

高 等 学 校 教 材

CAILIAO KEXUE JICHU XUEXI ZHIDAO

材料科学基础

学习指导

吕宇鹏 边洁 敖青 主编



化学工业出版社

TB3/100C

2008

高等学校教材

材料科学基础学习指导

吕宇鹏 边 洁 敖 青 主编



化学工业出版社

· 北 京 ·

本书是为材料科学与工程等专业学生学习《材料科学基础》课程而编写的辅导教材。旨在一方面辅导学生全面复习教材内容,掌握基本知识和基本技能;另一方面还注重为学生的自主性、创新性学习提供指导,为学生综合分析和解决问题能力的提高提供思路和资源。

全书共分为 11 章,分别为:晶体结构、晶体缺陷、凝固、固体中的相结构、相图、材料中的扩散、材料的塑性变形、回复与再结晶、固态相变与材料热处理、材料概论和综合思考题。各章分别设置了:基本要求、内容提要、疑难解析、学习方法指导、例题、习题等栏目。各栏目各有不同侧重。

本书可作为材料类、冶金类师生教与学的辅导参考教材,也可作为考研复习用书。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学基础学习指导/吕宇鹏,边洁,敖青主编.
北京:化学工业出版社,2008.4
高等学校教材
ISBN 978-7-122-02357-5

I. 材… II. ①吕…②边…③敖… III. 材料科学-
高等学校-教学参考资料 IV. TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 035443 号

责任编辑:杨 菁 彭喜英
责任校对:宋 夏

文字编辑:李 玥
装帧设计:韩 飞

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)
印 装:北京市兴顺印刷厂
787mm×1092mm 1/16 印张 9¼ 字数 232 千字 2008 年 5 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899
网 址: <http://www.cip.com.cn>
凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价:18.00 元

版权所有 违者必究

前 言

本书是为材料科学与工程等专业学生学习《材料科学基础》课程而编写的辅导教材。为了适应现代高等教育教学发展的需要,本书一方面辅导学生全面复习教材内容,掌握基本知识和基本技能;另一方面还注重为学生的自主性、创新性学习提供指导,为学生综合分析和解决问题能力的提高提供思路和资源。本书可作为材料类、冶金类师生教与学的辅导参考教材,也可作为考研复习用书。

为提高教学与学习效果,本书内容设置了基本要求、内容提要、疑难解析、学习方法指导、例题、习题、综合思考题等栏目。在内容提要部分,较为详细地给出主要概念、主要规律等学习内容,以方便学生整理学习纲目;在疑难解析部分,重点列出了易于混淆或难以理解的内容,并给出较为详细的解答;在学习方法指导部分,结合每章的内容特点,给出了建议性的学习方法及思路;在综合思考题部分,其题目侧重整个教材内容之间的联系,以锻炼学生综合性分析和解决问题的能力。

全书共分11章,按各版本《材料科学基础》一般的内容序列编排。其中第1章、第2章、第7章、第8章、第11章由吕宇鹏编写,第3章、第4章、第5章由陈方生编写,第6章由敖青编写,第9章、第10章由边洁编写。

本书在编写过程中参考了一些兄弟院校和同行编写的教材及辅导资料,并得到山东大学材料科学与工程学院的支持,在此一并致谢。

由于作者水平所限,书中若有疏漏和谬误之处,还请批评指正。

编者

2008年2月

目 录

第 1 章 晶体结构	1	6.2 内容提要	68
1.1 基本要求	1	6.3 疑难解析	70
1.2 内容提要	1	6.4 学习方法指导	72
1.3 疑难解析	3	6.5 例题	72
1.4 学习方法指导	4	6.6 习题及参考答案	74
1.5 例题	5	第 7 章 材料的塑性变形	78
1.6 习题及参考答案	6	7.1 基本要求	78
第 2 章 晶体缺陷	10	7.2 内容提要	78
2.1 基本要求	10	7.3 疑难解析	81
2.2 内容提要	10	7.4 学习方法指导	82
2.3 疑难解析	12	7.5 例题	83
2.4 学习方法指导	14	7.6 习题及参考答案	85
2.5 例题	15	第 8 章 回复与再结晶	87
2.6 习题及参考答案	16	8.1 基本要求	87
第 3 章 凝固	19	8.2 内容提要	87
3.1 基本要求	19	8.3 疑难解析	90
3.2 内容提要	19	8.4 学习方法指导	90
3.3 疑难解析	21	8.5 例题	91
3.4 学习方法指导	22	8.6 习题及参考答案	92
3.5 例题	23	第 9 章 固态相变与材料热处理	94
3.6 习题及参考答案	26	9.1 基本要求	94
第 4 章 固体中的相结构	31	9.2 内容提要	94
4.1 基本要求	31	9.3 疑难解析	102
4.2 内容提要	31	9.4 学习方法指导	103
4.3 疑难解析	33	9.5 例题	108
4.4 学习方法指导	33	9.6 习题及参考答案	111
4.5 例题	34	9.7 课堂讨论 (“钢的热处理原理与 工艺” 部分)	118
4.6 习题及参考答案	36	第 10 章 材料概论	121
第 5 章 相图	40	10.1 基本要求	121
5.1 基本要求	40	10.2 内容提要	121
5.2 内容提要	40	10.3 疑难解析	127
5.3 疑难解析	43	10.4 学习方法指导	129
5.4 学习方法指导	44	10.5 例题	130
5.5 例题	46	10.6 习题及参考答案	133
5.6 习题及参考答案	54	10.7 课堂讨论 (“工业用钢” 部分)	139
5.7 课堂讨论 (Fe-Fe ₃ C 相图部分)	65	第 11 章 综合思考题	141
第 6 章 材料中的扩散	68	参考文献	142
6.1 基本要求	68		

