

高等学校教材

# 金属学原理

胡德林 主编



西北工业大学出版社

高等学校教材

# 金属学原理

胡德林 主编

西北工业大学出版社

## 内 容 简 介

本书内容主要划为两条线：一条线为“金属及合金的结晶与相图”，包括纯金属及合金的结晶、二元相图、三元相图、铁碳相图及固态金属中的扩散等；另一条线为“金属及合金的晶体结构与形变”，包括金属及合金相的晶体结构、晶体缺陷、金属的塑性变形及断裂、回复与再结晶等。本书主要特点是注意处理好内容更新与教学要求等的关系，便于组织教学与学生自学。

本书可作为高等院校机械类热加工专业，包括铸造、焊接、锻造、腐蚀防护及热处理等学生的教材或参考书，亦可供从事热加工专业工程技术人员参考。

主审稿人：饶启昌 刘禹门 柴惠芬

责任编辑：王振兴

高等(学)校教材

金属学原理

胡德林 主编

※

西北工业大学出版社出版

(西安市友谊西路127号)

陕西省新华书店发行

西北工业大学出版社印刷厂印刷

※

开本 787×1092毫米 1/16 印张 18·375 461千字

1984年7月第一版 1987年5月第二次印刷

印数 2501—9000册

ISBN 7-5612-0007-2/TG·2 定价：3.05元

统一书号：15433·049

## 前 言

本教材是根据编者几年讲授金属学原理课程的基础上，并吸收兄弟院校的教学经验，按照1983年新订教学大纲的要求编写的。

金属学原理教材概括地叙述合金的成分、结构及性能之间的变化规律，它既不象金属物理课程那样理论性很强，又不象金属的工艺课程那样很强的实践性。人们运用金属学的基本理论去指导金属材料的生产及科研，解决其使用中的故障，并充分发挥金属材料的潜力和创制新材料。

近廿年来，由于现代科学技术的迅猛发展，对金属材料提出更高、更新的要求；学科之间的互相渗透，基础理论日益深化，以及各种近代测试手段的应用，金属内部的结构被揭示得更加精密细微。因此，本教材首先注意到内容的更新。同时，作为一本学生所喜欢的教科书，编者还尽量做到符合教学规律。并吸收近几年已经出版的几本同类教材的优点，处理好更新内容与基本要求、教学系统与学科系统、物理概念与数学推导、和有关课程衔接与分工的关系。另外，在精选内容，加强基础，联系实际及便于学生自学等方面都有所发展。

本教材的内容主要划分为两条线：一条为“金属及合金的结晶与相图”，包括纯金属及合金的各种转变、二元合金相图、三元合金相图、铁碳合金相图及固态金属中的扩散等章；另一条为“金属及合金的晶体结构与形变”，包括金属的晶体结构及合金相结构、晶体缺陷、金属的塑性变形及断裂、回复与再结晶等章。这两条线可以独立成系统，但是它们又能相互为基础，因此在教学中最好相互穿插安排，以期取得较好的教学效果。

本教材各章后备有大量复习思考题，一部分是让学生加强对基本理论和基础知识的理解；另一部分是让学生联系实际深入学习，培养独立分析能力。此外，还备有一定量的习题，让学生进行系统地总结与提高。各章后的附录属于数学公式的推导及更新幅度较大的内容，可供学生参考或因材施教。

本教材可作为高等院校机械制造类热加工各专业，包括锻造、铸造、焊接、腐蚀防护及热处理等学生的教材及参考书，也可供有关科技人员自学及参考。

本教材由西北工业大学胡德林主编，兼写第二、三、四、五、六章，田长生编写第七、八章；北京航空学院邢淑仪编写第一章。南昌航空学院谭达吾、彭良清同志参加全部定稿工作。邀请了西安交通大学饶启昌、刘禹门和柴惠芬等同志对全书进行审阅。此外，西北工业大学和北京航空学院有关同志参加描图及缮写工作，对他们的辛勤劳动，在此一并致谢。

由于编者水平有限，错误难免，望读者提出宝贵意见。

# 目 录

<b>第一章 金属及合金的晶体结构</b> .....	1
§ 1-1 金属的晶体结构 .....	1
§ 1-2 实际金属的晶体结构 .....	21
§ 1-3 合金的相结构 .....	37
附录 1-1 晶体中空位浓度的计算.....	50
附录 1-2 实际晶体中的位错.....	52
复习思考与习题.....	55
<b>第二章 金属的结晶</b> .....	58
§ 2-1 金属结晶的基本规律 .....	58
§ 2-2 金属结晶的基本条件 .....	60
§ 2-3 晶核的形成 .....	62
§ 2-4 晶体的长大 .....	71
§ 2-5 结晶理论的应用举例 .....	76
复习思考题与习题.....	78
<b>第三章 二元合金的结晶及相图</b> .....	80
§ 3-1 概述 .....	80
§ 3-2 匀晶相图及固溶体的结晶 .....	83
§ 3-3 共晶相图及共晶转变 .....	102
§ 3-4 包晶相图及包晶转变 .....	112
§ 3-5 其它类型的二元相图 .....	117
§ 3-6 二元相图的应用 .....	124
§ 3-7 合金铸锭(件)的结晶 .....	129
附录 3-1 液相中溶质完全混合时, 固溶体溶质浓度分布方程的推导.....	134
附录 3-2 固溶体凝固时平衡分配系数 $k_0$ 和有效分配系数 $k_e$ 的关系 .....	134
附录 3-3 成分过冷临界条件方程式的推导.....	135
附录 3-4 共晶体中组成相的相对体积百分量与共晶形态的关系.....	136
复习思考题与习题.....	136
<b>第四章 铁碳相图及铁碳合金的结晶</b> .....	139
§ 4-1 铁碳相图中的相 .....	139
§ 4-2 Fe—Fe <sub>3</sub> C 相图 .....	144
§ 4-3 铁碳合金的平衡结晶 .....	147

