

目 录

绪论	1
第 1 章 晶体学基础	5
1.1 引言	5
1.2 空间点阵	5
1.3 晶面指数和晶向指数	11
1.4 常见晶体结构及其几何特征	17
1.5 晶体的堆积方式	22
1.6 晶体投影	24
1.7 倒易点阵	32
1.8 菱方晶系的两种描述	42
习题	44
第 2 章 固体材料的结构	47
2.1 引言	47
2.2 原子结构	47
2.3 结合键	59
2.4 分子的结构	63
2.5 晶体的电子结构	77
2.6 元素的晶体结构和性质	83
2.7 合金相结构概述	89
2.8 影响合金相结构的主要因素	90
2.9 固溶体	95
2.10 离子化合物	103
2.11 硅酸盐结构简介	112
2.12 金属间化合物(I):价化合物	120
2.13 金属间化合物(II):电子化合物	123
2.14 金属间化合物(III):尺寸因素化合物——密排相	126
2.15 间隙化合物	137
2.16 合金相结构符号	141
习题	143
第 3 章 晶体的范性形变	145
3.1 引言	145
3.2 滑移系统和 Schmid 定律	147

3.3	滑移时参考方向和参考面的变化	150
3.4	滑移过程中晶体的转动	152
3.5	滑移过程的次生现象	158
3.6	单晶体的硬化曲线	159
3.7	孪生系统和原子的运动	159
3.8	孪生要素和长度变化规律	162
3.9	孪晶和基体的位向关系	166
3.10	孪生系统的实验测定	172
3.11	滑移和孪生的比较	173
3.12	多晶体范性形变的一般特点	175
3.13	冷加工金属的储能和内应力	179
3.14	应变硬化	181
3.15	多晶材料的择优取向(织构)	186
3.16	纤维组织和流线	195
3.17	晶体的断裂	197
	习题	205
第4章	晶体中的缺陷	207
4.1	引言	207
4.2	点缺陷的基本属性	207
4.3	点缺陷的实验研究	212
4.4	位错理论的提出	219
4.5	什么是位错	221
4.6	位错的普遍定义与柏格斯矢量	225
4.7	位错的运动	227
4.8	位错密度和晶体的变形速率	231
4.9	位错的基本几何性质	233
4.10	固体弹性理论简介	234
4.11	位错的应力场	245
4.12	位错的弹性能和线张力	248
4.13	作用于位错上的力	259
4.14	位错与位错间的交互作用	253
4.15	位错与点缺陷之间的交互作用	256
4.16	位错的起动力——派-纳力	260
4.17	镜像力	263
4.18	位错的起源与增殖	264
4.19	位错的塞积	271
4.20	位错的交割	272
4.21	面心立方晶体中的位错	276

4.22	位错反应	283
4.23	密排六方和体心立方晶体中的位错	291
4.24	其它晶体中的位错	297
4.25	小角度晶粒边界	300
4.26	位错的实验观测	308
4.27	位错理论的应用(小结)	313
	习题	317
第5章 材料热力学		320
5.1	热力学在材料科学中的意义	320
5.2	热力学基本参数和关系	320
5.3	纯金属吉布斯自由能和凝固热力学	325
5.4	合金相热力学	328
5.5	相平衡热力学	334
5.6	相图热力学	338
5.7	晶体缺陷热力学	344
5.8	相变热力学	348
	习题	352
第6章 相图		353
6.1	概述	353
6.2	相律和杠杆定律	357
6.3	二元匀晶相图	360
6.4	二元共晶相图	363
6.5	二元包晶相图	370
6.6	其他二元相图	372
6.7	相图基本类型小结	376
6.8	相图与性能关系	379
6.9	Fe-C合金相图	381
6.10	三元相图	386
	习题	406
第7章 界面		411
7.1	研究界面的意义	411
7.2	界面类型和结构	411
7.3	界面能量	417
7.4	界面偏聚	420
7.5	界面迁移	422
7.6	界面与组织形貌	426

7.7 界面能的测量	432
习题	433
第8章 固体中的扩散	434
8.1 引言	434
8.2 菲克定律	434
8.3 稳态扩散及其应用	437
8.4 非稳态扩散	441
8.5 $D-C$ 关系, 俟野方法	448
8.6 克根达耳效应	449
8.7 分扩散系数, 达肯公式	451
8.8 扩散的微观理论和机制	454
8.9 扩散热力学	462
8.10 影响扩散的因素	465
8.11 反应扩散	473
8.12 离子晶体中的扩散	478
8.13 扩散的实际应用——固态烧结	482
习题	484
第9章 凝固与结晶	487
9.1 概述	487
9.2 金属凝固时的形核过程	489
9.3 纯金属晶体的长大	494
9.4 单相固溶体晶体的长大	499
9.5 两相共晶体的长大	506
9.6 金属和合金铸锭组织的形成和控制	508
习题	511
第10章 回复与再结晶	513
10.1 概述	513
10.2 回复	514
10.3 再结晶	520
10.4 晶粒长大及其他结构变化	531
10.5 金属的热变形	540
习题	547
第11章 固态相变(I)——扩散型相变	549
11.1 固态相变通论	549
11.2 从过饱和固溶体中的脱溶(时效)	556

