

M “十二五”国家重点图书出版规划项目
材料科学研究与工程技术系列

材料科学基础教程

Fundamentals of Materials Science course

● 赵 品 谢辅洲 孙振国 主编
● 崔占全 宋润滨 主审

哈爾濱工業大學出版社

M “十二五”国家重点图书出版规划项目
材料科学研究与工程技术系列

材料科学基础教程

Fundamentals of Materials Science course

- 赵品 谢辅洲 孙振国 主编
- 崔占全 宋润滨 主审

哈尔滨工业大学出版社

内 容 简 介

本书是材料科学与工程系列教材之一,主要内容包括材料的结构,晶体缺陷,纯金属的凝固,二元相图,三元相图,固体材料的变形与断裂,回复与再结晶,扩散,固态相变,金属材料,高分子材料,陶瓷材料,复合材料及功能材料的基础知识。

本书可作为材料科学与工程各专业本科生教材,也可作为研究生、教师和工程技术人员参考书。

图书在版编目(CIP)数据

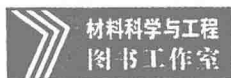
材料科学基础教程/赵品,谢辅洲,孙振国主编.

—哈尔滨:哈尔滨工业大学出版社,2015.12

ISBN 978-7-5603-5775-1

I. ①材… II. ①赵… ②谢… ③孙… III. 材料科学-高等学校-教材 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 295704 号



材料科学与工程
图书工作室

责任编辑 孙连嵩 张秀华

封面设计 卞秉利

出版发行 哈尔滨工业大学出版社

社 址 哈尔滨市南岗区复华四道街 10 号 邮编 150006

传 真 0451-86414749

网 址 <http://hitpress.hit.edu.cn>

印 刷 黑龙江省地质测绘印制中心印刷厂

开 本 787mm×1092mm 1/16 印张 22 字数 510 千字

版 次 2016 年 1 月第 1 版 2016 年 1 月第 1 次印刷

书 号 978-7-5603-5775-1

定 价 38.00 元

(如因印装质量问题影响阅读,我社负责调换)

前 言

为适应高等教育改革的需要,作者本着加强基础,淡化专业,宽口径的原则,以及教学时数普遍减少的实际情况,编写了《材料科学基础教程》一书,作为材料学科铸、锻、焊、防腐及热处理等专业的通用教材。

《材料科学基础教程》是材料科学与工程系列教材之一,材料科学基础则是研究材料的成分、结构与性能之间关系及其变化规律的一门应用基础科学。本书在内容上综合了原《金属学原理》和《金属学及热处理》的内容,并在《金属学原理》和《金属学及热处理》的基础上,从材料的共性出发,注意揭示各种材料的共性及普遍规律,保留了完整的物理冶金原理,并拓展了知识面,并从金属材料扩展到无机非金属材料、高分子材料、复合材料及功能材料。

《材料科学基础教程》主要内容包括材料的结构,晶体缺陷,纯金属的凝固,二元相图,三元相图,固体材料的变形与断裂,回复与再结晶,扩散,固态相变,金属材料,高分子材料,陶瓷材料,复合材料及功能材料的基础知识。不论在内容上还是在结构上,力争做到安排合理,以满足教与学的需要。

全书由14章组成,第1,2,6,7,11~14章由燕山大学赵品编写;第3,4,5,8章由哈尔滨工程大学谢辅洲编写;第9章由东北林业大学赵晏编写;第10章10.1,10.2,10.3.1~10.3.3由燕山大学高聿为编写;10.3.4由江苏科技大学孙振国编写。书中部分扫描电镜及透射电镜照片由王爱荣,张静武摄制;书中部分金相照片由李慧,王燕,孙大民为摄制。本书由赵品,谢辅洲,孙振国主编。

在本书的编写过程中参考和引用了一些文献和资料的有关内容,并得到哈尔滨工业大学,燕山大学,哈尔滨工程大学,哈尔滨理工大学及江苏科技大学等院校的大力支持与协作,谨此表示衷心的感谢。