第1章 晶体结构

1.1 基本要求

① 综合比较材料中的各种结合键，认识材料的三大类别：金属材料、无机非金属材料和高分子聚合物材料。

② 建立空间点阵和单位晶胞的概念，并能用于分析原子及其他组成单元的排列。

③ 掌握晶向、晶面指数的标定方法。一般由原点至离原点最近一个结点 (u, v, w) 的连线来标定其指数。如此方向即定为 $[uvw]$ 。 u, v, w 之值必须是互质。晶面指数为晶面和三轴相交的三个截距系数的倒数，约掉分数和公因数之后所得的最小整数值。若给出具体的晶向、晶面时会标注“指数”；若给出具体“指数”时，会在三维空间图上画出其位置。

④ 熟悉常见典型晶体中原子的规则排列形式，主要是面心立方、体心立方和密排六方结构及其晶格模型、单胞原子数、致密度、配位数和间隙特征等。

1.2 内容提要

1.2.1 原子的结合方式

1.2.1.1 原子结合键

(1) 离子键与离子晶体

原子结合：电子转移，结合力大，无方向性和饱和性。

离子晶体：硬度高、脆性大、熔点高、导电性差。如氧化物陶瓷。

(2) 共价键与原子晶体

原子结合：电子共用，结合力大，有方向性和饱和性。

原子晶体：强度高、硬度高（金刚石）、熔点高、脆性大、导电性差。

(3) 金属键与金属晶体

原子结合：电子逸出共有，结合力较大，无方向性和饱和性。

金属晶体：导电性、导热性、延展性好，熔点较高。如金属。

金属键：依靠正离子与构成电子气的自由电子之间的静电引力而使诸原子结合到一起的方式。

(4) 分子键与分子晶体

原子结合：电子云偏移，结合力很小，无方向性和饱和性。

分子晶体：熔点低，硬度低。如高分子材料。

氢键：（离子结合） $X-H\cdots Y$ （氢键结合），有方向性。如 $O-H\cdots O$ 。

(5) 混合键 如复合材料。

2 材料科学基础学习指导

1.2.1.2 结合键分类

- (1) 一次键（化学键） 金属键、共价键、离子键。
- (2) 二次键（物理键） 分子键和氢键。

1.2.1.3 原子的排列方式

- (1) 晶体 原子在三维空间内的周期性规则排列。长程有序，各向异性。
- (2) 非晶体 原子在三维空间内的不规则排列。长程无序，各向同性。

1.2.2 晶体学基础

1.2.2.1 空间点阵与晶体结构

- (1) 空间点阵 由几何点做周期性的规则排列所形成的三维阵列。

特征：①点的理想排列；②有 14 种。其中，空间点阵中的点——阵点。它是纯粹的几何点，各点周围环境相同。描述晶体中原子排列规律的空间格架称为晶格。空间点阵中最小的几何单元称为晶胞。

- (2) 晶体结构 原子、离子或原子团按照空间点阵的实际排列。

特征：①可能存在局部缺陷；②可有无限多种。

1.2.2.2 晶胞

- (1) 晶胞 构成空间点阵的最基本单元。

(2) 选取原则 ①能够充分反映空间点阵的对称性；②相等的棱和角的数目最多；③具有尽可能多的直角；④体积最小。

- (3) 形状和大小 由三个棱边的长度 a, b, c 及其夹角 α, β, γ 表示。

1.2.2.3 布拉菲点阵

14 种点阵分属 7 个晶系。

1.2.2.4 晶向指数与晶面指数

晶向：空间点阵中各阵点列的方向。晶面：通过空间点阵中任意一组阵点的平面。国际上通用米勒指数标定晶向和晶面。

- (1) 晶向指数的标定 ①建立坐标系，确定原点（阵点）、坐标轴和度量单位（棱边）；②求坐标， u', v', w' ；③化整数， u, v, w ；④加 $[\]$ ， $[uvw]$ 。

