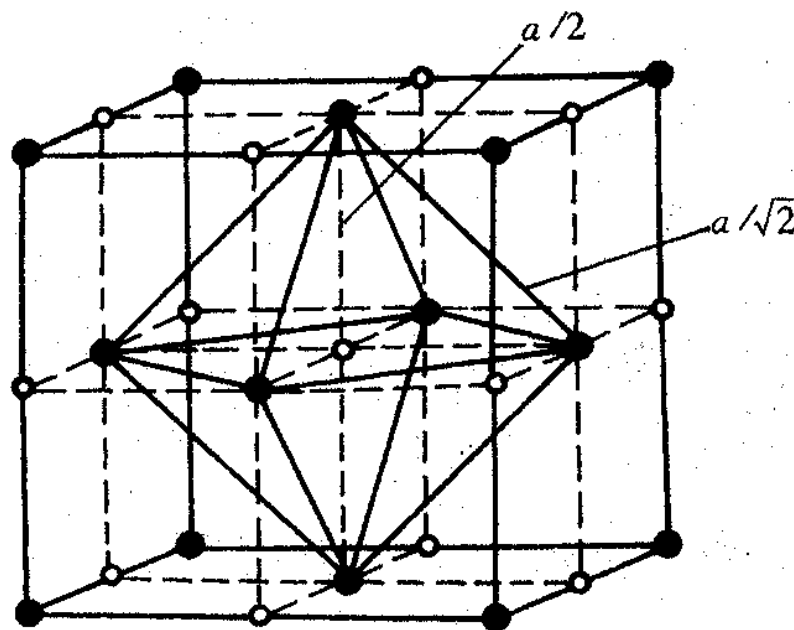
四、八面体间隙

tetrahedral
octahedral

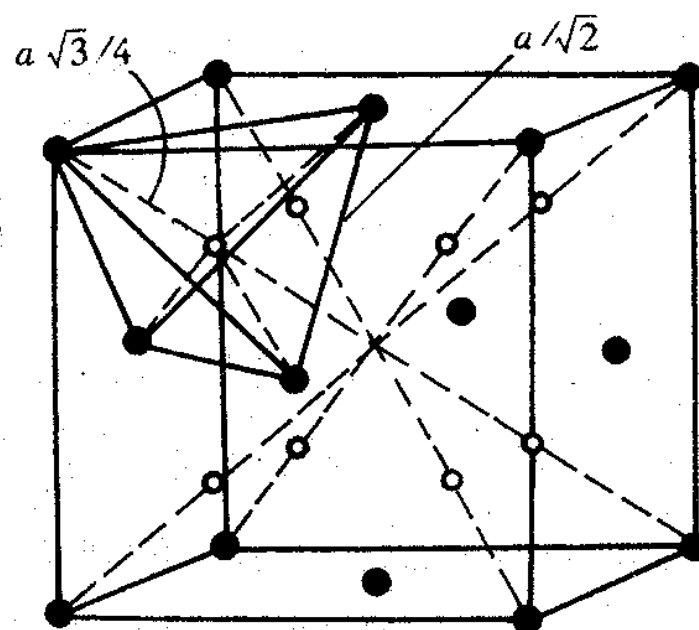
interstice

fcc, hcp 间隙为正多面体，且八面体和四面体间隙相互独立

bcc 间隙不是正多面体，四面体间隙包含于八面体间隙之中



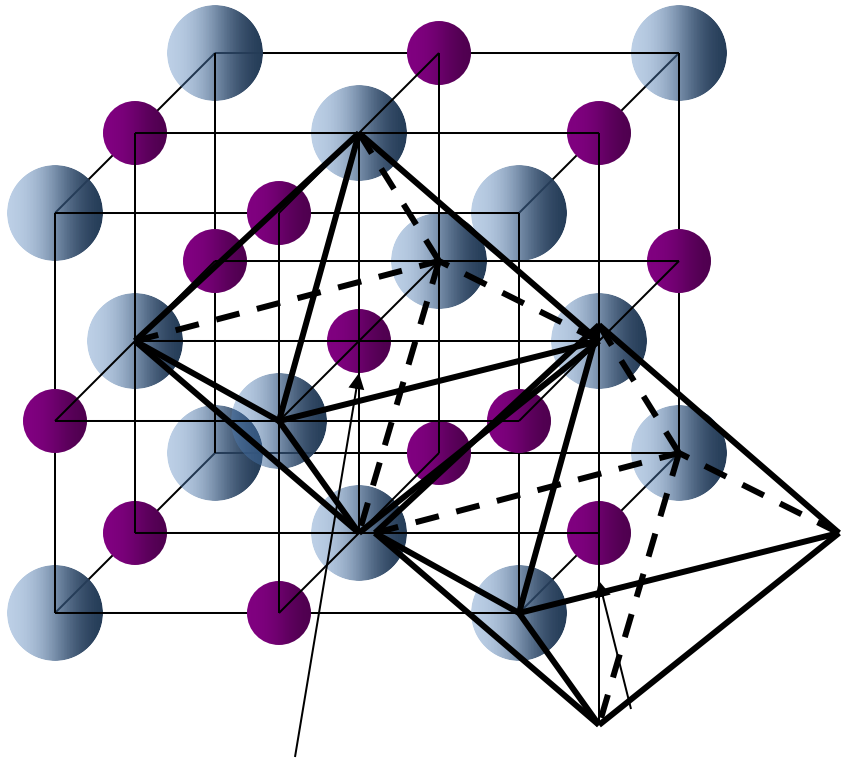
- 金属原子