由于作者水平有限,书中不足之处在所难免,敬请批评指正。

编 者
2015年2月

目 录

第1章 材料的结构	(1)	3.2.2 凝固的热力学条件	(50)
1.1 材料的结合方式	(1)	3.3 形核规律	(50)
1.1.1 化学键	(1)	3.3.1 均匀形核	(50)
1.1.2 工程材料的键性	(2)	3.3.2 非均匀形核	(52)
1.2 晶体学基础	(3)	3.4 长大规律	(54)
1.2.1 晶体与非晶体	(3)	3.4.1 液-固界面的微观结构	(54)
1.2.2 空间点阵	(4)	3.4.2 晶核的长大机制	(54)
1.2.3 晶向指数与晶面指数	(6)	3.4.3 纯金属的生长形态	(55)
1.2.4 晶体的极射赤面投影	(8)	3.5 结晶理论的某些实际应用	(57)
1.3 材料的晶体结构	(10)	3.5.1 细化金属铸件晶粒的方法	(57)
1.3.1 典型金属的晶体结构	(10)	3.5.2 定向凝固技术	(58)
1.3.2 共价晶体的晶体结构	(14)	3.5.3 单晶体的制备	(58)
1.3.3 离子晶体的晶体结构	(15)	3.5.4 急冷凝固技术	(59)
1.3.4 合金相结构	(17)	习题	(62)
习题	(23)	第4章 二元相图	(63)
第2章 晶体缺陷	(25)	4.1 相图的基本知识	(63)
2.1 点缺陷	(25)	4.1.1 相图的表示方法	(63)
2.1.1 点缺陷的类型及形式	(25)	4.1.2 相图的建立	(64)
2.1.2 点缺陷的运动及平衡浓度	(25)	4.1.3 相平衡与相律	(64)
2.1.3 点缺陷对性能的影响	(26)	4.1.4 二元相图的几何规律	(65)
2.2 线缺陷	(26)	4.2 二元相图的基本类型	(66)
2.2.1 位错的基本概念	(26)	4.2.1 匀晶相图	(66)
2.2.2 位错的运动	(29)	4.2.2 共晶相图	(72)
2.2.3 位错的弹性性质	(32)	4.2.3 包晶相图	(79)
2.2.4 实际晶体中的位错	(36)	4.3 二元相图的分析和使用	(81)
2.3 面缺陷	(43)	4.3.1 其他类型的二元相图	(81)
2.3.1 外表面	(43)	4.3.2 复杂二元相图的分析方法	(83)
2.3.2 晶界与亚晶界	(43)	4.4 铁碳相图和铁碳合金	(86)
习题	(47)	4.4.1 铁碳相图	(86)
第3章 纯金属的凝固	(49)	4.4.2 碳和杂质元素对碳钢组织	(93)
3.1 纯金属的结晶过程	(49)	和性能的影响	(93)
3.1.1 液态金属的结构	(49)	4.4.3 合金铸件的组织与缺陷	(96)
3.1.2 纯金属的结晶过程	(49)	习题	(101)
3.2 结晶的热力学条件	(49)		
3.2.1 结晶的过冷现象	(49)		

第5章 三元相图	(103)	5.7.4 CaO-SiO ₂ -Al ₂ O ₃ 三元系 投影图	(117)
5.1 三元相图的成分表示法	(103)	习题	(117)
5.1.1 浓度三角形	(103)	第6章 固体材料的变形与断裂 ...	(120)
5.1.2 浓度三角形中具有特定意义 的线	(103)	6.1 弹性变形	(120)
5.2 三元系平衡转变的定量法则	(104)	6.1.1 普弹性	(120)
5.2.1 直线定律	(104)	6.1.2 滞弹性	(121)
5.2.2 重心定律	(104)	6.2 单晶体的塑性变形	(121)
5.3 三元匀晶相图	(105)	6.2.1 滑移	(121)
5.3.1 相图分析	(105)	6.2.2 孪生	(128)
5.3.2 等温截面图(水平截面图)	(105)	6.2.3 晶体的扭折	(130)
5.3.3 变温截面图(垂直截面图)	(106)	6.3 多晶体的塑性变形	(130)
5.4 三元共晶相图	(107)	6.3.1 多晶体塑性变形过程 ...	(130)
5.4.1 组元在固态互不溶,具有 共晶转变的相图	(107)	6.3.2 晶粒大小对塑性变形的影响	(131)
5.4.2 组元在固态下有限溶解, 具有共晶转变的三元相图	(109)	6.3.3 多晶体应力-应变曲线	(131)
5.4.3 三相平衡包晶转变的相图 特征	(111)	6.4 塑性变形对金属组织与性能的 影响	(132)
5.5 三元合金相图的四相平衡转变)	(112)	6.4.1 显微组织与性能的变化	(132)
5.5.1 立体图中的四相平衡平面	(112)	6.4.2 形变织构	(133)
5.5.2 投影图上的四相平衡平面	(113)	6.4.3 残余应力	(133)
5.5.3 垂直截面图上的四相平衡区	(114)	6.5 金属及合金强化的位错解释	(134)
5.6 具有化合物的三元相图及三元 相图的简化分割	(114)	6.5.1 Cottrell 气团	(134)
5.7 三元合金相图应用举例	(115)	6.5.2 位错交割和带割阶位错的 运动	(134)
5.7.1 Fe-C-Si 三元系的垂直 截面图	(115)	6.5.3 固定位错	(136)
5.7.2 Fe-Cr-C 三元系的垂直 截面图	(115)	6.5.4 滑动位错与第二相质点的 交互作用	(137)
5.7.3 Fe-Cr-C 三元系的水平 截面图	(116)	6.6 断裂	(138)
		6.6.1 理论断裂强度	(139)
		6.6.2 Griffith 理论与断裂韧性	(139)
		6.6.3 裂纹的萌生	(140)
		6.6.4 断裂形式	(141)
		6.6.5 影响材料断裂的基本因素	(142)
		习题	(143)

