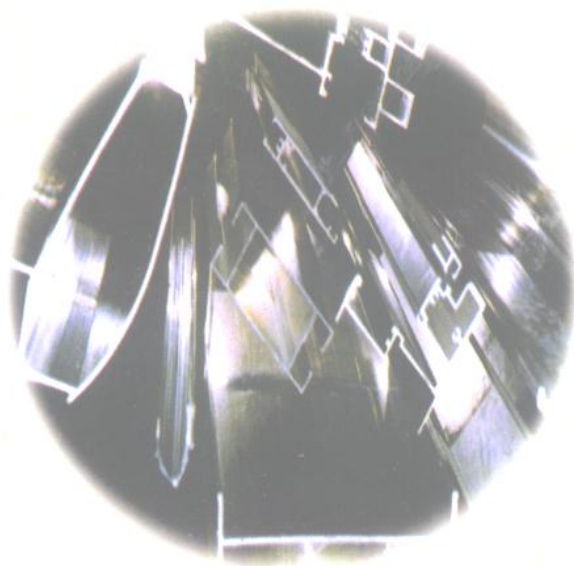


—— 高等学校教材 ——

材料科学基础

刘智恩 主编



西北工业大学出版社

高等学校教材

材料科学基础

刘智恩 主编

西北工业大学出版社

2000年8月 西安

(陕)新登字 009 号

【内容简介】 本书阐述了与工程材料有关的基础理论及应用,包括工程材料中的原子排列、相结构、凝固与结晶、合金相图、固体中的扩散、塑性变形、回复与再结晶、复合效应与界面、固态相变等内容。主要特点是以常用工程材料为对象,阐述其基本原理;书中选用了较多的例题,以利于对基础知识的理解。

本书可作为材料科学与工程专业,金属材料及热处理专业,铸造、焊接、锻造以及腐蚀与防护等专业的教科书,也可供工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学基础/刘智恩主编. —西安:西北工业大学出版社,2000.6

ISBN 7-5612-1241-0

I. 材... II. 刘... III. 材料科学 IV. TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2000)第 22250 号

©2000 西北工业大学出版社出版发行
(邮编:710072 西安市友谊西路 127 号 电话:8493844)

全国各地新华书店经销

西安市高陵县印刷厂印装

开本:787 毫米×1 092 毫米 1/16 印张:19.25 插页:1 字数:468 千字
2000 年 8 月第 1 版 2000 年 8 月第 1 次印刷
印数:1—3 000 册 定价:24.00 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



为了适应材料科学的发展,拓宽知识面,加强基础;同时考虑到按大类招生、培养的需要,在原有的《金属学原理》基础上,参考国内外教学发展趋势,编写《材料科学基础》这本教材。

近些年来,由于现代科学技术的迅猛发展,对材料提出了更高、更新的要求。在专业的培养目标上,就材料知识而言,必须从金属材料扩展到陶瓷、高分子和复合材料。所以,这本书是以工程材料为对象,阐述它的基本原理和基础知识,这和那些仅以金属材料为对象的《金属学原理》是不同的。

《材料科学基础》从材料的内部结构探讨其性质与行为,揭示材料结构与性能的内在联系及规律,为认识和改进材料的性能提供必备的基础知识。人们可以从其基本理论出发,指导材料的生产及科研,解决材料使用中的问题。

鉴于金属材料在当今工业材料应用中仍然占据主导地位,金属学相对其它材料学科更成熟、更严密,其理论及研究方法也正在向其它材料学科移植和渗透,所以,保证金属学的分量和教学时数,无论从加强基础和实际应用来说都是必要的。正因为如此,在《材料科学基础》中,涉及陶瓷、高分子及复合材料的基础知识约占 $2/5$,而在教学时数上不超过 $1/4$ 。

《材料科学基础》是材料科学与工程专业本科生一门重要的专业基础课,以介绍工程材料的基础知识为目的。主要内容包括工程材料中的原子排列、固体中的相结构、凝固与结晶、二元相图、三元相图、固体中的扩散、塑性变形、回复与再结晶、复合效应与界面、固态相变共 10 章。教学中可突出各类材料的共性,注意不同材料中的个性。

本书的主要特点,是以常用工程材料为对象,阐述其共性原理;书中选用了较多的例题,以利于学生对基础知识的理解,也有利于培养学生分析问题和解决问题的能力。

本书可作为材料科学与工程专业,金属材料及热处理专业,铸造、焊接、锻造及腐蚀与防护等专业的教科书,也可作为有关工程技术人员参考书。

本教材授课时数为 80 学时左右。使用本教材之前,学生应学完物理化学、材料力学等课程,并初步具有材料生产和使用方面的实践知识。

本书共十章。其中,第一、二、三、四章由西北工业大学刘智恩副教授编写,第五、六章由西北工业大学吕宝桐教授编写,第七、八章由西北工业大学侯晏红硕士编写,第九、十章由西北工业大学乔生儒教授编写。全书由刘智恩副教授主编。

