

普通高等院校“十二五”规划教材

工程材料 应用基础

(第2版)

刘云 编著



国防工业出版社

National Defense Industry Press

普通高等院校“十二五”规划教材

工程材料应用基础

(第2版)

刘云 编著

国防工业出版社

·北京·

前 言

《工程材料应用基础》是机械制造类专业学生必修的技术基础教材,在新的课程体系中占有举足轻重的地位。为了适应专业调整与改革及培养跨世纪人才的需要,本教材除要求学生熟悉金属材料外还适当增加了其它常用工程材料知识,供本科生教学使用。

本书由刘云编著,潘保武、杨晶、张星、李传大、马忠平任编委。

本书共分4个部分:金属学理论基础、热处理原理和工艺、金属材料和其它常用工程材料。其中第1章、第2章由潘保武编写;第3章和附录中的实验四、五、六由马忠平编写;第5章、第8章和附录中的实验一、二、三由刘云编写;第6章由张星编写;第4章、第7章由李传大编写;第9章由杨晶编写。本书是在2008年6月第一版的基础上的修订版,在修订编写的过程中,参考了一些同类教材,并将实验内容编入教材中,结合实验训练,使学生巩固和深化课堂上所学知识,使该教材更加系统化。本书编写时力求语言精炼,追求内容的科学性、先进性、系统性和一定的实用性。本书授课学时为40学时~50学时,实验学时为6学时~12学时。

本书承曹士锐教授审阅,并提出宝贵意见,特致感谢。

限于学术水平,书中错误和不妥之处,敬请批评指正。

编 者
2011年3月

目 录

绪论	1
第1章 金属的晶体结构与结晶	2
1.1 金属的晶体结构	2
1.1.1 金属	2
1.1.2 金属的晶体结构	4
1.2 金属的实际结构和晶体缺陷	12
1.2.1 单晶体和多晶体	12
1.2.2 实际金属晶体缺陷	13
1.3 金属的结晶	16
1.3.1 液态金属结构的特点和冷却曲线	16
1.3.2 结晶过程	17
1.3.3 影响晶粒大小的因素	19
1.3.4 金属铸锭的组织 and 缺陷	19
第2章 金属的塑性变形与再结晶	21
2.1 金属的力学性能	21
2.1.1 强度	21
2.1.2 塑性	23
2.1.3 硬度	24
2.1.4 冲击韧性	25
2.1.5 疲劳强度	26
2.1.6 断裂韧性	27
2.2 金属的塑性变形	28
2.2.1 单晶体金属的塑性变形	28
2.2.2 多晶体金属的塑性变形	31
2.2.3 塑性变形对金属组织结构和性能的影响	33
2.3 回复与再结晶	34
2.3.1 变形金属在加热过程中组织和性能的变化	35
2.3.2 金属的再结晶温度	36
2.3.3 再结晶后的晶粒度	37
2.4 金属的热加工	38

2.4.1	热加工与冷加工的区别	38
2.4.2	热加工对金属组织和性能的影响	39
第3章	合金的相结构与二元合金相图	41
3.1	固态合金中的相结构	41
3.1.1	固溶体	41
3.1.2	金属间化合物	45
3.2	二元合金相图的建立	49
3.2.1	相图的意义及其名词的涵义	49
3.2.2	二元合金相图的建立	50
3.3	匀晶相图	52
3.3.1	匀晶相图分析	52
3.3.2	合金的平衡结晶过程	52
3.3.3	二元相图的杠杆定律	52
3.3.4	固溶体合金中的枝晶偏析	53
3.4	二元共晶相图	54
3.4.1	相图分析	54
3.4.2	共晶系合金的平衡结晶及组织	55
3.4.3	伪共晶和密度偏析	58
3.5	二元包晶相图	59
3.5.1	相图分析	59
3.5.2	包晶反应	59
3.6	其它类型的二元系合金相图	60
3.6.1	具有其它恒温转变的相图	60
3.6.2	形成稳定化合物的相图	61
3.7	相图与性能的关系	62
3.7.1	根据相图判断材料的力学性能和物理性能	62
3.7.2	根据相图判断合金的工艺性能	62
第4章	铁碳合金	64
4.1	铁碳合金的组元及其相	64
4.1.1	纯铁及其同素异构体	64
4.1.2	铁素体、奥氏体与渗碳体	65
4.2	Fe-Fe ₃ C 合金相图分析	65
4.3	典型合金的平衡结晶过程及其组织	68
4.3.1	工业纯铁	68
4.3.2	钢	69
4.3.3	白口铸铁	71