说明：指数代表相互平行、方向一致的所有晶向；负值：标于数字上方，表示同一晶向的相反方向。晶向族：晶体中原子排列情况相同但空间位向不同的一组晶向。用 $\langle uvw \rangle$ 表示，数字相同，但排列顺序不同或正负号不同的晶向属于同一晶向族。

- (2) 晶面指数的标定 ①建立坐标系，确定原点（非阵点）、坐标轴和度量单位；②量截距， x, y, z ；③取倒数， h', k', l' ；④化整数， h, k, l ；⑤加圆括号，如 (hkl) 。

说明：指数代表一组平行的晶面；0 的意义：面与对应的轴平行；平行晶面：指数相同，或数字相同但正负号相反；晶面族：晶体中具有相同条件（原子排列和晶面间距完全相同），空间位向不同的各组晶面。用 $\{hkl\}$ 表示。若晶面与晶向同面，则 $hu + kv + lw = 0$ ；若晶面与晶向垂直，则 $u = h, v = k, w = l$ 。

- (3) 六方系晶向指数和晶面指数 六方系数数标定的特殊性：采用四轴坐标系（因等价晶面不具有等价指数）。

- (4) 晶带 平行于某一晶向直线（晶带轴）所有晶面（晶带面）的组合。

性质：晶带用晶带轴的晶向指数表示，晶带面平行于晶带轴，其指数符合 $hu + kv + lw = 0$ 。

(5) 晶面间距 一组平行晶面中，相邻两个平行晶面之间的距离。

计算公式（简单立方）： $d = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$ 。

注意只适用于简单晶胞。对于面心立方 hkl 不全为偶数、奇数，体心立方 $h + k + l =$ 奇数时， $d_{(hkl)} = d/2$ 。

1.2.3 典型晶体结构及其几何特征

1.2.3.1 三种常见晶体结构

项 目	面心立方(A1,fcc)		体心立方(A1,bcc)		密排六方(A3,hcp)	
晶胞原子数	4		2		6	
点阵常数	$a = 2\sqrt{2}r$		$a = \frac{4}{3}\sqrt{3}r$		$a = 2r$	
配位数	12		8(8+6)		12	
致密度	0.74		0.68		0.74	
堆垛方式	ABCABC...		ABABAB...		ABABAB...	
结构间隙	正四面体	正八面体	四面体	扁八面体	四面体	正八面体
个数	8	4	12	6	12	6
r_B/r_A	0.225	0.414	0.291	0.155	0.225	0.414

配位数 (CN)：晶体结构中任一原子周围最近且等距离的原子数。

致密度 (K)：晶体结构中原子体积占总体积的百分数。 $K = nv/V$ 。

间隙半径 (r_B)：间隙中所能容纳的最大圆球半径。

1.2.3.2 离子晶体的结构

(1) 鲍林第一规则（负离子配位多面体规则） 在离子晶体中，正离子周围形成一个负离子配位多面体，正负离子间的平衡距离取决于正负离子半径之和，正离子的配位数取决于正负离子的半径比。

(2) 鲍林第二规则（电价规则含义） 一个负离子必定同时被一定数量的负离子配位多面体所共有。

(3) 鲍林第三规则（棱与面规则） 在配位结构中，共用棱特别是共用面的存在，会降低这个结构的稳定性。

1.2.3.3 共价键晶体的结构

(1) 饱和性 一个原子的共价键数为 $8 - N$ 。

(2) 方向性 各键之间有确定的方位。

1.2.4 多晶型性

元素的晶体结构随外界条件的变化而发生转变的性质。

1.3 疑难解析

1.3.1 空间点阵与晶体结构有何区别

空间点阵的概念是为了分析计算晶体结构而抽象出来的概念，它是由几何点在三维空间理想的周期性规则排列而成，没有缺陷，共有 14 种；点阵中每个点周围的环境都相同，因

而理论上空间点阵应是无穷大的。晶体结构则是用于表示组成晶体的具体单元，如原子、分子、原子团在三维空间的实际排列，可存在缺陷，因而某物质的晶体结构种类可有很多。

具有不同结构的晶体可以有相同的空间点阵（空间格子），如 NaCl 和金刚石。由同种物质构成的晶体可以有不同的空间点阵，如金刚石和石墨。

1.3.2 标定米勒指数时如何正确确定与使用坐标系度量单位

米勒指数标定建立坐标系的度量单位是晶胞的晶格常数 (a, b, c)，即在三个轴上的度量单位分别是 a, b, c ，因而该坐标系的度量单位不一定相等。分析有关问题，特别是进行指数标定时应注意不要统一度量单位。