第7章 回复与再结晶	(145)	8.3.4 浓度	(167)
7.1 形变金属及合金在退火过程中 的变化	(145)	8.3.5 合金元素的影响	(167)
7.1.1 显微组织的变化	(145)	8.3.6 短路扩散	(167)
7.1.2 储存能释放与性能变化	(145)	8.4 反应扩散	(168)
7.2 回复	(146)	习题	(168)
7.2.1 回复机理	(146)	第9章 固态相变	(170)
7.2.2 回复动力学	(147)	9.1 固态相变总论	(170)
7.2.3 回复退火的应用	(148)	9.1.1 固态相变分类	(170)
7.3 再结晶	(148)	9.1.2 固态相变的特征	(172)
7.3.1 再结晶的形核	(148)	9.1.3 固态相变的形核	(173)
7.3.2 再结晶动力学	(150)	9.1.4 新相的长大	(176)
7.3.3 影响再结晶的因素	(151)	9.1.5 相变动力学	(178)
7.3.4 再结晶后晶粒大小	(152)	9.2 扩散型相变	(180)
7.4 晶粒长大	(152)	9.2.1 调幅分解	(180)
7.4.1 晶粒的正常长大	(153)	9.2.2 过饱和固溶体的脱溶	(181)
7.4.2 晶粒的异常长大	(155)	9.2.3 共析转变	(186)
7.5 金属的热变形	(155)	9.3 无扩散相变	(188)
7.5.1 动态回复	(156)	9.3.1 陶瓷的同质异构转变	(188)
7.5.2 动态再结晶	(156)	9.3.2 块型转变	(188)
7.5.3 热加工后的组织及性能	(157)	9.3.3 马氏体相变	(189)
7.5.4 超塑性	(158)	9.4 贝氏体相变	(193)
习题	(159)	9.4.1 钢中贝氏体类型及形成过程	(193)
第8章 扩散	(160)	9.4.2 贝氏体的组织形态	(193)
8.1 扩散定律	(160)	9.4.3 贝氏体钢及应用	(195)
8.1.1 菲克第一定律	(160)	9.5 钢的热处理原理	(195)
8.1.2 菲克第二定律	(160)	9.5.1 钢的加热转变	(196)
8.1.3 扩散方程在生产中的应用 举例	(160)	9.5.2 钢的冷却转变	(200)
8.1.4 扩散的驱动力及上坡扩散	(163)	9.5.3 钢的回火转变	(204)
8.2 扩散机制	(163)	9.6 钢的热处理工艺	(207)
8.2.1 间隙扩散	(163)	9.6.1 普通热处理	(207)
8.2.2 置换扩散	(164)	9.6.2 表面热处理	(213)
8.2.3 扩散系数公式	(165)	第10章 金属材料	(221)
8.3 影响扩散的因素	(166)	10.1 工业用钢	(221)
8.3.1 温度	(166)	10.1.1 钢中合金元素	(221)
8.3.2 固溶体类型	(166)	10.1.2 工程结构钢	(226)
8.3.3 晶体结构	(166)	10.1.3 机械制造结构钢	(228)
		10.1.4 工具钢	(233)
		10.1.5 特殊性能钢	(240)
		10.2 铸 铁	(249)
		10.2.1 铸铁的石墨化	(250)

10.2.2 铸铁中石墨形态的控制	(252)	12.4.1 坯料制备	(313)
10.2.3 常用铸铁	(254)	12.4.2 成型	(313)
10.3 有色金属及合金	(259)	12.4.3 烧结	(313)
10.3.1 铝及铝合金	(260)	12.5 陶瓷材料的脆性及增韧	(314)
10.3.2 铜及铜合金	(270)	12.5.1 陶瓷材料的脆性	(314)
10.3.3 轴承合金	(281)	12.5.2 改善陶瓷脆性的途径	(315)
10.3.4 钛及钛合金	(283)	12.6 工程陶瓷材料简介	(316)
第11章 高分子材料	(290)	12.6.1 普通陶瓷	(316)
11.1 概述	(290)	12.6.2 特种陶瓷	(316)
11.1.1 高分子材料的基本概念	(290)	习题	(317)
11.1.2 高分子化合物的结构	(293)	第13章 复合材料	(318)
11.1.3 高分子化合物的力学状态	(296)	13.1 概述	(318)
11.1.4 高分子材料的老化及其改性	(297)	13.1.1 复合材料的概念	(318)
11.2 工程塑料	(298)	13.1.2 复合材料的分类	(318)
11.2.1 塑料的组成与分类	(298)	13.1.3 复合材料的命名	(318)
11.2.2 塑料制品的成型与加工	(299)	13.2 复合材料的增强机制及性能	(319)
11.2.3 塑料的性能特点	(299)	13.2.1 复合材料的增强机制	(319)
11.2.4 常用工程塑料	(300)	13.2.2 复合材料的性能特点	(320)
11.3 合成橡胶与合成纤维	(303)	13.3 常用复合材料	(322)
11.3.1 橡胶	(303)	13.3.1 纤维增强复合材料	(322)
11.3.2 合成纤维	(305)	13.3.2 叠层复合材料	(326)
11.4 合成胶粘剂和涂料	(306)	13.3.3 粒子增强型复合材料	(327)
11.4.1 合成胶粘剂	(306)	第14章 功能材料	(328)
11.4.2 涂料	(307)	14.1 概述	(328)
第12章 陶瓷材料	(309)	14.1.1 功能材料的概念	(328)
12.1 陶瓷概述	(309)	14.1.2 功能材料的特点	(328)
12.2 陶瓷材料的典型结构	(310)	14.1.3 功能材料的分类	(329)
12.2.1 离子晶体陶瓷结构	(310)	14.2 功能材料简介	(329)
12.2.2 共价晶体陶瓷结构	(311)	14.2.1 电功能材料	(329)
12.2.3 非晶型陶瓷结构	(311)	14.2.2 磁功能材料	(332)
12.3 陶瓷的显微结构	(312)	14.2.3 热功能材料	(334)
12.3.1 晶粒	(312)	14.2.4 光功能材料	(336)
12.3.2 玻璃相	(313)	14.2.5 其他功能材料	(337)
12.3.3 气相	(313)	14.3 未来材料的发展	(338)
12.4 陶瓷材料制造工艺	(313)	参考文献	(340)