4.4	Fe-Fe ₃ C 相图的应用	74
4.4.1	Fe-Fe ₃ C 相图在选材上的应用	75
4.4.2	Fe-Fe ₃ C 相图在制定热加工工艺方面的应用	75
4.5	碳钢	76
4.5.1	常见杂质元素对碳钢性能的影响	76
4.5.2	碳钢的分类	78
4.5.3	碳钢的牌号、性能及用途	78
第5章	钢的热处理	84
5.1	钢在固态下的组织转变	84
5.1.1	碳钢在加热时的组织转变	84
5.1.2	碳钢在冷却时的组织转变	87
5.1.3	过冷奥氏体转变曲线图	91
5.2	钢的退火与正火	94
5.2.1	退火	94
5.2.2	正火	96
5.2.3	退火与正火的选择	97
5.3	钢的淬火	97
5.3.1	淬火的定义及目的	97
5.3.2	钢的淬火工艺	97
5.3.3	淬火缺陷简介	100
5.4	钢的淬透性	100
5.4.1	淬透性的概念及影响因素	100
5.4.2	淬透性的测定方法	101
5.4.3	淬透性在选材和制定热处理工艺时的作用	102
5.5	钢的回火	104
5.5.1	回火及目的	104
5.5.2	钢在回火时的组织转变	104
5.5.3	回火脆性	105
5.6	表面热处理	106
5.6.1	感应加热表面淬火	106
5.6.2	火焰加热表面淬火	107
5.6.3	激光热处理	108
5.6.4	电子束加热表面淬火	108
5.7	钢的化学热处理	108
5.7.1	钢的渗碳	109
5.7.2	钢的氮化	111
5.7.3	钢的碳氮共渗	111

第6章 合金钢	114
6.1 概述	114
6.1.1 合金元素对钢组织转变的影响	114
6.1.2 合金钢的分类及编号	118
6.2 合金结构钢	119
6.2.1 普通低合金结构钢	120
6.2.2 渗碳钢	121
6.2.3 调质钢	124
6.2.4 弹簧钢	126
6.2.5 滚动轴承钢	128
6.3 工具钢	129
6.3.1 刃具钢	129
6.3.2 高速钢	131
6.3.3 模具钢	133
6.3.4 量具钢	138
6.4 特殊性能钢	139
6.4.1 不锈钢	139
6.4.2 耐热钢	142
6.4.3 其它特殊钢	144
6.5 粉末冶金和硬质合金	145
6.5.1 粉末冶金材料	145
6.5.2 硬质合金	146
第7章 铸铁	148
7.1 概述	148
7.1.1 铸铁的成分及性能特点	148
7.1.2 铸铁的石墨化及其影响因素	148
7.1.3 铸铁的分类	150
7.2 灰铸铁	151
7.2.1 普通灰铸铁的化学成分、组织、性能和用途	151
7.2.2 灰铸铁的变质处理——变质铸铁	153
7.2.3 灰铸铁的热处理	153
7.3 可锻铸铁	154
7.3.1 可锻铸铁的成分	155
7.3.2 可锻铸铁的退火与组织	155
7.4 球墨铸铁	156
7.4.1 球墨铸铁的成分、组织、性能及用途	157

7.4.2	球墨铸铁的热处理	158
7.5	特殊性能铸铁	160
7.5.1	耐磨铸铁	160
7.5.2	耐热铸铁	161
7.5.3	耐蚀铸铁	162
第8章	非铁金属材料	163
8.1	铝及铝合金	163
8.1.1	工业纯铝	163
8.1.2	铝合金的分类	163
8.1.3	铝合金的强化	165
8.1.4	铸造铝合金	166
8.1.5	变形铝合金	172
8.2	铜及铜合金	175
8.2.1	纯铜	175
8.2.2	黄铜	176
8.2.3	青铜	182
8.3	轴承合金	189
8.3.1	轴承合金的性能要求	189
8.3.2	常用的轴承合金	190
8.4	钛及钛合金	193
8.4.1	纯钛	193
8.4.2	钛合金化	193
8.4.3	工业用钛合金	194
8.4.4	钛合金的热处理	196
8.5	镁及镁合金	198
8.5.1	镁及镁合金	198
8.5.2	镁的应用	201
8.5.3	镁的精炼与镁锭	201
8.5.4	镁锭的表面处理	205
第9章	其它常用工程材料	209
9.1	高分子材料	209
9.1.1	高分子材料的基本特征	209
9.1.2	高分子材料的结构	212
9.1.3	高分子材料的性能	215
9.1.4	高分子材料的成形加工方法	216
9.1.5	常用高分子工程材料	216

9.2 陶瓷材料	220
9.2.1 陶瓷材料概述	220
9.2.2 陶瓷材料结构特点	220
9.2.3 陶瓷材料的性能特点	222
9.2.4 常用工程结构陶瓷材料	224
9.2.5 陶瓷在工程应用中应注意的问题	228
9.2.6 陶瓷材料与环境协调性	229
9.3 复合材料	230
9.3.1 复合材料的分类	230
9.3.2 复合材料的性能特点	232
9.3.3 复合材料的类型	233
9.3.4 复合材料的应用	235
9.4 纳米材料	237
9.4.1 纳米科学技术发展	237
9.4.2 纳米结构材料的特点	238
9.4.3 纳米材料的应用	239
附录 实验	244
实验一 金相显微镜的基本原理、构造和使用	244
实验二 金相试样的制备	250
实验三 铁碳合金的平衡组织观察	254
实验四 金属材料的硬度实验	261
实验五 碳钢的热处理	268
实验六 碳钢热处理后的显微组织观察	273
参考文献	279

