

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

金属学原理

西
北

11
6-2

社

16.4
456-2

454635

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

1995年6月 西安

(陕)新登字 009 号

【内容简介】 本书概括地叙述合金的成分、结构及性能之间的变化规律,比较系统地介绍了金属与合金的晶体结构、纯金属的结晶、二元合金相图、三元合金相图、铁碳相图、固态金属中的扩散、金属的塑性变形、回复与再结晶及固态金属中的相变等。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金属材料及热处理专业学生的教材,亦可供热加工专业学生及从事金属材料及热处理、热加工专业工程技术人员参考。

DIV40/24



© 1995 西北工业大学出版社出版
(710072 西安市友谊西路 127 号 电话 4253 407)
陕西省新华书店发行
西北工业大学出版社印刷厂印装
ISBN 7-5612-0742-5/TG·28 (课)

开本: 787×1092 毫米 1/16 印张: 20 字数: 484 千字
1995 年 6 月第 1 版 1995 年 6 月第 1 次印刷
印数: 1—4 000 册 定价: 16.00 元

购买本社出版的图书,如有缺页、错页的,本社发行部负责调换。

前 言

本书是根据原航空航天工业部 1993 年—1995 年高校教材规划,以及在编者经过 10 年使用的讲义基础上编写的。

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,它既不像金属物理课程那样理论性很强,又不像金属工艺课程那样实践性很强。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,解决其使用中的问题,并充分发挥金属材料的潜力和创制新材料。

近 20 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,并注意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、固态金属中的扩散及固态相变等章;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、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。

本教材可作为高等院校机械制造类金属材料及热处理专业的教材,亦可供锻造、铸造、焊接及腐蚀防护等专业的参考书,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教授主编并编写第三、四、五章,田长生教授编写第七章,张帆副教授编写第一章,刘智恩副教授编写第二章、孟亮副教授编写第六、八章,南昌航空学院区桂叶副教授编写第九章,全书由西安交通大学刘禹门教授审阅。此外,西北工业大学杨慧芳、陈彦、单玲等同志参加绘图及编写工作,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。

编 者

1995 年 1 月

目 录

第一章 金属及合金的晶体结构	1
§ 1—1 金属概述.....	1
§ 1—2 晶体学基础.....	5
§ 1—3 金属的晶体结构.....	14
§ 1—4 合金的相结构.....	23
§ 1—5 晶体结构中的缺陷.....	44
附 录 汤普森四面体及记号.....	74
复习思考题.....	75
习题.....	76
第二章 纯金属的结晶	78
§ 2—1 金属结晶的基本规律.....	78
§ 2—2 金属结晶的基本条件.....	80
§ 2—3 晶核的形成.....	82
§ 2—4 晶体的长大.....	90
§ 2—5 结晶理论的应用举例.....	96
复习思考题.....	99
习题.....	100
第三章 二元合金的结晶及相图	101
§ 3—1 相、相图及其制作.....	101
§ 3—2 匀晶相图及固溶体的结晶.....	104
§ 3—3 共晶相图及共晶转变.....	119
§ 3—4 包晶相图及包晶转变.....	129
§ 3—5 其他类型的二元相图.....	134
§ 3—6 二元相图的应用.....	140
§ 3—7 相图的热力学解释.....	142
§ 3—8 合金铸锭(件)的结晶.....	145
复习思考题.....	149
习题.....	151
第四章 铁碳相图及铁碳合金的结晶	152
§ 4—1 铁碳相图中的相.....	152

§ 4—2	Fe-Fe ₃ C 相图	156
§ 4—3	铁碳合金的平衡结晶	160
§ 4—4	铁碳合金的平衡组织及力学性能	166
§ 4—5	Fe-C(石墨) 稳定系相图及石墨化	168
	复习思考题	172
	习题	173
第五章	三元合金相图及结晶	174
§ 5—1	三元合金相图的几何原理	174
§ 5—2	三元匀晶相图	178
§ 5—3	三元共晶相图	182
§ 5—4	其他三元合金相图	193
§ 5—5	从液相面投影图判断相平衡	196
§ 5—6	实用三元合金相图举例	198
	复习思考题与习题	208
第六章	固态金属中的扩散	210
§ 6—1	扩散定律及其应用	210
§ 6—2	扩散的微观机理	216
§ 6—3	扩散激活能及扩散系数	218
§ 6—4	扩散热力学及反应扩散	221
	复习思考题	226
	习题	227
第七章	金属的塑性变形	228
§ 7—1	单晶体的塑性变形	228
§ 7—2	晶体滑移的位错机制	238
§ 7—3	多晶体的塑性变形	248
§ 7—4	合金的塑性变形	250
§ 7—5	塑性变形对合金组织和性能的影响	256
§ 7—6	超塑性	260
	复习思考题	263
	习题	263
第八章	回复与再结晶	264
§ 8—1	冷变形金属在退火时的一般变化	264
§ 8—2	回复	266
§ 8—3	再结晶	269
§ 8—4	再结晶后的晶粒长大	276

