



普通高等教育“十三五”规划教材暨智能制造领域人才培养规划教材



扫码获取配套数字资源

# 工程材料及其应用

GONGCHENG CAILIAO JI QI YINGYONG

主编 徐志农 倪益华

主审 周华民



华中科技大学出版社  
<http://www.hustp.com>



普通高等教育“十三五”规划教材暨智能制造领域人才培养规划教材

# 工程材料及其应用

主 编 徐志农 倪益华  
副主编 赵 朋 吴超华  
主 审 周华民



华中科技大学出版社  
中国·武汉

## 内 容 简 介

本书根据教育部高等学校机械基础课程教学指导分委员会制定的工程材料课程教学基本内容和要求编写,在保留工程材料核心内容的基础上,增加了提高学生兴趣的元素和内容。每章后附有“身边的工程材料”,将抽象的理论和现实生活结合起来,提高学生的阅读兴趣,增加学生对工程材料的感性理解。课程中诸多核心知识点和专业术语配有网络媒体素材,可以用移动终端扫描二维码获取,便于学生自主学习和理解。

全书共8章,主要包括:金属材料结构及力学性能、金属的塑性变形与再结晶、铁碳合金、钢的热处理、合金钢、非铁金属及其合金、其他工程材料和工程材料的选择及应用。

本书可作为高等院校机械类和近机类各专业的教材,也可供远程教育、成人高校、电视大学等机构选作教材或参考书,还可供有关工程技术人员参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

工程材料及其应用/徐志农,倪益华主编. —武汉:华中科技大学出版社,2019.3  
普通高等教育“十三五”规划教材暨智能制造领域人才培养规划教材  
ISBN 978-7-5680-5081-4

I. ①工… II. ①徐… ②倪… III. ①工程材料 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2019)第 048197 号

### 工程材料及其应用

徐志农 倪益华 主编

GONGCHENG CAILIAO JI QI YINGYONG

策划编辑:万亚军

责任编辑:邓薇

封面设计:原色设计

责任监印:周治超

出版发行:华中科技大学出版社(中国·武汉)

电话:(027)81321913

武汉市东湖新技术开发区华工科技园

邮编:430223

录排:武汉三月禾文化传播有限公司

印刷:湖北新华印务有限公司

开本:787mm×1092mm

印张:18

字数:456千字

版次:2019年3月第1版第1次印刷

定价:45.00元



华中出版

本书若有印装质量问题,请向出版社营销中心调换  
全国免费服务热线:400-6679-118 竭诚为您服务  
版权所有 侵权必究

# 前 言

本书作为“普通高等教育‘十三五’规划教材暨智能制造领域人才培养规划教材”之一,根据教育部高等学校机械基础课程教学指导分委员会对工程材料及机械制造基础课程教学的基本要求,参照机械基础课程教学指导分委员会和工程训练教学指导委员会教研项目“工程材料与机械制造基础课程知识体系和能力要求”“工程材料与机械制造基础课程标准的制定依据和原则”,以及高校教育面向 21 世纪教学内容和课程体系改革项目“机械类专业人才培养方案和课程体系改革的研究与实践”等相关研究成果进行编写。在上述基础上,本书的编写还融合了兄弟院校的多年实际教学经验,按照当前本科机械类和近机类专业人员对材料及成形技术知识的要求,以及学生的学习接受能力,搭建了本教材的基本架构。

全书共 8 章,每一章结尾都附有一定量的习题,系统阐述了金属材料的力学性能、金属的体结构与结晶、金属的塑性变形理论及再结晶过程、材料的分类与性能、合金的相组成与相图分析、铁碳合金、工业用钢、工业铸铁、合金钢、非铁金属及其合金、非金属材料、特殊用途材料、钢的热处理、表面工程技术、机械工程材料选用与成形工艺制定等基本原理与基础知识。

本书在内容取舍和编写体系方面有一定的改革创新,并力求为适应“智能制造”的大工程发展前景做出教学探索。本书的编写主要体现了以下几个特点。

(1) 全书依据课程教学基本要求编写。其一,根据课程的知识体系和能力要求体系,保留了现有同类教材的基本内容;其二,基于本课程的专业教育属性及与机械制造基础和实习中部分通识教育属性的关系,围绕人才培养需求、产品制造流程逻辑关系和教学特点,汇集了工程材料及其与机械制造相关的有代表性知识点,精选了工程材料教学内容;其三,从培养学生选择工程材料及应用成形工艺能力出发,去掉一些繁冗的细节,既避免本书内容过于繁杂而不利于教学,又在某些方面适当加深或拓宽,如对新材料和新工艺及其发展趋势的介绍,以适应科技发展对材料的多样性需求;其四,根据相关专业的教学要求及规定学时,可选择适当内容进行讲授,能适合 24~56 学时的课堂教学。