绪 论

材料是工业技术发展的基础,20 世纪以来,各种新型先进材料的开发正在加速,其特点是高性能化、功能化、复合化。传统的金属材料、无机材料、有机材料的界限正在消失,材料科学已成为多学科互相交叉、相互渗透的科学。

机械工程材料按属性可分为 3 类:金属材料、陶瓷材料和高分子材料,也可由此 3 类相互组合成复合材料。其中金属材料是工业中应用最广泛的材料,除此以外,高分子材料、陶瓷材料、复合材料与纳米材料也有了长足的发展,显示出巨大的开发潜力和广阔的应用前景。

金属材料在现代工农业生产中占有极其重要的地位。不仅在机械制造、交通运输、国防与科学技术等各个部门需要使用大量的金属材料,而且人们在日常生活中也离不开金属材料。金属材料的品种繁多,工程上常用的金属材料有钢铁、非铁金属材料、粉末冶金材料等。金属材料的性能与其成分、组织结构以及加工工艺之间有着非常密切的关系。各种材料成分不同,性能各异,而且通过加工,特别是热处理以后性能变化很大。金属材料及热处理是本书的核心内容。其主要目的是使读者获得有关金属学、热处理的基本理论及金属材料的一般知识。了解常用金属材料的成分、内部组织、热处理工艺与性能之间的关系,找出其内在规律,使读者具有合理选用金属材料,正确选定热处理工艺方法,妥善安排工艺路线等方面的初步能力。以便能够通过控制金属材料的成分和冷、热加工工艺过程来控制其组织,提高材料的性能或研制具有特殊性能的新材料。

本书的其它常用的工程材料,主要向读者介绍高分子材料、陶瓷材料、复合材料及纳米材料。目的是使读者对材料学科有全面了解,扩大材料领域的知识,并了解有关材料的发展规律。

高分子材料不仅具有质量小、耐腐蚀和电绝缘等许多优良性能,而且具有可塑性好、易加工成型、原料丰富、价格低廉等特点,可以制成各种颜色和不同形状的产品。近 50 年来,高分子材料发展迅速,其应用已遍及人们的衣、食、住、行、用以及信息、能源、国防和航空、航天等各个领域。高分子材料之所以具有各种良好性能和广泛的应用,是与其独特的内部结构分不开的。因此本书在介绍高分子材料有关基本概念的基础上,让读者进一步了解高分子材料的链结构,以及结构与性能的关系等内容。

陶瓷材料具有熔点高、硬度高、化学稳定性高、耐高温、耐磨损、耐氧化和耐腐蚀、弹性模量大,强度高优良性质。因此,陶瓷材料能够在各种苛刻的环境(如高温、腐蚀、辐射环境)下工作,成为非常有发展前途的工程结构材料。本书介绍了常用陶瓷材料的结构及性能特点,目的是使读者了解陶瓷材料在工业生产中具有广泛的用途。

材料的复合化是材料发展的必然趋势之一。复合材料是由两种或两种以上化学性质或组织结构不同的材料组合而成的新型材料,一般由基本组元与增强体或功能组元所组成。复合材料可经过设计,使各组成部分材料优点互补,因而呈现出优异的综合性能。了解复合材料,能够扩大读者对材料的认识及选择使用材料的范围。

总之,本书的编写除要求读者熟悉金属材料中的金属学理论知识,掌握热处理原理与工艺以及常用的金属材料外,还要求读者了解不断出现的新型材料,以适应高速发展的时代要求。

第 1 章 金属的晶体结构与结晶

1.1 金属的晶体结构

1.1.1 金属

在自然界中迄今已发现 114 种化学元素,其中金属元素约占 4/5。

在固体状态下,金属表现出与非金属不同的物理特性,即金属具有良好的导电性、导热性和可锻性。金属之所以具有这些特性,是与金属原子结构特点和原子之间的结合方式密切联系的。

一、金属原子结构特点

金属与非金属都是由为数众多的原子所组成。每个原子主要由 3 种基本质点所组成:带负电的电子、带正电的质子和中性的中子。质子和中子集中在原子核内,电子按一定规律分布在原子核外的各电子层上,并围绕原子核作高速旋转运动。质子和电子所带的电荷数量相等,性质相反,所以原子呈电中性。一个元素原子具有的质子数就是这个元素的原子序数,也就是这个元素的电子数。各种元素的原子序数不同,表明各种元素的质子数目不等,电子数目也相异。例如,铜原子序数为 29,核外有 29 个电子;氯原子序数为 17,核外有 17 个电子。