11.3	脱溶的形核长大理论.....	563
11.4	脱溶的调幅分解理论.....	577
11.5	颗粒粗化.....	583
11.6	不连续沉淀.....	586
11.7	沉淀强化机制.....	589
11.8	过冷奥氏体的等温转变及连续转变曲线.....	593
11.9	共析转变.....	597
11.10	贝氏体转变.....	605
11.11	有序—无序转变.....	611
	习题.....	623
第 12 章	固态相变(Ⅱ)——马氏体相变	626
12.1	马氏体相变的基本特性.....	626
12.2	马氏体相变机制和表象理论简介.....	639
12.3	马氏体相变热力学.....	649
12.4	马氏体相变动力学.....	655
12.5	马氏体的回火.....	658
12.6	马氏体时效钢的强化机制分析.....	664
	习题.....	669
	参考文献.....	672

绪 论

能源、信息和材料被认为是现代国民经济的三大支柱。其中材料更是各行各业的基础。可以说,没有先进的材料,就没有先进的工业、农业和科学技术。无怪乎历史学家将材料作为文明社会进化的标志,将历史划分为石器时代、陶器时代、青铜器时代、铁器时代等等。从世界科技发展史看,重大的技术革新往往起始于材料的革新。例如,本世纪50年代镍基超级合金的出现,将材料使用温度由原来的700℃提高到900℃,从而导致了超音速飞机问世;而高温陶瓷的出现则促进了表面温度高达1000℃的航天飞机的发展。反过来,近代新技术(如原子能、计算机、集成电路、航天工业等)的发展又促进了新材料的研制。目前已涌现出了各种各样的新材料,以致有人将我们的时代称为精密陶瓷时代、复合材料时代、塑料时代或合成材料时代等等。不管叫什么名称,这反映了当代材料的多样化。

各种材料可以从不同角度分类。例如,根据材料的组成,可以将材料分为金属材料、无机非金属材料、有机高分子材料(聚合物)和复合材料(有人将它们称之为固体材料的四大家族)。根据材料的特性和用途,可将它分为结构材料和功能材料两大类。结构材料主要是利用它的力学性能,用于制造需承受一定载荷的设备、零部件、建筑结构等。功能材料主要是利用它的特殊物理性能(电学、热学、磁学、光学性能等),用于制造各种电子器件、光敏元件、绝缘材料等。此外,还可以根据材料内部原子排列情况分为晶态和非晶态材料;根据材料的热力学状态分为稳态和亚稳态材料;根据材料尺寸分为一维(纤维及晶须)、二维(薄膜)和三维(大块)材料等等。

今后材料研究的方向应该是充分利用和发掘现有材料的潜力,继续开发新材料,以及研究材料的再循环(回收)工艺。

在利用现有材料和开发新材料方面,人们预计,不仅在目前,而且在今后一个时期内,结构材料仍然是材料的主体部分,而且今后30年可能是复合材料的世界。在功能材料方面,人们预计,在今后20年,需重点发展应用于计算机、集成电路、激光技术等方面的电子材料。关于材料再循环的研究,则不仅是为了节约原材料,而且是减少能耗、保护环境的急需。

新材料的特点之一是具有特殊的性能。例如,超高强度、超高硬度、超塑性,以及各种特殊物理性能,如磁性、超导性等等。

新材料的特点之二是它的制备和生产往往和新技术、新工艺紧密相关。例如,为了制得用纤维或晶须增强的新型复合材料,需要制备高强度、高热稳定性、无(或很少)缺陷的陶瓷晶须或纤维,并解决它们和基体的复合工艺问题;为了获得具有特殊性质的薄膜或表层,需要应用各种近代溅射技术、激光技术、高能粒子轰击或离子注入技术。又如通过离子注入、机械合金化等技术可以得到具有特殊性能的新型亚稳晶态或非晶态材料等等。

新材料的特点之三是更新换代快,式样多变。新材料和传统材料并无明显的界限,有的就是由传统材料发展而来的。

新材料的特点之四是它的发展和材料理论的关系比传统材料更密切。如果说,传统材料的制备或生产更多地是依靠经验和手艺(在早期尤其如此),那么新材料的研制则更多地是

在理论指导下进行,尽管目前材料理论还没有发展到定量指导生产的阶段。

正是由于新材料的不断涌现,新技术、新工艺的不断发展,以及新材料、新技术对材料理论的日益需要和推动作用,“材料科学与工程”这一新的学科才应运而生。从70年代以来,国内外的大学内纷纷设立了材料科学与工程系,开设了材料科学与工程方面的课程。

“材料科学与工程”的任务是研究材料的结构、性能、加工和使用状况四者间的关系。这里所指材料,包括传统材料和各种新型材料。所谓结构,包括用肉眼或低倍放大镜观察到的宏观组织(粗视组织),用光学或电子显微镜观察到的微观组织,用场离子显微镜观察到的原子象,以及原子的电子结构;所谓性能,包括力学性能、物理性能、化学性能,以及冶金和加工性能等工艺性能;所谓加工,是指包括材料的制备、加工、后处理(再循环处理)在内的各项生产工艺;所谓使用状况,则是指材料的应用效果和反响(例如,有些材料在使用过程中组织结构不稳定,或易受环境的影响,使性能迅速下降)。材料的结构、性能、加工和使用状况这四个因素称为材料科学与工程的四要素。因此,材料科学与工程就是研究四要素之间的关系的一门学科。