§ 4-4 铁碳合金的平衡组织和机械性能 .....	153
§ 4-5 Fe—C (石墨) 稳定系相图及石墨化 .....	155
复习思考题与习题 .....	160
<b>第五章 三元合金相图及结晶</b> .....	<b>162</b>
§ 5-1 三元合金相图的几何原理 .....	162
§ 5-2 三元匀晶相图 .....	166
§ 5-3 三元共晶相图 .....	172
§ 5-4 其它三元合金相图 .....	183
§ 5-5 从液相面投影图判断相平衡 .....	188
§ 5-6 实用三元合金相图举例 .....	189
附录 5-1 铝—铜—镁三元相图 .....	195
附录 5-2 铁—碳—铬三元相图垂直截面 .....	198
附录 5-3 铁—碳—硅三元相图垂直截面 .....	201
复习思考题与习题 .....	202
<b>第六章 固态金属中的扩散</b> .....	<b>204</b>
§ 6-1 扩散的宏观规律及其应用 .....	204
§ 6-2 扩散的微观规律及其应用 .....	209
§ 6-3 上坡扩散与反应扩散 .....	217
附录 6-1 扩散第二方程解的推导方法 .....	220
复习思考题与习题 .....	221
<b>第七章 金属的塑性变形及断裂</b> .....	<b>224</b>
§ 7-1 金属的变形特性 .....	224
§ 7-2 单晶体的塑性变形 .....	225
§ 7-3 多晶体的塑性变形 .....	243
§ 7-4 合金的塑性变形 .....	245
§ 7-5 塑性变形对合金组织和性能的影响 .....	250
§ 7-6 金属的断裂 .....	254
复习思考题与习题 .....	261
<b>第八章 回复与再结晶</b> .....	<b>263</b>
§ 8-1 变形金属与合金在加热时的变化 .....	263
§ 8-2 回复 .....	264
§ 8-3 再结晶 .....	266
§ 8-4 再结晶后的晶粒长大 .....	273
§ 8-5 再结晶退火后的组织 .....	280
§ 8-6 金属与合金的热加工 .....	282
复习思考题与习题 .....	287
主要参考文献 .....	289

# 第一章 金属及合金的晶体结构

金属及合金在固态下通常都是晶体。晶体就是原子按照一定的几何方式在空间作周期性的重复排列，它们的许多特性都与这种结晶状态有关。要了解金属及合金内部的微观构造，就必须掌握其内部的结晶构造，其中包括晶体中原子是如何相互作用并结合起来的，原子的排列方式和分布规律，各种晶体的特点及差异，以及不同元素组成合金相时所发生的变化等。因此，研究金属及合金的晶体结构就成为研究金属材料和使用金属材料一个极为重要的方面。在学习金属学时，首先应掌握这方面的基础知识，同时这些知识也是学习专业课程不可缺少的重要基础。

## § 1—1 金属的晶体结构

### 一、金属原子间的结合

金属的晶体结构主要取决于金属原子的电子结构及原子间的结合力与结合能。

#### (一) 金属原子的结构特点

从化学中已经知道，孤立的单个自由原子是由带正电的原子核与带负电的核外电子组成的。每个电子都在原子核外的一定“轨道”上高速运动着，形成一层层的电子层。原子的尺寸很小，是  $10^{-8}$  cm 数量级，而原子核与电子的尺寸更小，约为  $10^{-12}$  cm 的数量级。

金属原子结构的特点在于其最外层的电子数很少，只有一、二个，一般不超过四个。金属原子中核与外层电子的结合力很弱，它很容易丢失其外层电子而成为正离子。

在周期表中，还有一些所谓的过渡族金属元素，如钛、钒、铬、锰、铁、钴、镍等。过渡族金属元素的原子结构，除了具有上述特点之外，还有一个特点，就是在次外层尚未填满电子的情况下，最外层就先填充了电子。因此，过渡族金属的原子不仅容易丢失最外层电子，而且还容易丢失次外层的一、二个电子，这就出现了过渡族金属的化合价是可变的现象。当过渡金属原子互相结合时，不仅最外层电子参与结合，而且次外层电子也参与结合。因此，过渡族金属的原子间结合力特别强，宏观上就表现为过渡族金属的熔点高，强度高。过渡族金属在金属材料中占有极为重要的地位。

#### (二) 金属键

金属处于气态时，原子之间距离较远，只是偶而发生碰撞，彼此之间并不存在着结合键。当金属原子互相靠近达到一定程度而成为液态金属或固态金属时，原子之间就形成了结合键，使原子紧凑而规则地排列在一起。金属原子间的结合键称为金属键。

金属原子结构的特点，在金属原子相互紧密的规则排列时也表现出来了。由于原子的相互作用，金属原子的外层价电子便从各个原子中脱离出来，为整个金属所共有，这些共有的电子不再属于哪一个原子所有，它们可以在整个金属内运动形成所谓“电子气”。金属正离

子与自由电子之间产生的静电吸引力使金属原子结合在一起，形成了金属晶体。这就是金属键的本质。

图 1-1 示意地给出金属键的模型。在实际的固态金属中，并不是所有的金属原子都变成正离子，而只是绝大部分处于正离子状态，还有小部分处于中性原子状态，并且金属原子的这种状态也是在不断地变化着。

根据金属键的本质，可以解释固态金属的一些特性。例如，在外加电场作用下，金属中的自由电子能够沿着电场方向作定向运动，形成电流，从而显示出良好的导电性。自由电子的运动和原子（正离子）本身的振动使金属具有较好的导热性。随着温度的升高，原子（或正离子）本身振动的振幅加大，可阻碍电子的通过，使电阻升高，因而金属具有正的电阻温度系数。由于自由电子很容易吸收可见光的能量使金属具有不透明性，而吸收了能量从而被激发的电子回到基态时产生辐射，使金属具有光泽。