金属原子结构不同于非金属之点,只在于金属原子最外层的电子数目很少,一般只有 1 个~2 个,少数的是 3 个~4 个,而非金属原子最外层电子数目都为 5 个~8 个。图 1-1 表示钠和氯原子结构示意图,钠是金属元素,氯是非金属元素。

二、金属原子结合方式

对金属原子来说,最外层电子因与原子核距离较远,受原子核的吸引力较弱,容易脱离最外电子层轨道而在金属内部作自由运动,构成由自由电子组成的“电子云”。原子丢失最外层电子后,电荷失去平衡变成正离子。电子云中的任一电子并不属于某个原子所有,而是为整个金属中的正离子所共有。金属原子就是依靠自由电子与正离子之间的吸引力而结合在一起,金属原子这样的结合方式称为金属键,如图 1-2 所示。

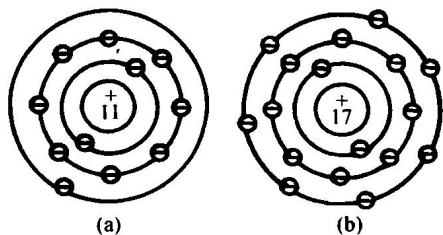


图 1-1 钠原子和氯原子结构示意图
(a) 钠原子; (b) 氯原子。

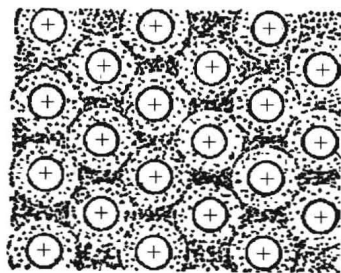


图 1-2 金属键模型

由金属原子的结合方式,能够说明金属的物理特性。例如,导电性是通过电子的定向运动而产生的,只要金属两端存在很小的电位差,就能形成电流;而导热性则是借助于原子振动能的传递产生的,金属的某一部分受热而获得能量,借助于自由电子的运动就能迅速地将能量传到邻近的正离子,以至整个金属块;又如,可锻性是金属在外力作用下,通过物体内部原子层相对移动引起的,在金属中,由于自由电子的运动,使相对移动后的正离子层仍然被自由电子联系在一起,因而金属能锻打成形、轧压成片、拉拔成丝。

三、结合力及结合键

金属和合金大多是规则排列的原子聚合体,因此金属的性质一方面取决于原子的本性,另一方面取决于由结合力、结合键决定的原子聚合的方式。

原子能够结合为晶体的根本原因,是原子结合起来后,体系的能量可以降低,即在分散的原子结合成晶体的过程中,会有一定的能量释放出来。这个能量叫做结合能。

晶体中的原子之间可以相互吸引,也可以相互排斥。吸引作用在远距离时是主要的,而排斥作用在近距离时是主要的。吸引作用的起因是异性电荷之间的库仑引力;排斥作用的起因则是同性电荷间的库仑力和原子核的电子云相互重叠引起的排斥。

设以 f_a 代表引力, f_r 代表斥力, R 代表原子间距离,则

$$f_a = -\frac{a}{R^m}, \quad f_r = \frac{b}{R^n}$$

原子间净作用力应为

$$f = f_a + f_r = -\frac{a}{R^m} + \frac{b}{R^n}$$

式中, a, b, m 及 n 均为常数,且 $m < n$ 。

从式中可以看出当 R 较大时 f_r 很小, $|f_a|$ 较大,故 $f < 0$,即原子间相互吸引。当 R 小到一定程度以后, f_r 很大而 $|f_a|$ 很小, $f > 0$,故原子间相互排斥(图 1-3)。由图可以看出存在某个 $R = R_0$,此时 $f = 0$,即 $f_a = f_r$,原子间作用力达到平衡,晶体中原子间距保持恒定。

显然,把原子从晶体中取走需要作功,其大小等于将 $f-R$ 曲线下由 R_0 积分至 ∞ 处的面积。这时所作的功在数值上就等于晶体中原子间的结合能。结合能 E 随原子间距 R 的变化如图 1-3 下部的曲线所示,从图中可以看出 $R = R_0$ 时, $E = E_{\min}$, $E_{\min}$ 即为晶体中原子的结合能, R_0 就是原子间的平衡距离。以上是用两个原子来进行分析的,显然这些规律可以推广到许多原子结合在一起时的情况。结合方式不同,结合能是不同的。