1.3.3 晶向指数、晶面指数有哪些含义

晶向指数、晶面指数除了表示该指数所确定的一组晶向或晶面的空间方位，还包含晶面或晶向上的原子排列信息。一个指数代表了特定原子排列，如晶向或晶面上原子的线密度或面密度。扩展开来，提出了晶向族和晶面族的概念，把空间不同方位但原子排列与周围环境都相同的晶向或晶面都用一个指数表示。

1.3.4 计算点阵间隙半径时如何选择几何关系

在计算晶格间隙半径时，关键是找到正确的间隙半径与晶格常数的几何关系。有些关于晶格间隙的图示常看起来间隙较大，使人认为代表晶格间隙的刚球会首先和组成间隙的各边相切。实际上通过原子堆垛图可以看出，该刚球首先和组成间隙顶点的原子相切，在此基础上建立几何关系即可计算出间隙半径。

1.4 学习方法指导

1.4.1 高度认识本章内容的重要性

本章既是课程的入门内容，也是材料科学领域基础和常用的内容。初次接触较多的名词术语可能理解和接受较为困难，但这些名词术语在今后的学习中要经常用到，随着后续学习的进行会很快掌握。

1.4.2 在概念性内容掌握上要重视对其本质的理解

如金属键是由自由电子“气”与金属离子的结合；空间点阵中的点是几何点，每点周围的环境都相同；晶胞的首要特征是充分反映空间点阵的对称性等。

1.4.3 对指标性内容采用记忆和推算相结合的方式掌握

这类指标如单胞原子数、致密度、配位数、间隙半径等，有的记忆相对容易，有的通过画图计算的方式也较为简便，可以结合自己的特长进行选择。

1.4.4 建立本章的内容体系

从宏观上建立内容体系，有利于对内容的全面掌握。图 1-1 所示的思路可供参考。

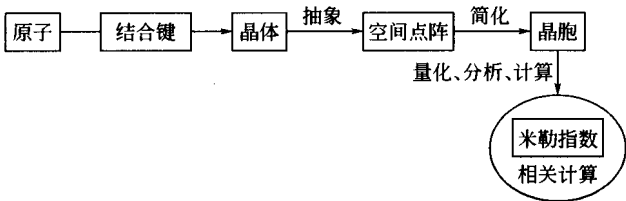


图 1-1 晶体结构内容体系

1.5 例题

例题 1-1 试证明理想密排六方结构的轴比 $\frac{c}{a} = 1.633$ 。

解：此题的关键在于从密排六方结构中找到能够建立 c 与 a 关系的几何关系。如图 1-2 所示。等边三角形的高：

$$h = \sqrt{\frac{3}{4}}a$$

$$d = \sqrt{\left(\frac{c}{2}\right)^2 + \left(\frac{2h}{3}\right)^2} = \sqrt{\frac{c^2}{4} + \frac{a^2}{3}}$$

在理想密排六方晶体结构中 $d = a$ ，所以：

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.633$$

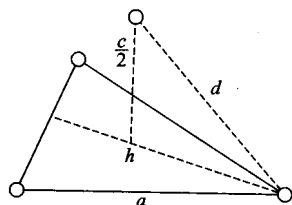


图 1-2

例题 1-2 在一个立方晶胞中画出 (111) 面及 $(\bar{1}10)$ 面，并画出同时位于该两面上属于 $\langle 112 \rangle$ 晶向族中的某晶向。

解：先画出上述两晶面，同时位于两晶面的晶向必然是两晶面的交线，而此交线的晶向指数为 $[11\bar{2}]$ ，属于 $\langle 112 \rangle$ 晶向族。

例题 1-3 纯铝晶体为面心立方点阵，已知铝的相对原子质量 $A_r(\text{Al}) = 26.97$ ，原子半径 $r = 0.143\text{nm}$ ，求铝晶体的密度。

解：密度即质量与体积的比值。在此题中，以一个晶胞为计算对象，计算一个晶胞内原子的质量和该晶胞的体积即可。纯铝晶体为面心立方点阵，每个晶胞有 4 个原子，点阵常数 a 可由原子半径求得。即：

$$a = 2\sqrt{2}r = 2\sqrt{2} \times 0.143 = 0.404 \text{ (nm)}$$

所以密度：

$$\rho = \frac{A_r(\text{Al})}{\frac{1}{4}N_0a^3} = \frac{26.97}{\frac{1}{4} \times 6.023 \times 10^{23} \times (0.404 \times 10^{-7})^3} = 2.716 \text{ (g/cm}^3\text{)}$$

例题 1-4 ① 按晶体的刚球模型，若球的直径不变，当 Fe 从 fcc 转变为 bcc 时，计算其体积膨胀多少？

② 经 X 射线衍射测定，在 912°C 时， $\alpha\text{-Fe}$ 的 $a = 0.2892\text{nm}$ ， $\gamma\text{-Fe}$ 的 $a = 0.3633\text{nm}$ ，计算从 $\gamma\text{-Fe}$ 转变为 $\alpha\text{-Fe}$ 时，其体积膨胀为多少？与①相比，说明其产生差别的原因。