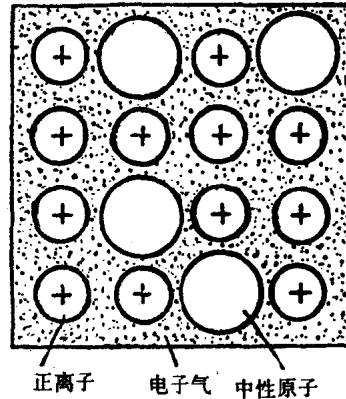


图 1-1 金属键的模型

在固态金属中，电子气好象是一种流动的万能胶，把所有的正离子都结合在一起。所以金属键并不挑选结合对象，也没有方向性，所以当一块金属的两部分发生相对位移时，金属正离子始终包围在电子气中，因而仍保持着金属键的结合。这样，金属就能经受变形而不断裂，使其具有延展性。

以上是利用经典的自由电子理论，粗略地解释金属的一些特性。实际上，金属中的自由电子并非完全自由，根据量子力学的观点，在金属中运动的自由电子可以看成是电子波（即德布罗意物质波），它们在金属内周期性电场作用下，电子所具有的能量是不连续的，是依能带而分布的。

### （三）金属的结合能

如上所述，在固态金属中，原子依靠金属键牢固地结合在一起。如果用外力把这些原子互相拉开，拆散成单个原子所消耗的能量就相当于金属的结合能。

由于固态金属是很多原子的集合体，因此研究其性能就必须考虑众多原子间的相互作用，这是十分困难的。对于塑性变形和热处理方面的许多问题，通常只是近似的考虑。在固态金属中每个原子周围都有几个最近邻的原子，我们只要知道最近邻原子间的相互作用，就可大体上了解整个金属中原子间的作用情况。

两个原子间的化学亲和力，从物理本质上说，是由于在这两个原子之间存在着吸引力，然而，即使在化学亲和力很强的情况下，原子也难以挤压得过于接近，这是由于当原子相距很近时，它们之间有排斥力，这种排斥力是物质不可入性的基础。吸引力来源于金属正离子与周围电子气之间的静电引力，而排斥力来源于正离子与正离子之间和电子与电子之间的静电斥力。排斥力是一种短程力，即在远距离处它的数值很小，但在近距离处它比吸引力大。吸引力正好与排斥力相反，所以它是长程力。原子间的结合力就是由吸引力和排斥力合成的。同样，原子间的结合能也是由吸引能和排斥能合成的。



图 1-2 表示出 A 原子对 B 原子的作用力和作用能随原子间距  $D$  的变化。由图可见，当原子间距较大时，吸引力大于排斥力，原子互相吸引，自动靠近，同时伴随着作用能的降低。原子靠近到一定距离后，排斥力急剧增长，其增长速度大于吸引力的增长速度。当原子过分接近时，排斥力大于吸引力，原子便相互排斥，自动离开，同时伴随着作用能的降低。当原子间距为  $D_0$  时，吸引力和排斥力恰好相等，此时两原子间的距离  $D_0$  为平衡距离，即两个原子既不会自动靠拢，也不会自动离开，这时，原子处于作用能曲线的低谷，势能最低，最稳定。在固态金属中，绝大部分原子都处于这种势能最低的平衡位置，吸引力和排斥力保持平衡。如果原子偏离平衡位置，不论向哪个方向偏离，立刻会受到一个力的作用，促使它回到平衡位置。实际上，原子的热运动永远不会停止，原子不会静止在平衡位置上，而是围绕平衡位置不断地进行着热振动。

如果在外力作用下，使 B 原子逐渐远离平衡位置，则 A、B 原子间的相互吸引力逐渐增大，同时，相互作用能也升高，B 原子处于作用能曲线的“半坡”位置，愈来愈不稳定。当 B 原子被拉到  $D_c$  位置时，吸引力达到最大值，这一点对应着作用能曲线的拐点。拉过  $D_c$  点后，吸引力越来越小，故拉开 B 原子所需的力就越来越小，直至为零。可见，原子间的最大结合力不是出现在平衡位置，而是在  $D_c$  位置上，这个最大结合力就对应着金属的理论抗拉强度，它比实际抗拉强度要大千倍以上。

图 1-3 是三个原子之间相互作用的模型，分别给出 A 原子和 C 原子对 B 原子的作用能曲线  $U_A$  和  $U_C$ ，以及由它们合成的总作用能曲线  $U_{A+C}$ 。由图可见，由于两侧原子的共同作

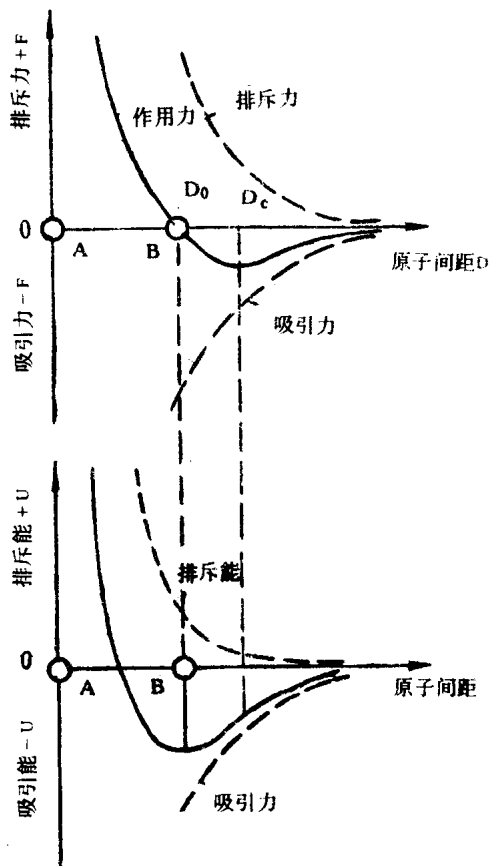


图 1-2 双原子作用模型

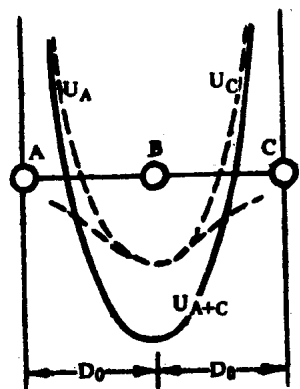


图 1-3 三原子作用模型

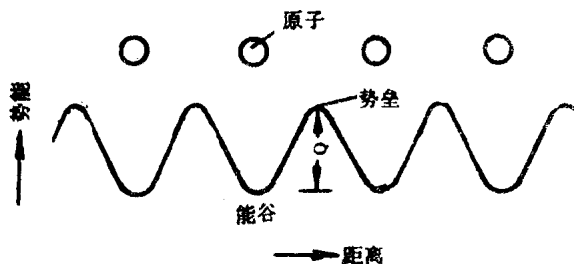


图 1-4 固态金属中的周期势场

用,使B原子处于一个对称的势能谷中,而且能谷更深了。能谷的深浅反映出原子结合的强弱。能谷愈深,结合能越大,原子结合越牢固。显然这些规律可以推广到许多原子结合在一起的情况。