第1章 材料的结构

材料的成分不同其性能也不同。对同一成分的材料也可通过改变内部结构和组织状态的方法,改变其性能,这促进了人们对材料内部结构的研究。组成材料的原子的结构决定了原子的结合方式,按结合方式可将固体材料分为金属、陶瓷和聚合物。根据其原子排列情况,又可将材料分为晶体与非晶体两大类。本章首先介绍材料的晶体结构。

1.1 材料的结合方式

1.1.1 化学键

组成物质整体的质点(原子、分子或离子)间的相互作用力叫化学键。由于质点相互作用时,其吸引和排斥情况的不同,形成了不同类型的化学键,主要有共价键、离子键和金属键。

1. 共价键

有些同类原子,例如周期表 IVA, VA, VIA 族中大多数元素或电负性相差不大的原子互相接近时,原子之间不产生电子的转移,此时借共用电子对所产生的力结合,形成共价键。金刚石、单质硅、SiC 等属于共价键。实践证明,一个硅原子与 4 个在其周围的硅原子共享其外壳层能级的电子,使外层能级壳层获得 8 个电子,每个硅原子通过 4 个共价键与 4 个邻近原子结合,如图 1.1 所示。共价键具有方向性,对硅来说,所形成的四面体结构中,每个共价键之间的夹角约为 109° 。在外力作用下,原子发生相对位移时,键将遭到破坏,故共价键材料是脆性的。为使电子运动产生电流,必须破坏共价键,需加高温、高压,因此共价键材料具有很好的绝缘性。金刚石中碳原子间的共价键非常牢固,其熔点高达 3750°C ,是自然界中最坚硬的固体。

2. 离子键

大部分盐类、碱类和金属氧化物在固态下是不能导电的,熔融时可以导电。这类化合物为离子化合物。当两种电负性相差大的原子(如碱金属元素与卤族元素的原子)相互靠近时,其中电负性小的原子失去电子,成为正离子,电负性大的原子获得电子成为负离子,两种离子靠静电引力结合在一起形成离子键。

由于离子的电荷分布是球形对称的,因此它在各方向上都可以和相反电荷的离子相吸引,即离子键没有方向性。离子键的另一个特性是无饱和性,即一个离子可以同时和几个异号离子相结合。例如,在 NaCl 晶体中,每个 Cl^- 离子周围都有 6 个 Na^+ 离子,每个 Na^+ 离子周围也有 6 个 Cl^- 离子等距离排列着。离子晶体在空间三个方向上不断延续就形成了巨大的离子晶体。NaCl 是离子型晶体,结构如图 1.2 所示。

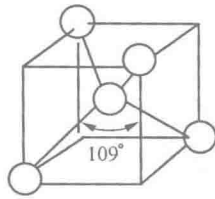


图 1.1 Si 形成的四面体

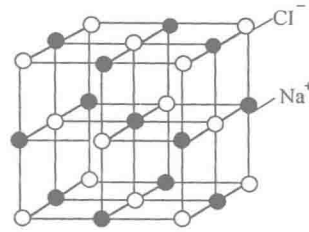


图 1.2 NaCl 晶体结构

离子型晶体中,正、负离子间有很强的吸引力,所以有较高熔点,离子晶体如果发生相对移动,将失去电平衡,使离子键遭到破坏,故离子键材料是脆性的。离子的运动不像电子那么容易,故固态时导电性很差。

3. 金属键

金属原子的结构特点是外层电子少,容易失去。当金属原子相互靠近时,其外层的价电子脱离原子成为自由电子,为整个金属所共有,它们在整个金属内部运动,形成电子气。这种由金属正离子和自由电子之间互相作用而结合的称为金属键。金属键的经典模型有两种,一种认为金属原子全部离子化,一种认为金属键包括中性原子间的共价键及正离子与自由电子间的静电引力的复杂结合,如图 1.3(a),(b)所示。