§ 8—5 再结晶退火及其组织控制.....	284
§ 8—6 金属的热加工.....	288
复习思考题.....	291
习题.....	292
第九章 固态金属中的相变.....	293
§ 9—1 总论.....	293
§ 9—2 固态相变热力学.....	295
§ 9—3 固态相变的形核.....	297
§ 9—4 固态相变的晶核长大.....	299
§ 9—5 固态相变动力学.....	302
§ 9—6 脱溶转变.....	303
复习思考题.....	308
习题.....	309
参考文献.....	310

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。晶体是原子按照一定的几何方式在空间作周期性重复排列的固体，它们的许多特性均与这种排列状态有关。欲了解金属及合金的性能，就必须掌握其内部晶体结构特点，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实为金属材料研究的一个极为重要的方面。在学习本课程时首先应掌握这方面的基础知识，同时这些知识也是学习后续专业课程必不可少的重要基础。

§ 1-1 金属概述

一、元素的金属性与非金属性

在自然界中，目前已发现的化学元素不到 110 种，它们的化学性能取决于其原子核外电子层结构，且与最外层电子（价电子）数目及分布状态有关。随原子序数的增加，由于电子分布的能级变化规律存在相似性和周期性，所以元素的性质也呈周期性变化。

在表 1-1 所列的化学元素周期表中，已用深折线将金属元素与非金属元素划分开，深折线附近的元素具有二重性，称为亚（类）金属，如碳、硼、锡、锗等。由表可见，金属元素达到 77 种，约占已知化学元素的 7/10。

金属元素的共同特点是原子结构中最外层电子数较少，极易失去电子而形成正离子状态；非金属原子则最外层电子数较多，易于取得电子而形成负离子。故金属为正电性原子，非金属为负电性原子。

化学元素中最典型的金属只有一个价电子，如碱金属和铜、银、金等。但是，在现代常用金属材料中，过渡族金属更具有广泛的应用意义。该类元素的原子结构由于受其内层电子屏蔽效应的作用， ns 层电子能量低于 $(n-1)d$ 层，从而使 d 层电子数处于 1~10 之间未填满的状态，导致了过渡族金属原子价的可变性，并在与其它原子相互作用时，可表现出某些独特的性质。此外，在原子序数较大的过渡族金属中，还出现一类镧系稀土族金属元素，其原子结构在 $6s$ 电子层首先填满的情况下，才开始填充 $4f$ 层。该类元素作为辅助元素在改善常用金属材料性能方面显示出良好的效果。我国是稀土金属矿藏最丰富的国家，稀土元素的良好作用已受到广泛的重视。

金属在参与各类化学反应过程中所表现的行为属于单原子特性，而工程技术上所应用的实际金属材料皆由为数众多的原子所组成。金属学在研究金属的各种行为时，除首先考虑单个金属原子结构特点之外，更重要的是探讨由此决定的原子间相互作用，结合方式及原子集成体的特性。

表 1-1 原子的电子结构与元素周期表

周期	组态	金属																		非金属					惰性气体	
		过渡族元素																		IIA	IIIA	IVA	VA	VIA		
1	1s	1																	2						He s ²	
2	2s 2p	3	4																	5	6	7	8	9	10	Ne p ⁶
3	3s 3p	11	12																	13	14	15	16	17	18	Ar p ⁶
4	4s 3d 4p	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	Kr p ⁶						
5	5s 4d 5p	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	Xe p ⁶						
6	6s 4f 5d 6p	55	56	57~71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	Rn p ⁶						
7	7s 5f 6d	87	88	89-103																						

f 区	s 区		d 区										ds 区		p 区				
	57~71	s ² df	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71		
镧系元素			La d ¹	Ce f ²	Pr f ²	Nd f ⁴	Pm f ⁶	Sm f ⁶	Eu f ⁷	Gd d ¹ f ⁷	Tb f ⁹	Dy f ¹⁰	Ho f ¹¹	Er f ¹²	Tu f ¹³	Yb f ¹⁴	Lu d ¹ f ¹⁴		
锕系元素			Ac d ¹	Th d ²	Pa d ¹ f ²	U d ¹ f ³	Np f ⁶	Pu f ⁶	Am f ⁷	Cm d ¹ f ⁷	Bk f ⁹	Cf f ¹⁰	Es f ¹¹	Fm f ¹²	Md f ¹³	No f ¹⁴	Lr d ¹ f ¹⁴		