由于原子结构不同,故当它们相互靠近时产生的吸引排斥作用也不相同,从而形成不同类型化学键。在金属与合金中的结合键主要为金属键,但有时存在共价键或离子键。

1. 金属键

金属中原子大多以金属键相结合。金属原子结构的特点是外层电子较少,当金属原子互相靠近产生相互作用时,各金属原子都易失去最外层电子而成为正离子。这些脱离

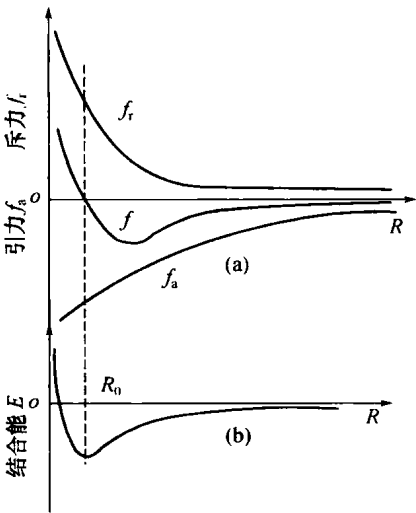


图 1-3 两个原子间的
作用力与结合能

了每个原子的电子为相互结合的原子集体所共有,成为自由的公有化的电子云(或称电子气)而在整个金属中运动。电子云的分布可看作是球形对称的。这些正离子、自由电子之间产生强烈的静电相互作用,使其结合成一个整体。金属键没有饱和性和方向性,故形成的金属晶体结构大多数为具有高对称性的紧密排列。利用金属键可以解释金属的导电性、导热性、金属光泽以及正的电阻温度系数等一系列特性。

2. 共价键

亚金属(例如ⅣA族元素C、Si、Ge以及ⅥA族的Se、Te等)大多以共价键相结合。此类原子一般具有3个以上价电子,当其结合时,相邻原子各给出一个电子作为二者共有,原子间共用电子对所产生的力而结合。为了使原子的外层填满8个电子以满足原子稳定性的要求,电子必须由 $(8 - N)$ 个邻近原子所共有, N 为原子的价电子数,因而共价键结合具有饱和性。金刚石即为共价键结合,碳是ⅣA族元素,故它有 $8 - N = 4$ 个共价键,每个碳原子又有4个最近邻原子。共价键晶体具有高熔点、高硬度。例如,金刚石具有最高的莫氏硬度,且熔点高达 3750°C 。

3. 离子键

离子键结合即由失掉电子的正离子和得到电子的负离子依靠静电引力而结合在一起。例如Na失掉一个电子成为 Na^+ ,Cl得到一个电子成为 Cl^- , Na^+ 和 Cl^- 由于静电引力相互靠拢。当它们接近到一定距离时,二者的电子云之间以及原子核之间将产生排斥力,当斥力和引力达到平衡时,正负离子处于相对稳定位置上,形成NaCl晶体。在离子键组成的化合物 A_xB_y 中,A离子周围最近邻的异号离子数与B离子周围最近邻的异号离子数之比等于 $y : x$ 。例如,在 CaF_2 晶体中,每个钙离子周围有8个氟离子,每个氟离子周围有4个钙离子,其比恰为 $8 : 4 = 2 : 1$ 。离子键是没有方向性的,因离子周围的电子云是以核为中心球对称分布的,它在各个方向上与异性离子的作用力都是相同的。一般离子键结合力也较强,结合能很高,所以离子晶体大多具有高熔点、高硬度、低的热膨胀系数。而且由于不存在自由电子,所以离子晶体是不导电的,但在熔融状态下可以依靠离子的定向运动来导电。

金属与合金中原子主要是靠金属键结合,它对金属材料的结构和性能起决定性作用,其次是共价键和离子键;有时也出现综合的结合键,即几种结合键同时存在。例如在钢中常存在的渗碳体相 Fe_3C ,其中铁原子之间为纯粹的金属键结合,铁原子和碳原子之间可能存在金属键和离子键。结合键的强度常以结合键能来表示,键能是指原子在构成某一结合键时所放出的能量,或破坏某一化学键使之成为中性原子所需要的能量。不同化学键的键能是不相同的。离子晶体、共价晶体的结合能最大约为几百 kJ/mol ;金属元素的结合能以过渡族元素为最大为 $25\text{kJ/mol} \sim 50\text{kJ/mol}$,Cu、Ag、Au为 $17\text{kJ/mol} \sim 20\text{kJ/mol}$,而碱金属为 $5\text{kJ/mol} \sim 10\text{kJ/mol}$ 。

必须指出,金属的上述物理特性只是表现在由大量原子结合在固态的金属块上,而不能由气态、液态中单个的金属原子表现出来。在固体状态下,金属原子如何结合在一起,结合的形式有哪些,这就是我们下面将要讨论的晶体结构的内容。

1.1.2 金属的晶体结构

1. 晶体与非晶体

自然界的固态物质,根据其结构特征,即原子或分子排列特征,可分为晶体和非晶体两大类。晶体是指原子呈规则排列的物体,所有固态金属和合金都属于晶体。反之,原子排列不规则的物体称为非晶体,如玻璃、松香、沥青等。晶体和非晶体具有一些明显不同的特征