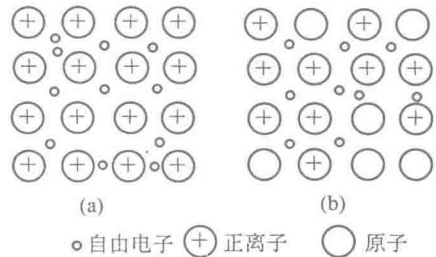


图 1.3 金属键模型

金属键无方向性和饱和性,故金属的晶体结构大多具有高对称性,利用金属键可解释金属所具有的各种特性。金属内原子面之间相对位移,金属键仍旧保持,故金属具有良好的延展性。在一定电位差下,自由电子可在金属中定向运动,形成电流,显示出良好的导电性。随温度升高,正离子(或原子)本身振幅增大,阻碍电子通过,使电阻升高,因此金属具有正的电阻温度系数。固态金属中,不仅正离子的振动可传递热能,而且电子的运动也能传递热能,故比非金属具有更好的导热性。金属中的自由电子可吸收可见光的能量,被激发、跃迁到较高能级,因此金属不透明。当它跳回到原来能级时,将所吸收的能量重新辐射出来,使金属具有光泽。

4. 范德瓦耳键

许多物质其分子具有永久极性。分子的一部分往往带正电荷,而另一部分往往带负电荷,一个分子的正电荷部位和另一分子的负电荷部位间,以微弱静电力相吸引,使之结合在一起,称为范德瓦耳键,也叫分子键。分子晶体因其结合键能很低,所以其熔点很低。金属与合金这种键不多,而聚合物通常链内是共价键,而链与链之间是范德瓦耳键。

1.1.2 工程材料的键性

在实际的工程材料中,原子(或离子、分子)间相互作用的性质,只有少数是这四种键

型的极端情况,大多数是这四种键型的过渡。如果以四种键为顶点,作个四面体,就可把工程材料的结合键范围示意在四面体上,如图 1.4 所示。

金属材料的结合键主要是金属键,但四价锡却有明显共价键特点,而 Mg_3Sb_2 这样的金属间化合物却显示出强烈的离子键特性。陶瓷材料的结合键主要是离子键与共价键。高分子材料的链状分子间的结合是范德瓦耳键,而链内是共价键。材料的键型不同,表现出不同的特性。

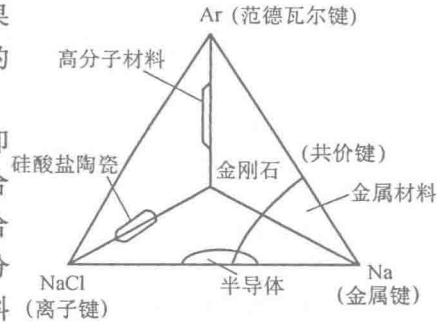


图 1.4 工程材料键性

1.2 晶体学基础

1.2.1 晶体与非晶体

如果不考虑材料的结构缺陷,原子的排列可分为三个等级,如图 1.5 所示。可分为无序排列,短程有序和长程有序。

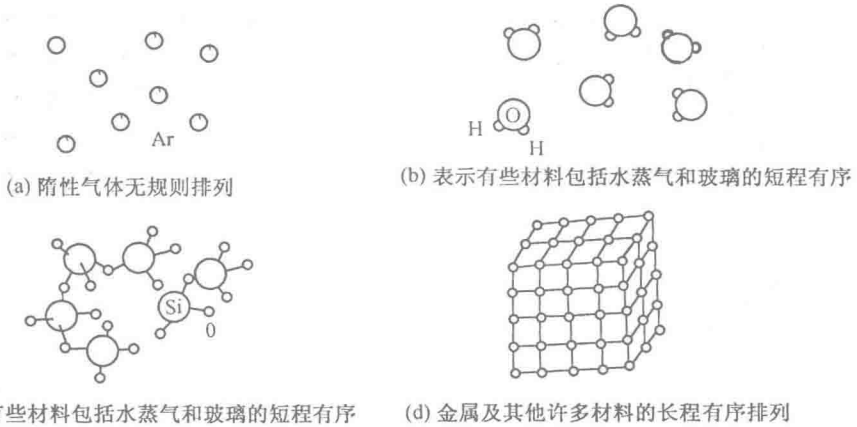


图 1.5 材料中原子的排列

物质的质点(分子、原子或离子)在三维空间作有规律的周期性重复排列所形成的物质叫晶体,如图 1.5(d)所示。

非晶体在整体上是无序的,但原子间也靠化学键结合在一起,所以在有限的小范围内观察还有一定规律,可将非晶体的这种结构称为近程有序,如图 1.5(b),(c)所示。

晶体与非晶体中原子排列方式不同,导致性能上出现较大差异。首先晶体具有一定的熔点,非晶体则没有。熔点是晶体物质的结晶状态与非结晶状态互相转变的临界温度,对于一定的晶体其熔点是一恒定的值。固态非晶体则是液体冷却时,尚未转变为晶体就凝固了,它实质是一种过冷的液体结构,往往称为玻璃体,故液固之间的转变温度不固定。其次,晶体的某些物理性能和力学性能在不同方向上具有不同的数值称为各向异性,而非晶体则是各向同性。表 1.1 列出几种常见金属单晶体沿不同方向测得的力学性能。