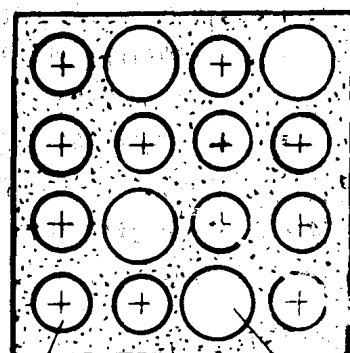
二、金属原子间的结合

(一) 金属键

金属处于气态时，各原子间距离较远，只是偶尔发生碰撞，彼此间并不存在结合键，当金属原子相互靠近到一定程度而成为液体特别是固体状态时，原子间就会发生强烈的相互作用，形成结合键，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。

金属键的基本特点是“电子共有化”。当金属原子结合成晶体时，每个原子的价电子不再被束缚在各个原子上，而是形成“自由电子”，在整个晶体内运动，所有的自由电子即形成所谓的“电子云”，失去了价电子的金属正离子与组成电子云的自由电子之间产生的静电引力，使金属原子结合在一起形成了金属晶体。图 1-1 示意地给出了金属键的模型。在实际的固态金属中，并非所有的金属原子都变成正离子，还有小部分处于中性原子状态，并且金属原子这种中性状态也是在不断地变化着的。

由金属键的本质，可以解释固态金属的许多特性。例如，金属在很小的外电场作用下，自由电子即可沿着电场方向流动，形成电流，所以金属具有良好的导电性；金属正离子的振动与自由电子的运动都可以传递热能，故金属也具有有良好的导热性；随着温度的升高，金属正离子振动的振幅增大，阻碍自由电子通过，使电阻升高，故金属具有正的电阻温度系数；自由电子很容易吸收可见光的能量，使金属具有不透明性，而吸收了能量从被激发态回到基态时所产生的辐射，使金属具有光泽；在固态金属中，电子云好像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，也无方向性。当一块金属的两部分发生相对位移时，金属正离子始终“浸泡”在电子云中，因而仍保持着金属键结合。这样金属便能经受较大的变形而不断裂，显示出良好的塑性。



正离子 电子气 中性原子

图 1-1 金属键的模型

应该指出，以上只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（德布罗易物质波），在金属内周期性电场作用下，它们所具有的能量是不连续而依能带分布的。

(二) 结合能

原子能够结合为晶体的根本原因，在于原子结合起来后，体系的能量可以降低，即当分散的原子结合成晶体时会有一定的能量 (E) 释放出来，这部分能量称作结合能。

固态金属是很多原子的集合体，在研究其性能时就必须考虑众多原子间的相互作用，这是十分困难的，因此通常只作近似的分析。晶体中每个原子周围都有几个最近邻的原子，我们只要了解最近邻原子间的相互作用，便可大致了解整个金属中原子间的作用情况。

为简便起见，我们首先分析两个原子间的相互作用情况（即双原子作用模型）。晶体中的原子之间存在两种相互矛盾的作用：吸引和排斥。吸引作用的本质来源于异性电荷间的库仑引力；排斥作用则产生于同性电荷间的库仑斥力以及正离子周围电子云相互重叠引起的排斥力。究竟哪种作用占主导地位取决于原子之间的距离。一般地，吸引作用在远距离是主要的，而排斥作用则主要体现在近距离上。

设以 f_a 代表引力， f_r 代表斥力， R 代表原子间的距离，则：

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

原子间的静作用力为

$$f = f_a + f_r = -\frac{a}{R^m} + \frac{b}{R^n} \quad (1-1)$$

式中， a 、 b 、 m 、 n 均为常数，且 $m < n$ 。由 (1-1) 式可以看出：当 R 较大时， $|f_a| > f_r$ ，故 $f < 0$ ，原子间相互吸引；当 R 小到一定程度后， $f_r > |f_a|$ ， $f > 0$ ，原子间相互排斥；当 $R = R_0$ 时， $f_r = |f_a|$ ，即 $f = 0$ ，原子间作用力达到平衡（见图 1-2）。

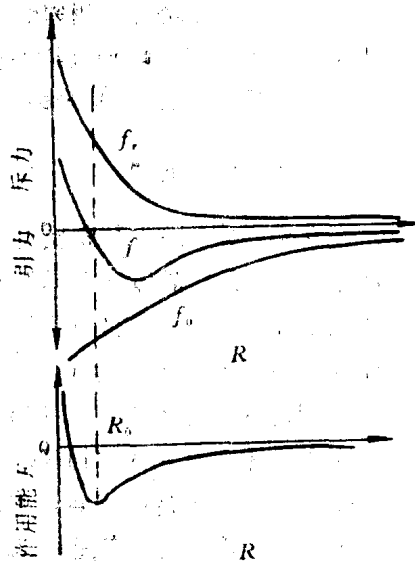


图 1-2 两个原子间的作用力与位能

显然，要把原子完全分开需做功，其大小等于将 $f-r$ 曲线中 R 积分至 ∞ 远处，这时所作的功便是原子在平衡位置上的位能，它在数值上等于晶体中原子间的结合能。当原子间距离为平衡距离 R_0 时，原子处于作用能（位能）曲线的低谷，最稳定。固态金属中的绝大部分原子都处于这种位能最低的平衡位置。如果原子偏离该平衡位置，不论向哪个方向偏离，立刻会受到一个反向力的作用，促使其返回平衡位置。

