

## 第一章 晶体学基础

多数金属和非金属材料都是晶体。因此，首先要掌握晶体的特征及其描述方法。

**晶体**——组成晶体的质点在三维空间作周期性、规则地排列。

**晶体的特点：**

- 质点排列具有规则性、周期性
- 有固定熔点（结晶温度）[非晶体没有固定的熔点]
- 各向异性（包含多种性能）

## § 1-1 空间点阵

### 一、空间点阵的概念

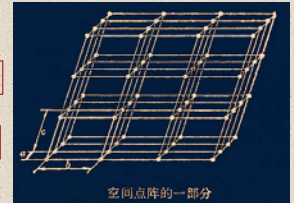
为了便于分析研究晶体的结构，进行如下处理：

组成晶体的原子（或分子、原子集团）

抽象 → 几何点（点阵的结点）

自然形成 → 三维阵列（空间点阵）

平行线连接 → 空间格子（晶格）



空间点阵的一部分

## 二、晶胞、晶系、点阵类型

### 1. 晶胞

**晶胞**——点阵中能够代表晶格特征的基本结构单元。

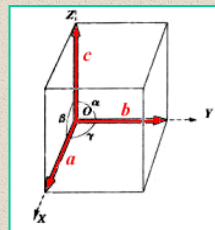
**选取晶胞的原则：**体积最小，一般为平行六面体；对称性高，直角尽可能多，边、角尽可能分别相等。

**晶格常数：**

边长： $a, b, c$

夹角： $\alpha, \beta, \gamma$

三条棱称为**晶轴**



### 2. 晶系

根据6个晶格常数之间的关系，可以将各种晶体归类成**7种晶系**。

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

**正方**  $a = b \neq c$   $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

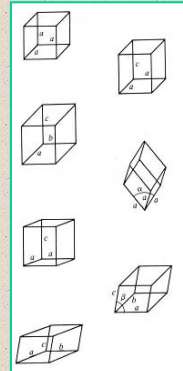
**斜方**  $a \neq b \neq c$   $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

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

**六方**  $a = b \neq c$   $\alpha = \beta = 90^\circ$   $\gamma = 120^\circ$

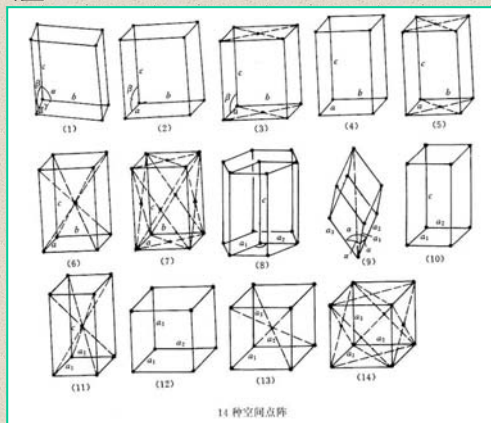
**单斜**  $a \neq b \neq c$   $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$

**三斜**  $a \neq b \neq c$   $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$



## 3. 点阵类型

7大晶系  
包含14  
种空间  
点阵——**布拉菲**  
(A.Bravais)  
点阵



14种空间点阵

## § 1-2 晶面指数、晶向指数——Miller指数

**晶面**——穿过晶体的原子平面。

**晶向**——晶体中任意原子列的直线方向。

不同的晶面和晶向具有不同的原子排列和取向。这就是晶体具有各向异性的原因。

### 一、晶向指数

确定晶向指数的步骤：

- 建立坐标系： $oxyz$ ，晶格长度作为单位长度，原点 $o$ 在待定晶向上；
- 找出该晶向上除原点外的任意一点的坐标： $x, y, z$ ；
- 将 $x, y, z$ 按比例划成互质(最小)整数 $u, v, w$ ；
- 将 $u, v, w$ 三个数放在方括号内，就得到**晶向指数** $[uvw]$ 。

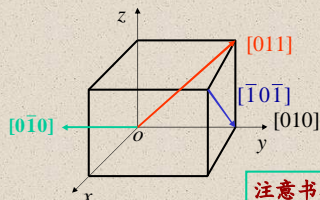
### [说明]:

❖晶向指数表示的是一族平行的晶向，即相互平行的晶向具有相同的晶向指数；

❖同一直线上，方向相反的晶向其指数加负号；

❖原子排列相同但空间位向不同的所有晶向称为**晶向族**，用<>括号表示。

例如<100>包含：[100],[010],[001],[ $\bar{1}$ 00],[0 $\bar{1}$ 0],[00 $\bar{1}$ ]



不通过原点的晶向：  
( $x_2-x_1$ ):( $y_2-y_1$ ):( $z_2-z_1$ )  
 $=u:v:w$

注意书写规则：负号在上，无逗号

## 二、晶面指数

确定晶面指数的步骤：

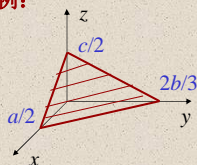
➢建立坐标系： $oxyz$ ，(同上)

➢确定待定晶面在三个坐标轴上的截距，并取截距的倒数，

➢将截距的倒数划成三个互质的整数： $h,k,l$ ，

➢把 $h,k,l$ 放在括号( )内，写成 $(h\ k\ l)$ ，则 $(h\ k\ l)$ 就是该晶面指数

例：



截距： $a/2, 2b/3, c/2$

倒数： $2, 3/2, 2$

互质整数： $4, 3, 4$

晶面指数： $(4\ 3\ 4)$

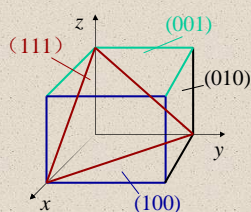
### [说明]:

❖晶面与坐标轴平行时，取截距为 $\infty$ ，倒数为0；

❖相互平行的晶面具有相同的晶面指数，或相差一负号；

❖通过原点的晶面，可以通过与其平行的晶面求出晶面指数；

❖原子排列相同的晶面，尽管空间位向不同，但仍属于同一个**晶面族**，用 $\{h\ k\ l\}$ 表示。例如{100}包含6个等价位：



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

思考：  
{111}包含多少个等价位？

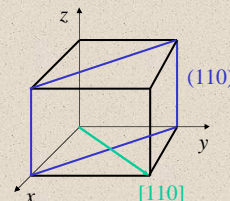
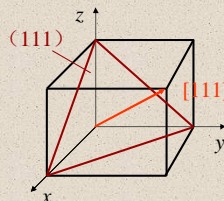
## 三、晶向指数与晶面指数的关系

在立方晶系中(包括密排六方)：

$[u\ v\ w] \parallel (h\ k\ l)$  时，一定满足： $hu+kv+lw=0$

$[u\ v\ w] \perp (h\ k\ l)$  时，一定满足： $h=u, k=v, l=w$

例如： $[111] \perp (111)$ ,  $[110] \perp (110)$



## 四、六方晶系的晶体学指数 —— 四指数表示

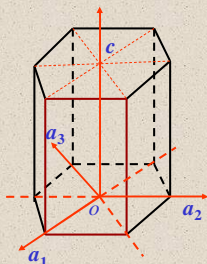
为了使晶体学上等价的晶面或晶向具有类似的指数，以便于判断其等价性，对于六方晶体不再采用三指数，而采用四指数表示。

四个坐标轴： $a_1, a_2, a_3, c$

### 1、晶面指数

方法和步骤与三指数时相同，只是要找出晶面在四个坐标轴上的截距。

例如： $(10\bar{1}0)$   
 $(\bar{1}010)$   
 $(01\bar{1}0)$   
 $(\bar{1}100)$



### 2、晶向指数:

四坐标晶向指数的确定方法有行走法和解析法。由于行走法确定的晶向指数不是唯一的，所以这里仅介绍**解析法**。

步骤：

1)求出待定晶向在 $a_1, a_2, c$ 三个坐标轴下的指数： $U, V, W$

2)按以下公式算出在四坐标轴下的指数： $u, v, t, w$

$$u = \frac{1}{3}(2U - V)$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U)$$

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

$$w = W$$

注： $a_1, a_2$ 夹角 $120^\circ$

例如：求出 $oa_1$ 晶向

从晶胞图直接得到： $U=1, V=0, W=0$   
所以，

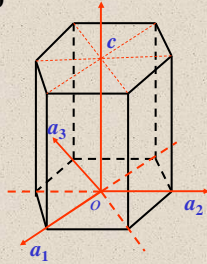
$$u = \frac{1}{3}(2U - V) = \frac{1}{3}(2 \times 1 - 0) = \frac{2}{3}$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U) = \frac{1}{3}(2 \times 0 - 1) = -\frac{1}{3}$$

$$t = -(u + v) = -(\frac{2}{3} - \frac{1}{3}) = -\frac{1}{3}$$

$$w = W = 0$$

$$oa_1 \text{ 晶向指数为 } \frac{1}{3}[2\bar{1}\bar{1}0] \Rightarrow [2\bar{1}\bar{1}0]$$