表 1.1 单晶体的各向异性

类别	弹性模量/MPa		抗拉强度/MPa		延伸率/%	
	最大	最小	最大	最小	最大	最小
Cu	191 000	66 700	346	128	55	10
α -Fe	293 000	125 000	225	158	80	20

1.2.2 空间点阵

实际晶体中,质点在空间的排列方式是多种多样的,为了便于研究晶体中原子、分子或离子的排列情况,近似地将晶体看成是无错排的理想晶体,忽略其物质性,抽象为规则排列于空间的无数几何点。这些点代表原子(分子或离子)的中心,也可是彼此等同的原子群或分子群的中心,各点的周围环境相同。这种点的空间排列称为空间点阵,简称点阵,这些点叫阵点。从点阵中取出一个仍能保持点阵特征的最基本单元叫晶胞,如图 1.6 所示。将阵点用一系列平行直线连接起来,构成一空间格架叫晶格。显然晶胞作三维堆砌就构成了空间点阵。

同一点阵,可因晶胞选择方式不同,得到不同的晶胞,如图 1.7 所示。因此,晶胞选取应满足下列条件。

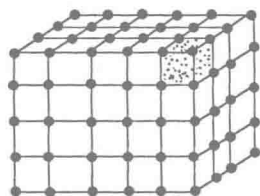


图 1.6 空间点阵及晶胞

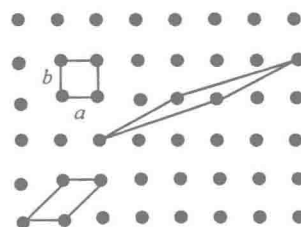


图 1.7 在点阵中选取晶胞

- ①晶胞几何形状充分反映点阵对称性。
- ②平行六面体内相等的棱和角数目最多。
- ③当棱间呈直角时,直角数目应最多。
- ④满足上述条件,晶胞体积应最小。

晶胞的尺寸和形状可用点阵参数来描述,它包括晶胞的各边长度和各边之间的夹角,如图 1.8 所示。对于立方系,只要知道立方一边的长度,就可完全描述晶胞特征。

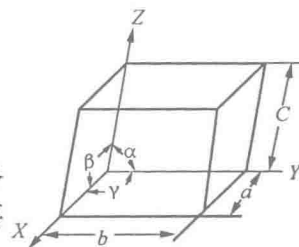


图 1.8 晶胞、晶轴及点阵参数

根据以上原则,可将晶体划分为 7 个晶系。布拉菲(A. Bravais)在 1848 年根据“每个阵点环境相同”,用数学分析法证

明晶体的空间点阵只有 14 种,故这 14 种空间点阵叫做布拉菲点阵,分属 7 个晶系,如表 1.2 所示。空间点阵虽然只可能有 14 种,但晶体结构则是无限多的。这是因为空间点阵的每个阵点上,都可放上一个“结构单元”,这个结构单元可以由各种原子、离子、分子或原子集团,分子集团所组成,由于“结构单元”是任意的,故晶体结构为无限多。Cu, NaCl, CaF_2 具有不同的晶体结构,但都是属于面心立方点阵,如图 1.9 所示。NaCl 结构中,每个阵点,包含一个 Na^+ 和一个 Cl^- 。而 CaF_2 可看成每阵点包含两个 F^- 和一个 Ca^{2+} 。

表 1.2 十四种布拉菲点阵

	P	C	I	F
三斜 $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$				
单斜 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$				
正交 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
四方 $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
菱方 $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$				
六方 $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma = 120^\circ$				
立方 $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				

P-不带心; C-底心; I-体心; F-面心

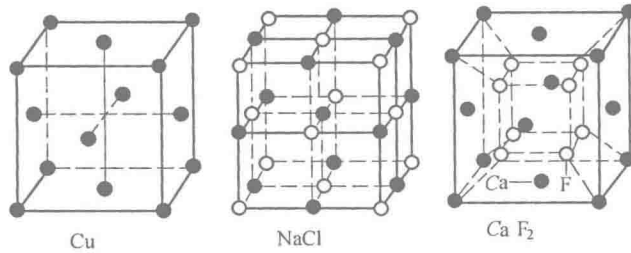


图 1.9 具有相同点阵的晶体结构

1.2.3 晶向指数与晶面指数

在分析材料结晶、塑变和相变时,常常涉及到晶体中某些原子在空间排列的方向(晶向)和某些原子构成的空间平面(晶面),为区分不同的晶向和晶面,需采用一个统一的标号来标定它们,这种标号叫晶向指数与晶面指数。

1. 晶向指数的标定

① 以晶格中某结点为原点,取点阵常数为三坐标轴的单位长度,建立右旋坐标系,如图 1.10 所示。定出欲求晶向上任意两个点的坐标。

② “末”点坐标减去“始”点坐标,得到沿该坐标系各轴方向移动的点阵参数的数目。

③ 将这三个值化成一组互质整数,加上一个方括号即为所求的晶向指数 $[uvw]$,如有某一数为负值,则将负号标注在该数字上方。

图 1.10 给出了正交点阵中的几个晶向指数。显然一个晶向指数代表一组互相平行的晶向。如果晶向指数数字相同而正负号完全相反,则这两组晶向互相平行,方向相反,如图 1.10 中 $[0\bar{1}0]$ 与 $[010]$ 。