在四要素关系中,最基本的是结构和性能的关系,而“材料科学”这门课程的主要任务就是研究材料的结构、性能及二者间的关系。研究的途径一是通过实验,二是总结生产实践的经验,三是建立材料基础理论,从理论上预计材料的结构和性能。

材料的基础理论实际上就是综合数学、物理、化学等各种基础知识来分析实际的材料问题。具体来说,它包括以下几部分:

- (1) 晶体学基础;
- (2) 晶体缺陷理论;
- (3) 固体材料热力学和平衡态理论(包括相图);
- (4) 固体动力学理论(包括扩散和相变理论);
- (5) 固体材料的结构理论;
- (6) 固体电子论(包括分子轨道理论和能带理论)。

目前国内外材料科学课程的内容并未定型,材料科学书籍的内容也很不相同。有的偏重材料,有的偏重性能,且面比较宽,但对基础理论的阐述则比较简略。本书的内容则偏重材料的基础理论,结合各种材料讲述材料基础理论及其应用。我们的考虑是:

- (1) 基础理论是普遍的,适用于各种材料,是材料科学与工程系各专业的共性。
- (2) 随着材料科学与工程的发展,基础理论显得日益重要,对发展新材料、培养学生创新能力具有深远的意义。
- (3) 基础理论是比较定型的,不管材料和工艺如何更新换代,基础理论一般不会过时。

我们希望并相信,这样的体系和内容对材料系学生、研究生和广大材料工作者是有益的。

当然,在阐述材料基础理论时,必然会涉及一些材料性能和工艺问题。作为例子,本书比较多地列举了金属材料,这不仅是考虑到清华大学材料系的专业设置情况,也是由于金属材料涉及的基础理论问题较多,研究得也最充分。此外,本书内容的选择也和后续课程有关。例如,由于后续课程中有X射线衍射,电镜分析、固体物理等,在本书中与这些课程有关的内容就没有详细讨论或根本没有讨论。

本书具有一定的广度和深度。它既可作为材料科学与工程系各专业学生和研究生

科书,也可作为从事材料工作的科技工作者的参考书。在用作本科生教材时,教师可根据具体情况舍去某些内容。

本书是由北京清华大学材料科学与工程系三位教师在他们长期从事金属学、金属物理、材料科学等课程教学的基础上共同编写而成。其中第1至4章由潘金生编写;第5至7章和第9,10章由仝健民编写,第8、11和12章由田民波编写。全书由三人互校。

作者水平有限,不妥或谬误之处在所难免,恳请读者批评指正。

...the ... of ...
...the ... of ...
...the ... of ...
...the ... of ...
...the ... of ...

第1章 晶体学基础

1.1 引言

无论是金属还是非金属材料,通常都是晶体。因此,作为材料科学工作者,首先要熟悉晶体的特征及其描述方法。本章将扼要地介绍晶体学的基础知识,包括以下几方面内容:

- (1) 空间点阵及其描述,晶系和点阵类型。
- (2) 晶体取向的解析描述:晶面和晶向指数。
- (3) 晶体中原子堆垛的几何学,堆垛次序,四面体和八面体间隙。
- (4) 晶体取向的几何描述:各种晶体投影。
- (5) 倒易点阵的定义、属性及应用,晶体学基本公式。
- (6) 晶体的对称性,点群和空间群。

以上内容不仅是学习材料科学课程的基础,也是学习其它许多专业课程(如X射线衍射、电子衍射、固体物理等)的基础。因此,要求读者对这些内容,特别是上述第(1)、(2)和(3)项内容,能掌握得非常透彻、非常熟练。

要熟练地掌握以上内容,关键是要多练习,多应用。

1.2 空间点阵

1.2.1 晶体的特征和空间点阵

晶体的一个基本特征就是其中的原子或原子集团都是有规律地排列的,这个规律就是周期性,即不论沿晶体的哪个方向看去,总是相隔一定的距离就出现相同的原子或原子集团。这个距离就叫周期。显然,沿不同的方向有不同的周期。

晶体中原子或原子集团排列的周期性规律,可以用一些在空间有规律分布的几何点来表示。沿任一方向上相邻点之间的距离就是晶体沿该方向的周期。这样的几何点的集合就构成空间点阵,每个几何点就叫点阵的结点。既然点阵只是表示原子或原子集团分布规律的一种几何抽象,每个结点就不一定代表一个原子。就是说,可能在每个结点处恰好有一个原子,也可能围绕每个结点有一群原子(原子集团)。但是,每个结点周围的环境(包括原子的种类和分布)都是相同的,亦即点阵的结点都是等同点。