简便方法：仅适用于 $a_1, a_2, a_3, c$ 轴及其反向晶向

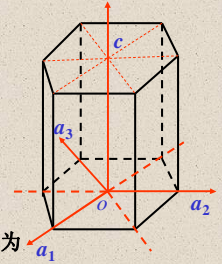
例如：确定 $oa_1$ 的晶向指数

由于 $a_1$ 点的坐标为： $1, -1/2, -1/2, 0$   
所以 $oa_1$ 的晶向指数为  $[2\bar{1}\bar{1}0]$

同样可以求出：

$oa_2, oa_3, oc$ 的晶向指数分别为  
 $[\bar{1}2\bar{1}0], [\bar{1}\bar{1}20], [0001]$

$oa_1, oa_2, oa_3, oc$ 的反向晶向指数分别为  
 $[\bar{2}110], [1\bar{2}10], [11\bar{2}0], [000\bar{1}]$



说明：在确定晶向上某点的坐标值时，需要向坐标轴作垂线。

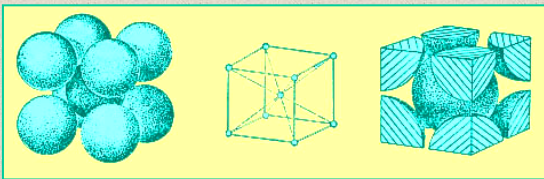
## § 1-3 常见晶体结构

常见的晶体结构主要有：体心立方，面心立方，密排六方

### 一、体心立方(BCC)

Java动画

体心立方结构可以缩写为BCC (body-centered cubic)



钢球模型

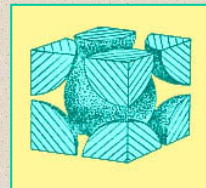
质点模型

晶胞原子数（示意图）

属于此类结构的金属：碱金属(K, Na, Li等)，难熔金属(V, Nb, Ta, Cr, Mo, W等)， $\alpha$ -Fe等。

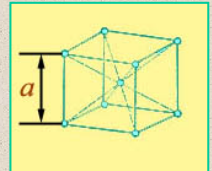
### 1、晶胞中原子数 $n$

$$n = \frac{1}{8} \times 8 + 1 = 2$$



### 2、点阵常数 $a$

点阵常数也称为晶格常数，用来衡量晶胞的大小。对于立方晶系，点阵常数只需要用晶胞的棱边长度 $a$ 一个数值。单位： $\text{\AA}$  ( $10^{-10}\text{m}$ )



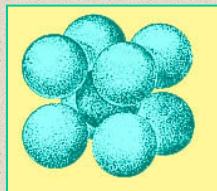
### 3、配位数CN (coordination number)

定义——晶体中任一原子周围最临近并且距离相等的原子个数。

BCC晶体结构：CN8

### 4、致密度 $K$ ，或紧密系数 $\xi$

定义——晶体中原子（看作钢球）所占空间体积的百分数。



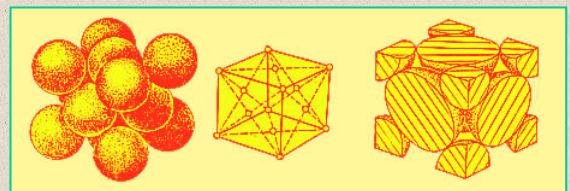
$$K = \frac{nv}{V} = \frac{2 \times \frac{1}{6} \pi d^3}{a^3} = 68\%$$

$$d = \frac{\sqrt{3}}{2} a$$

### 二、面心立方(FCC)

Java动画

面心立方结构可以缩写为FCC (face-centered cubic)