本书审稿由西安交通大学周敬恩教授(第二、六、七、八、九章)、西安交通大学柴东朗教授(第一、三、四、五、十章)担任。

在编写过程中,西北工业大学刘正堂教授提供了大量资料,给予了极大的支持和帮助;陕西工业学院闫文教授、西北工业大学李华伦、杨延清等教授审阅了部分初稿,并提出了宝贵意见;许多有关同志参加了描图及缮写工作,对他们的辛勤劳动,在此一并致谢。

由于编者水平有限,书中难免存在缺点和错误,敬请读者批评指正。

编 者

1999 年 9 月

目 录



第一章 工程材料中的原子排列.....	1
第一节 原子键合.....	1
第二节 原子的规则排列.....	4
第三节 原子的不规则排列	20
习题	48
复习思考题	49
第二章 固体中的相结构	51
第一节 固溶体	51
第二节 金属间化合物	56
第三节 陶瓷晶体相	60
第四节 玻璃相	66
第五节 分子相	67
习题	73
复习思考题	74
第三章 凝固与结晶	75
第一节 金属结晶的基本规律	75
第二节 金属结晶的基本条件	77
第三节 晶核的形成	80
第四节 晶体的长大	88
第五节 陶瓷、聚合物的凝固.....	96
第六节 结晶理论的应用	97
习题.....	100
复习思考题.....	101
第四章 二元相图.....	103
第一节 相、相平衡及相图制作	103
第二节 二元匀晶相图.....	105
第三节 二元共晶相图.....	116

第四节	二元包晶相图	127
第五节	其它二元相图	131
第六节	二元相图的分析方法	136
第七节	相图的热力学解释	147
第八节	铸锭(件)的组织与偏析	152
习题		154
复习思考题		155
第五章	三元相图	157
第一节	三元相图的几何特性	157
第二节	三元匀晶相图	160
第三节	三元共晶相图	163
第四节	三元相图中的相平衡特征	170
第五节	实用三元相图举例	173
习题		177
第六章	固体中的扩散	179
第一节	扩散定律及其应用	179
第二节	扩散的微观机理	184
第三节	扩散的热力学理论	188
第四节	反应扩散	190
第五节	一些影响扩散的重要因素	192
习题		193
复习思考题		194
第七章	塑性变形	196
第一节	金属的应力—应变曲线	196
第二节	单晶体的塑性变形	197
第三节	多晶体的塑性变形	207
第四节	合金的塑性变形	209
第五节	冷变形金属的组织与性能	215
第六节	聚合物的变形	220
第七节	陶瓷材料的塑性变形	224
习题		226
复习思考题		227
第八章	回复与再结晶	228
第一节	冷变形金属在加热时的变化	228
第二节	回复	229

第三节 再结晶.....	232
第四节 再结晶后的晶粒长大.....	239
第五节 金属的热变形.....	249
习题.....	254
复习思考题.....	255
第九章 复合效应与界面.....	256
第一节 材料复合、增强体及复合效应	256
第二节 复合材料增强原理.....	261
第三节 复合材料的界面.....	270
习题.....	274
第十章 固态相变.....	276
第一节 固态相变的特点.....	276
第二节 固态相变的形核.....	278
第三节 固态相变的核长大.....	281
第四节 扩散型相变示例.....	283
第五节 无扩散型相变.....	287
习题.....	293
附录.....	294
附录 A 书中用到的物理常数	294
附录 B 有关元素资料表	295
附录 C 有关工程材料的性质 (20℃)	297
参考文献.....	299

第一章 工程材料中的原子排列

工程上最广泛应用的材料多为晶体,它们的许多性能都与其内部原子排列有关。因此,作为材料科学工作者,首先要熟悉固体中原子的排列方式和分布规律。其中包括固体中的原子是如何相互作用并结合起来的,晶体的特征及其描述方法,晶体结构的特点,各种晶体间的差异,以及晶体结构中缺陷的类型及性质等。这些都是本章要重点介绍的内容。这些知识不仅是学习材料科学课程的基础,也是学习其它专业课程(如X射线衍射、电子衍射等)必不可少的重要基础。

第一节 原子键合

在固态下,当原子(离子或分子)聚集为晶体时,原子(离子或分子)之间产生较强的相互作用,这种相互作用力就称为结合力,也叫做结合键。由于电子运动使原子产生聚集的结合力称为化学键。固体中的结合键主要是化学键,其大小与原子的结构有关。不同类型的原子之间,具有不同性质的结合键。固体中的结合键可以分为离子键、共价键和金属键3种化学键,以及分子键、氢键等物理键。