图1-1是三维空间点阵,即在三维空间内表示原子或原子集团的排列规律的几何点(结点)所构成的阵列。设想用直线将各结点连接起来,

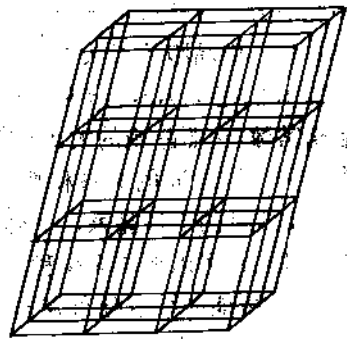


图 1-1 空间点阵

就形成空间网络,也叫**晶格**。在图 1-2 中(a)和(b)都是二维正方点阵,但晶体结构不同(围绕每个结点的原子分布不同)。同样,(c)和(d)都是长方点阵,但结构也不同。图 1-2(e)则是菱形点阵。

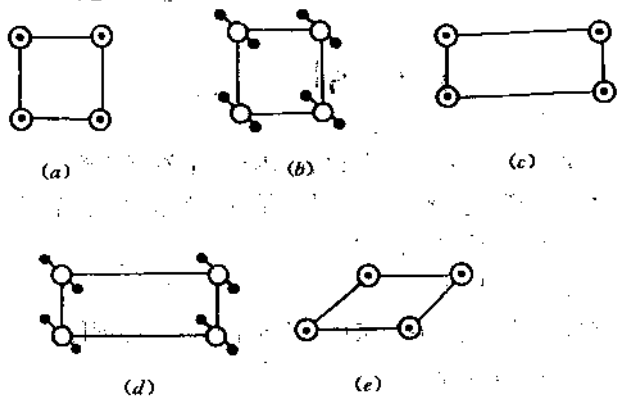


图 1-2 3 种二维点阵、5 种(二维)晶体结构
(a)和(b) 正方点阵 (c)和(d) 长方点阵 (e) 菱形点阵
(\circ 代表结点 \blacksquare 代表原子)

1.2.2 晶胞、晶系和点阵类型

图 1-1 所示的空间点阵可以看成是由最少的单元——平行六面体沿三维方向重复堆积(或平移)而成。这样的平行六面体就叫**晶胞**,如图 1-3 所示。晶胞的三条棱 AB 、 AD 和 AE 的长度就是点阵沿这些方向的周期,这三条棱就叫**晶轴**。

既然任何晶体的晶胞都可以看成是平行六面体,那么不同晶体的差别在哪里?差别有两点:第一,不同晶体的晶胞,其大小和形状可能不同;第二,围绕每个结点的原子种类、数量及分布可能不同。

晶胞的大小显然取决于 AB 、 AD 和 AE 这三条棱的长度 a 、 b 和 c ,而晶胞的形状则取决于这些棱之间的夹角 α 、 β 和 γ 。我们把 a 、 b 、 c 、 α 、 β 和 γ 这 6 个参量称为**点阵常数**或**晶格常数**。按照晶胞的大小和形状的特点,也就是按照 6 个点阵常数之间的关系和特点,可以将各种晶体归于如表 1-1 所示的 7 种**晶系**, (准确地说,晶系是根据它的对称性来划分的,详见 1.9 节)。

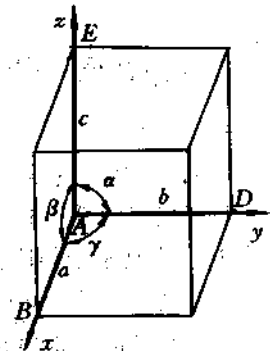


图 1-3 晶胞和点阵常数

由 7 种晶系可以形成多少种空间点阵呢?这就取决于每种晶系可以包含多少点阵,或者说,有多少种可能的结点分布方式。为了回答这个问题,我们的基本出发点是:点阵的结点必须是等结点。由于晶胞的角隅、6 个外表面的中心(面心)以及晶胞的中心(体心)都是等结点,故乍看起来,似乎每种晶系都包括 4 种点阵,即简单点阵、底心点阵、面心点阵和体心点阵。这样看来,7 种晶系总共似乎可以形成 $4 \times 7 = 28$ 种点阵。然而,读者如果将这 28 种点阵逐一画出,就会发现,从对称的角度讲,其中有些点阵是完全相同的。真正不同的点阵只有

表 1-1 7 种晶系

晶系	点阵常数间的关系和特点	实例
三斜	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	K_2CrO_7
单斜	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$ (第一种设置) $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ (第二种设置)	β -S $CaSO_4 \cdot 2H_2O$
斜方 (正交)	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	α -S, Ga, Fe_3C
正方	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	β -Sn (白锡), TiO_2
立方	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Cu, Al, α -Fe, NaCl
六方	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Zn, Cd, Ni-As
菱方	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	As, Sb, Bi, 方解石