在金属晶体中,每个原子的四面八方都被相邻原子包围着,因此,每个原子都处于周围原子共同形成的势能谷中。相邻势能谷之间都被一个能量升高的“势垒”隔开。原子结合得越强,则能谷越深,势垒越高。在固态金属中,无论向哪个方向看,原子结合能都是一峰一谷地周期变化着,被称为周期势场,如图1-4所示。正是这种周期势场使金属原子按周期规律排列起来。

## 二、晶体学的基础知识

### (一)晶体的特点

晶体与非晶体的主要区别在于内部原子排列不同。在晶体中,原子(或分子)在三维空间按一定规律排列得很整齐。而在非晶体中,原子则是紊乱地分布着,至多有些局部地方呈现规则排列。像食盐,冬天下的雪花、水凝结成的冰块,以及金属和合金等都是晶体,而玻璃、松香之类是非晶体。应当指出,目前有一些特殊成分的合金,由液态激冷也可制成非晶体。

由于晶体与非晶体中原子排列不同,因此性能也不同。晶体具有一定的熔点,非晶体则没有。在熔点以上,晶体变成液体,处于非结晶状态;在熔点以下,液体又变成晶体,处于结晶状态。熔点就是物质的结晶状态与非结晶状态互相转变的临界温度。固态非晶体则是液体在冷却时没有来得及变成晶体就凝固了,所以它实质上是一种过冷的液体结构。

晶体的性能在不同方向上具有不同的数值,即具有各向异性。表1-1列举了几种金属沿其不同方向测得的机械性能,而非晶体则是各向同性的。另外,许多晶体的天然外形呈现出规则的几何外形,保持一定的晶面角,具有一定的对称性,例如天然金刚石、结晶盐、水晶等,而非金属则没有这些特点。

表 1-1 单晶体的各向异性

别 类	弹性模量 (MN/m <sup>2</sup> )		抗拉强度 (MN/m <sup>2</sup> )		延伸率 (%)	
	最大	最小	最大	最小	最大	最小
Cu	191000	66700	346	128	55	10
$\alpha$ -Fe	293000	125000	225	158	80	20
Mg	50600	42900	840	294	220	20

实际使用的金属和合金都是多晶体,也就是由无数小“单晶体”(通常称为晶粒)所组成。图1-5为工业纯铁的显微组织,它是由许多等轴状的晶粒所组成。利用 $x$ 射线结构分析研究发现,在金属多晶体中,每个晶粒内部的原子排列都是大体上整齐一致的。但是,不同晶粒中原子排列的位向并不相同。因此,在晶粒交界处两边原子的排列不能恰好衔接一起,因而出现一个原子排列不规则的过渡区,这就是晶粒界面,称为晶界。由于晶界的存在,破坏了整块晶体的完整性,使原子的规则排列只存在于每个晶粒内部,如图1-6所示。

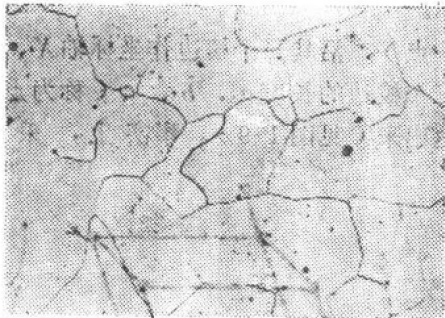


图 1-5 纯铁的组织

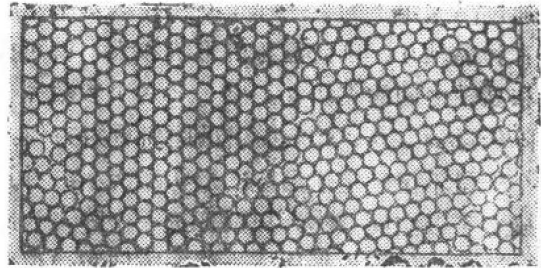


图 1-6 多晶体中原子排列示意图

## (二)空间点阵和晶胞

为了便于研究晶体中原子的排列情况，可以把它们抽象为规则排列于空间的无数个几何点。这些点可以是原子的中心，也可以是彼此等同的原子群的中心，但是各个点子的周围环境都必须相同。为使观察方便，可作许多平行的直线将这些点子连接起来，构成一个三维的几何格架，如图 1-7 所示。该空间格架称为空间点阵，简称点阵或晶格。点阵中的点子称为阵点或结点。显然，在某一空间点阵中，各阵点在空间的位置是一定的，而通过阵点所作的空间格架则会因直线的接向不同可有多种形式。因此必须强调，阵点是构成空间点阵的基本要素。

为了便于研究点阵排列的规律和特点，可以在点阵中取出一个具有代表性的基本单元。通常是取一个最小的平行六面体作为点阵的组成单元，称为单位点阵或晶胞。在图 1-7 的左下方以粗黑线标出的平行六面体就是这个点阵的晶胞。可见，将晶胞作三维的重复堆砌就构成了空间点阵。因此，可以说晶胞就是构成点阵的细胞。利用晶胞来反映晶体原子（或分子）排列的规律性，就更为简单明瞭。

同一空间点阵可因选取方式不同而得到不同形状的晶胞，图 1-8 表示出在一个二维点阵中可以取出的不同晶胞。那么应该如何正确地选取晶胞呢？为了研究方便，规定在选择晶胞时应满足下列条件：