一、金属键

金属元素的原子失去最外层价电子后就变成带正电的离子,被失去的电子则形成围绕离子运动的“电子云”,如图1-1所示。脱离原子的价电子,已不再与某一特定的正离子相互吸引,而是在电子云中自由运动,成为被若干个正离子相吸引的电子。通过正离子与电子之间相互吸引,使这些正离子与电子结合起来。这种结合力就是金属键。

当金属发生弯曲等变形时,原子将改变它们彼此之间的位置,但并不破坏键。因此,金属具有良好的塑性。在电压作用下,价电子将发生运动,因而金属有良好的导电性。正离子在热的作用下,震荡加剧并传递热量,因而金属有良好的导热性。

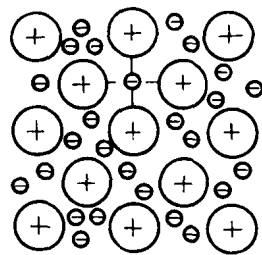


图1-1 金属原子正常堆积时的金属键及其电子云

二、共价键

一些陶瓷和聚合物是通过共价键使其原子结合在一起。以硅为例,如图1-2所示。1个4价的硅原子,与其周围4个硅原子共享最外层的电子,从而使每个硅原子最外层获得8个电子。1个共有电子代表1个共价键,所以1个硅原子有4个共价键与4个邻近的硅原子结合。

通常两个相邻原子只能共用一对电子。一个原子的共价键数,即与它共价结合的原子数,最多只能等于 $8-N$ (N 表示这个原子最外层的电子数),所以共价键具有明显的饱和性。另外,在共价晶体中,原子以一定的角度相邻接,各键之间有确定的方位,故共价键有着强烈的方向性。

共价键的结合力很大,所以共价晶体具有强度高、硬度大、脆性大、熔点高等性质,结构也比较稳定。受力时要么不变形,要么键被破坏使材料破坏和断裂。

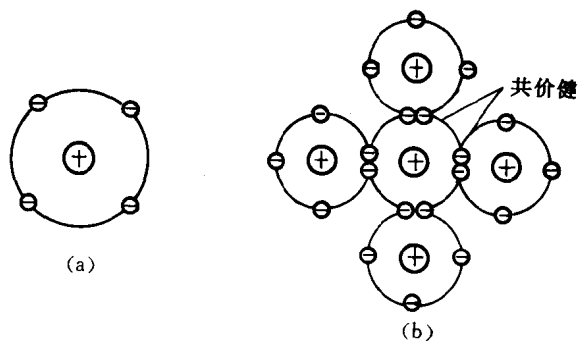


图 1-2 硅的共价键
(a) 硅原子; (b) 硅的 4 个共价键

三、离子键

部分陶瓷材料(如 MgO , Al_2O_3 , ZrO_2 等)是依靠离子键将原子堆积排列在一起。在周期表(见表 1-1)中,当相隔较远的一正电性元素原子和一负电性元素原子接触时,前者失去最外层价电子变成带正电荷的正离子,后者获得电子变成带负电荷的满壳层负离子。正离子和负离子由于静电引力相互吸引;当它们充分接触时会产生排斥,引力和斥力相等时即形成稳定的离子键。

氯化钠晶体是靠离子键结合的晶体,如图 1-3 所示。图中表明,Na 的外层电子贡献给 Cl,Na 变为带正电的离子,而内层电子数为 8,是满层电子数;Cl 接受 1 个电子,变为带负电的离子,并使外层电子数为 8,也是满层电子数。所以,1 个 Na 原子和 1 个 Cl 原子依正负离子间的吸引力而结合在一起。

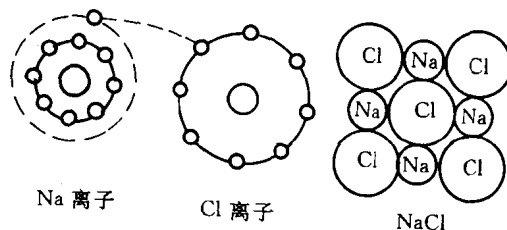


图 1-3 NaCl 的离子键

离子键的结合力很大。所以离子晶体的硬度高、强度大,热膨胀系数小,但脆性大。离子键中很难产生可以自由运动的电子,故离子晶体都是良好的绝缘体。

四、分子键(范德瓦尔斯力)