图 1-3 为三原子间相互作用模型示意图，分别给出了 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 U_{A+C} 。由图可见，由于两侧原子的共同作用，使 B 原子处于一个对称的位能谷中，而且能谷更深了。能谷的深浅反映出原子间结合的强弱，能谷愈深，结合能愈大，原子结合愈牢固。这一规律也可推广到许多原子结合在一起时的情况。

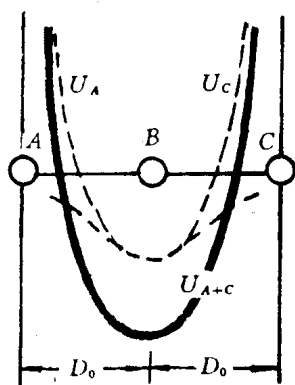


图 1-3 三原子作用模型

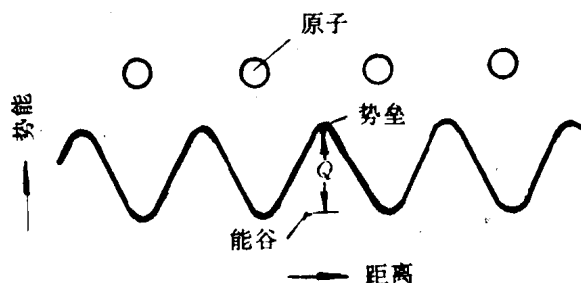


图 1-4 固态金属的周期势场

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，相邻势能谷被一个能量升高的“势垒”隔开，无论向哪个方向看，原子结合能都是一谷一峰地周期性变化着，被称为周期性势场，如图 1-4 所示。正是这种周期性势场使金属原子按周期规律排列起来，构成晶体结构。

三、金属的晶体性

在自然界中，除少数物质（如普通玻璃、松香、赛璐珞等）外，包括金属在内的绝大多数固体都是晶体。天然晶体一般具有规则的几何外形，例如食盐（ NaCl ）结晶成立方体形；明矾结晶成八面体形。然而金属制品不具有规则的几何外形，可见晶体与非晶体的区别不在外形，主要在于内部原子排列情况。在晶体中原子按一定规律作周期性排列；而所有的非晶体，内部原子则是散乱分布着，至多有些局部的短程规则排列。

由于晶体与非晶体中原子排列不同，因此性能有很大差异，主要表现在：

① 晶体具有一定的熔点，非晶体则没有。在熔点以上晶态固体变成非晶态的液体，在熔点以下，液体又变成晶态固体。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。对应于一定的晶体，熔点是一个恒定值。固态非晶体是液体在冷却时没有来得及变成晶体就凝固了，所以实质上是一种过冷的液体结构。

② 晶体的某些物理性能和力学性能在不同的方向上具有不同的数值，呈现出各向异性。而非晶体则是各向同性的。表 1-2 列出了几种金属沿其不同方向测得的力学性能。

表 1-2 单晶体的各向异性

别 类	弹性模量 (MN/m ²)		抗拉强度 (MN/m ²)		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
Mg	50 600	42 900	840	294	220	20

通常，工程上实际应用的金属材料都是“多晶体”，也就是由无数个小“单晶体”（常称为晶粒）所组成。图 1-5 为工业纯铁的显微组织，它是由许多等轴状晶粒所组成。利用 X 射线结构分析发现，其每个晶粒内部的原子排列大体上整齐一致，但不同晶粒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在一起，出现一个原子排列不规则区域，这就是晶粒间界，简称为晶界。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局限于每个晶粒内部，如图 1-6 所示。

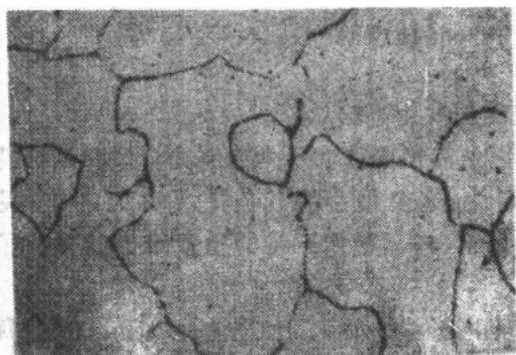


图 1-5 纯铁光学显微组织 400×

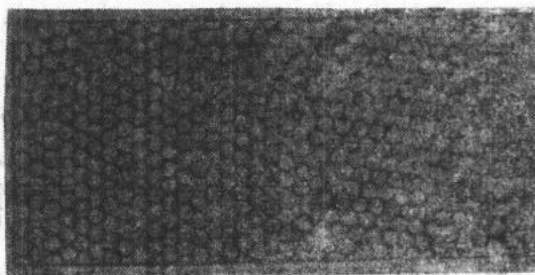


图 1-6 多晶体中原子排列示意图

§ 1-2 晶体学基础

一、晶体的定性描述

(一) 晶体结构与空间点阵

晶体物质的基本特征是物质质点在空间排列的规则性。这些质点既可以是组成物质的同类或异类单原子（离子、分子），也可以是等同的原子集团。由这些实际原子排列成的规则集体称为晶体结构，有时也称为晶体点阵。