钢球模型

质点模型

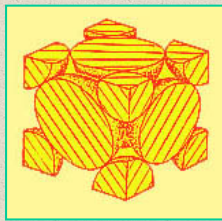
晶胞原子数（示意图）

属于此类结构的金属：Au, Ag, Cu, Pt,  $\gamma$ -Fe, Ni, Al, Pb, Pd(钯)，等。



### 1、晶胞中原子数 $n$

$$n = \frac{1}{8} \times 8 + \frac{1}{2} \times 6 = 4$$

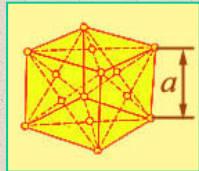


### 2、点阵常数 $a$

对于立方晶系，点阵常数只需要用晶胞的棱边长度 $a$ 一个数值。单位： $\text{\AA}$  ( $10^{-10}\text{m}$ )

最近原子间距：  
(原子直径)

$$d = \frac{\sqrt{2}}{2} a$$



### 3、配位数CN (coordination number)

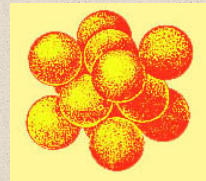
定义——晶体中任一原子周围最邻近并且距离相等的原子个数。

**FCC晶体结构：CN12**

### 4、致密度 $K$ ，或紧密系数 $\xi$

定义——晶体中原子（看作钢球）所占空间体积的百分数。

$$K = \frac{nv}{V} = \frac{4 \times \frac{1}{6} \pi d^3}{a^3} = 74\%$$



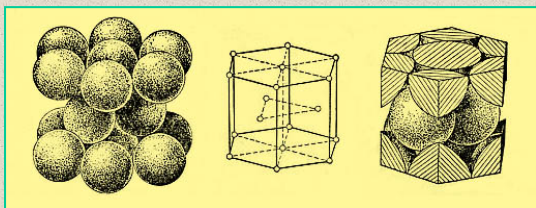
晶体结构一定时，原子直径 $d$ 决定了晶格常数 $a$ 的大小。

$$d = \frac{\sqrt{2}}{2} a$$

### 三、密排六方(HCP)

Java动画

密排六方结构可以缩写为**HCP** (hexagonal close-packed)



钢球模型

质点模型

晶胞原子数 (示意图)

属于此类结构的金属：**Mg, Zn, Cd(镉),  $\alpha$ -Ti,  $\alpha$ -Be(铍),  $\alpha$ -Zr(锆),  $\alpha$ -Co,  $\alpha$ -Hf(铪)**

### 1、晶胞中原子数 $n$

$$n = \frac{1}{6} \times 12 + \frac{1}{2} \times 2 + 3 = 6$$

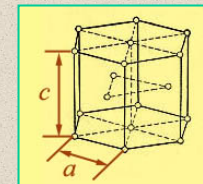
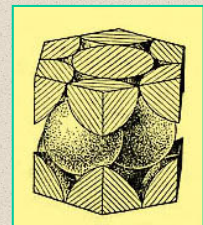
### 2、点阵常数 $a$

对于密排六方，需要用2个点阵常数来描述晶胞：边长 $a$ 和高 $c$ ， $c/a$ 称为轴比。

最近原子间距：  
(原子直径)

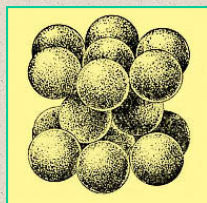
$$d = a$$

理想情况： $c/a=1.633$



### 3、配位数CN (coordination number)

**HCP晶体结构：CN12**



### 4、致密度 $K$ ，或紧密系数 $\xi$

$$K = \frac{nv}{V} = \frac{6 \times \frac{1}{6} \pi d^3}{\frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 \sqrt{\frac{8}{3}} a} = 74\%$$

$$d = a$$

小结：

常见晶体的几何参数

晶体	配位数 CN	晶胞中原子数 $n$	原子半径 $r$	原子体积 $v$	晶胞体积 $V$	紧密系数 $\xi$
BCC	8	2	$\frac{\sqrt{3}}{4} a$	$\frac{\sqrt{3}}{16} \pi a^3$	$a^3$	0.68
FCC	12	4	$\frac{\sqrt{2}}{4} a$	$\frac{\sqrt{2}}{24} \pi a^3$	$a^3$	0.74
HCP	12	6	$\frac{1}{2} a$	$\frac{1}{6} \pi a^3$	$\frac{3\sqrt{3}}{2} \left(\frac{c}{a}\right) a^3$	0.74