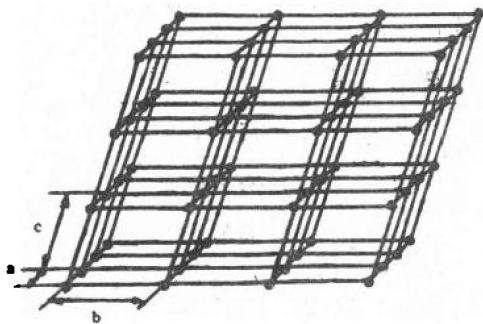


图 1-7 空间点阵

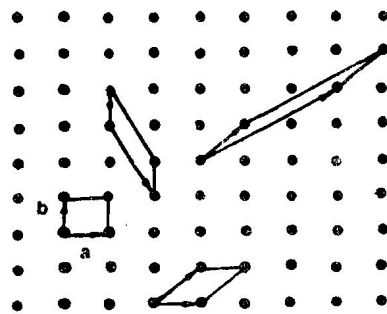


图 1-8 在点阵中选取晶胞

1. 晶胞的几何形状应与宏观晶体具有同样的对称性。
2. 平行六面体内相等的棱和角的数目应最多。
3. 当平行六面体的棱间呈直角时，直角的数目应最多。

4. 在满足上述条件下，晶胞应具有最小的体积。

通过晶胞角上的某一阵点（往往取左下角后面一点），沿其三个棱边作坐标轴X、Y、Z（称为晶轴），则此晶胞的形状和大小就可由其三个棱边的长度 $a$ 、 $b$ 、 $c$ （称为点阵常数）和晶轴之间的夹角 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 六个参数完全表达出来（见图1-9）。事实上，采用三个点阵矢量 $a$ 、 $b$ 、 $c$ 来描述晶胞将更为方便。

这三个矢量不仅确定了晶胞的形状和大小，并且完全确定了该空间点阵。只要任选一个阵点为原点，以这三个矢量作平移，平移的方向和单位距离由点阵矢量来定，这样就可以确定空间点阵中任何一个阵点的位置：

$$Y_{uvw} = ua + vb + wc。$$

式中： $Y_{uvw}$ 为从原点到某一阵点的矢量， $u$ 、 $v$ 、 $w$ 分别表示沿三个点阵矢量的平移量，也就是该阵点的坐标。

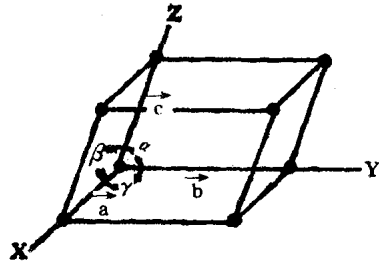


图 1-9 晶胞、晶轴和点阵矢量

### (三)晶系和布拉菲点阵

布拉菲 (Bravais) 于 1848 年根据“每个阵点周围具有相同的环境”的要求，用数学的方法推出空间点阵共有十四种，而且也只能有十四种。这十四种空间点阵的晶胞，如图 1-10 中所示。在晶体学中，根据晶胞棱边长度之间的关系和晶轴之间的夹角情况，又可以把这十四种空间点阵归纳为七个晶系。但应指出，在这里只是考虑 $a$ 、 $b$ 、 $c$ 是否相等， $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 是否相等，以及它们是否呈直角等因素，而不涉及晶胞中原子的具体排列情况。这七个晶系是：

1. 三斜晶系	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
2. 单斜晶系	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
3. 正交晶系	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
4. 六方晶系	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
5. 菱方晶系	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
6. 正方晶系	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
7. 立方晶系	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

表 1-2 列出 14 种空间点阵归属于七个晶系的情况。

表 1-2 空间点阵与晶系

晶系	空间点阵	分图号	晶系	空间点阵	分图号
三斜	简单三斜	1	六方	简单六方	8
	简单单斜	2		正方	简单正方
单斜	底心单斜	3	菱方		体心正方
	正交	简单正交		4	立方
底心正交		5	简单立方	12	
体心正交		6	体心立方	13	
面心正交		7	面心立方	14	

在这里应强调指出，虽然晶体只有 14 种空间点阵，但是点阵上的每一个阵点（或结点）可以由一个或一个以上的质点（原子、离子或分子）所组成，而这些质点的组合和排列又可以采取各种不同的形式。因此，每种空间点阵都可以形成无限多的晶体点阵（晶体结构）。