- 八面体间隙



- 金属原子
- 四面体间隙

面心立方结构的间隙

Octahedral (O_h) sites

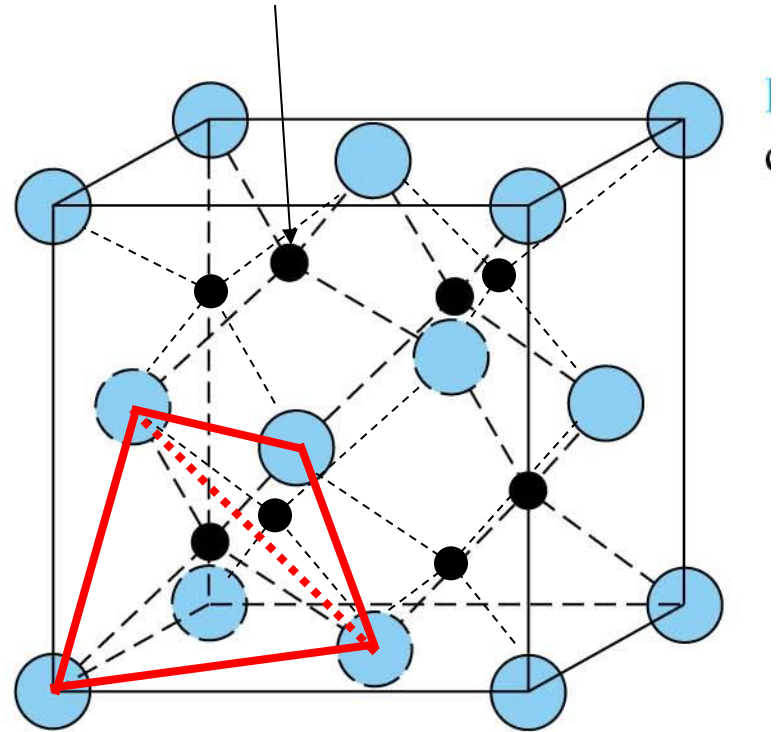


1 at the center

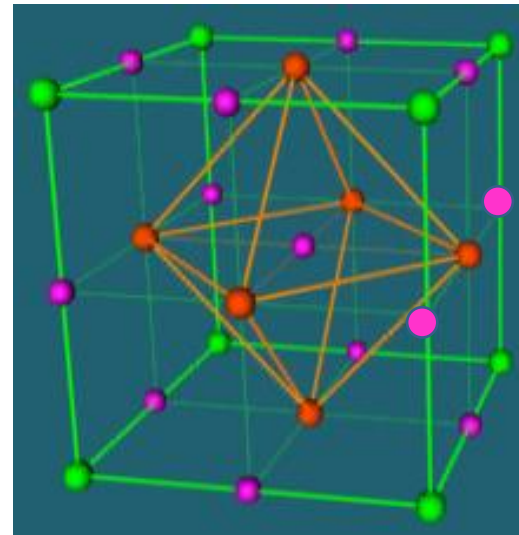
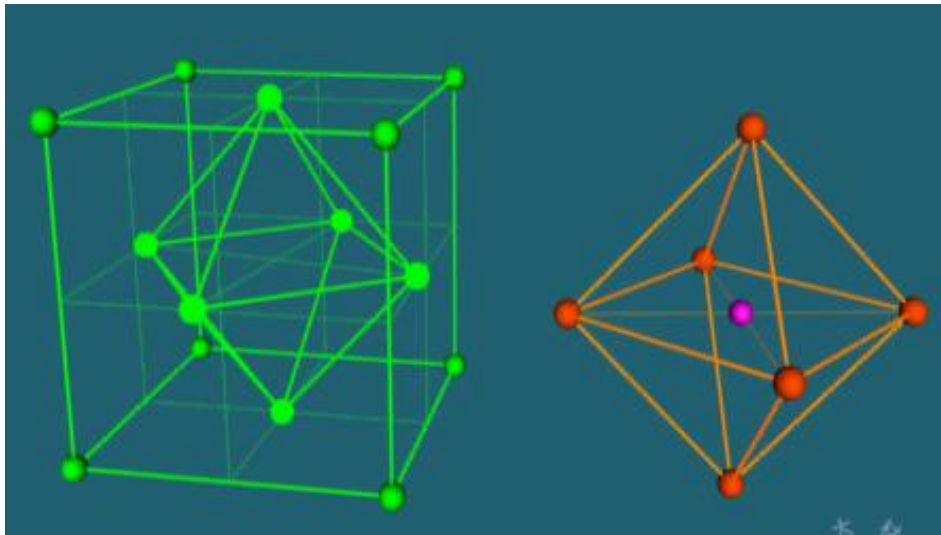
12 edge sites
(each shared by 4 cells)