## § 1-4 常见晶体结构的间隙

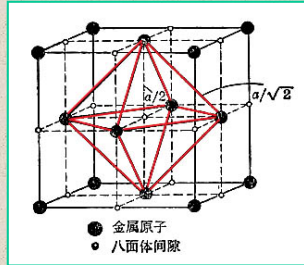
从晶体结构的钢球模型可以看出，原子与原子之间存在许多间隙。分析这些间隙的数量、位置、形状和大小，对于了解晶体的性能、合金的相结构以及相变、扩散等问题都是十分重要的。

### 一、FCC晶体

FCC中的间隙有2种：  
八面体间隙，四面体间隙

#### 1、正八面体间隙

边长为： $\frac{a}{\sqrt{2}}$

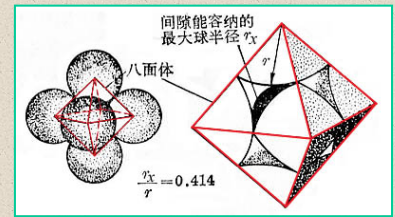


常以间隙中能够容纳钢球半径 $r_x$ 的大小或与晶体原子半径的比值来衡量间隙的大小。

$$\text{因为 } r_x + r = \frac{a}{2}$$

$$r = \frac{\sqrt{2}}{4}a$$

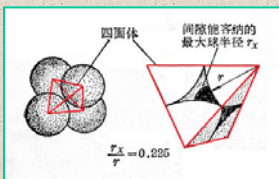
$$\text{所以 } \frac{r_x}{r} = \frac{a}{2r} - 1 = 0.414$$