注:表中的“ \neq ”的意义是:不一定等于。

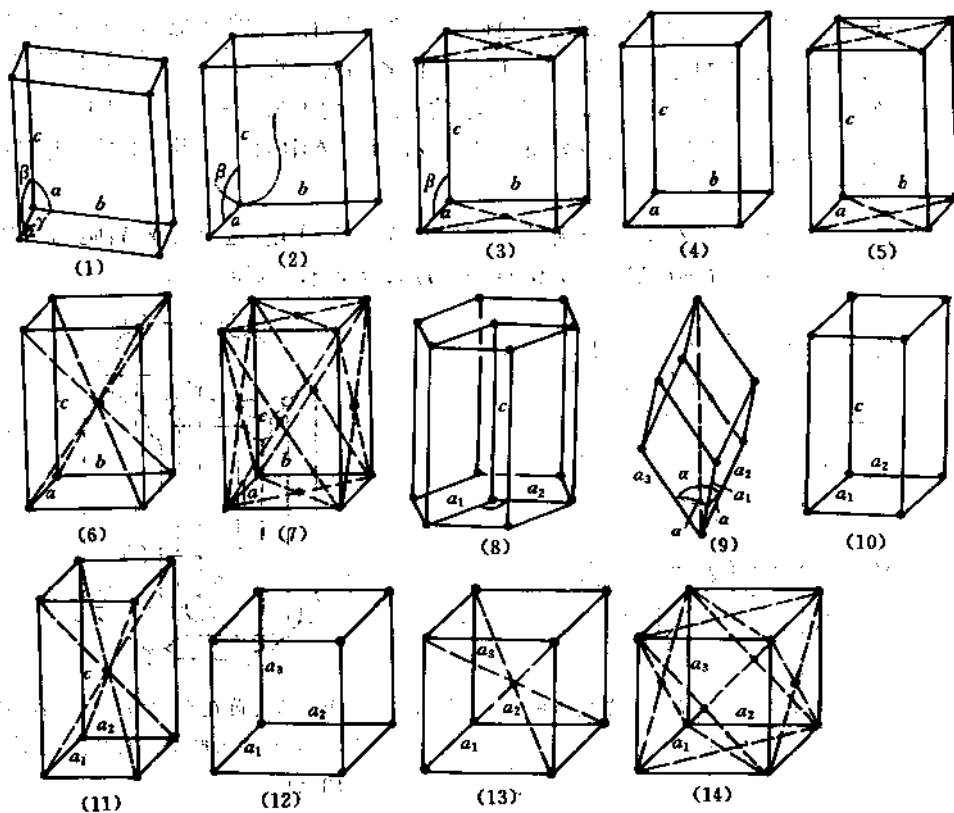


图 1-4 14 种空间点阵

14 种,如图 1-4 所示。它们是:

- (1) 简单三斜点阵(图 1-4(1)),
- (2) 简单单斜点阵(图 1-4(2)),
- (3) 底心单斜点阵(图 1-4(3)),
- (4) 简单斜方点阵(图 1-4(4)),
- (5) 底心斜方点阵(图 1-4(5)),
- (6) 体心斜方点阵(图 1-4(6)),

- (7) 面心斜方点阵(图 1-4(7)),
- (8) 六方点阵(图 1-4(8)),
- (9) 菱方点阵(三角点阵)(图 1-4(9)),
- (10) 简单正方(或四方)点阵(图 1-4(10)),
- (11) 体心正方(或四方)点阵(图 1-4(11)),
- (12) 简单立方点阵(图 1-4(12)),
- (13) 体心立方点阵(图 1-4(13)),
- (14) 面心立方点阵(图 1-4(14))。

这里要强调指出的是,点阵的分类是基于对称性。因此,上述分类的准确说法是:“在反映对称性的前提下,有且仅有 14 种空间点阵”。这句话有两层意思。第一,不少于 14 种点阵。就是说,对于上述 14 种点阵中的任一种点阵,不可能找到一种连接结点的方式,能将它的晶胞连成另一种点阵的晶胞,而仍然反映其对称度(诚然,任何点阵的晶胞都可以通过某种连接方式连成简单三斜点阵的晶胞,但后者不再反映前者的对称性了)。第二,不多于 14 种点阵。就是说,如果在某种晶胞的底心、面心或体心放置结点而形成一种“新”的点阵,那么这个“新”点阵必然包含在 14 种点阵中,或者可以连成 14 种点阵中的某一种,且不改变对称度。下面举两个例子。

例 1 体心单斜点阵是不是一个新的点阵?从图 1-5 可知,这个点阵晶胞为 $ABCDE$ FGH 可以连成底心单斜点阵(晶胞为 $JACDKEGH$),因而不是新的点阵。

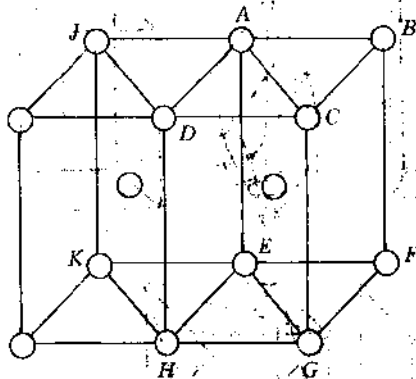


图 1-5 体心单斜点阵可以连成底心单斜点阵

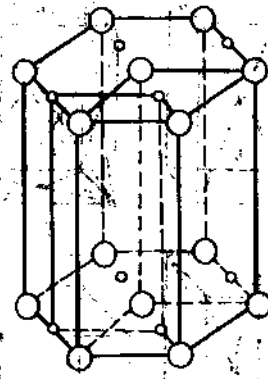


图 1-6 简单六方点阵在 C 面添加结点后形成简单单斜点阵(大圆是原有结点,小圆是新加的结点)