(2) 系统性地处理专业课程教育的理论深度与工程应用的通识性教育的关系。如对以往同类教材关于金属材料结构的内容进行了整合与筛选,并加入了关于材料力学性能的内容,组成了本书第 1 章,以鼓励机械类学生将工程材料课程与材料力学课程进行同步参考学习,培养学生的联动思维。对于尚未学习材料力学的学生,第 1 章则可以选择性地发挥本课程入门作用。又如在本书的第 4 章“钢的热处理”中适度配置了热喷涂、涂装、表面形变强化等表面工程技术内容,拓宽热处理技术的外延,丰富了教学内容。

(3) 提供了“互联网+”教学平台的服务内容。为促进学生学习理解本书内容,针对教材中各重要知识点和关键名词配有相关教学视频(视频仅供参考,以教材为准),并将视频链接以二维码形式附在对应名词或知识点后面,方便学生自学与课后复习。

(4) 力求做到寓教于乐。本书中每个章节末尾都附有“身边的工程材料”环节,该环节或介绍与本章内容相关的故事、新闻、社会热点等内容,或具有一定的选材应用逻辑关系,既归纳本章要点又拓宽学生的知识面,激发学生的学习兴趣,起到将本章所学知识付诸实际应用的启迪作用。

(5) 全书的名词术语、符号和计量单位采用最新国家标准及其他有关标准,如采用新国家标准规定的强度与塑性指标的表示方法等。标准内容与教材内容紧密结合。

本书可作为高等院校理工科机械类及近机类专业的教学用书,也可供远程教育、成人高校、电视大学等机构选作教材或参考书,还可供有关技术人员参考。使用本书时,可结合专业的具体情况进行调整,有些内容可供学生自学。

本书由徐志农、倪益华任主编,赵朋、吴超华任副主编,参加本书的编写并做出贡献的还有严波、李吉泉、侯英岢、倪忠进、许小锋、周继烈、尹俊。分工如下:第1章,上海交通大学严波;第2章,浙江工业大学李吉泉;第3章,浙江农林大学侯英岢、倪忠进;第4章,浙江大学赵朋;第5章,浙江农林大学倪益华、许小锋;第6章6.1、6.2节,浙江大学周继烈;第6章6.3、6.4节和第7章7.1~7.3节,武汉理工大学吴超华;第7章7.4节,浙江大学尹俊;第8章,浙江大学徐志农。华中科技大学周华民教授作为主审对全书进行了细致审阅并提出许多关键性改进意见。

本书的编写工作得到了同仁的大力支持和校内外人士的热情帮助与指导,再次向他们致以真诚的谢意。浙江大学陈培里、陆秋君为本书提供了部分网络视频和图片等素材,本书还参考和引用了国内外有关教材、科技著作及论文等文献的内容与插图,在此特向有关作者及单位致以衷心的感谢。

本书编写力求适应工程科学技术的进步和高校教育的发展与改革,但由于编者的理论水平与教学经验有限,书中难免存在疏漏与欠妥之处,敬请各位读者、同仁和专家批评指正。

编者

2018年11月8日

# 目 录

绪 论 .....	(1)
<b>第 1 章 金属材料结构及力学性能 .....</b>	<b>(3)</b>
1.1 纯金属的晶体结构与结晶 .....	(3)
1.2 合金的结构 .....	(28)
1.3 工程材料基本力学性能 .....	(31)
身边的工程材料应用 1: 澎湖空难 .....	(39)
本章复习思考题 .....	(41)
<b>第 2 章 金属的塑性变形与再结晶 .....</b>	<b>(42)</b>
2.1 金属的塑性变形 .....	(42)
2.2 塑性变形金属的再结晶 .....	(45)
2.3 金属的塑性加工 .....	(48)
2.4 金属的热变形 .....	(56)
身边的工程材料应用 2: 大马士革刀和中国铸剑 .....	(57)
本章复习思考题 .....	(59)
<b>第 3 章 铁 碳 合 金 .....</b>	<b>(60)</b>
3.1 二元合金状态图 .....	(60)
3.2 铁碳合金的相结构与性能 .....	(64)
3.3 铁碳合金状态图 .....	(66)
3.4 碳 素 钢 .....	(73)
3.5 铸 铁 .....	(81)
身边的工程材料应用 3: 木工手动工具 .....	(91)
本章复习思考题 .....	(92)
<b>第 4 章 钢的热处理 .....</b>	<b>(94)</b>
4.1 概 述 .....	(94)
4.2 碳素钢热处理的理论基础 .....	(94)