2. 晶面指数的标定

① 建立如前所述的参考坐标系,但原点应位于待定晶面之外,以避免出现零截距。

② 找出待定晶面在三轴的截距,如果该晶面与某轴平行,则截距为无穷大。

③ 取截距的倒数,将其化为一组互质的整数,加圆括号,如有某一数为负值,则将负号标注在该数字上方得到晶面指数 (hkl) 。

与晶向指数类似, (hkl) 代表互相平行的一组晶面。晶面指数遍乘 -1 所表示的晶面仍与原晶面互相平行。立方系一些常用晶面指数如图 1.11 所示,具有相同指数的晶面与晶向必定互相垂直,如 $[010] \perp (010)$,但此关系显然不适用于其他晶系。

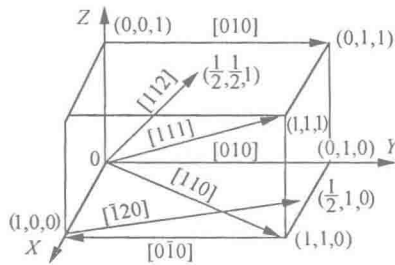


图 1.10 正交系中一些晶向指数

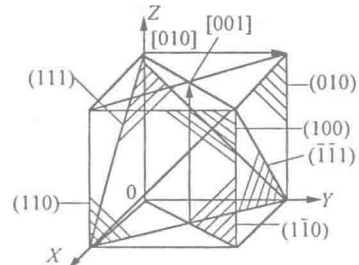


图 1.11 立方系常用晶面指数

3. 晶面族与晶向族

在晶体中有些晶面原子排列情况相同,面间距也相等,只是空间位向不同,属于同一晶面族用 $\{hkl\}$ 表示。在立方系中:

$$\{100\} : (100), (010), (001)$$

$$\{110\} : (110), (101), (011), (\bar{1}10), (\bar{1}01), (0\bar{1}1)$$

$$\{111\} : (111), (\bar{1}11), (1\bar{1}1), (11\bar{1})$$

与此类似,晶向族用 $\langle uvw \rangle$ 表示,代表原子排列相同,空间位向不同的所有晶向。

4. 六方系晶面及晶向指数标定

由于六方系的独特对称性,为它采用了一套专用的密勒-布拉非指数。坐标系使用了四轴,其中一轴是多余的。四轴制中,等同晶面及晶向属于同一晶面族和晶向族。

晶面指数的标定同前,六方系的一些晶面如图 1.12 所示。六个侧面的指数分别用 $(\bar{1}100)$, $(01\bar{1}0)$, $(10\bar{1}0)$, $(\bar{1}\bar{1}00)$, $(0\bar{1}10)$, $(\bar{1}010)$ 表示。各面原子排列情况相同,属同一晶面族,用 $\{\bar{1}100\}$ 表示。由几何学可知三维空间独立坐标最多不超过三个。应用上述方法标定的晶面指数 $\{h k i l\}$,四个指数中前三个指数只有两个是独立的,它们有如下关系

$$i = -(h+k) \quad (1.1)$$

采用四轴坐标,晶向指数的确定方法如下:当晶向通过原点时,把晶向沿四个轴分解成四个分量,晶向 OP 可表示为

$$OP = ua_1 + va_2 + ia_3 + wc \quad (1.2)$$

晶向指数用 $[u v t w]$ 表示,其中 $t = -(u+v)$ 。原子排列相同的晶向为同一晶向族,图 1.12 中, a_1 轴为 $[2\bar{1}\bar{1}0]$, a_2 轴为 $[\bar{1}2\bar{1}0]$, a_3 轴为 $[\bar{1}\bar{1}20]$ 均属 $\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$ 。其缺点是标定较麻烦。可先用三轴制确定晶向指数 $[U V W]$,再利用公式(1.3)转换为 $[u v t w]$ 。采用三轴坐标系时, c 轴垂直底面, a_1 、 a_2 轴在底面上,其夹角为 120° ,如图 1.12 所示。确定晶向指数的方法同前。采用三轴制虽然指数标定简单,但原子排列相同的晶向本应属于同一晶向族,其晶向指数的数字却不尽相同,例如 $[100]$, $[010]$, $[\bar{1}\bar{1}0]$,如图 1.12 所示。

六方系按两种晶轴系所得的晶向指数可相互转换如下

$$\begin{cases} u = \frac{1}{3}(2U-V) \\ v = \frac{1}{3}(2V-U) \\ t = -(u+v) \\ w = W \end{cases} \quad (1.3)$$

例如, $[\bar{1}\bar{1}0] \rightarrow [\bar{1}\bar{1}20]$, $[100] \rightarrow [2\bar{1}\bar{1}0]$, $[010] \rightarrow [\bar{1}2\bar{1}0]$ 。这样等同晶向的晶向指数的数字都相同。