Net 4 O_h sites/unit cell

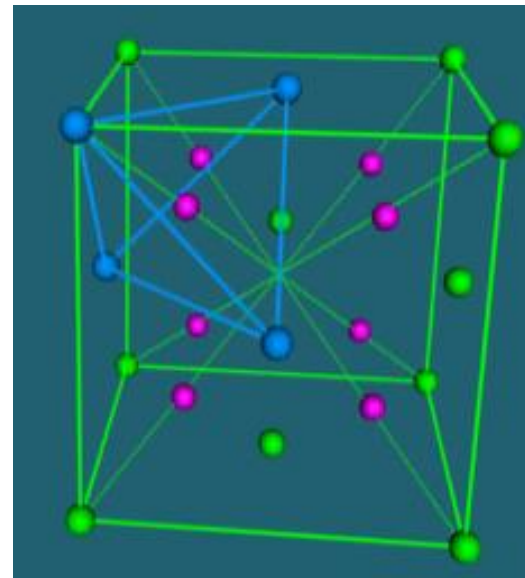
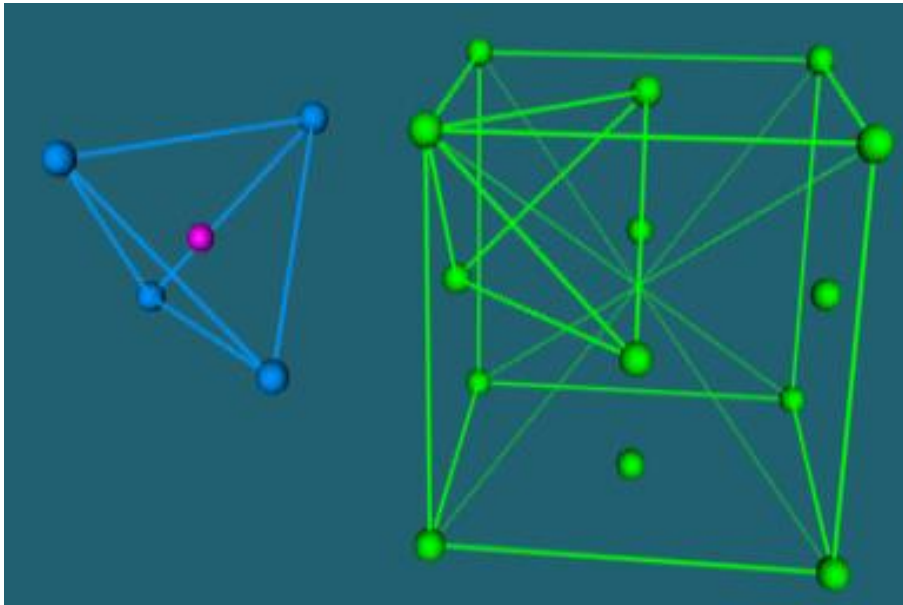
Tetrahedral (T_d) sites