4.3 钢的热处理工艺 .....	(103)
4.4 影响热处理效果的因素 .....	(121)
身边的工程材料应用 4:轴承的热处理工艺 .....	(122)
本章复习思考题 .....	(123)
<b>第5章 合金钢</b> .....	(126)
5.1 合金钢的分类、编号及合金元素在钢中的作用 .....	(126)
5.2 合金结构钢 .....	(134)
5.3 合金工具钢 .....	(144)
5.4 特殊性能钢 .....	(154)
身边的工程材料应用 5:航空发动机涡轮叶片用材及其发展 .....	(162)
本章复习思考题 .....	(165)
<b>第6章 非铁金属及其合金</b> .....	(166)
6.1 铜及铜合金 .....	(166)
6.2 铝及铝合金 .....	(174)
6.3 其他非铁合金 .....	(184)
6.4 铜合金与铝合金的选用比较 .....	(189)
身边的工程材料应用 6:硬币用金属及合金 .....	(190)
本章复习思考题 .....	(192)
<b>第7章 其他工程材料</b> .....	(193)
7.1 高分子材料 .....	(193)
7.2 陶瓷材料 .....	(211)
7.3 复合材料 .....	(221)
7.4 生物制造工程用水凝胶材料 .....	(232)
身边的工程材料应用 7:C919 大飞机用到的先进材料 .....	(236)
本章复习思考题 .....	(237)
<b>第8章 工程材料的选择及应用</b> .....	(238)
8.1 选材的一般原则 .....	(238)
8.2 失效判断与选材综合举例 .....	(251)
8.3 工程材料探究——手机机身或中框的选材和成形 .....	(268)
身边的工程材料应用 8:充电电池——移动式机电产品的动力之源 .....	(272)
本章复习思考题 .....	(276)
<b>参考文献</b> .....	(278)

# 绪 论

材料是人类制作各种工具和产品,进行生产和生活的基本物质基础。材料的研究和生产水平是一个国家工业技术水平的重要标志。

第一,人类社会的全部活动都与材料紧密相关。每种有重要影响的新材料问世,都推动着生产技术的一次跨越式飞跃。石器的应用使原始社会的生产水平提高了一大步。炼铜技术的成熟,使人类社会由石器时代进入了铜器时代,社会生产力随之大大提高。炼铁技术的发展,使人类社会进入一个新的历史时代——铁器时代。在这些伟大的人类历史发展进程中,我国都处于世界的前列。

第二,材料的发展是一种从感性向理性逐步深化的过程。直到18世纪英国工业革命前,人们对材料的认识仍然是表面的、非理性的,停留在工匠、艺人的经验技术水平上。工业革命使制造技术和机械生产社会化有了第一次鼎新革故的发展。产品的大工业生产方式具备了物质基础和技术条件,依赖手工业生产的材料选择和产品制造转为以机器为加工手段的批量化生产,产品的材料则不仅要求达到使用性能,还要与材料的加工方法与可加工性能相适应。这样的发展过程既满足了批量实现的市场需求,反过来又促进了金属材料的研究和钢铁工业迅猛发展。

18世纪后,作为测量工具的显微镜率先在金属材料研究中得到应用和拓展,进而在化学、物理、材料力学等基础上发展出了一门新的工程技术学科——金属学。金属学提供研究金属材料化学成分、微观组织结构与性能之间关系,以及研究制取和使用金属材料的相关知识理论与理论,使人们对材料的认识进入到理性认知阶段——材料微观研究。其后,X射线技术与电子显微镜等实验物理技术的发明与应用,以及与材料学相关的固体物理、量子力学等基础理论的发展,使人们对各类材料的微观世界认识进入到更深层次,推动了材料研究的深入发展。