解：解此题首先要确定结构虽然变化，但总的原子数不变。那么总体积发生变化必然导致每个原子所占的体积发生变化，而且总体积的变化率与单个原子所占体积的变化率相等。

① 首先计算晶胞总体积，然后根据单胞原子数计算出单个原子所占的体积：

$$a_{\text{fcc}} = \frac{4}{\sqrt{2}}r \Rightarrow V_{\text{fcc单胞}} = a_{\text{fcc}}^3 = \frac{64}{2\sqrt{2}}r^3$$

$$a_{\text{bcc}} = \frac{4}{\sqrt{3}}r \Rightarrow V_{\text{bcc单胞}} = a_{\text{bcc}}^3 = \frac{64}{3\sqrt{3}}r^3$$

$$\Delta V_{\gamma \rightarrow \alpha} = \frac{\frac{1}{2} \times \frac{64}{3\sqrt{3}}r^3 - \frac{1}{4} \times \frac{64}{2\sqrt{2}}r^3}{\frac{1}{4} \times \frac{64}{2\sqrt{2}}r^3} = 9\%$$

② 将给出的具体数值代入上式, 对于 fcc 结构:

$$r = \frac{\sqrt{2}}{4} a = \frac{\sqrt{2}}{4} \times 0.3633 = 0.1284 \text{ (nm)}$$

对于 fcc 结构:

$$r = \frac{\sqrt{3}}{4} a = \frac{\sqrt{3}}{4} \times 0.2892 = 0.1252 \text{ (nm)}$$

$$\Delta V_{\gamma \rightarrow \alpha} = \frac{\frac{1}{2} \times (0.2892)^3 - \frac{1}{4} \times (0.3633)^3}{\frac{(0.3633)^3}{4}} = 0.89\%$$

产生差别的原因: 晶体结构不同, 原子半径大小也不同; 晶体结构中原子配位数降低时, 原子半径发生收缩。

1.6 习题及参考答案

1.6.1 习题

习题 1-1 名词和术语解释

材料科学、晶体、非晶体;

结合能、结合键、离子键、共价键、金属键、分子键、氢键;

金属材料、陶瓷材料、高分子材料、复合材料;

空间点阵、晶体结构、晶格、晶胞、晶系、布拉菲点阵;

晶格常数、晶胞原子数、配位数、致密度;

晶面、晶向、晶面指数、晶向指数、晶面族、晶向族;

各向异性、各向同性;

原子堆积、同素异构转变;

陶瓷、离子晶体、共价晶体。

习题 1-2 分析金属键和共价键的异同。

习题 1-3 试证明四方晶系中只有简单四方点阵和体心四方点阵两种类型。

习题 1-4 为什么密排六方结构不能称为一种空间点阵?

习题 1-5 作图表示立方晶体的 (123)、(0 $\bar{1}$ 2)、(421) 晶面及 [$\bar{1}$ 02]、[$\bar{2}$ 11]、[346] 晶向。

习题 1-6 ① 计算 fcc 和 bcc 晶体中四面体间隙及八面体间隙的大小 (用原子半径 R 表示), 并注明间隙中心坐标。

② 指出溶解在 γ -Fe 中碳原子所处的位置, 若此位置全部被碳原子占据, 那么, 问在此情况下, γ -Fe 能溶解 C 的质量分数为多少? 实际上, 碳在铁中的最大溶解质量分数是多少? 二者在数值上有差异的原因是什么?

习题 1-7 计算面心立方结构 (111)、(110)、(100) 晶面的面间距和原子密度 (原子个数/单位面积)。

习题 1-8 比较金属材料、陶瓷材料、高分子材料和复合材料在结合键上的差别。

1.6.2 参考答案

习题 1-1 略。

习题 1-2 二者在结合形式上都是电子共用, 结合力大。但二者电子共用的范围不同, 共价键有方向性和饱和性, 金属键没有方向性和饱和性。

习题 1-3 可作图加以证明四方晶系表面上也可含简单四方、底心四方、面心四方和体心四方结构, 然而根据选取晶胞的原则, 晶胞应具有最小的体积, 尽管可以从 4 个体心四方晶胞中勾出面心四方晶胞 [图 1-3(a)], 从 4 个简单四方晶胞中勾出 1 个底心四方晶胞 [图 1-3(b)], 但它们均不具有最小的体积。因此, 四方晶系实际上只有简单四方和体心四方两种独立的点阵。