Net 8 T_d sites/unit cell

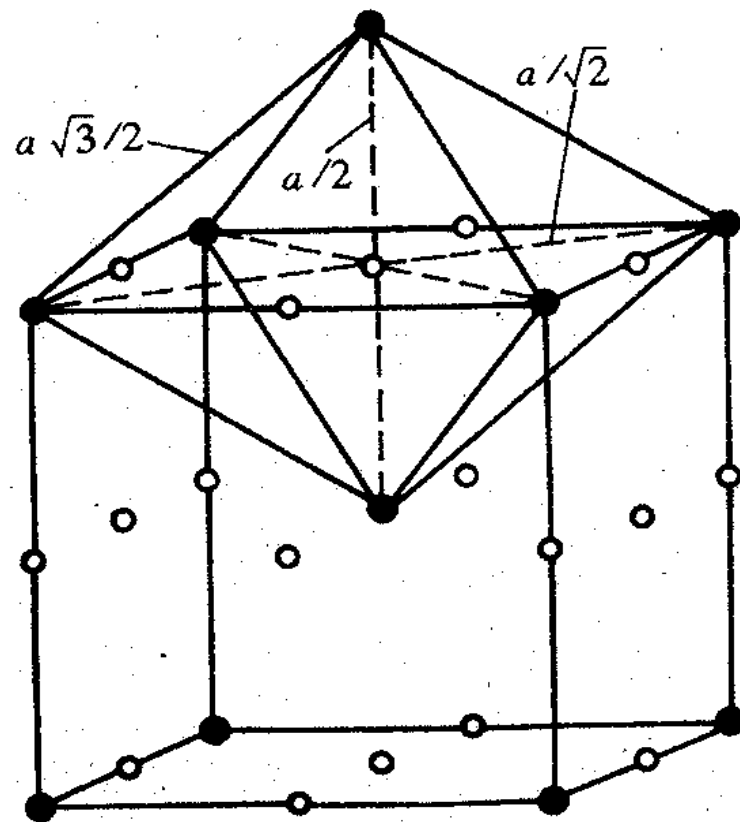


4

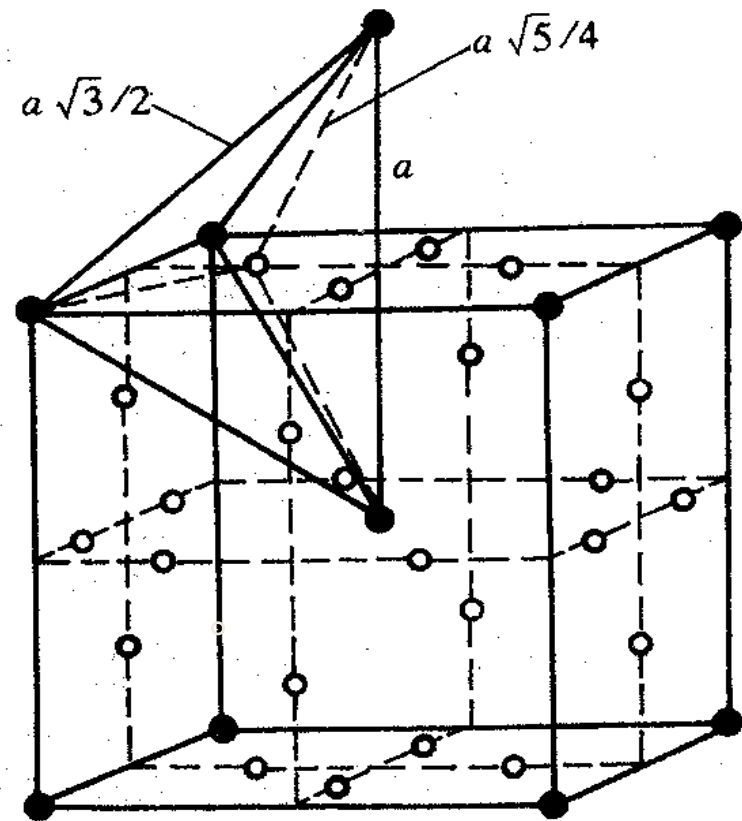


8

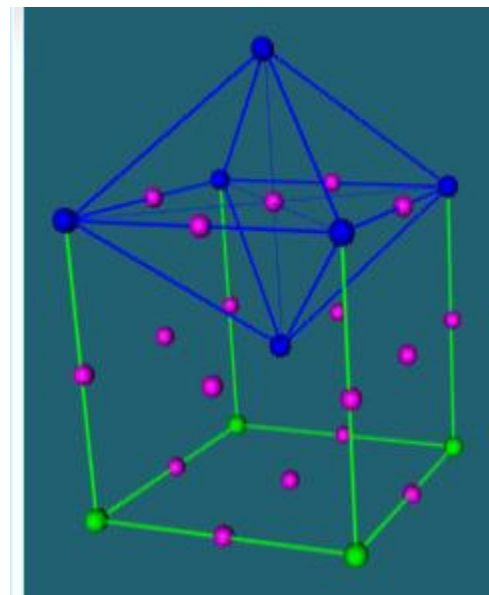
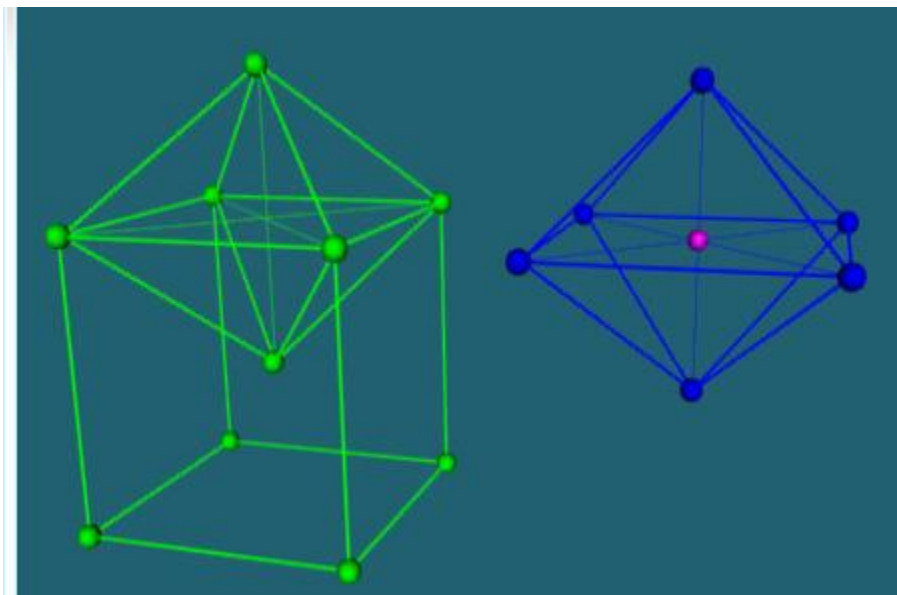
体心立方结构的间隙



