版权声明

目录

2026年新疆大学841材料科学基础考研核心笔记

《材料科学基础》考研核心笔记

第1章　晶体学基础

考研提纲及考试要求

考点：结晶状态及晶体的宏观特性
考点：点阵、晶体结构
考点：对称变换的解析式
考点：布喇菲点阵
考点：点阵的阵点直线、方向指数
考点：点阵的阵点平面及平面指数
考点：倒易点阵
考点：球面投影
考点：极射赤面投影
考点：标准投影图、标准极图

考研核心笔记

现代使用的材料绝大部分是晶态材料。晶态材料包括单晶材料、多晶材料、微晶材料和液晶材料等。我们日常使用的各种金属材料大部分是多晶材料。

天然晶体具有规则外形和宏观对称性

晶体科学既是很多学科的基础，又是很多学科的边缘和交叉，它包含广泛的内容：

（1）晶体几何学—研究晶体的外表几何形状及它们之间的规律性；
（2）晶体结构学—研究晶体内部质点排列的规律性以及晶体结构的不完整性；
（3）晶体生成学—研究天然以及人工晶体的发生、成长和变化过程及其机制；
（4）晶体物理学—研究晶体的光学、电学、力学等物理性质以及和它们相关的结构对称性；
（5）晶体化学—研究晶体的化学组成和晶体结构与晶体物理化学性质间的关系。

【核心笔记】结晶状态及晶体的宏观特性

物质结晶状态的本质特征是：结构基元在空间呈不随时间变化的三维周期排列，它决定了晶体的宏观和微观物理性质。

不具有这种特性的物质例如石蜡、玻璃等是非晶态物质。

有一些有机高聚合物，它们的结构基元具有一维或二维的近似长程有序排列，其性质介于晶体和非晶体之间，这种物质称为液态晶体，简称液晶。

晶态物质可以由多个晶体组成，由许多取向不同单晶体晶粒随机排列的组合称多晶体，各个晶粒之间有晶界分隔开。当晶粒颗粒尺度很小（约为微米级）时称为微晶。

晶体中结构基元的三维周期排列使晶体在宏观上具有一些共同的性质，它们是：

（1）晶体的棱角—面和棱的存在以及它们之间的规则性是晶体的宏观特性之一。晶体自发生长成规则几何外形的性质称自限性。互相平行的面之间的夹角是守恒的。这些平行的面称为对应面，对应面的这种关系称为面角守恒定律。

（2）均匀性—晶态物质任意部分的所有性质是完全相同

（3）各向异性—晶体的标量性质（例如相对密度、热容量等）和晶体的取向无关；矢量或更普遍情

况下的张量性质（例如热导率、磁导率、光折射率等）（例如介电系数、弹性系数、扩散系数等）和晶体的取向有关，就是各向异性。

（4）对称性—晶体的各向异性是指晶体的性质在某些不同的、不连续变化或间断的方向上存在着有规律的等同性，这就是晶体对称性的表现。对称性的概念是自然科学中最普遍最基本的概念之一，它贯穿于整个晶体学研究中，是晶体学的基础。

【核心笔记】点阵、晶体结构

晶体是由结构基元在空间呈不随时间变化的规则的三维周期排列而形成的，因此，研究晶体微观结构的首要任务就是研究周期排列的规律性。

在研究结构基元周期排列的规律性时，往往把结构基元抽象为一个几何点。这样，结构基元的三维周期排列就被抽象为点的三维周期排列（称空间点阵）。研究结构基元的三维周期排列规律就可以转化为研究点的三维周期排列规律。

我们把晶体结构看成是结构基元组成的空间图案，这些图案基元按一定的周期平移能自身重合（在以后的讨论将会知道，这叫作平移对称）。若把每个基元抽象为一个点，显然，这些点也必须具有这种平移重合的特性。