例 2 在简单六方点阵的晶胞的 C 面中心添加结点后是否形成一个新的点阵——底心六方点阵?如果所形成的点阵仍系六方点阵,那么它就是一个新的点阵,因为不可能将它连成简单六方点阵。然而,从图 1-6 可以看出,所形成的点阵不再具有 6 次旋转对称,因而不再是六方晶系,而是单斜晶系。而该点阵可以连成简单单斜点阵(见图 1-6),因而不是新点阵。

1.2.3 进一步讨论

1.2.3.1 布拉维点阵与复式点阵

上面讨论的点阵都是由等同点构成的,这样的点阵就叫布拉维点阵。通常人们所说的点

阵就是指布拉维点阵。

但是,实际晶体中各原子并不一定是等同点。例如,对合金来说,至少就有两种不同的原子。即使对纯金属,晶体中各原子也未必是等同点,因为各原子周围的环境(近邻原子的分布)未必相同。因此,实际晶体中各原子的集合并不一定构成布拉维点阵。人们把晶体中原子的集合(或分布)称为晶体结构,把表示原子分布规律的代表点(几何点)的集合称为布拉维点阵,或简称点阵。如上所述,这些代表点必然是等同点。对一些简单的金属和合金,晶体结构和点阵没有差别。例如,铜、银、金、铝、镍、钨、铂、铅、 γ 铁、不锈钢等的晶体结构和点阵都是面心立方(通常用 FCC 表示),碱金属、钒、铌、钽、铬、钼、钨、 α 铁、碳钢等的晶体结构和点阵都是体心立方(通常用 BCC 表示)。但是,其它一些金属,特别是具有复杂结构的金属和合金,其晶体结构就不同于点阵。让我们举两个实际的例子。

第一个例子是锌、镉、镁、铍、 α 钛、 α 锆、铪等金属。它们都具有简单六方点阵,但原子不仅分布在晶胞顶点,而且还分布在 $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2})$, $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$ 和 $(-\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}, \frac{1}{2})$ 处,如图 1-7(a)所示。图 1-7(b)是原子在底面(垂直于 c 轴的平面)上的投影。从图可以看出,位于晶胞顶点的 a 原子和位于内部的 b 原子,其周围环境是不同的: a_1 原子周围的 b 原子分布(图 1-7(b)中的 b_1, b_2, b_3)不同于 b_1 原子周围的 a 原子分布(见图 1-7(b)中的 a_1, a_2, a_3),因而 a 原子和 b 原子不是等同点,由 a, b 原子的集合不构成布拉维点阵,而构成一个密排六方结构,因为如果把原子看成是同样大小的刚性小球,那么每个原子都几乎和 12 个近邻原子相切(最密的排列)。这样,晶体中原子分布的规律可以用简单六方点阵描写。为了得到晶体结构,只要在每个结点处按图 1-7(a)所示的位置(或方位)放置一对 a, b 原子。这里 $a-b$ 原子对也称为结构单元。综上所述可知,锌、镉、镁、铍、钛、锆、铪等金属具有简单六方点阵,密排六方结构。

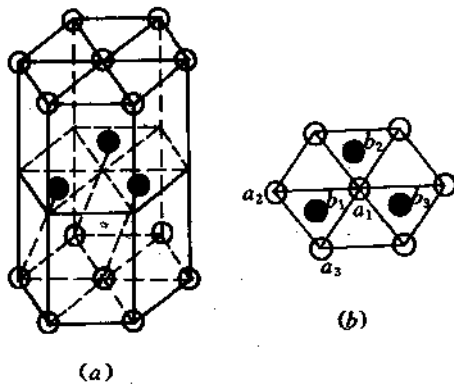


图 1-7 六方金属的点阵和结构关系

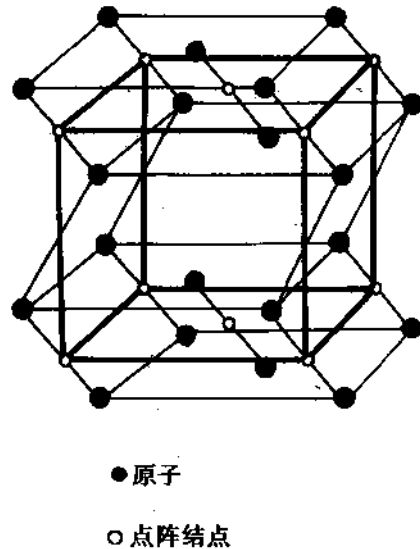


图 1-8 α -U 的点阵和结构关系

第二个例子是 α 铀。它具有底心斜方点阵,在点阵的每一结点周围,按一定的方位和距

离分布了一对铀原子,如图 1-8 所示。图中圆圈代表点阵结点,黑点代表铀原子。这个例子再一次表明,布拉维点阵的结点分布反映晶体中原子或原子集团的分布规律,但结点本身并不一定代表原子,就是说,点阵和晶体结构并不一定相同。