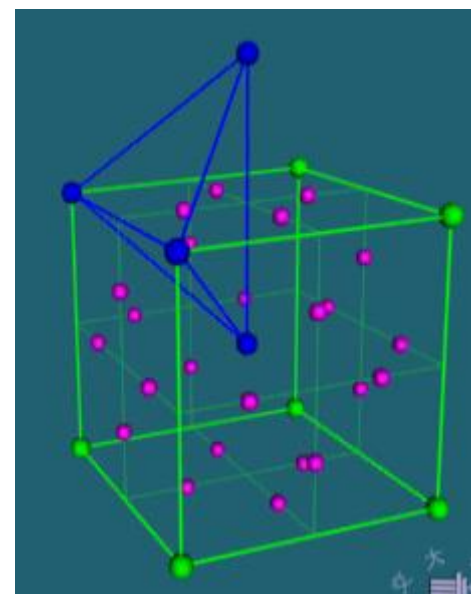
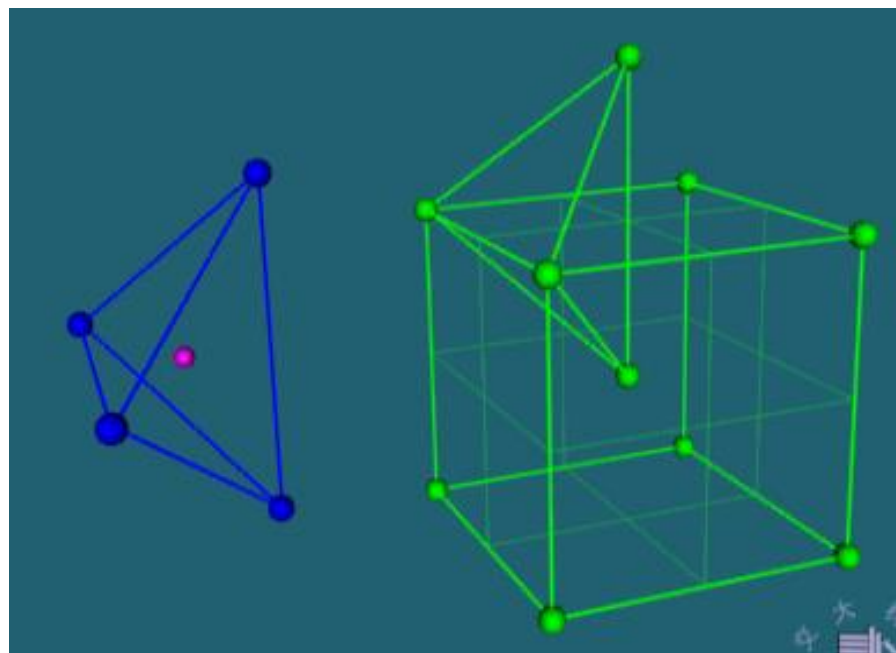
- 金属原子
- 八面体间隙



