

第一章 材料中的原子排列

第一节 原子的结合方式

1 原子结构

2 原子结合键

(1) 离子键与离子晶体

原子结合：电子转移，结合力大，无方向性和饱和性；

离子晶体：硬度高，脆性大，熔点高、导电性差。如氧化物陶瓷。

(2) 共价键与原子晶体

原子结合：电子共用，结合力大，有方向性和饱和性；

原子晶体：强度高、硬度高（金刚石）、熔点高、脆性大、导电性差。如高分子材料。

(3) 金属键与金属晶体

原子结合：电子逸出共有，结合力较大，无方向性和饱和性；

金属晶体：导电性、导热性、延展性好，熔点较高。如金属。

金属键：依靠正离子与构成电子气的自由电子之间的静电引力而使诸原子结合到一起的方式。

(3) 分子键与分子晶体

原子结合：电子云偏移，结合力很小，无方向性和饱和性。

分子晶体：熔点低，硬度低。如高分子材料。

氢键：（离子结合） $X-H\cdots Y$ （氢键结合），有方向性，如 $O-H\cdots O$

(4) 混合键。如复合材料。

3 结合键分类

(1) 一次键（化学键）：金属键、共价键、离子键。

(2) 二次键（物理键）：分子键和氢键。

4 原子的排列方式

(1) 晶体：原子在三维空间内的周期性规则排列。长程有序，各向异性。

(2) 非晶体：———不规则排列。长程无序，各向同性。

第二节 原子的规则排列

一 晶体学基础

1 空间点阵与晶体结构

(1) 空间点阵：由几何点做周期性的规则排列所形成的三维阵列。图 1-5

特征：a 原子的理想排列；b 有 14 种。

其中：

空间点阵中的点——阵点。它是纯粹的几何点，各点周围环境相同。

描述晶体中原子排列规律的空间格架称之为晶格。

空间点阵中最小的几何单元称之为晶胞。

(2) 晶体结构：原子、离子或原子团按照空间点阵的实际排列。

特征：a 可能存在局部缺陷；b 可有无限多种。

2 晶胞

图 1-6

(1) ———：构成空间点阵的最基本单元。

(2) 选取原则：

a 能够充分反映空间点阵的对称性；

b 相等的棱和角的数目最多；

c 具有尽可能多的直角；

d 体积最小。

(3) 形状和大小

有三个棱边的长度 a, b, c 及其夹角 α, β, γ 表示。

(4) 晶胞中点的位置表示（坐标法）。

3 布拉菲点阵

图 1-7

14 种点阵分属 7 个晶系。

4 晶向指数与晶面指数

晶向：空间点阵中各阵点列的方向。

晶面：通过空间点阵中任意一组阵点的平面。

国际上通用米勒指数标定晶向和晶面。

(1) 晶向指数的标定

- a 建立坐标系。确定原点（阵点）、坐标轴和度量单位（棱边）。
- b 求坐标。 u', v', w' 。
- c 化整数。 u, v, w 。
- d 加[]。 $[uvw]$ 。

说明:

- a 指数意义: 代表相互平行、方向一致的所有晶向。
- b 负值: 标于数字上方, 表示同一晶向的相反方向。
- c 晶向族: 晶体中原子排列情况相同但空间位向不同的一组晶向。用 $\langle uvw \rangle$ 表示, 数字相同, 但排列顺序不同或正负号不同的晶向属于同一晶向族。

(2) 晶面指数的标定

- a 建立坐标系: 确定原点（非阵点）、坐标轴和度量单位。
- b 量截距: x, y, z 。
- c 取倒数: h', k', l' 。
- d 化整数: h, k, l 。
- e 加圆括号: (hkl) 。

说明:

- a 指数意义: 代表一组平行的晶面;
- b 0 的意义: 面与对应的轴平行;
- c 平行晶面: 指数相同, 或数字相同但正负号相反;
- d 晶面族: 晶体中具有相同条件（原子排列和晶面间距完全相同）, 空间位向不同的各组晶面。用 $\{hkl\}$ 表示。
- e 若晶面与晶向同面, 则 $hu + kv + lw = 0$;
- f 若晶面与晶向垂直, 则 $u = h, k = v, w = l$ 。

(3) 六方系晶向指数和晶面指数

- a 六方系指数标定的特殊性: 四轴坐标系（等价晶面不具有等价指数）。

b 晶面指数的标定

标法与立方系相同(四个截距); 用四个数字 $(hkil)$ 表示; $i = -(h+k)$ 。

c 晶向指数的标定

标法与立方系相同(四个坐标); 用四个数字 $(uvtw)$ 表示; $t = -(u+v)$ 。

依次平移法: 适合于已知指数画晶向（末点）。

坐标换算法: $[UVW] \sim [uvtw]$

$$u = (2U - V)/3, v = (2V - U)/3, t = (U + V)/3, w = W。$$

(4) 晶带

- a ——: 平行于某一晶向直线所有晶面的组合。

晶带轴 ↓ 晶带面 ↓

- b 性质: 晶带用晶带轴的晶向指数表示; 晶带面//晶带轴;
 $hu + kv + lw = 0$

c 晶带定律

凡满足上式的晶面都属于以 $[uvw]$ 为晶带轴的晶带。推论:

- (a) 由两晶面 $(h_1k_1l_1)$ $(h_2k_2l_2)$ 求其晶带轴 $[uvw]$:

$$u = k_1l_2 - k_2l_1, v = l_1h_2 - l_2h_1, w = h_1k_2 - h_2k_1。$$

- (b) 由两晶向 $[u_1v_1w_1]$ $[u_2v_2w_2]$ 求其决定的晶面 (hkl) 。

$$H = v_1w_1 - v_2w_2, k = w_1u_2 - w_2u_1, l = u_1v_2 - u_2v_1。$$

(5) 晶面间距

- a ——: 一组平行晶面中, 相邻两个平行晶面之间的距离。

b 计算公式（简单立方）:

$$d = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$$

注意: 只适用于简单晶胞; 对于面心立方 hkl 不全为偶、奇数、体心立方 $h+k+l =$ 奇数时, $d_{(hkl)} = d/2$ 。

二 典型晶体结构及其几何特征

1 三种常见晶体结构