一个晶体周期结构抽象为点阵的基本规则是点阵中各点各自的物理和几何环境应完全相同，这些点称为等同点。

三种 2-D 花样的例子，它们由相同的矩形点阵构成，但基元不同：

（1）基元是单一符号

（2）基元包含重复的符号

（3）基元包含两种不同取向的符号

空间点阵的完整的严格的定义：

在空间由点排列成的无限阵列，其中每一个点都和其它所有的点具有相同的环境，这种点的排列就称为空间点阵。

点阵中任意两个点连接的矢量称为点阵平移矢量。根据点阵的平移对称性，可以选取初基矢量（简称基矢）来描述点阵平移矢量或点阵中的任意点。

对于二维点阵，则必须选择两个不共线的方向上连接最近邻点的矢量 a，b 作初基矢量来描述点阵，这两个基矢构成的平行四边形称为初基胞（它只包含一个点）。

点阵的任意点（任意平移矢量 r）可以选取任意阵点作原点用两个基矢 a 和 b 来描述。

$$\mathrm{r} = p_1\mathrm{a} + p_2\mathrm{b} \qquad\qquad p_1, p_2 = 1,2,3,\cdots$$

三维点阵应选择非共面、非共线的三个方向上的最近邻点的矢量 a，b，c 来描述点阵。这三个基矢构成的平行六面体也称为初基胞（它只包含一个点）。

点阵中任一点（任一平移矢量 r）可以选定任一阵点作原点用这三个基矢来描述：

$$r = \mathrm{p}_1 a + \mathrm{p}_2 b + \mathrm{p}_3 c$$
$$\mathrm{p}_1, \mathrm{p}_2, \mathrm{p}_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3\cdots$$

初基胞（又称 P 单胞，对二维点阵简化为一个平面，对一维点阵简化为一个线段）及初基矢量选择的原则是：

初基单胞只包含一个阵点，初基胞的非平行边是初基矢量

根据这个原则，初基胞必有如下性质：

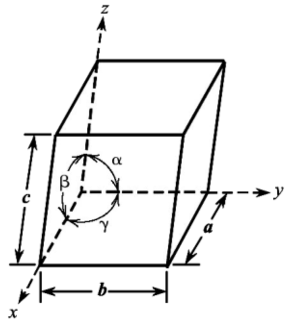
（1）每一个初基胞只包含一个阵点；

（2）以一个阵点作原点，以初基胞作周期平移，可以覆盖整个点阵；

（3）不管初基胞如何选择，它们的体积（二维的是面积，一维的是线段长）相等。

包含不止一个阵点的平行六面体（平行四边形），这些都是非初基胞，称它们为复式初基胞。

单胞的三个矢量（三个棱）a，b，c 的长度 a，b，c 以及三个棱之间的夹角 α（b∧c），β（c∧a），γ (a∧b)这 6 个参数称为点阵常数，它们是描述单胞特征的基本参数。



点阵是由晶体的结构基元抽象出来的，可以由下式来说明点阵和晶体结构的关系：

点阵+结构基元=晶体结构

结构基元可以是一个或多个原子（分子）构成。

【核心笔记】对称性，空间变换

任何物体（几何图形，晶体，函数）都可以在描述它的变量空间对它的整体作适当的变换，如果这种变换使物体本身重合（即它在变换后不变亦即转换成自己），这样的物体就是对称的，这样的变换就是对称性变换。

对称性还有另外的一种说法：物体可以分割成等同的部分。

概括地说对称性就是在描述物体变量的空间中物体经过某种变换后的不变性。

1. 对称变换(操作)

对称变换实际上就是一种对称操作。从几何意义考察物体的对称性就是考察变换前后物体是否自身重合，如果重合了，这种变换就是一种对称操作。

以 g 表示对空间坐标 r(x_1，x_2，x_3)的变换，变换后的空间坐标变为 r’，即

$$g[x_1, x_2, x_3] = x'_1, x'_2, x'_3 \qquad\qquad g[r] = r'$$

如果物体 F 在 g 作用于它的变量后所得的结果不变，即

$$F(x_1, x_2, x_3) = F(g[x_1, x_2, x_3]) = F(x'_1, x'_2, x'_3)$$
$$F(r) = F(g[r]) = F(r')$$