- 金属原子
- 四面体间隙

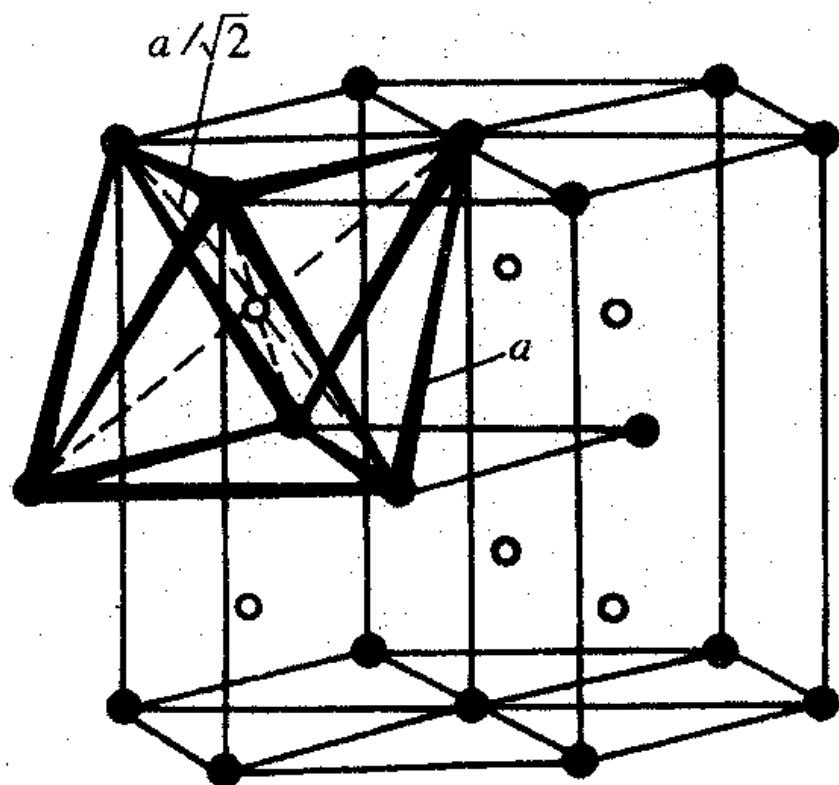


3+3

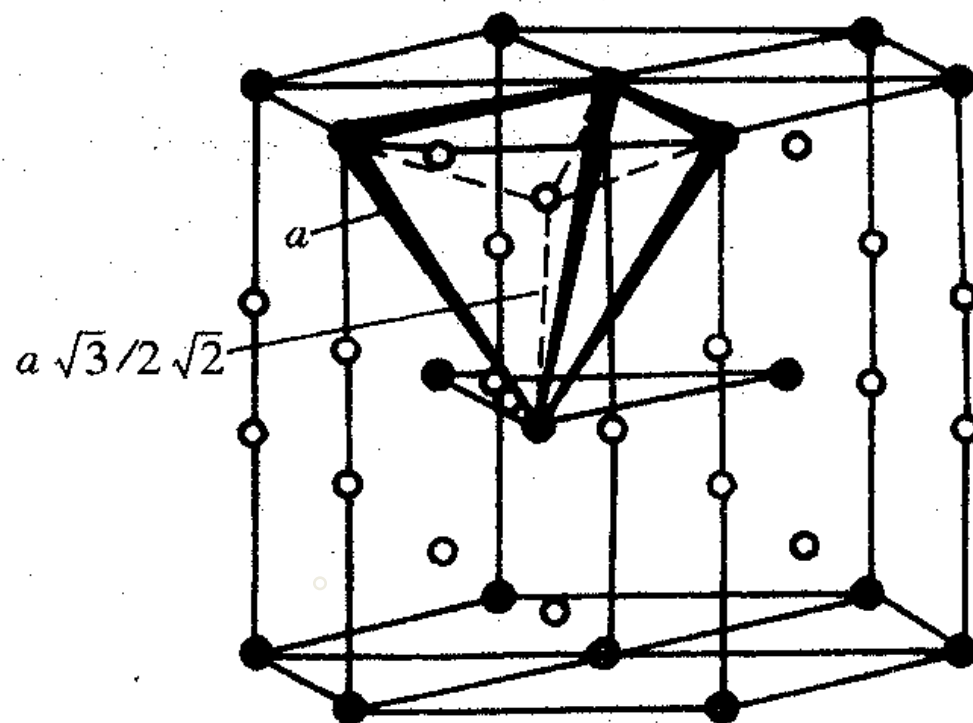


12

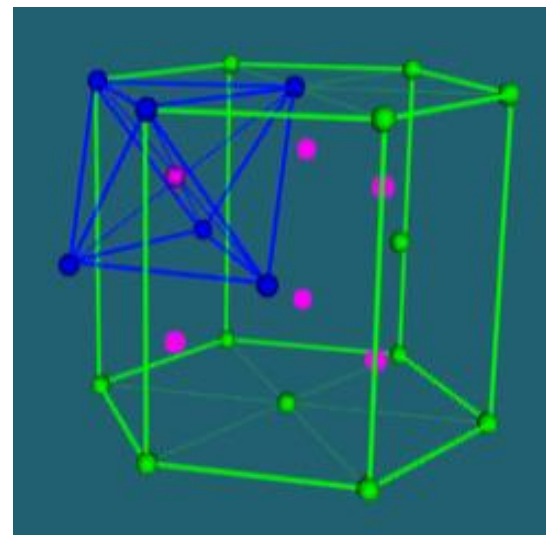
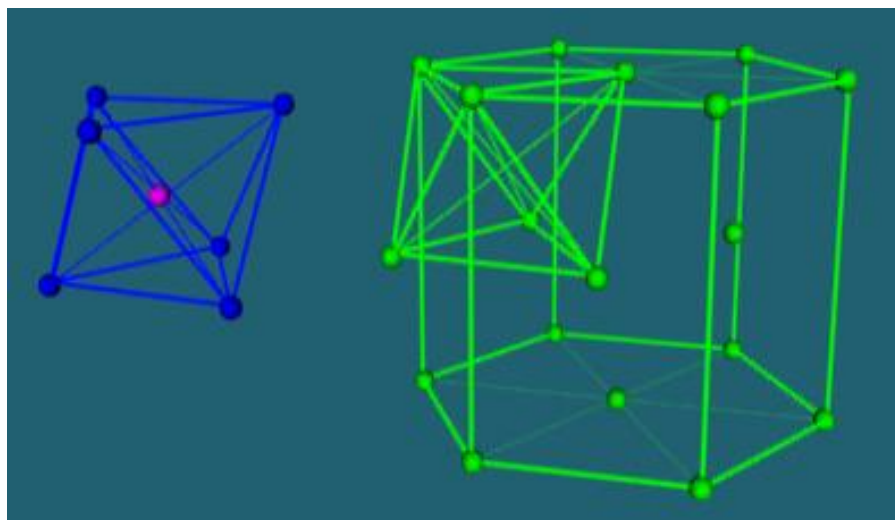
密排六方结构的间隙