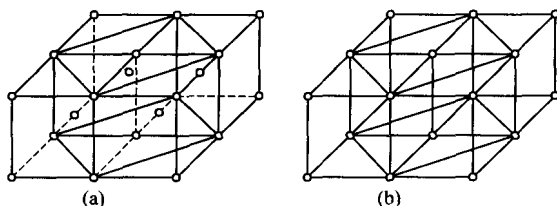


图 1-3

习题 1-4 空间点阵中每个阵点应具有完全相同的周围环境, 而密排六方晶胞内的原子与晶胞角上的原子具有不同的周围环境。如图 1-4 在 A 和 B 原子连线的延长线上取 $BC=AB$, 然而 C 点却无原子。若将密排六方晶胞角上的一个原子与相应的晶胞内的一个原子共同组成一个阵点 ($0, 0, 0$ 阵点可视作由 $0, 0, 0$ 和 $\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}$ 这一对原子所做成), 如图 1-4 所示, 这样得出的密排六方结构应属简单六方点阵。

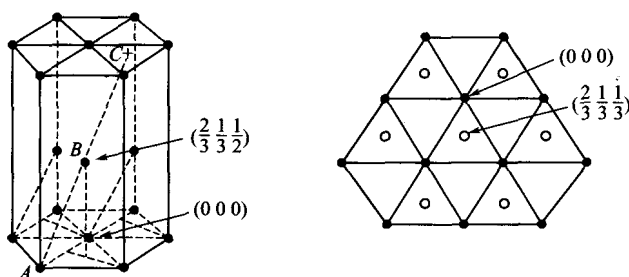


图 1-4

习题 1-5 略。

习题 1-6 参照图 1-5 所示和疑难解析中的有关内容。

① fcc 八面体间隙半径:

$$r = \frac{a - 2R}{2} = \frac{\frac{4}{\sqrt{2}}R - 2R}{2} = 0.414R$$

间隙中心坐标: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ 。

fcc 四面体间隙半径:

$$r = \frac{\sqrt{3}}{4}a - R = \left[\frac{\sqrt{3}}{4} \times \frac{4}{\sqrt{2}} - 1 \right] R = 0.225R$$

间隙中心坐标: $\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$ 。

bcc 八面体间隙半径:

$$r = \frac{a - 2R}{2} = \frac{\frac{4}{\sqrt{3}}R - 2R}{2} = 0.155R$$

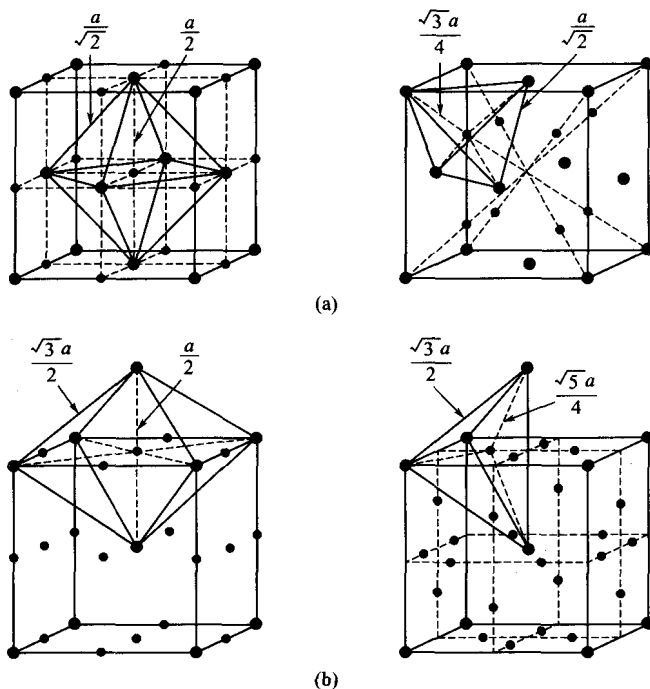


图 1-5

间隙中心坐标: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ 。

bcc 四面体间隙半径:

$$r = \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{4}\right)^2} - R = \left[\frac{\sqrt{5}}{4} \times \frac{4}{\sqrt{3}} - 1\right] R = 0.291R$$

间隙中心坐标: $\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 1$ 。

② γ -Fe 为 fcc 结构, 八面体间隙半径较大, 所以 γ -Fe 中的碳原子一般处于八面体间隙位置。由于 fcc 结构中八面体间隙数与原子数相等, 若此类位置全部被碳原子占据, 则 γ -Fe 中碳原子数分数为 50%, 质量分数为 17.6%。而实际上碳在 γ -Fe 中最大质量分数为 2.11%, 远小于理论值, 这是因为碳原子半径为 0.077nm, 大于八面体间隙半径 (0.054nm), 所以碳的溶入会引起 γ -Fe 晶格畸变, 这就妨碍了碳原子进一步的溶入。