实际晶体中每个原子都在围绕着它的平衡位置不停地振动着，且这种振动随温度的升高而加剧。此外，晶体中还存在局部破坏原子排列完整性的各种缺陷。为了方便，这里先把晶体看成是由不动的原子所组成，而且是不含各种缺陷的理想晶体。假定理想晶体中的原子都是静止不动的刚球，那么晶体即由这些刚球堆垛而成，图 1-7(a) 即为这种刚球堆垛模型。该种模型的优点是立体感强，很直观，而缺点是刚球密密麻麻堆积在一起，很难看清内部的排列规律和特点，不便于研究。为了清楚地表明原子在空间排列的规律性，常常将构成晶体的

实际质点的体积忽略，而将它们抽象为纯粹的几何点，称之为阵点或结点。阵点可以是原子或分子的中心，也可以是彼此等同的原子群或分子群的中心，但各个阵点的环境必须相同。由这些环境相同的抽象阵点所组成的点阵排列为空间点阵。在表达空间点阵的几何图形时，为观察方便起见，可作许多平行的直线把阵点连接起来，构成三维的几何格架，称为空间格架，简称晶格，如图 1-7 (b) 所示。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因直线的取向不同可有多种形式，故须强调指出：阵点是构成空间点阵的基本要素。

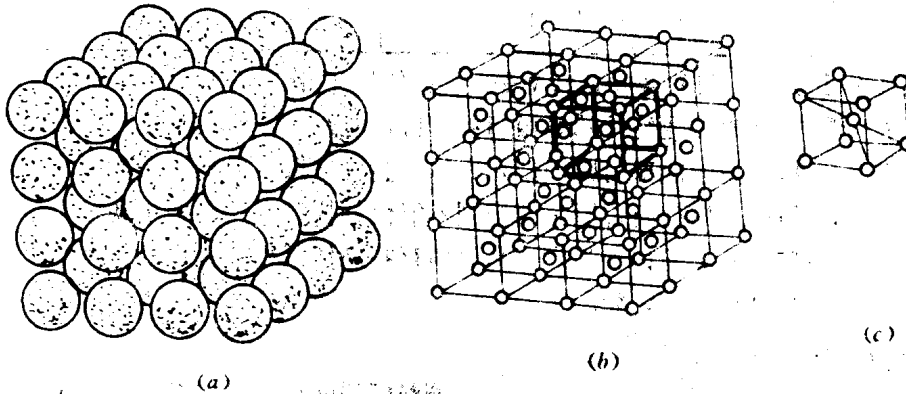


图 1-7 晶体 (a)，空间格子 (b) 和晶胞 (c)

由于晶体中原子排列具有周期性的特点，可以从晶格中选取一个能够完全反映晶格特征的最小几何单元来分析晶体中原子排列的规则性。这个最小的几何单元称为晶胞 (见图 1-7 (c))。通常是取一个最小的平行六面体作为晶胞，将晶胞作三维的重复堆砌就构成了空间点阵。

同一空间点阵可因选取晶胞方式不同而得到不同形状的晶胞，如图 1-8 所示。通常规定在选择晶胞时应满足下列条件：

- 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 当平行六面体棱间有直角时，直角数目应最多；
- ④ 在满足上述条件下，晶胞的体积应最小。

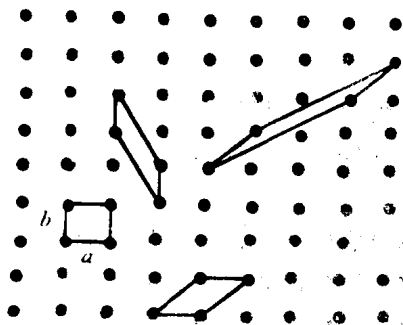


图 1-8 在点阵中选取晶胞

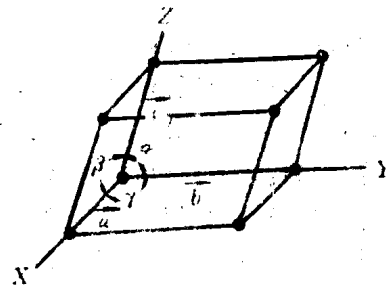


图 1-9 晶胞、晶轴和点阵矢量

通过晶胞角上的某一阵点 (往往取左下角后面的一点)，沿其 3 个棱边引坐标轴 X, Y, Z (称为晶轴)，则此晶胞的形状和大小可由其 3 个棱边的长度 a, b, c (称为点阵常数) 和晶轴