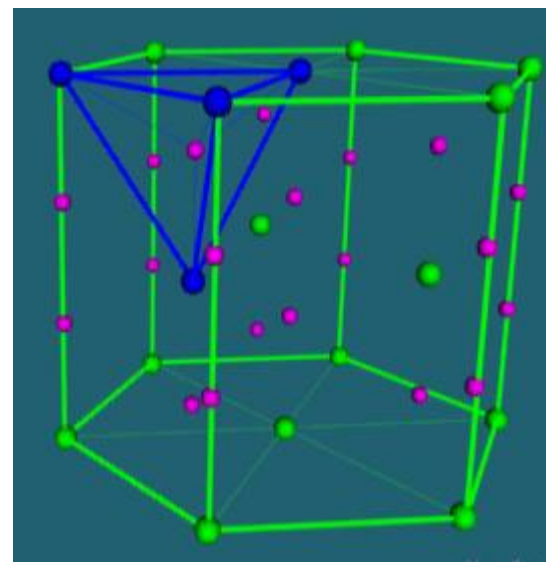
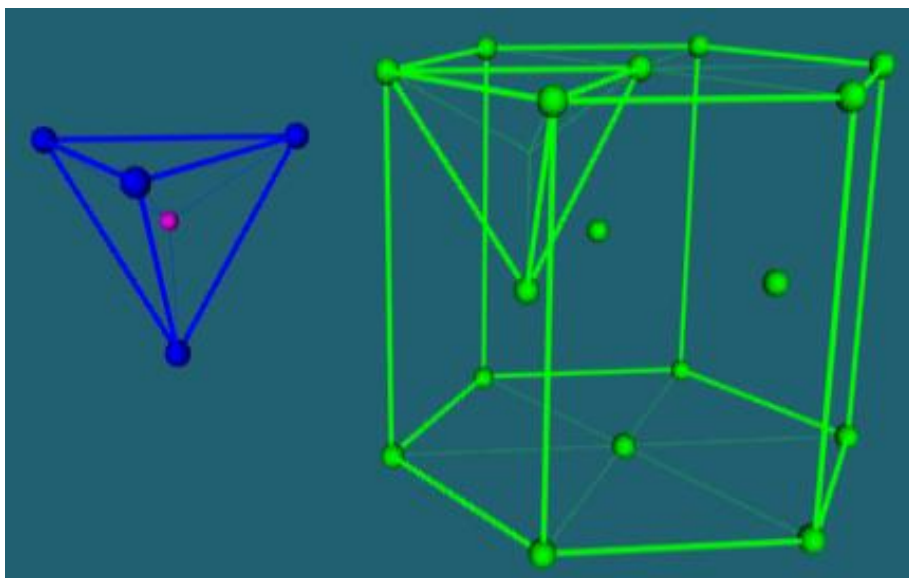
- 金属原子
- 八面体间隙



- 金属原子
- 四面体间隙



6



12

思考题：试计算推导面心立方晶体中四面体间隙和八面体间隙的大小？

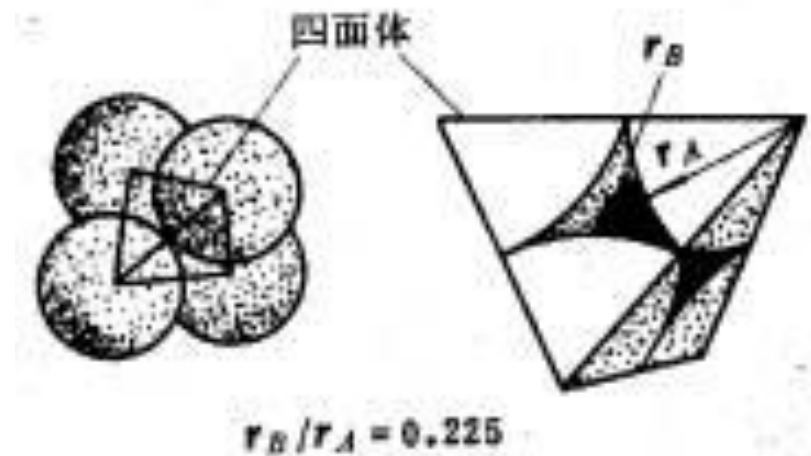
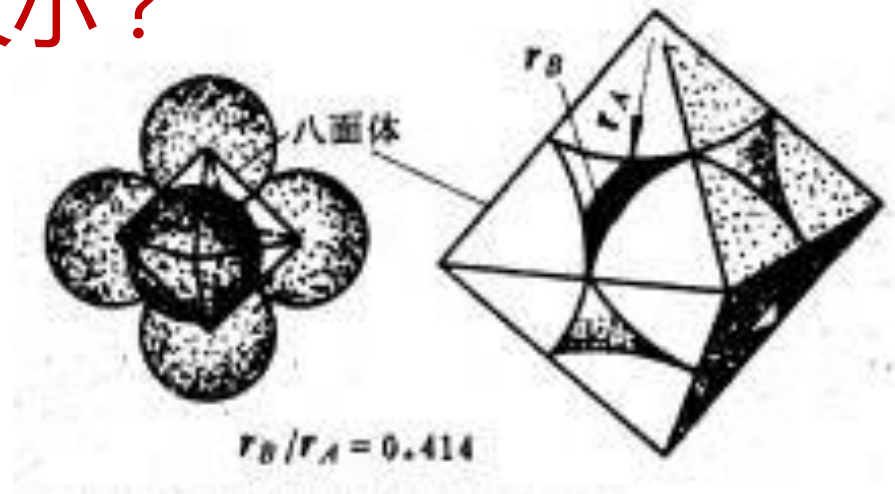