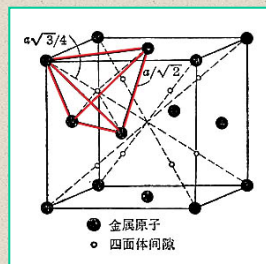
FCC的(正)八面体间隙

#### 2、正四面体间隙

八面体间隙的每一个面外紧接着一个四面体。所以，一个FCC晶胞中含有8个四面体间隙。



四面体4个角上的原子都相切



根据几何关系：

$$r_x + r = \frac{\sqrt{3}}{4}a \quad r = \frac{\sqrt{2}}{4}a$$

$$\frac{r_x}{r} = 0.225$$

### 3、应用分析

$\gamma$ -Fe的原子半径为1.27Å，计算可知

八面体间隙的球半径为： $r_x=0.52$  Å，

四面体间隙的球半径为： $r_x=0.28$  Å。

由于C原子半径为0.77 Å，N原子半径为0.70 Å，接近八面体间隙的大小，可以形成间隙固溶。 $\gamma$ -Fe中最多能够溶解2.11%的C。

从后面将要介绍的BCC晶体的间隙，可以知道， $\alpha$ -Fe的间隙都很小，几乎不能间隙固溶其它原子，如C、N等小原子。

$\alpha$ -Fe中最多只能溶解0.0218%的C。

## 二、BCC晶体

### 1、八面体间隙

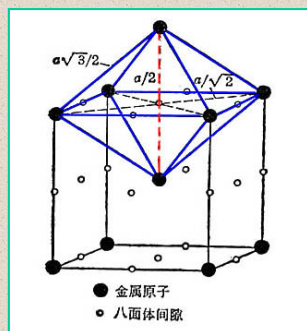
注意间隙的位置与FCC中的不同。同时也不是正八面体。

根据几何关系：

$$r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$$

$$r_x + r = \frac{1}{2}a$$

$$\text{所以：} \frac{r_x}{r} \approx 0.155$$

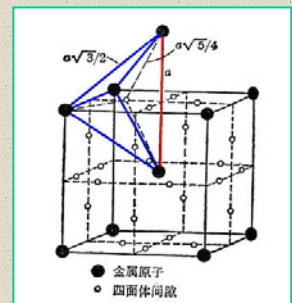


### 2、四面体间隙

BCC中的四面体间隙是八面体间隙的一部分（1/4）。

为什么要再分出四面体？

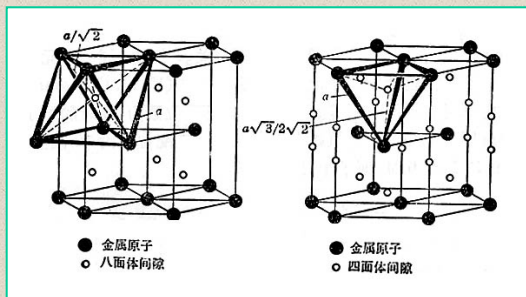
$$\frac{r_x}{r} = 0.291$$



这个比值大于八面体间隙。但是研究发现，极少量的C原子仍然存在于 $\alpha$ -Fe八面体间隙中。原因是C原子进入八面体间隙只需要推开上下二个Fe原子。



### 三、HCP晶体



注意八面体间隙和四面体间隙的位置

八面体间隙:  $\frac{r_x}{r} = 0.414$  与FCC的相同

四面体间隙:  $\frac{r_x}{r} = 0.225$  与FCC的相同

HCP与FCC的八面体间隙、四面体间隙大小相同，位置不同，都是正八面体和正四面体。

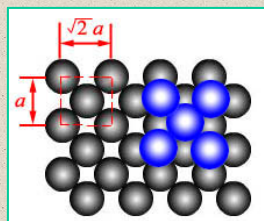
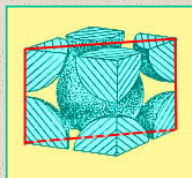
### § 1-5 晶体的堆垛方式

任何晶体都可以看作是由任意晶面(hkl)一层一层地堆垛而成的。一般是以最密排晶面的堆垛方式作为晶体的堆垛方式。

#### 一、BCC晶体 视频

最密排晶面: (110)

堆垛次序: ABAB... ..

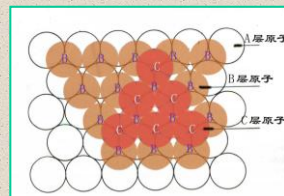
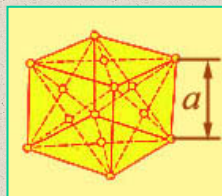
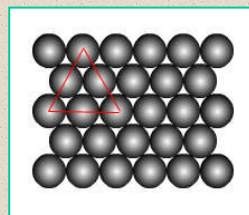


### 二、FCC晶体

Java动画

最密排晶面: (111)

堆垛方式: ABCABC... ..

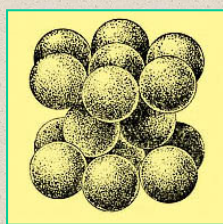
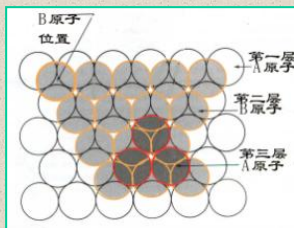


### 三、HCP晶体

最密排晶面: (0001)

堆垛方式: ABAB... ..

Java动画

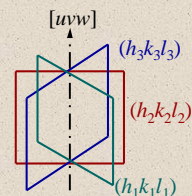


### § 1-6 晶带

所有相交于某一直线的或平行于此直线的晶面构成一个晶带，此直线称为晶带轴。

晶带轴[uvw]与该晶带的晶面(hkl)之间存在如下关系——晶带方程：

$$hu + kv + lw = 0$$



例如：在正交（立方、正方、四方）点阵中，(100)、(010)、(110)、(110)、(210)、(210)等晶面都与[001]晶向平行，构成以[001]为晶带轴的晶带。

求两个已知不平行晶面的晶带轴 $[uvw]$ :

记忆方法: 排成3个二阶行列式,  
依次算出 $u, v, w$

$$\begin{array}{c|c|c|c|c|c|c} & \textcircled{1} u & & \textcircled{3} w & & & \\ h_1 & k_1 & l_1 & h_1 & k_1 & l_1 & \\ h_2 & k_2 & l_2 & h_2 & k_2 & l_2 & \\ \hline & \textcircled{2} v & & & & & \end{array}$$

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

### § 1-7 晶面间距 $d$

正交晶系:

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

立方晶系:

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

六方晶系:

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

说明: 按以上公式计算出的晶面间距是对简单晶胞而言的,  
如果是复杂晶胞, 如体心立方、面心立方、密排六方, 在计算时应考虑到晶面层数增加的影响。例如

例如: 在体心立方、面心立方晶胞中, 上下底面(001)之间还有一层同类型晶面, 故实际晶面间距应为:

$$\frac{1}{2} d_{(001)}$$