习题 1-7

$$d_{(111)} = \frac{a}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2}} = \frac{\sqrt{3}}{3}a$$

$$d_{(110)} = \frac{a}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}} \times \frac{1}{2} = \frac{\sqrt{2}}{4}a$$

$$d_{(100)} = \frac{a}{\sqrt{1^2 + 0^2 + 0^2}} \times \frac{1}{2} = \frac{a}{2}$$

面心立方 (111)、(110)、(100) 面的原子排列如图 1-6 所示, 各面面密度如下。

$$\rho_{(111)} = \frac{3 \times \frac{1}{6} + 3 \times \frac{1}{2}}{\frac{1}{2} \sqrt{2} a \times \frac{\sqrt{6}}{2} a} = \frac{4}{a^2 \sqrt{3}} \approx 2.31/a^2$$

$$\rho_{(110)} = \frac{4 \times \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \times 2}{a^2 \sqrt{2}} = \sqrt{2}/a^2 \approx 1.41/a^2$$

$$\rho_{(100)} = (4 \times \frac{1}{4} + 1)/a^2 = 2/a^2$$

由计算结果可以知道 $\{111\}$ 面为最密排面。

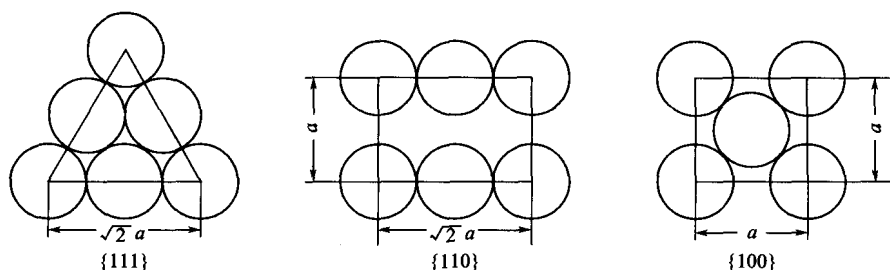


图 1-6

习题 1-8 简单金属（指元素周期表上主族元素）的结合键完全为金属键，过渡族金属的结合键为金属键和共价键的混合，但以金属键为主。

陶瓷材料是由一种或多种金属同一种非金属（通常为氧）相结合的化合物，其主要结合方式为离子键，也有一定成分的共价键。

在分子材料中，大分子内的原子之间结合方式为共价键，而大分子与大分子之间的结合方式为分子键。

复合材料是由两种或两种以上的材料组合而成的物质，因而其结合键非常复杂，不能一概而论。

第2章 晶体缺陷

2.1 基本要求

① 掌握材料中各种晶体缺陷的分类方法、基本类型和基本性质，初步认识晶体缺陷对材料物理、化学和力学性质等的影响。

② 掌握点缺陷的热力学特点，了解点缺陷对材料结构和性能的影响。

③ 掌握位错类型的判断方法、位错的特点、柏氏矢量的意义与性质、位错易动性的本质、位错的增殖机制、位错反应的判断方法，熟悉与位错有关力的意义与推导，了解位错的应力场、位错的交割、实际晶体中位错的类型。

④ 掌握常见面缺陷的结构模型，熟悉表面与界面的特点。

2.2 内容提要

2.2.1 点缺陷

2.2.1.1 点缺陷的类型

(1) 空位

肖脱基空位：离位原子进入其他空位或迁移至晶界或表面。

弗伦克尔空位：离位原子进入晶体间隙。

(2) 间隙原子 位于晶体点阵间隙的原子。

(3) 置换原子 位于晶体点阵位置的异类原子。

2.2.1.2 点缺陷的平衡浓度

(1) 点缺陷是热力学平衡的缺陷 在一定温度下，晶体中总是存在着一定数量的点缺陷（空位），这时体系的能量最低——具有平衡点缺陷的晶体比理想晶体在热力学上更为稳定。

(2) 点缺陷的平衡浓度 $C = A \exp(-\Delta E_v/kT)$ 。

2.2.1.3 点缺陷的产生及其运动

(1) 点缺陷的产生 平衡点缺陷：热振动中的能力起伏；过饱和点缺陷：外来作用，如高温淬火、辐照、冷加工等。

(2) 点缺陷的运动 点缺陷的迁移、复合导致其浓度降低；点缺陷聚集导致其浓度升高或塌陷。

2.2.1.4 点缺陷与材料行为

(1) 结构变化 晶格畸变。如空位引起晶格收缩，间隙原子引起晶格膨胀，置换原子可引起收缩或膨胀。

(2) 性能变化 物理性能, 如电阻率增大, 密度减小。力学性能, 如屈服强度提高。

2.2.2 线缺陷 (位错)