有时人们把实际晶体结构也看成是一个点阵,但不是单一的布拉维点阵,而是由几个布拉维点阵穿插而成的复杂点阵,称为**复式点阵**。例如,上述密排六方结构就可以看成是由两个简单六方点阵穿插而成的复式点阵。显然,复式点阵的结点并非都是等同点,这是它和布拉维点阵的根本区别。

1.2.3.2 晶胞和原胞

我们在前面引出的晶胞和点阵常数的概念是不严格的,原因是晶胞的选取不是唯一的。就是说,从同一点阵中可以选出大小、形状都不同的晶胞,相应的点阵常数自然也就不同,这样就会给晶体的描述带来很大的麻烦。为了确定起见,必须对晶胞的选取方法作一些规定。这规定就是,所选的晶胞应尽量满足以下 3 个条件:(1) 能反映点阵的周期性,将晶胞沿 a, b, c 三个晶轴方向无限重复堆积(或平移)就能得出整个点阵(既不漏掉结点,也不产生多余的结点);(2) 能反映点阵的对称性;(3) 晶胞的体积最小。第(1)个条件是所有晶胞都要满足的(必要条件)。第(2)和第(3)两个条件若不能兼顾,则至少要满足一个。这样就有两种选取方法。

第一种选取方法是在保证对称性(即条件(2))的前提下选取体积尽量小(但不一定是最小)的晶胞。在金属学、金属物理、材料科学、X 射线衍射、电子衍射等学科中以及在实际材料的科研、生产中大都选取这种晶胞,而晶体的点阵常数就是由这种晶胞决定的。这种反映点阵对称性的晶胞也叫**结构胞**。

第二种选取方法只要求晶胞的体积最小,而不一定反映点阵的对称性。这样的晶胞通常称为**原胞**。布拉维点阵的原胞只包含一个结点,故原胞的体积就是一个结点所占的体积。在固体物理中常采用原胞。

图 1-9 和图 1-10 分别画出了 FCC 和 BCC 点阵的原胞,以及它和晶胞的关系。从图看出, FCC 和 BCC 的晶胞都是高度对称的立方体,但体积则不是最小。FCC 晶胞的体积(a^3)是 4 个结点所占的体积,而 BCC 晶胞的体积(a^3)则是两个结点所占的体积。它们的原胞都只包含一个结点,故 FCC 和 BCC 的原胞体积分别为 $a^3/4$ 和 $a^3/2$ 。可见原胞的体积的确是**最小**,但却没有反映立方点阵的对称性。

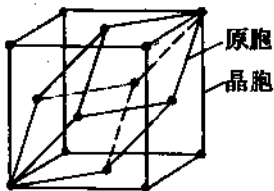


图 1-9 FCC 的原胞与晶胞的关系

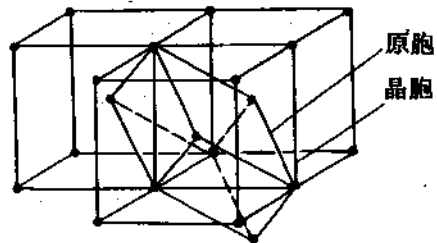


图 1-10 BCC 的原胞与晶胞的关系

密排六方晶体的晶胞和原胞见图 1-11。从图看出,为了反映点阵的六次旋转对称(见

1.9 节),需选取六棱柱晶胞。它包含 2 个整原胞和 2 个“半原胞”,即相当于 3 个原胞的体积,每个原胞包含一个结点,每个晶胞则包含 3 个结点。

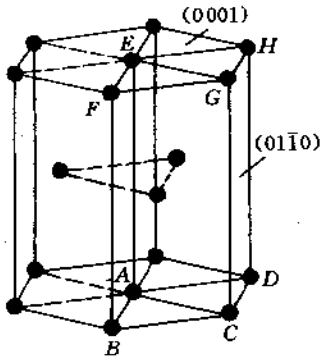


图 1-11 密排六方晶体的晶胞(六棱柱)和原胞(平行六面体 ABCDEFGH)

如果在晶胞中同时给出原子位置,就得到“结构胞”,因为它是晶体结构的最小单元。但习惯上人们往往把结构胞也称为晶胞,就是说,晶胞可以是点阵的最小单元,也可以是晶体结构的最小单元,应视上下文而定。从图 1-11 看,每个原胞中包含 2 个原子,每个晶胞中包含 6 个原子。从简单的几何关系不难证明,当 $c/a = \sqrt{8/3} \approx 1.633$ 时,不仅同一层(与 c 轴垂直的各层)上的相邻原子彼此相切,而且相邻层上的原子也彼此相切,这就是理想的密排六方结构(通常用 CPH 或 HCP 表示)。

顺便指出,原胞的选择也不是唯一的。选择原胞时除了要满足基本要求(即只包含一个结点)外,在可能的情形下,最好使原胞的各边都是点阵的最短平移矢量。例如, BCC 晶体的原胞各边都是体对角线之半, FCC 晶体的原胞各边都是面对角线之半,但六方晶体的原胞各边就不可能都是点阵的最短平移矢量(见图 1-11,该图中原胞是边长为 a, a 和 c 的平行六面体)。