之间的夹角 α, β, γ 共 6 个参数完全表达出来, 如图 1-9 所示。

事实上, 采用 3 个点阵矢量 a, b, c 来描述晶胞更为方便。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 3 个矢量作平移, 平移的方向和单位距离由点阵矢量来定, 这样便可确定空间点阵中任何一个阵点的位置为

$$Y_{...} = ua + vb + wc \quad (1-2)$$

式中 $Y_{...}$ 为从原点到某一阵点的矢量, u, v, w 分别表示沿 3 个点阵矢量的平移量, 也就是该阵点的坐标。

(二) 晶系

自然界中的晶体有成千上万种, 它们的晶体结构各不相同, 但根据空间点阵“每个阵点周围有相同的环境”的要求, 布拉菲 (Bravis) 于 1948 年用数学方法证明了空间点阵共有 14 种, 而且也只能有 14 种。这 14 种空间点阵的晶胞如图 1-10 所示。

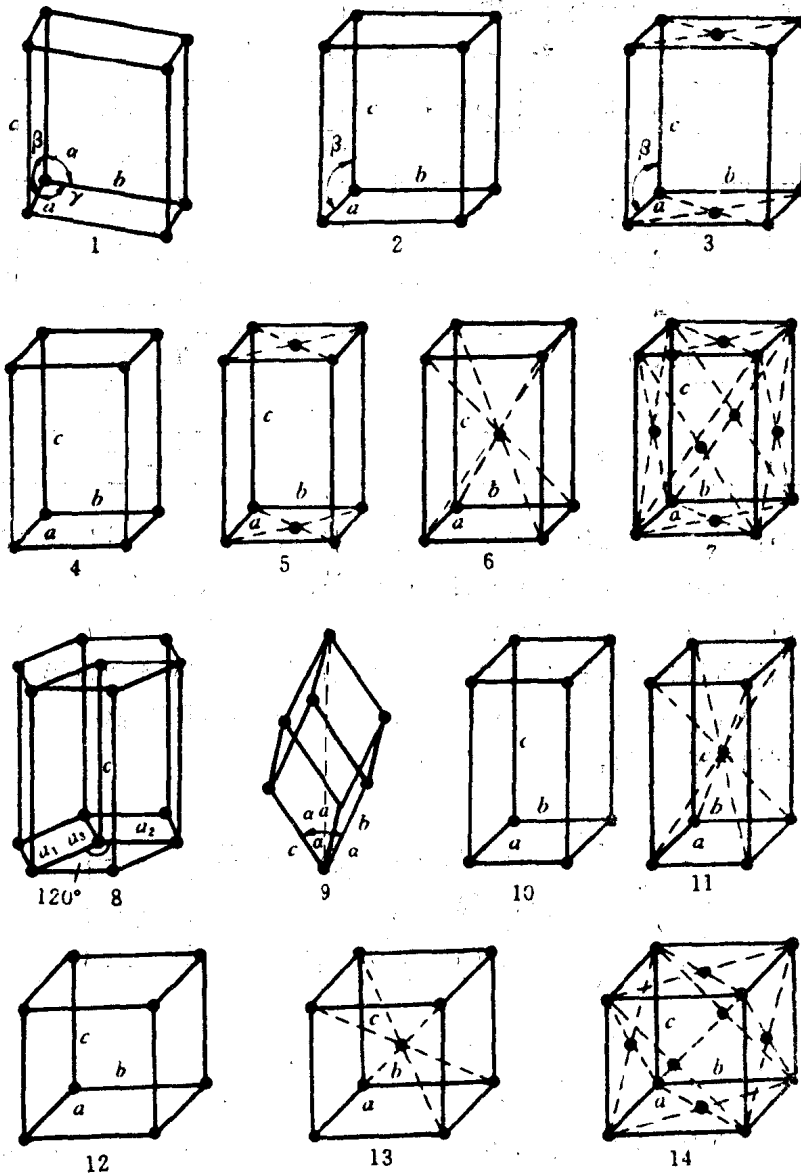


图 1-10 14 种空间点阵的晶胞

若进一步根据晶胞的 3 个晶格常数和 3 个棱间夹角的相互关系对所有的晶体进行归纳分类, 又可把这 14 种空间点阵归纳为 7 个晶系, 在这里只考虑 a, b, c 是否相等, α, β, γ 是否相等或呈直角等因素, 即只考虑晶胞的外形, 而不涉及晶胞中原子排列的具体情况。这 7 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: $a = b = c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
- ⑥正方晶系: $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- ⑦立方晶系: $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