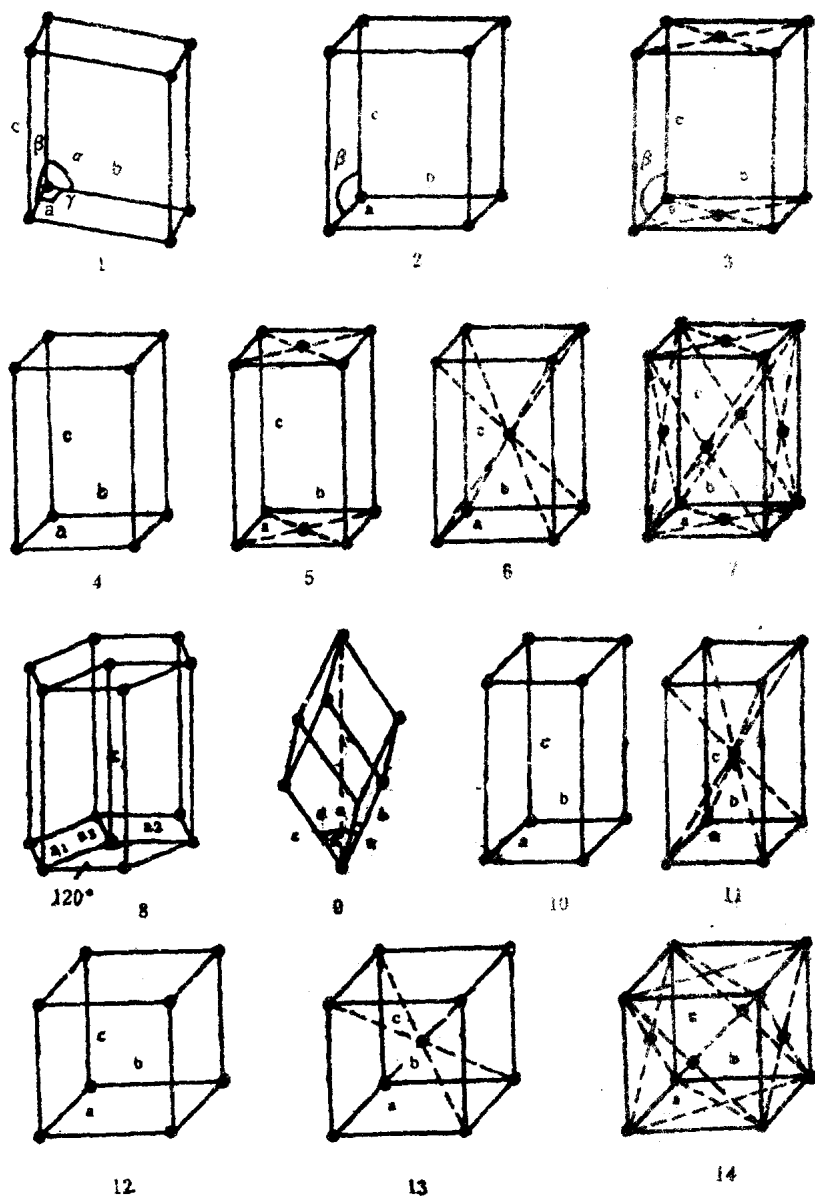


图 1-10 14种空间点阵的晶胞

例如，图 1-11 中的 (a)、(b)、(c) 为三种不同的晶体结构（由于对称关系，这里只用平面图形表示），但却都属于同一种空间点阵 (d)，即简单立方点阵。

往往在晶体结构中，有时看起来是很相似的，但却不属于同一空间点阵，如图 1-12 所示；相反，有时看起来是极不相同的晶体结构，却是属于同一空间点阵，如图 1-13 所示。金属晶体点阵的结点上，一般都是只存在单个原子，其结点间的距离通常为零点几个纳

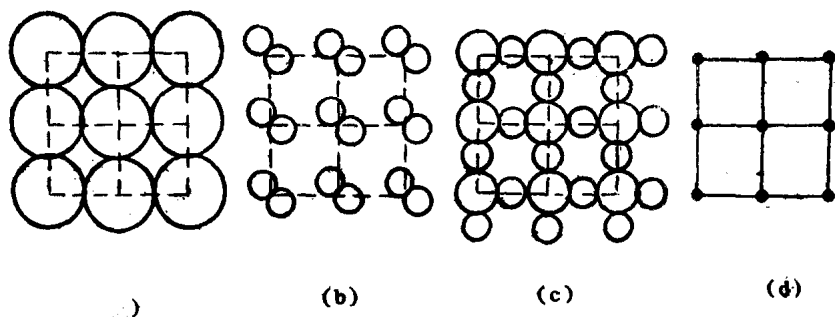


图 1-11 晶体点阵与空间点阵

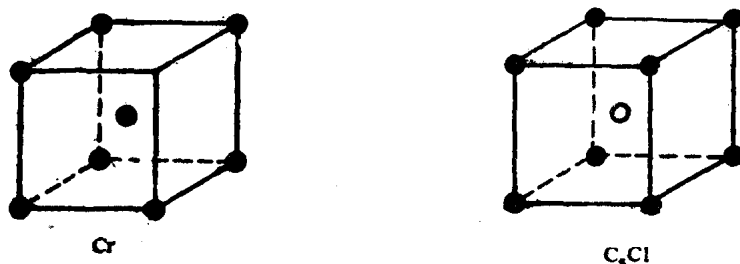


图 1-12 晶体结构相似而点阵不同

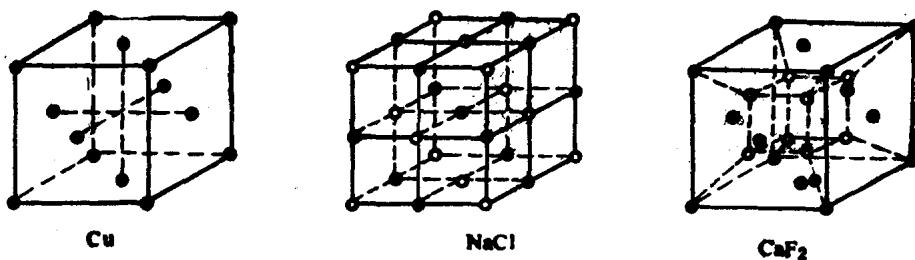


图 1-13 具有相同空间点阵的晶体结构

米 (nm) ( $1\text{nm} = 10^{-7}\text{cm}$ )。

晶体结构晶胞的取法与空间点阵相同。

#### (四) 晶向指数和晶面指数

在以后的章节中，如金属的结晶、塑性变形、固态下的相变等，都会涉及到晶体中的某些方向和原子所构成的某些平面。为了确定晶向和晶面在晶体中的位向，分别采用了晶向指数和晶面指数来描述。

##### 1. 晶向指数

在晶体结构中，任何一条穿过结点的直线方向都称为晶向。

前已指出，任何结点的位置可由矢量  $r_{uvw}$  或该结点的坐标  $u$ 、 $v$ 、 $w$  来确定。同样，晶向  $op$  亦可沿  $a$ 、 $b$ 、 $c$  分解成三个分矢量（见图 1-14），即

$$op = ua + vb + wc。$$

不同的晶向只是  $u$ 、 $v$ 、 $w$  的数值不同，故可用  $[uvw]$  来表示晶向指数。确定晶向指数的具体步骤是：

(a) 以晶胞的晶轴为坐标轴  $X$ 、 $Y$ 、 $Z$ ，以点阵矢量的长度（即晶胞的棱边长度）作为坐标轴的长度单位，并将坐标轴的原点放置在欲确定的晶向直线上。