有些物质,如塑料、陶瓷等,它们的分子或原子团,往往具有极性,即分子中的一部分带正电,而另一部分带负电。一个分子带正电的部位,同另一个分子带负电的部位之间就存在比较弱的静电吸引力,这种吸引力就称为范德瓦尔斯力。这种存在于中性原子或分子之间的结合力叫做分子键。如高分子材料聚氯乙烯,是由 C, H, Cl 构成的大分子,如图 1-4 (a) 所示。图中一个大分子链的内部,如 C—C 原子之间,主要由共价键结合,而两侧的 H 原子带正电,也可以是 Cl 原子并带负电。在两个大分子链之间,带正电的 H 原子和带负电的 Cl 原子,存在着微弱的静电引力,即为范德瓦尔斯力。

由于范德瓦尔斯力很弱,分子晶体的结合力很小。在外力作用下,易产生滑动并造成很大变形。分子晶体熔点很低,硬度也很低。这种引力在其它化学键晶体中也可以存在,但常被忽略不计。

五、氢键

在含氢的物质中,分子都是通过极性共价键结合,而原子之间则是通过氢键连接的。氢键的产生主要是由于氢原子与某一原子形成共价键时,共有电子向这个原子强烈偏移,使氢原子几乎变成一半径很小的带正电荷的核,而这个氢原子还可以和另一个原子相吸引,形成附加的键。所以氢键是一种较强的、有方向性的范德瓦尔斯键。氢键的结合力比离子键、共价键等小得多。

以上简单地讨论了结合键的类型及其本质。表 1-2 比较了各种结合键的主要特点及实例。

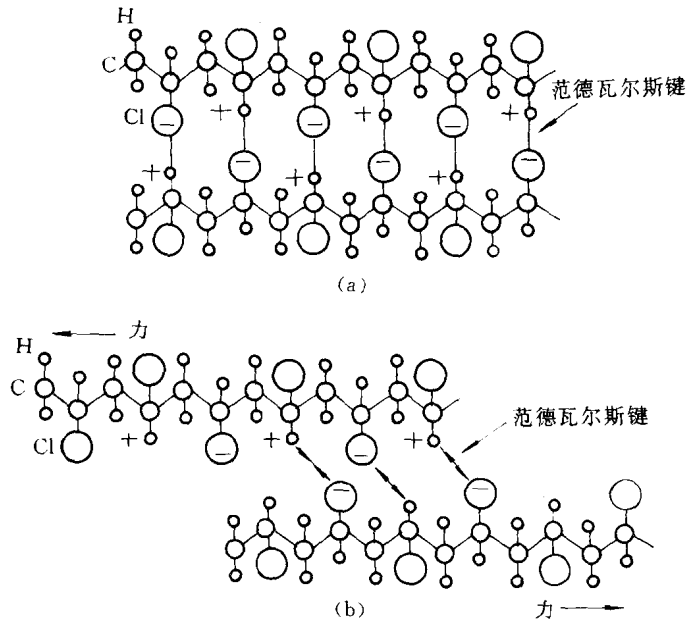


图 1-4 聚氯乙烯的范德瓦尔斯键

表 1-2 各种结合键的比较

结合键类型	实 例	结 合 能		主 要 特 征
		kcal/mol ^d	eV/mol	
离子	LiCl	199	8.63	非方向键,高配位数,低温不导电,高温离子导电
	NaCl	183	7.94	
	KCl	166	7.20	
	RbCl	159	6.90	
共价	金刚石	170	1.37	空间方向键,低配位数,纯晶体在低温下导电率很小
	Si	108	1.68	
	Ge	89	3.87	
	Sn	72	3.11	

续 表

结合键 类 型	实 例	结 合 能		主 要 特 征
		kcal/mol ^①	eV/mol	
金属	Li	37.7	1.63	非方向键,配位数及密度都极高,导电率高,延性好
	Na	25.7	1.11	
	K	21.5	0.931	
	Rb	19.6	0.852	
分子	Ne	0.46	0.020	低的熔点和沸点,压缩系数大,保留了分子的性质
	Ar	1.79	0.078	
	Kr	2.67	0.116	
	Xe	3.92	0.170	
氢 键	H ₂ O(冰)	12	0.52	结合力高于无氢键的类似分子
	HF	7	0.30	

① 1 kcal=4.18 kJ。

从以上讨论可以看出,金属键、共价键和离子键都涉及到原子外层电子的重新分布,这些电子在键合后不再仅仅属于原来的原子,故这3种键都称为化学键。相反,在形成分子键和氢键时,原子的外层电子分布没有变化,或变化极小,它们仍然属于原来的原子,故把这两种键称为物理键。一般来说,化学键最强,氢键次之,分子键最弱。