和性质。

晶体自由生成时具有规则多面体的对称外形,例如,食盐(NaCl)结晶成立方体形,明矾 $[\text{KAl}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}]$ 结晶成八面体形。晶体在发生液—固态转变时有固定的熔点和凝固点。在一定压力下,给一种晶体加热到一定温度,晶体开始熔化。如果继续加热,晶体继续不断地熔化直至全部为液态。在晶体未全部熔化之前,温度保持恒定不变,如果这时停止加热并保持温度不变,则出现液、固二相平衡,此时熔化速度等于凝固速度,该温度即为熔点或凝固点。晶体具有各向异性,许多性质是随晶体位向而变的,且显示出晶体对称性的影响。非晶体没有一定的几何外形,也没有固定的熔点。例如,将固态玻璃加热时,它会慢慢地变软,逐渐成为具有一定黏性的流体。它是各向同性的。

上述晶体和非晶体的差异起源于它们本质上的区别,即组成它们的粒子(原子、离子、分子、原子集团)在三维空间的分布状态不同。组成晶体的各种粒子在空间呈有规律的周期性重复排列,而非晶体内部的粒子排列则是无规律的,或者说不具备长程有序的排列,这一点和液态金属原子排列状态相同,所以非晶体又称为过冷液体。

晶体和非晶体之间可以相互转化。在一定条件下,晶体中的原子均处于平衡位置上。晶态比非晶态稳定,非晶态处于热力学的亚稳定状态,因此非晶态可自发转变为晶态。例如,光学显微镜的镜头玻璃使用时间久了,受潮后会产生一些擦不掉的霉斑,这些霉斑实际上就是玻璃局部向晶态转化而成的“小雏晶”,这个过程称之为晶化。反之,在一定外界条件下,如果晶态中原子规则排列受到破坏亦可变为非晶态,这个过程称之为玻璃化。

在晶体中,如果某一小区域内原子排列的规律相同、位向一致,则称该小区域为一个晶粒。一块晶体仅由一个晶粒组成为单晶体,而由多个晶粒组成则为多晶体。

2. 晶体结构与空间点阵

我们已经知道,晶体内部的原子(离子、分子)都作规则的排列,但对于不同的物质,原子可以有规则地排列成不同的形式。研究金属的晶体结构就是研究金属晶体中原子是怎样排列的。

如果把理想晶体中的原子抽象成不动的原子,就会得到一个在三维空间中的规则阵列结构。这种阵列结构叫做晶体结构或晶体点阵(图1-4(a)、(b)、(c))。可以进一步把不动的原子抽象成几何点,这样,组成晶体点阵的点就叫做阵点或节点。在自然界中晶体结构,可能存在的种类是无限的,而经过抽象处理的空间点阵是有限的。

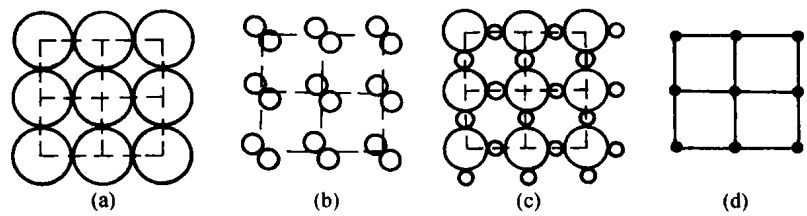


图1-4 几种晶体点阵的平面图和它们空间点阵
(a)、(b)、(c) 晶体点阵平面图; (d) 空间点阵。

图1-4(a)、(b)、(c)显然是3种不同的晶体点阵。如果令晶体点阵中的每个阵点不仅可以代表一个原子,而且可以代表几个原子或分子的中心,如图1-4(a)、(b)、(c)中虚线的交点所示,则图(a)、(b)、(c)这3种不同的晶体点阵都可以抽象成为图1-4(d)所示的点阵。

这种点阵叫作空间点阵。空间点阵是一个由无限多个阵点在三维空间有规律地排列而成的阵列。每个阵点的周围环境完全相同。在表达空间点阵的几何形貌时,为了便于观察,可以用许多相互平行的直线将阵点连接起来,构成一个三维的几何格架,如图 1-5 所示。这种格架叫做空间格子或晶格。

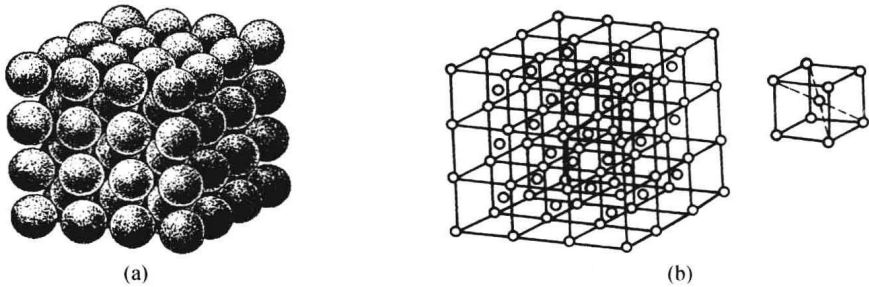


图 1-5 空间点阵和晶格
(a) 原子堆垛模型; (b) 晶格与晶胞。

由此看来,晶体结构和空间点阵是两个完全不同的概念,晶体结构是指具体的物质粒子排列分布,它的种类有无限多;而空间点阵只是一个描述晶体结构规律性的几何图形,它的种类却是有限的。只有空间点阵中的每个阵点只代表一个原子,空间点阵才和晶体结构的形式相同。