(b) 从坐标原点  $O$  沿所指晶向的直线上，取最近一个结点的坐标  $u$ 、 $v$ 、 $w$ 。例如  $P$  点的坐标可写为 2、1、2。

(c) 将此数化为最小整数并加以方括号，即为晶向指数  $[uvw]$ 。例如  $op$  方向的晶向指数为  $[212]$ 。如果  $u$ 、 $v$ 、 $w$  有负值，就将负号记在其上方，如  $[\bar{1}00]$ 、 $[1\bar{1}0]$ 、 $[\bar{2}\bar{1}\bar{2}]$  等。

显然，晶向指数表示着所有相互平行、方向一致的晶向。如果所指的方向相反，则晶向指数相同，而符号相反。例如  $[123]$  方向与  $[\bar{1}\bar{2}\bar{3}]$  方向是互相平行，而方向相反的。

现以立方晶系为例来具体加以说明。图 1-15 中标出了立方晶系中一些重要的晶向及其晶向指数。例如  $X$  轴方向，其晶向指数由  $A$  点的坐标来确定， $A$  点的坐标为 1、0、0，故

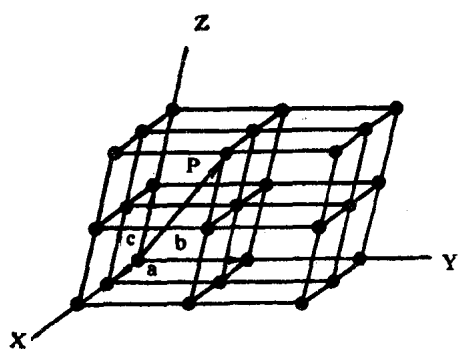


图 1-14 晶向的表示法

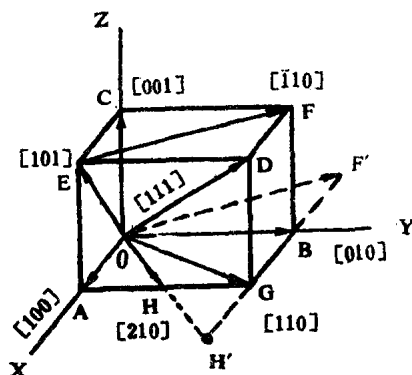


图 1-15 立方晶系一些晶向及其指数

沿  $X$  轴的晶向指数为  $[100]$ 。同理，沿  $Y$  轴及  $Z$  轴的晶向指数分别为  $[010]$  和  $[001]$ 。 $D$  点的坐标为 1、1、1，故  $oD$  方向的晶向指数为  $[111]$ 。 $oH$  方向的晶向指数可根据  $H'$  点的坐标求得，为  $[210]$ 。若欲求  $EF$  方向的晶向指数，应将  $EF$  平行移动，使  $E$  点与原点  $O$  重合，这时  $F$  点则移至  $F'$ ， $F'$  点的坐标为 -1、1、0，故  $oF'$  的晶向指数为  $[\bar{1}10]$ 。既然  $EF$  和  $oF'$  相平行，所以  $EF$  的晶向指数亦为  $[\bar{1}10]$ 。如果我们不去平移  $EF$ ，而是将坐标平移，使坐标原点与  $E$  点重合，也得到完全相同的结果。

由于对称的关系，有些晶向是处于同等的地位，因而归属于一个晶向族，用  $\langle uvw \rangle$  表示。例如，立方晶系的  $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$  和  $[\bar{1}00]$ 、 $[0\bar{1}0]$ 、 $[00\bar{1}]$  等六个晶向，它们的原子排列情况是完全相同的，故属同一晶向族，以  $\langle 100 \rangle$  表示。又如空间对角线共有 4 个，代表 8 个晶向，它们的晶向指数是： $[111]$ 、 $[1\bar{1}\bar{1}]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 、 $[\bar{1}1\bar{1}]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 、 $[\bar{1}11]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}1]$  和  $[1\bar{1}\bar{1}]$ 。这 8 个晶向上的原子排列情况也完全相同，故属于同一晶向族  $\langle 111 \rangle$ 。如果不是立方晶系，改变晶向指数的顺序所表示的晶向，则不一定是属同一晶向族。例如，对于正交晶系的  $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$  这三个

晶向，我们就不能说它们是属 $\langle 100 \rangle$ 晶向族，这是因为以上三个方向的原子间距分别为  $a$ 、 $b$ 、 $c$ ，且  $a$ 、 $b$ 、 $c$  不相等，所以原子排列情况完全不同。

确定晶向指数的方法，可适用于任何晶系。但对六方晶系，常采用另一种表示方法，后面将再介绍。

## 2. 晶面指数

在晶体结构中，由结点组成的任一平面都代表晶体的原子平面，叫做晶面。因而需用晶面指数来分别表示这些晶面。晶面指数，通常采用 Miller 指数法，即晶面指数是根据晶面与三个坐标轴的截距值来决定的。具体的确定晶面指数的方法是：

(a) 对晶胞作晶轴  $X$ 、 $Y$ 、 $Z$ ，以晶胞的边长作为晶轴上的单位长度。应当注意：坐标原点应取在欲确定的晶面之外，以避免出现零截距。

(b) 求出晶面与  $X$ 、 $Y$ 、 $Z$  三个轴的截距，假定其数值分别为  $m$ 、 $n$ 、 $p$ 。

(c) 取上述截距的倒数，即  $\frac{1}{m}$ 、 $\frac{1}{n}$ 、 $\frac{1}{p}$ ，并将三个倒数比化为简单整数比，即：

$$\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} = \frac{h}{E} : \frac{k}{E} : \frac{l}{E} = h : k : l$$

其中  $E$  为  $m$ 、 $n$ 、 $p$  三数的最小公倍数， $h$ 、 $k$ 、 $l$  均为简单的整数，也就是所要求的晶面指数。

(d) 将所得指数放在圆括号内，即  $(hkl)$ 。若某一指数为负值，则将负号写在该指数的上方，如  $(\bar{h}kl)$ 、 $(h\bar{k}l)$ 。