应该指出,工程材料中大多数都是以多种键合方式结合的,但仍有主次之分。金属材料以金属键为主,氧化物陶瓷材料以离子键为主,高分子材料以共价键、分子键为主,复合材料可以有多种键合机制。

第二节 原子的规则排列

一、晶体学基础

1. 晶体

自然界中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。所谓晶体,是指原子(分子)在三维空间按一定规律作周期性排列的固体。相反,非晶体(如玻璃、松香)中原子则是散乱分布,或仅有局部区域为短程规则排列。

晶体与非晶体由于原子排列不同在性能上表现出较大的差异。例如,晶体具有确定的熔点,它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;而非晶体从液态冷却时尚未来得及变成晶体就凝固了,所以固态下的非晶体具有液态时的原子排列。另外,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,此即晶体的各向异性;而非晶体则是各向同性。表1-3列出几种常用金属沿其不同方向测得的力学性能。

表 1-3 单晶体的各向异性

别 类	弹性模量/MPa		抗拉强度/MPa		延伸率/ 10^{-2}	
	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

2. 晶体结构与空间点阵

晶体的基本特征是原子排列的规则性。这些由实际原子、离子、分子或各种原子集团,按一定几何规律的具体排列方式称为晶体结构,或称为晶体点阵。

假定理想晶体中的原子都是固定不动的刚球,则晶体可被认为是由这些刚球堆积而成,如图 1-5 (a)所示。为了便于研究,常将构成晶体的实际质点(原子、离子、分子或原子集团)的体积忽略,抽象成为纯粹的几何点,称之为阵点或结点。在“抽象”时,必须使每个阵点周围具有相同的环境。这种由周围环境相同的阵点在空间排列的三维列阵称为空间点阵。若用平行直线将空间点阵的各阵点连接起来,就构成一个三维的空间格架(如图 1-5(b)所示)。这种用以描述晶体中原子排列规律的空间格架称之为晶格。

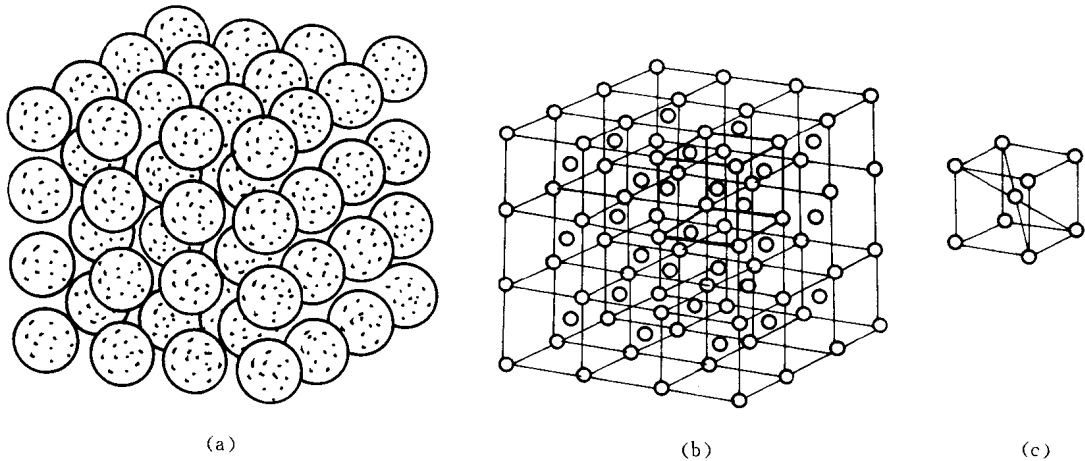


图 1-5 晶体中原子排列示意图

(a) 原子堆垛模型; (b) 晶格; (c) 晶胞

由于晶体中原子排列具有周期性,故可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,这个最小的几何单元称为晶胞(如图 1-5(c)所示)。通常是在晶格中取一个最小的平行六面体作为晶胞(图 1-6),这种晶胞在空间重复堆垛就得到空间点阵。

为了表示晶胞的形状和大小,可通过晶胞角上的某一阵点,沿其 3 个棱边作坐标轴 x, y, z (称为晶轴),坐标轴的顺序按右螺旋规则(也可以按左螺旋规则)。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,其单位为 nm)和晶轴之间的夹角 α, β, γ 等 6 个参数表达出来,如图 1-6 所示。

如果在点阵晶胞的范围内,标出相应晶体结构中各原子的位置,这部分原子构成了晶体结构中有代表性的部分,含有这一附加信息的晶胞称为结构晶胞。这种晶胞在空间重复堆垛,就得到晶体结构。通常把点阵晶胞与结构晶胞都称之为晶胞,但这两者是有区别的。