1.3 晶面指数和晶向指数

穿过晶体的原子面(平面)称为晶面。连接晶体中任意原子列的直线方向称为晶向。不同的晶面和晶向具有不同的原子排列和不同的取向。因此,材料的许多性质和行为(如各种物理性质、力学行为、相变、X 光和电子衍射特性等)都和晶面、晶向密切相关。这样,为了研究和描述材料的性质和行为,首先就要设法表征晶面和晶向。

表征晶面和晶向的方法有两种。一种是解析法,即用一组(3 或 4 个)数字表征晶面和晶向。这组数就称为晶面指数或晶向指数。它是材料科学工作者的共同语言。另一种是图示法,即用各种晶体投影图表征晶面或晶向。本节讨论解析表示法。

1.3.1 晶面和晶向指数的确定

1.3.1.1 三指数表示

(1) 晶面指数(或密勒指数)的确定

用三个数字表示的晶面指数也叫密勒指数,其确定步骤如下(参看图 1-12):

1) 建立三组以晶轴 a, b, c 为坐标轴的坐标系,令坐标原点不在待标晶面上,各轴上的坐标单位分别是晶胞边长 a, b 和 c 。

2) 找出待标晶面在 a, b, c 轴上的截距 x, y, z (以 a, b, c 为坐标单位)。

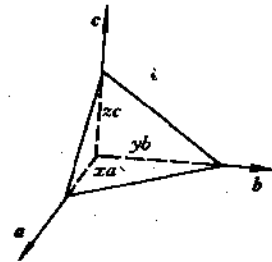


图 1-12 晶面(密勒)指数的确定方法

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

4) 将这些倒数化成三个互质的整数 h, k, l , 使 $h : k : l = \frac{1}{x} : \frac{1}{y} : \frac{1}{z}$ 。

5) 将 h, k, l 置于括号内, 写成 $(h k l)$, 则 $(h k l)$ 就是待标晶面的密勒指数。

例: 确定图 1-13(a) 中的晶面的密勒指数。

选坐标系如图。待标晶面在 a, b, c 轴上的截距分别为 $\frac{1}{2}a, \frac{2}{3}b, \frac{1}{2}c$ 。取倒数后得到 $2, \frac{3}{2}, 2$ 。化成互质整数, 得到 4, 3, 4 三个数。于是该面的密勒指数为 $(4 \ 3 \ 4)$ 。在图 1-13(b) 中标出了各种晶面及其密勒指数。

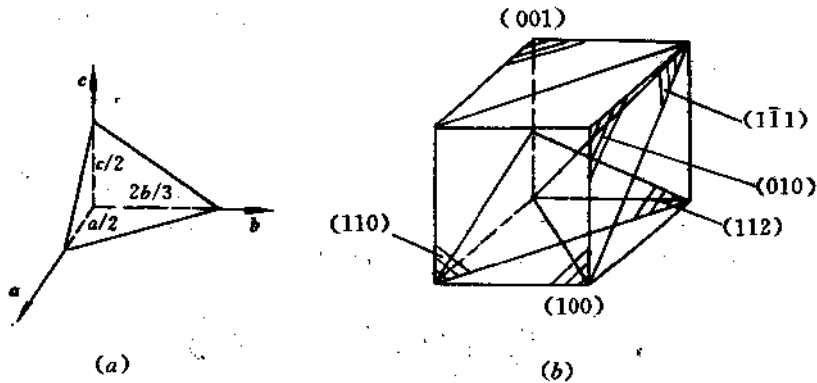


图 1-13 晶面密勒指数的标注

(2) 晶向指数的确定

确定用三指数表示的晶向指数 u, v, w 的步骤如下(图 1-14):

- 1) 建立坐标系, 如上述 1)。但令坐标原点在待标晶向上。
- 2) 找出该晶向上除原点以外的任一点的坐标 x, y, z 。
- 3) 将 x, y, z 化成互质整数 u, v, w , 要求 $u : v : w = x : y : z$ 。
- 4) 将 u, v, w 三数置于中括号内, 就得到晶向指数 $[u \ v \ w]$ 。

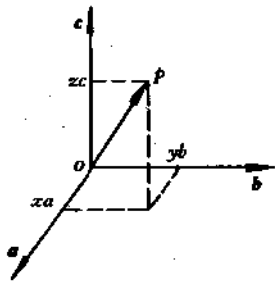


图 1-14 晶向指数的确定方法

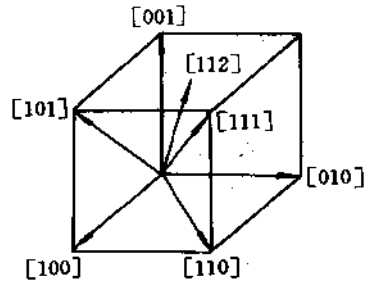


图 1-15 不同的晶向及其指数

图 1-15 中标出的各晶向及其指数就是用以上方法得出的。