下面举例加以说明：

图 1-16 中所标出的晶面  $a_1b_1c_1d_1$ ，在  $X$ 、 $Y$ 、 $Z$  晶轴上的相应截距为  $1$ 、 $\infty$ 、 $\infty$ ，其倒数为  $1$ 、 $0$ 、 $0$ ，所以晶面  $a_1b_1c_1d_1$  的晶面指数为  $(100)$ ；又如晶面  $a_2b_2c_2$ ，相应的截距为  $\frac{1}{2}$ 、 $\frac{1}{3}$ 、 $\frac{2}{3}$ ，其倒数为  $2$ 、 $3$ 、 $\frac{3}{2}$ ，化为简单整数为  $4$ 、 $6$ 、 $3$ ，所以晶面  $a_2b_2c_2$  的晶面指数为  $(463)$ 。

所有相互平行的晶面在三个晶轴上的截距虽然是不同的，但它们是成比例的，其倒数也仍然成比例，经简化可以得到相同的最小整数。因此，所有相互平行的晶面，其晶面指数相同，或者至多相差一负号。可见，晶面指数所代表的不仅是某一晶面，而是代表着一组互相平行的晶面。

在晶体中，凡是具有相同的原子排列方式而只是空间位向不同的各组晶面，可归并为一个晶面族，用  $\{hkl\}$  来表示。例如，在立方晶系中：

$\{100\}$  包括  $(100)$ 、 $(010)$ 、 $(001)$ 。

$\{110\}$  包括  $(110)$ 、 $(101)$ 、 $(011)$ 、 $(\bar{1}10)$ 、 $(\bar{1}01)$ 、 $(0\bar{1}1)$ 。

$\{111\}$  包括  $(111)$ 、 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ 、 $(1\bar{1}\bar{1})$ 、 $(\bar{1}1\bar{1})$ 。

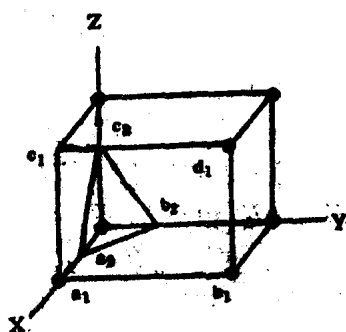


图 1-16 晶面指数的表示方法



如图 1-17 所示。

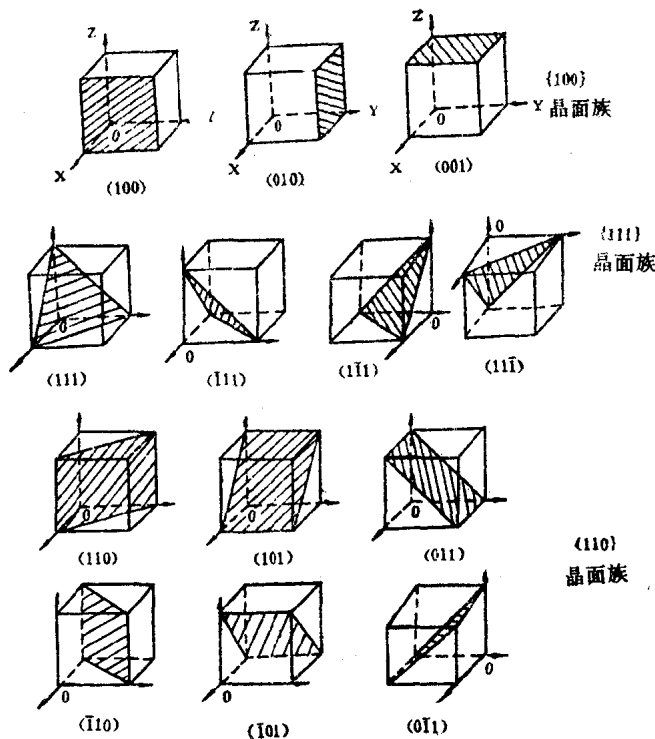


图 1-17  $\{100\}$ 、 $\{110\}$ 、 $\{111\}$  晶面族

对于非立方晶系，由于对称性改变，晶面族所包括的晶面数目就不一样。例如，正交晶系的  $(100)$ 、 $(010)$  和  $(001)$  晶面，就不是等同晶面，所以不能以  $\{100\}$  晶面族来表示。

另外，在立方晶系中，具有相同指数的晶向和晶面必定是相互垂直的，即  $[h k l] \perp (h k l)$ 。例如， $[100] \perp (100)$ ， $[111] \perp (111)$ ， $[123] \perp (123)$ 。但是，此关系不适用于其它晶系。

### 3. 六方晶系指数

对于六方晶系，晶面指数和晶向指数的确定方法也可以采用三晶轴坐标系。这时取  $a_1$ 、 $a_2$ 、 $c$  为晶轴， $a_1$  轴和  $a_2$  轴之间的夹角为  $120^\circ$ ， $c$  轴与  $a_1$ 、 $a_2$  轴相垂直，如图 1-18 所示。确定晶面指数和晶向指数的方法仍按前所述。只是由于这种表示方式，同类型的晶面（或晶向），其晶面指数（或晶向指数）不能类同，往往看不出它们之间的等同关系。例如，晶胞的六个柱面是等同的晶面，其指数分别为  $(100)$ 、 $(010)$ 、 $(\bar{1}10)$ 、 $(\bar{1}00)$ 、 $(0\bar{1}0)$ 、 $(1\bar{1}0)$ 。而  $[100]$  和  $[110]$  晶向实际上是等同的方向。为了克服这个缺

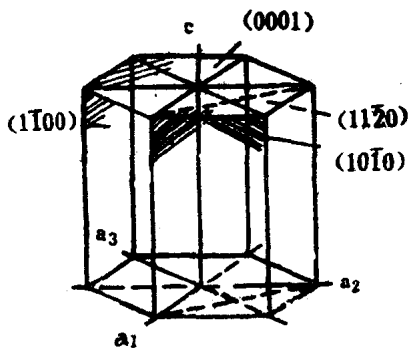


图 1-18 六方晶系的一些晶面指数