3. 晶胞与晶系

空间点阵可以用具有代表性的基本单元(通常是选取一个最小的平行六面体)表示,如图 1-5(b)中用加粗线画出的平行六面体。将这一基本单元在三维空间重复堆砌,即可构成空间点阵。这个基本单元叫做晶胞,它反映了点阵中阵点排列的方式。对于同一个点阵,阵点的连法可以不同(图 1-6),所以选取晶胞的方法不同时,得到的晶胞形状也不同,如图 1-7 所示。为了统一,选取晶胞的原则应遵循:

- (1) 要能充分反映整个空间点阵的对称性。
- (2) 在满足(1)的基础上,单胞要具有尽可能多的直角。
- (3) 在满足(1)、(2)的基础上,所选取单胞的体积要最小。

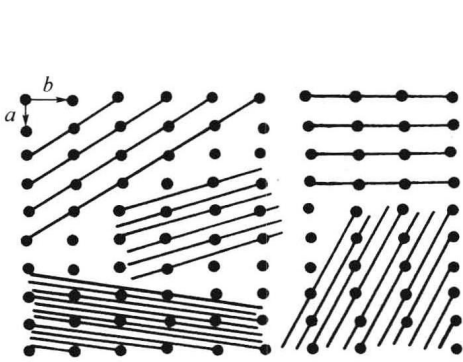


图 1-6 同一点阵中不同的联结方式

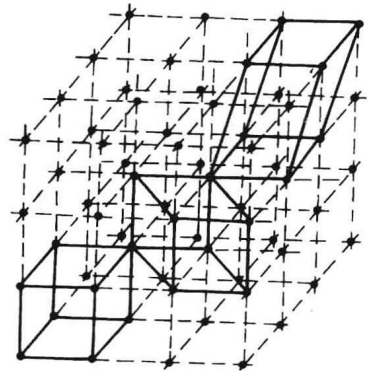


图 1-7 同一点阵中不同晶胞的选取

以晶胞角上某一阵点为原点,以晶胞上过原点的 3 个棱为坐标轴(也叫晶轴)建立坐标系。3 个棱边可作为描述点阵的基本矢量,简称基矢。3 个基矢的长度 a 、 b 、 c 和 3 个基矢间的

夹角 α, β, γ 是描述这个点阵的基本参数,统称为点阵常数(图 1-8)。各种晶体结构的特征用晶胞参数来表示。

在晶体学中常常根据晶胞中 3 个基矢的长度 a, b, c 及它们之间的夹角 α, β, γ 将晶体进行分类。在分类时只考虑 a, b, c 是否相等; α, β, γ 是否相等,它们是否为直角,而不涉及晶胞内原子的具体排列。这样所有晶体只能分成 7 种类型,或者叫 7 个晶系,如表 1-1 所列。

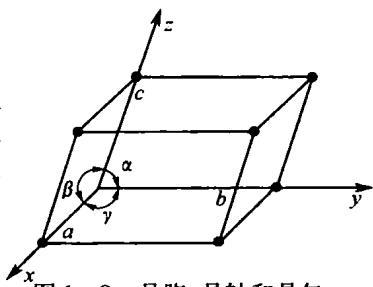


图 1-8 晶胞、晶轴和晶矢

表 1-1 7 个晶系

晶系	棱边长度和夹角的关系		实 例
三斜	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$\text{Al}_{11}\text{Mn}_4, \text{AuIn}$
单斜	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	$\text{FeZn}_{13}, \gamma\text{-ZrO}_2, \text{Al}_4\text{Li}_9$
正交	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\beta\text{-As}, \text{Fe}_3\text{C}, \text{FeB}, \text{Al}_6\text{Mn}$
六方	$a_1 = a_2 = a_3 \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$\text{Mg}, \text{Ti}, \text{Zn}, \text{Co}$
菱方	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$\alpha\text{-B}, \text{Bi}, \text{Hg}, \text{Sb}$
四方	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\text{In}, \beta\text{-Sn}, \text{Al}_2\text{Cu}, \text{Fe}_2\text{B}$
立方	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\text{Fe}, \text{Cu}, \text{Al}, \text{Ni}$

4. 布拉非(Bravais)点阵

空间点阵具有周期性的,可以把一个空间点阵进行平移。所谓平移就是将物体进行一种直线的位移,使其移动到与原来环境完全相同的位置上去的一种操作。如平移矢量为

$$\mathbf{r} = l_1 \mathbf{a} + l_2 \mathbf{b} + l_3 \mathbf{c}$$

式中: $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ 为 3 个方向的基矢; l_1, l_2, l_3 均为任意整数,则平移后的点阵将与原来的点阵完全一致。