称 F 是对称物体，g 是对称变换（操作）。

对一个物体可以有若干个对称操作，由两个或更多个相继的相同或不同的对称操作构成的操作也是对称操作。对给定的物体的对称操作的集合就是对称群）。

在操作作用下，物体空间各点和全部位矢都相对一组固定参考轴移动，称主动操作。

在操作作用下，保持物体空间各点和全部位矢都固定不动而使坐标移动，称被动操作。

空间物体可看作是点的集合，经对称变换前后点的集合会完全重合。对称变换保持空间的度规性质不变，它是一种等体积变换，变换过程中空间不延伸，不扭曲，任何二点间距离保持不变。

2. 对称变换的解析式

平移对称：设平移矢量为 t，对称变换 r’=G[r]描写为

$$r' = r + t$$

物体绕某个轴转动的变换（主动操作）

在 X 坐标系有一点 r(x_1, x_2,, x_3)，它也是从原点到此点的矢量。

如果这一矢量绕 x_3 轴转动θ角，点到达的新位置为 r’(x'_1, x'_2,, x'_3)。新位置的坐标为：

$$x'_1 = -|r|\sin(\theta - \alpha) = -|r|(\sin\theta\cos\alpha - \cos\alpha\sin\theta)$$

$$x'_2 = |r|\cos(\theta-\alpha) = |r|(\cos\theta\cos\alpha + \sin\alpha\sin\theta)$$

因 $\cos\alpha = x_2/|r|$ 及 $\sin\alpha = x_1/|r|$，即

$$x'_1 = x_1\cos\theta - x_2\sin\theta$$
$$x'_2 = x_1\sin\theta + x_2\cos\theta$$

因此，r 到 r’ 变换的解析式是：

$$\begin{bmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

又可写成：$r' = \mathrm{R}r$，式中 R 是变换矩阵

$$R = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

更一般的情况，r 绕任意方向的单位矢量 $S=ue_1+ve_2+we_3$（把 S 记作[uvw]）转动θ角到达 r’ 的变换矩阵是:

$$R = \cos\theta\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + (1-\cos\theta)\begin{bmatrix} u\cdot u & u\cdot v & u\cdot w \\ v\cdot u & v\cdot v & v\cdot w \\ w\cdot u & w\cdot v & w\cdot w \end{bmatrix} + \sin\theta\begin{bmatrix} 0 & -w & v \\ w & 0 & -u \\ -v & u & 0 \end{bmatrix}$$

3. 点对称变换(操作)

点对称操作保证操作前后最少有一点保持不动，因此也可能会有线或面保持不动甚至还可能整体不动。

在操作过程保持不动的点、线或面都是对称元素。对称元素通常用两种符号表示，一种是国际符号，另一种是熊夫利斯符号。

（1）旋转操作

旋转操作是绕某一轴[uvw]反时针方向旋转 2π/n=θ角度的对称操作，n 为正整数，是旋转轴的轴次。旋转轴就是这个操作过程中不动的线，它就是这个操作的对称元素。旋转操作的国际符号为 $n_{[uvw]}$，熊夫利斯符号为 $C_{n[uvw]}$。

$n(C_n)$连续操作了 m 次，则记作 $n^m(C_n^m)$。它的变换矩阵也相应于原操作矩阵自乘了 m 次。一般 m≤n，当 m=n 时，实际上旋转了共 360°，即回到原来位置，是下面讨论的恒等操作。

①恒等操作（又称单位操作）

这操作后与没有操作一样，从旋转的角度看，n=1，θ=2π。所以国际符号是 1，熊夫利斯符号是 E。合在一起记作 1(E)。它的操作矩阵就是单位矩阵:

$$\{1(E)\} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

②二次轴 n=2，θ=π，国际符号是 2，熊夫利斯符号是 C_2，合在一起记作 $2(C_2)$。

连续进行两次二次旋转轴操作，即 $2\cdot 2=2^2$ 或 $C_2\cdot C_2=C_2^2$，所得结果是恒等操作:

$$\{2^2_{[001]}\} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \{1(E)\}$$

③三次轴 n=3，θ=2π/3，国际符号是 3，熊夫利斯符号是 C_3，合在一起记作 $3(C_3)$。