3. 布拉菲点阵

自然界中的晶体有成千上万种,它们都有各自的晶体结构。为了研究方便,引入了“空间点阵”的概念。那么,空间点阵有多少种呢?法国晶体学家 A. Bravais 于 1848 年用数学方法证明空间点阵只能有 14 种。这 14 种空间点阵的晶胞如图 1-7 所示。根据其晶胞外形而不涉及晶胞中原子的具体排列情况,又可把 14 种空间点阵归纳为 7 个晶系。

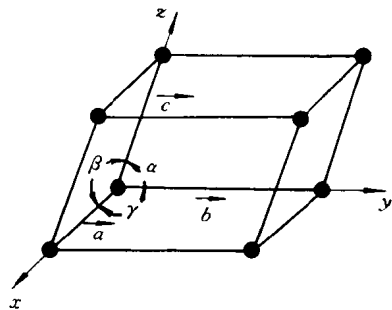


图 1-6 晶胞、晶轴和点阵矢量

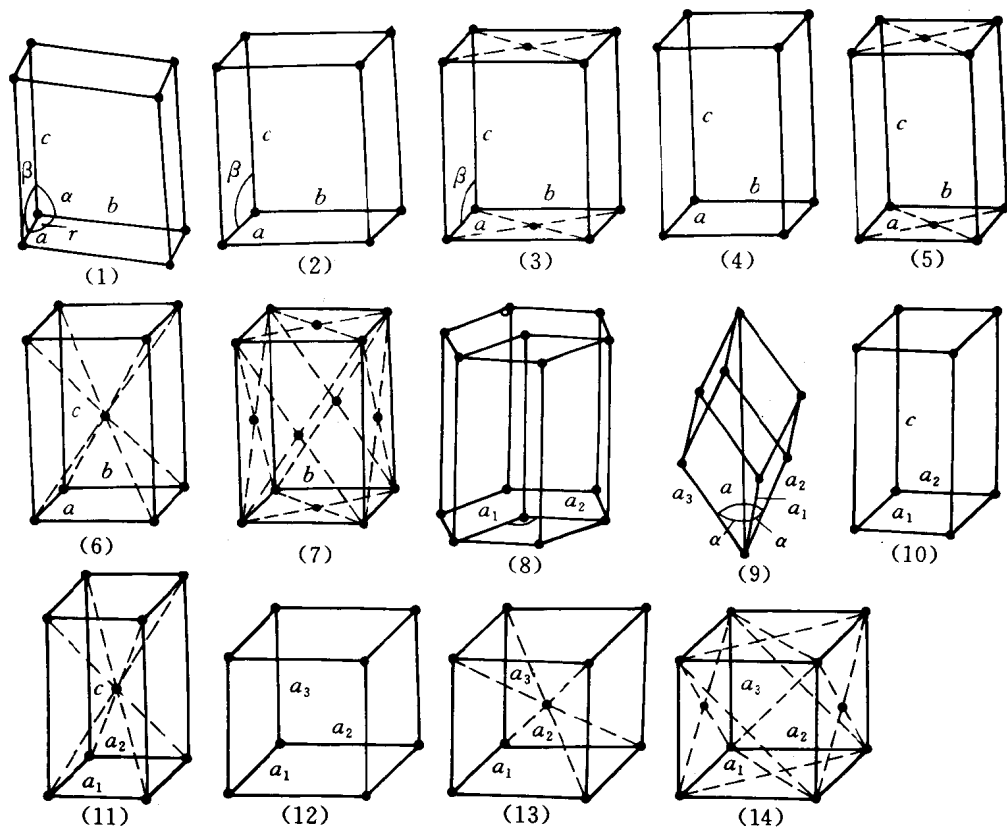


图 1-7 14 种空间点阵

表 1-4 列出了 14 种空间点阵归属于 7 个晶系的情况。

表 1-4 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

- (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: $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- (7) 立方晶系: $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

其实,所有 14 种空间点阵都可以用简单点阵来描述。如面心立方点阵可以用简单菱方点阵表示。只是这种表示法的对称性较低,故为了显示对称性,通常还是选用面心立方点阵。

14 种布拉菲点阵概括了所有晶体结构中原子的排列规律,而且也可把它看成 14 种晶胞。

4. 晶向指数与晶面指数

在晶格中,穿过两个以上结点的任一直线,都代表晶体中一个原子列在空间的位向,称为晶向;由结点组成的任一平面都代表晶体的原子平面,称为晶面。为了确定晶面、晶向在晶体中的相对取向,就需要一种符号,这种符号称为晶向指数和晶面指数。国际上通用的是密勒 (W. H. Miller) 指数。