位错: 晶体中某处一列或若干列原子有规律的错排。

意义: 对材料的力学行为 (如塑性变形、强度、断裂等) 起着决定性的作用, 对材料的扩散、相变过程有较大影响。

2.2.2.1 位错的基本类型

主要包括刃型位错、螺型位错和混合位错。其中位错线、晶体滑移方向、位错运动方向具有确定的关系。

2.2.2.2 位错的性质

位错的实际形状不是一条直线, 位错及其畸变区是一条管道。位错是晶体已滑移区和未滑移区的边界, 因而不能中断于晶体内部。但可在表面露头, 或终止于晶界和相界, 或与其他位错相交, 或自行封闭成环。

2.2.2.3 柏氏矢量

(1) 确定方法 (避开严重畸变区) ①在位错周围沿着点阵结点形成封闭回路; ②在理想晶体中按同样顺序作同样大小的回路; ③在理想晶体中从终点到起点的矢量即为柏氏矢量。

(2) 柏氏矢量的物理意义与应用 ①代表位错, 并表示其特征 (强度、畸变量); ②表示位错引起的晶体滑移的方向和大小; ③柏氏矢量的守恒性 (唯一性): 一条位错线具有唯一的柏氏矢量; ④判断位错的类型。

(3) 柏氏矢量的表示方法

表示: $\mathbf{b} = \frac{a}{n} [uvw]$ (可以用矢量加法进行运算)。

求模: $|\mathbf{b}| = \frac{a}{n} \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$ 。

2.2.2.4 位错的运动

位错具有易动性, 即通过原子的微小移动导致晶体的变形。位错的运动方式主要是滑移和攀移。与位错有关的三个力分别是作用在位错上的力、位错的线张力和保持位错弯曲所需的切应力。

2.2.2.5 位错的应力场及其与其他缺陷的作用

位错具有特定的应力场, 因而可发生位错与位错、位错与溶质原子等的相互作用。在这种作用下, 位错形成特定的排列状态, 形成柯氏气团等组态。

2.2.2.6 位错的增殖、塞积与交割

位错的增殖的主要机制是 F-R 源。位错遇到障碍物后发生塞积, 在切应力作用在位错上的力、位错间的排斥力、障碍物的阻力的作用下, 形成逐步分散的排列状态。位错与位错发生交割后形成割阶或扭折, 可按照方位错柏氏矢量的方向和大小进行判断。

2.2.2.7 位错反应

(1) 位错反应 位错的分解与合并。

(2) 反应条件

几何条件: $\sum \mathbf{b}_{\text{前}} = \sum \mathbf{b}_{\text{后}}$, 反应前后位错的柏氏矢量之和相等。

能量条件: $\sum b_{\text{前}}^2 > \sum b_{\text{后}}^2$, 反应后位错的总能量小于反应前位错的总能量。

2.2.2.8 实际晶体中的位错

(1) 全位错 通常把柏氏矢量等于点阵矢量的位错称为全位错或单位位错。

(2) 不全位错 柏氏矢量小于点阵矢量的位错。

(3) 肖克莱和弗兰克不全位错

肖克莱不全位错的形成：原子运动导致局部错排，错排区与完整晶格区的边界线即为肖克莱不全位错（结合位错反应理解，可分为刃型、螺型或混合型位错）。

弗兰克不全位错的形成：在完整晶体中局部抽出或插入一层原子所形成（只能攀移，不能滑移）。

(4) 堆垛层错与扩展位错

堆垛层错：晶体中原子堆垛次序中出现的层状错排。

扩展位错：一对不全位错及中间夹的层错。

2.2.3 面缺陷（界面）

2.2.3.1 晶界

(1) 晶界 两个空间位向不同的相邻晶粒之间的界面。

(2) 分类

大角度晶界：晶粒位向差大于 10° 的晶界。其结构为几个原子范围内的原子的混乱排列，可视为一个过渡区。

小角度晶界：晶粒位向差小于 10° 的晶界。其结构为位错列，又分为对称倾侧晶界和扭转晶界。

亚晶界：位向差小于 1° 的亚晶粒之间的边界。为位错结构。

孪晶界：两块相邻孪晶的共晶面。分为共格孪晶界和非共格孪晶界。

2.2.3.2 相界

(1) 相界 相邻两个相之间的界面。

(2) 分类 共格、半共格和非共格相界。

2.2.3.3 表面

(1) 表面吸附 外来原子或气体分子在表面上富集的现象。

(2) 分类

物理吸附：由分子键力引起，无选择性，吸附热小，结合力小。

化学吸附：由化学键力引起，有选择性，吸附热大，结合力大。

2.2.3.4 界面特性

① 界面能会引起界面吸附。

② 界面上原子扩散速度较快。

③ 对位错运动有阻碍作用。

④ 易被氧化和腐蚀。

⑤ 原子的混乱排列利于固态相变的形核。

2.3 疑难解析

2.3.1 如何认识晶体缺陷在材料科学中的重要意义

晶体缺陷名为缺陷，但实际上是材料科学与工程的重要基础。如对完美的晶体人们难以