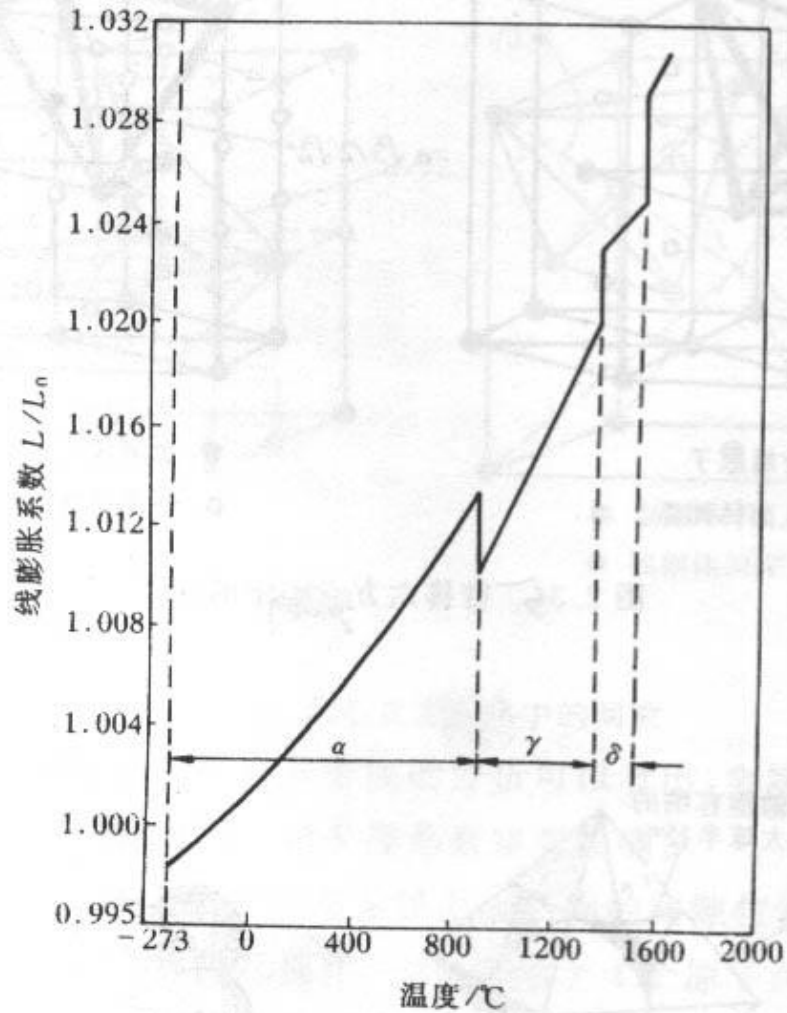
表2.5三种典型金属结构的晶体学特点

表 2.5 三种典型金属结构的晶体学特点

结构特征		晶体结构类型		
		面心立方(A1)	体心立方(A2)	密排六方(A3)
点阵常数		a	a	a, c ($c/a = 1.633$)
原子半径 R		$\frac{\sqrt{2}}{4}a$	$\frac{\sqrt{3}}{4}a$	$\frac{a}{2} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} \right)$
晶胞内原子数		4	2	6
配位数		12	8	12
致密度		0.74	0.68	0.74
间隙	四面体间隙 数量 大小	8 $0.225R$	12 $0.291R$	12 $0.225R$
	八面体间隙 数量 大小	4 $0.414R$	6 $0.154R \langle 100 \rangle$ $0.633R \langle 110 \rangle$	6 $0.414R$

多晶型转变 (allotropic transformation)

同素异构转变



纯铁加热时的膨胀曲线

α -Fe $< 912^{\circ}\text{C}$

γ -Fe $912 \sim 1394^{\circ}\text{C}$

δ -Fe $> 1394^{\circ}\text{C}$