(1) 晶向指数 晶向指数是按以下几个步骤确定的 (参见图 1-8)。

① 以晶胞的某一阵点为原点,三条棱边为坐标轴,并以晶胞棱边的长度作为坐标轴的单位长度。

② 过原点作一有向直线 OP ,使其平行于待标定的晶向 AB 。

③ 在直线 OP 上选取离原点最近一个结点的坐标 (x, y, z) 。

④ 将上述坐标的比化为简单整数比,如 $x : y : z = u : v : w$ 。把所得最小整数加上方括号, $[uvw]$ 即为 AB 晶向的晶向指数。如果其中某一数为负值,则将负号标注在该数的上方。

图 1-9 给出了正交点阵中几个晶向的晶向指数。

显然,一个晶向指数并不是表示一个晶向,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,则这两组晶向互相平行,但方向相反。

原子排列相同但空间位向不同的所有晶向称为晶向族,以 $\langle uvw \rangle$ 表示。在立方晶系中, $[111], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}11], [1\bar{1}\bar{1}]$ 和 $[\bar{1}\bar{1}1], [\bar{1}1\bar{1}], [1\bar{1}1], [11\bar{1}]$ 8 个晶向,是指 4 个体对角线的正、反方向,这些晶向上原子排列规律及密度相同,故属于同一晶向族 $\langle 111 \rangle$ 。

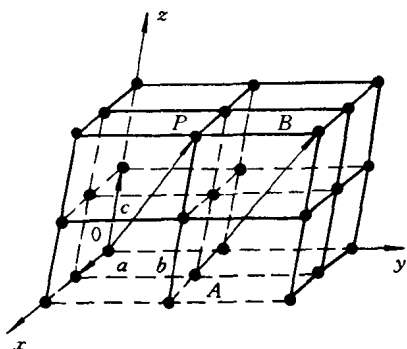


图 1-8 晶向指数的确定

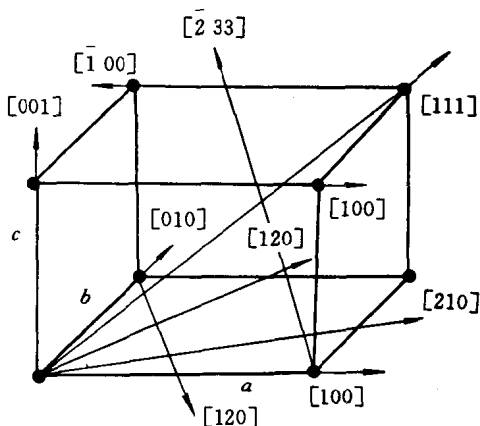


图 1-9 正交点阵中几个晶向的晶向指数

(2) 晶面指数 晶面指数确定方法如下 (参见图 1-10):

① 建立以晶轴 a, b, c 为坐标轴的坐标系, 令坐标原点不在待定晶面上, 各轴上的坐标单位为晶胞边长 a, b 和 c 。

② 找出待定晶面在三坐标轴上的截距 x, y, z (以 a, b, c 为坐标单位)。

③ 取截距的倒数 $\frac{1}{x}, \frac{1}{y}, \frac{1}{z}$ 。

④ 将这些倒数化成 3 个互质的整数 h, k, l , 使 $\frac{1}{x} : \frac{1}{y} : \frac{1}{z} = h : k : l$ 。将 h, k, l 置于圆括号内, 写成 (hkl) , 此即待定晶面的密勒指数。

图 1-11 中标出了各种晶面及其密勒指数。

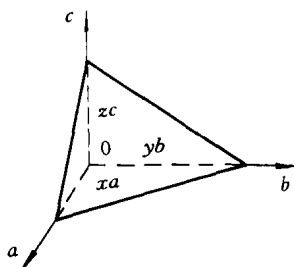


图 1-10 晶面 (密勒) 指数的确定方法

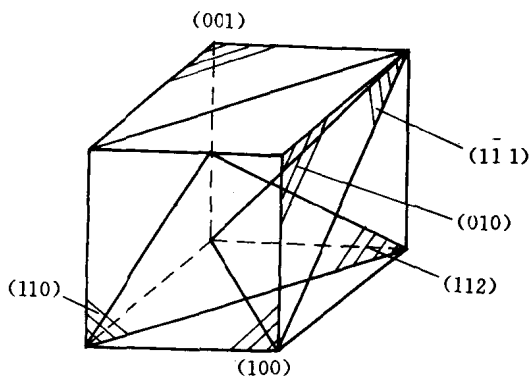


图 1-11 晶面密勒指数的标注

【例题 1-2.1】 试确定图 1-12 中各晶面的晶面指数。

解 图 1-12 (a) 中晶面 $a_1b_1c_1d_1$ 及 $a_2b_2c_2d_2$ 为相互平行的两个晶面, 在 x, y, z 坐标轴上的截距分别为 $1, 1, \infty$ 及 $2, 2, \infty$, 其倒数分别为 $1, 1, 0$ 及 $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$, 化为最小整数, 则两个晶面的晶面指数都是 (110) 。同理可求图 1-12 (b) 中, 晶面 $a_1b_1c_1$ 及 $a_2b_2c_2$ 的晶面指数分别是 (111) 及 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ 。这两个晶面的指数数字相同而符号相反, 这是由于原点选取不同造成的, 但