点阵的这种特性叫做点阵的平移对称性。在 7 个晶系的基础上,即根据 7 个晶系中晶胞基矢的特性,通过平移对称操作,就可以得到不同的空间点阵。

根据晶胞的 6 个晶格常数间的相互关系对所有的晶体进行分析,布拉非于 1848 年证明了空间点阵可分为 14 种,所有的晶体结构都可以化为这 14 种空间点阵中之一。因此,将这 14 种空间点阵又称为布拉非点阵(图 1-9,表 1-2)。

表 1-2 14 种布拉非点阵

布拉非点阵	晶系	布拉非点阵	晶系
简单三斜	三斜	简单六方	六方
简单单斜	单斜	简单菱方	菱方
底心单斜		简单四方 体心四方	四方
简单正交 底心正交 体心正交 面心正交	正交	简单立方 体心立方 面心立方	立方

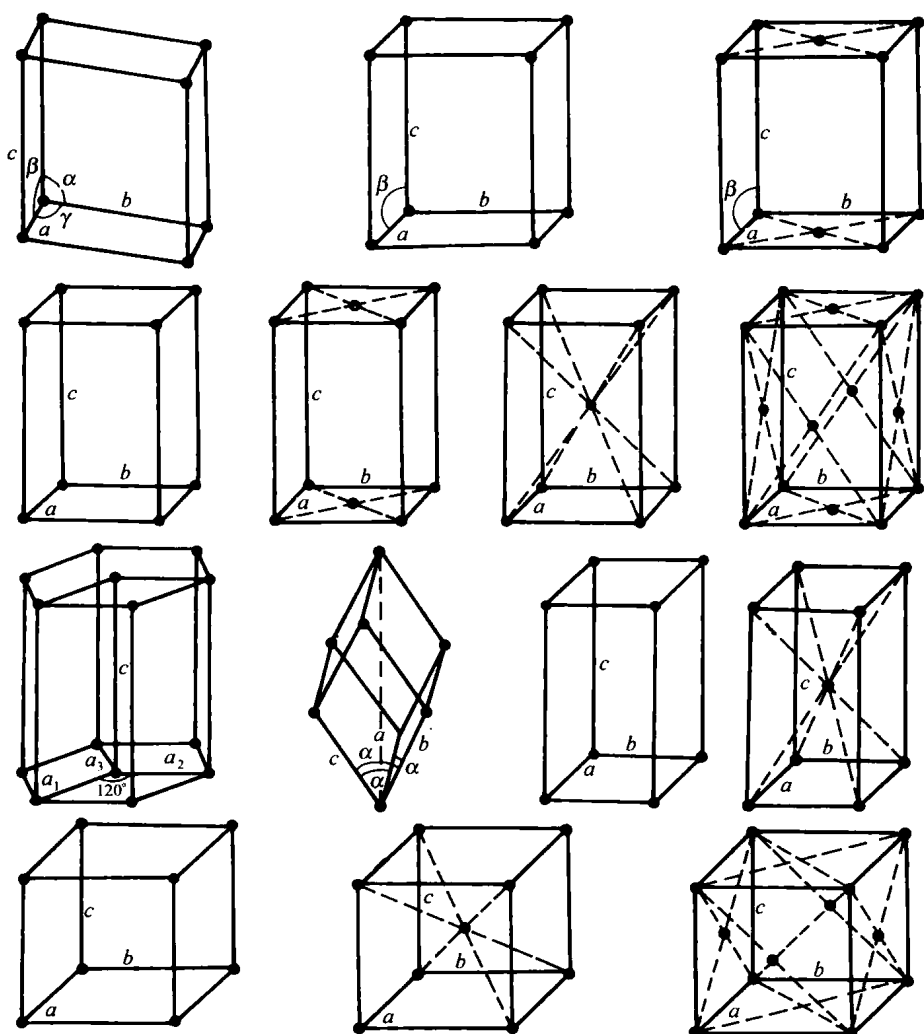


图 1-9 14 种布拉菲点阵的晶胞

5. 晶面指数和晶向指数

在晶体中,由一系列原子所组成的平面称为晶面,任意两个原子之间的连线所指的方向称为晶向。为了便于研究和区分不同晶面和晶向,需要有一个统一的表示方法。这种统一的标志叫作晶向指数和晶面指数;国际上通用的是密勒(Miller)指数。

1) 晶向指数

晶向指数是按以下几个步骤确定的:

(1) 以晶胞的某一阵点为原点,3 个基矢为坐标轴,并以点阵基矢的长度作为 3 个坐标的单位矢度。

(2) 过原点作一直线 OP ,使其平行于待标志的晶向 AB (图 1-10),这一直线必定会通过某些阵点。

(3) 在直线 OP 上选取距原点 O 最近的一个阵点 P ,确定 P 点的坐标值。