14 种空间点阵归属于 7 个晶系的情况列于表 1-3 中。

表 1-3 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
单斜	简单单斜	2	正方	简单正方	10
	底心单斜	3		体心正方	11
正交	简单正交	4	菱方	简单菱方	9
	底心正交	5	立方	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

应强调指出, 晶体点阵和空间点阵是不同的概念, 晶体点阵反映的是实际原子排列情况, 而空间点阵则是将晶体点阵通过抽象而得到的, 虽然只有 14 种类型, 但是点阵上的每一个阵点可以由一个或一个以上的质点(原子、离子、分子或原子群)所组成, 而这些实际质点的组合及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)。例如, 图 1-11 中的 (a)、(b)、(c) 为三种不同的晶体结构, 但却都属于同一种空间点阵, 即简单立方点阵(图 1-11(d))。

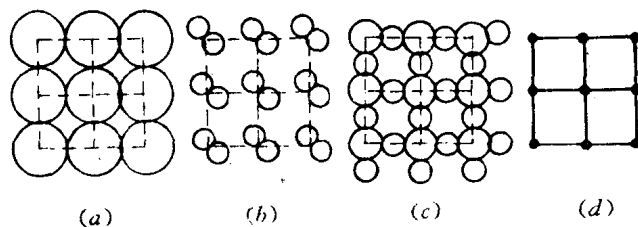


图 1-11 晶体点阵与空间点阵

往往在晶体结构中, 有时看起来很相似, 但却不属于同一种空间点阵, 如图 1-12 所示; 相反, 有时看起来极不相同的晶体结构, 却属于同一空间点阵, 如图 1-13 所示。

金属晶体点阵的阵点上，一般都只存在单个原子，其阵点间的距离通常为埃(Å)的数量级($1\text{Å} = 10^{-8}\text{cm}$)。

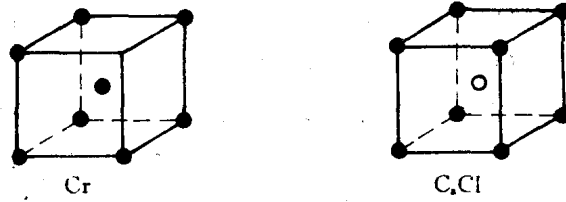


图 1-12 晶体结构相似而点阵不同

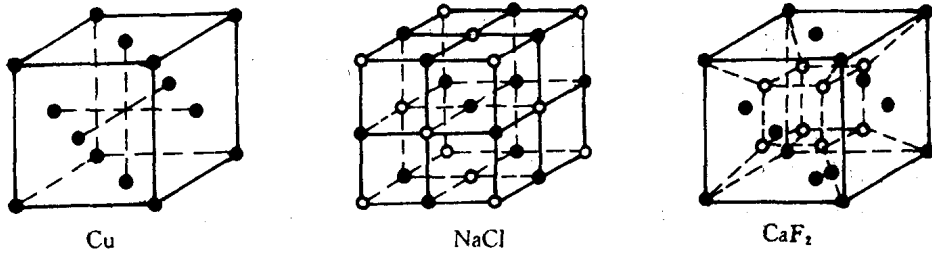


图 1-13 具有相同空间点阵的晶体结构

二、晶体的定量描述

在分析晶体的结晶、塑性变形、固态相变等问题时，往往要涉及晶体中某些原子排列的方向(称为晶向)和原子构成的某些平面(称为晶面)，为了区分不同的晶向和晶面，需要一个统一的规则来标志它们，这种符号称做晶向指数和晶面指数。国际上通用的是密勒(Miller)指数。

(一) 晶向指数

晶向指数按以下几个步骤确定：

①以晶胞的某一阵点为原点，晶胞的3个棱边为坐标轴，并以晶胞棱边长度作为坐标轴的单位长度。

②过原点作一直线 OP ，使其平行于待定的晶向 AB (见图 1-14)。

③在直线 OP 上选取距原点最近的一点 P ，确定 P 点的三个坐标值。

④将这三个值乘以最小公倍数化为最小整数 u, v, w ，加上方括号， $[uvw]$ 即为 AB 晶向的晶向指数。如果 u, v, w 中某一数值为负值，则将负号标注在该数的上方。

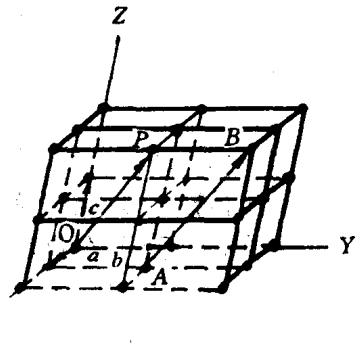


图 1-14 晶向指数的确定

图 1-15 给出了正交点阵中几个晶向的晶向指数。

显然，一个晶向指数并不仅表示一个晶向，而是一组互相平行、位向相同的晶向，如果晶向指数相同而正负号相反，如 $[110]$ 和 $[\bar{1}\bar{1}0]$ ，则这两种晶向互相平行，但方向相反。