5. 晶带

相交于某一晶向直线或平行于此直线的晶面构成一个晶带,此直线称晶带轴。立方系某晶面 $(h k l)$ 以 $[u v w]$ 为晶带轴必有

$$hu + kv + lw = 0 \quad (1.4)$$

反之亦成立。两个不平行的晶面 $(h_1 k_1 l_1)$, $(h_2 k_2 l_2)$ 的晶带轴 $[u v w]$ 可如下求得

$$\begin{cases} u = k_1 l_2 - k_2 l_1 \\ v = l_1 h_2 - l_2 h_1 \\ w = h_1 k_2 - h_2 k_1 \end{cases} \quad (1.5)$$

6. 晶面间距

对于不同的晶面族 $\{hkl\}$ 其晶面间距也不同。总的来说,低指数晶面的面间距较大,高指数晶面的面间距较小,如图 1.13 所示。由晶面指数的定义,可用数学方法求出晶面间距,其计算公式为

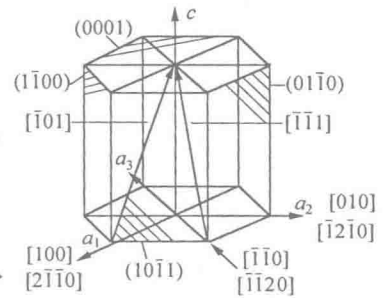


图 1.12 六方系的一些晶面与晶向指数

$$\begin{cases}
 d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}} & \text{正交系} \\
 d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} & \text{立方系} \\
 d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2}\right) + \left(\frac{l}{c}\right)^2}} & \text{六方系}
 \end{cases}
 \quad (1.6)$$

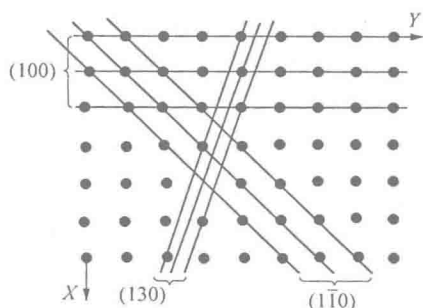


图 1.13 晶面间距

此公式用于复杂点阵(如体心立方,面心立方等)时要考虑晶面层数的增加。例如,体心立方(001)面之间还有一同类的晶面,可称为(002)面,故晶面间距应为简单晶胞 d_{001} 的一半,等于 $\frac{a}{2}$ 。由公式(1.6)也可看出低指数晶面的面间距大。

1.2.4 晶体的极射赤面投影

采用立体图难以做到清晰表达晶体的各种晶向、晶面及它们之间的夹角。通过投影图可将立体图表现于平面上。晶体投影方法很多,广泛应用的是极射赤面投影。

1. 参考球与极射赤面投影

设想将一很小的晶体或晶胞置于一个大圆球的中心,由于晶体很小,可认为各晶面均通过球心,由球心作晶面的法线与球面的交点称为极点,这个球称参考球,如图 1.14 所示。球面投影用点表示相应的晶面,两晶面的夹角可在参考球上量出,如图 1.14, (110) 与 (010) 夹角为 45° 。但使用上仍不方便。可在此基础上再作一次极射赤面投影。

以球的南北极为观测点,赤道面为投影面。连结南极与北半球的极点,连线与投影面的交点即为晶面的投影,如图 1.15 所示。投影面上的边界大圆直径与参考球直径相等,称边界大圆为基圆。位于南半球的极点应与北极连线,所得投影点可另选符号,以便与北半球的投影点相区分。也可选与赤道平行的其他平面作投影面,所得投影图形状不变,只改变其比例。对于立方系,相同指数的晶面和晶向互相垂直,所以立方系标准投影图的极点既代表了晶面又代表了晶向。若将参考球比拟为地球,以地球的两极为投影点,将球面投影投射到赤道平面上,就叫极射赤面投影。

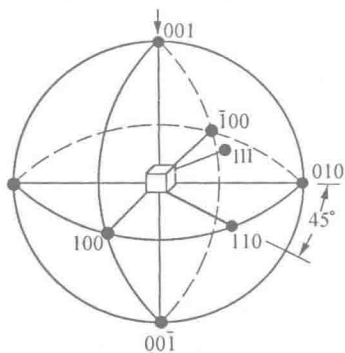


图 1.14 参考球与立方系球面投影

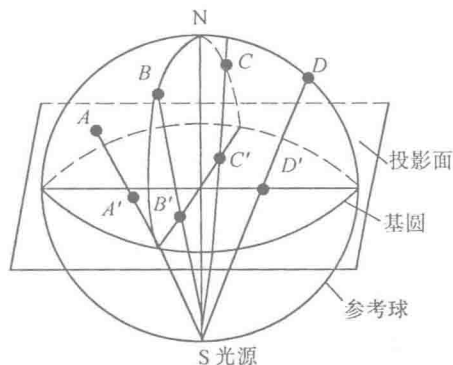


图 1.15 极射赤面投影