它们仍然是互相平行的。

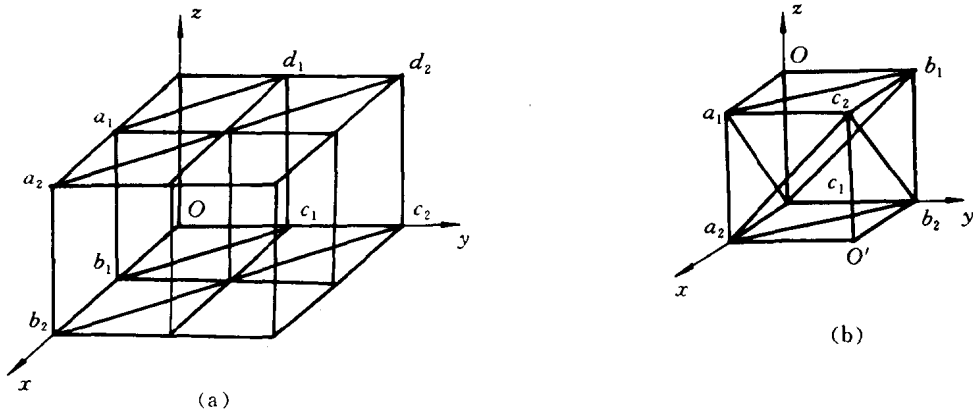


图 1-12 晶面指数的确定

【例题 1-2.2】在立方系中,画出(421)晶面。

解 晶面 (hkl) 并不是仅仅表示一个晶面,而是代表了一组平行的晶面。其中离原点最近的一个晶面就是 $(1/h, 1/k, 1/l)$ 。故已知晶面指数画出该晶面时,可视情况画出离原点最近的这个晶面。(421)晶面如图 1-13 所示。

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 $\{hkl\}$ 表示。如立方晶系中:

$\{100\}$ 包括 $(100), (010), (001)$;

$\{110\}$ 包括 $(110), (101), (011), (\bar{1}10), (\bar{1}01), (01\bar{1})$;

$\{111\}$ 包括 $(111), (\bar{1}\bar{1}1), (1\bar{1}\bar{1}), (11\bar{1})$ 。

如图 1-14 所示。

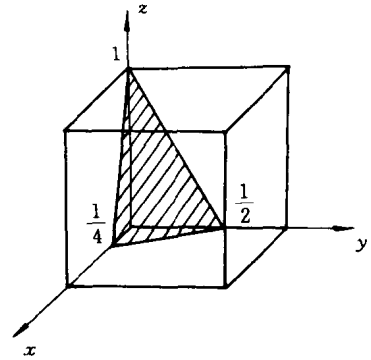


图 1-13 已知晶面指数画晶面

(3) 六方晶系中的晶向、晶面指数 上面介绍了用 3 个指数表示晶向和晶面。这种三指数表示,原则上适用于任意晶系。但是,用三指数表示六方晶系的晶面和晶向有一个

很大的缺点,即晶体学上等价的晶面和晶向不具有类似的指数。从图 1-15 中可以看出,六棱柱的两个相邻外表面是晶体学上等价的晶面,但其密勒指数却分别是 $(1\bar{1}0)$ 和 (100) ;图中夹角为 60° 的两个密排方向 D_1 和 D_2 是晶体学上的等价方向,但其方向指数却分别是 $[100]$ 和 $[110]$ 。由于等价晶面或晶向不具有类似的指数,人们就无法从指数判断其等价性,也无法由晶面族或晶向族指数写出它们所包括的各种等价晶面或晶向,这就给晶体研究带来很大的不便。为了克服这一缺点,对六方晶体来说一般采用四指数表示。这一方法是以 a_1, a_2, a_3 及 c_4 个轴为坐标轴,如图 1-16 所示。晶面指数标定方法与三轴坐标相同,但须用 $(hkil)$ 4 个数字表示。由于在三维空间中独立的坐标轴不会超过 3 个,故上述方法中位于同一平面上的 h, k, i 中必定有一个不是独立的。可以证明,它们之间存在下列关系: $i = -(h + k)$ 。