在立方晶系中， $[111]$ 、 $[1\bar{1}\bar{1}]$ 、 $[\bar{1}1\bar{1}]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 和 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 、 $[\bar{1}11]$ 、 $[1\bar{1}1]$ 、 $[11\bar{1}]$

8个晶向表示的是立方体中4个体对角线的方向，从晶体的对称性来看，这一组晶向在性质上（排列规律及密度）是等同的。原子排列相同但空间位向不同的所有晶向可归为一类，称为晶向族，以 $\langle uvw \rangle$ 表示。上述8个晶向所属的晶向族即可用 $\langle 111 \rangle$ 表示。同理， $\langle 100 \rangle$ 代表了 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 、 $[\bar{1}00]$ 、 $[0\bar{1}0]$ 和 $[00\bar{1}]$ 6个晶向。应该指出，只有对立方结构晶体，改变晶向指数的顺序，所表示的晶向上的原子排列情况才相同，这种方法对非立方系的其它晶体结构则不一定适用。

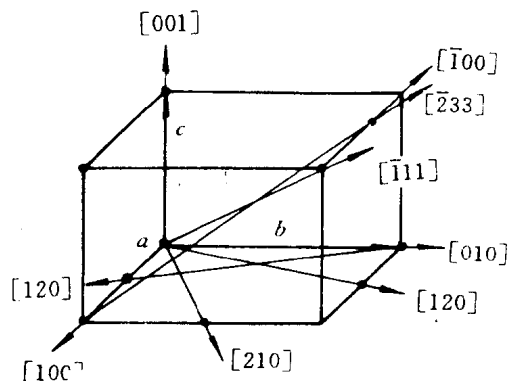


图 1-15 正交点阵中几个晶向的晶向指数

(二) 晶面指数

晶面指数的确定方法如下：

①在点阵中设置参考坐标系，设置方法与确定晶向指数时相同，但不能将坐标原点选在待定指数的晶面上。

②以晶胞棱边长度为单位，量出待定晶面在各坐标轴上的截距，得到3个截距值。

③取3个截距的倒数，并以最小公倍数乘这3个数，得到3个最小的整数 h 、 k 、 l 。

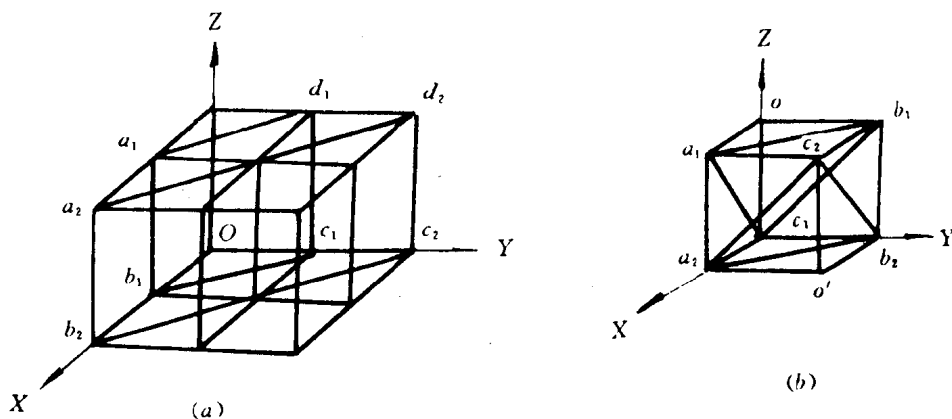


图 1-16 晶面指数的确定

④将求得的 h 、 k 、 l 用圆括号括起来， (hkl) 即为该晶面的晶面指数。如果晶面在某个坐标轴上的截距为负，则在相应的指数上边加负号。

同样，平行晶面的晶面指数相同，或数字相同而正、负相反，如 (hkl) 与 $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ ， $(10\bar{1})$ 与 $(\bar{1}01)$ 等。

现举例说明如下：图 1-16 (a) 中晶面 $a_1b_1c_1d_1$ 及 $a_2b_2c_2d_2$ 为互相平行的两个晶面，在 X 、 Y 、 Z 坐标轴上的截距分别为 1 、 1 、 ∞ 及 2 、 2 、 ∞ ，其倒数为 1 、 1 、 0 及 $1/2$ 、 $1/2$ 、 0 化为最小整数后两个晶面的指数均为 (110) 。图 1-16 (b) 中晶面 $a_1b_1c_1$ 与 $a_2b_2c_2$ 也是互相平行的，如果分别选取 O 及 O' 为原点，则求得的晶面指数分别是 $(11\bar{1})$ 及 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 。这两个晶面的指数数字相同而符号相反，这正是由于原点选取不同所造成的。

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（参见图 1-17）：