第三,材料和材料学研究构成了近代科学技术发展的重要支柱。每一种新材料的发明和应用,都会促使一类新兴工业的产生和发展,使人类的生活更加丰富多彩。例如,合成纤维的研究成功,改变了化学工业和纺织工业的面貌,人们的衣着发生了重大变化;超高温合金的发明,使航空航天技术高速度发展;超纯半导体材料的研制和应用,使超大规模集成电路技术日新月异,为当代计算机工业的迅速发展提供了物质保证;光导纤维的开发应用,使通信技术和制造加工技术发生重大变革;高硬度、高强度材料的开发,具有各种优异性能的工、模具材料的应用,热强钢、高淬透性钢以及某些功能材料的应用,使机械制造业从产品设计到制造工艺均发生了重大变化,并向机电一体化和自动化方向前进了一大步。

目前,我国机械工业中应用的材料仍以金属材料为主。金属材料中以铁合金材料应用最多,其中碳钢和灰铸铁占铁合金材料的一半以上,合金钢用量占铁合金材料的15%~20%。非铁合金(铜合金和铝合金)在机械工业中的应用虽然相对比例较小,但是比强度高的轻质金属材料(如铝合金)发展较快,生产应用逐年增多,其他高强度合金(如钛合金)材料在工业应用有所扩大。在非金属材料中,目前应用最多的是塑料,已遍及机械工业各个领域





乃至国民经济的各部门。粉末冶金材料由于成型方法比较简单,成分和结构容易调整,并具有某些特殊性能,其应用范围正在逐步扩大。复合材料是近来发展起来的新型结构材料,可根据使用要求调整材料组分而获得满意性能,因而应用范围越来越广。非金属材料中的陶瓷材料具有独特性能,如耐热性、耐磨性、耐蚀性和电绝缘性是其他材料难以媲美的,在机械、化工、电气、纺织等工业部门的某些领域,是不可替代的重要材料。

由于科学技术的发展和现实需求的多样化,仅采用自然状态的物质直接制造产品和工具远远无法满足人们的需求。自然状态的物质常常需要经过加工处理才可以转化为能应用或者批量化应用的材料。材料的开发过程及应用领域的拓展,使得各种新产品、新技术得以产生并更新换代。如机械工业中,机电一体化进程加快,机械设备多功能化、自动化乃至智能化程度随之提高,对材料性能的要求也趋于多样化。有些领域,如轻工业或医疗技术领域除了要求材料有特殊的强度、硬度等力学性能外,还要求材料有良好的耐热性、耐蚀性、耐疲劳性、耐老化性和生物相容性等,或具备压电效应、热电效应、光电效应等物理性能,因此发展功能材料就有了现实意义和急迫需求。兵器、航天、核能等特殊工业部门,更需要大量具有某种特殊性能的新材料。目前来看,材料研制、生产和应用将发生重大变化,钢铁材料的应用比例会逐步减少,其他金属和非金属材料的应用比例会增加;对材料性能的要求将向综合化和功能化方向发展。可以预见,在不远的将来,众多新材料的问世是产品升级换代的重要前提,并使工业领域乃至人类生活更加五彩斑斓。

# 第 1 章 金属材料结构及力学性能

## 1.1 纯金属的晶体结构与结晶

### 1.1.1 晶体的一些重要概念

#### 1. 晶体

固体材料按原子排列是否有序,可分为晶体和非晶体。原子按一定规则排列的称为晶体,如图 1-1(a)所示;原子排列不规则的称为非晶体。绝大多数的固体金属都是晶体。

#### 2. 晶格

在晶体中,通过原子中心将原子用线段连接起来,即呈一定的空间几何形状,这种空间格子称为晶格,又称晶体的空间点阵,如图 1-1(b)所示。晶格形式与晶体的性能有密切关系。



#### 3. 晶胞

晶格中最基本的几何单元称为晶胞,如图 1-1(c)所示。每一种晶格都是由晶胞堆砌而成的,晶胞的结构特征就是晶格的结构特征。

#### 4. 晶格常数

用以表示晶胞大小及几何特征的参数称为晶格常数,通常用晶胞中各棱边的长度及各棱边的夹角表示,如图 1-1(c)所示。

#### 5. 晶粒

晶体中晶格方位相同的晶区称为晶粒,如图 1-1(d)所示。在一个晶粒内,由于各个方向原子排列的状况不同,故呈现各向异性。但实际金属都是由很多晶粒组成的多晶体结构,因而呈现各向同性。

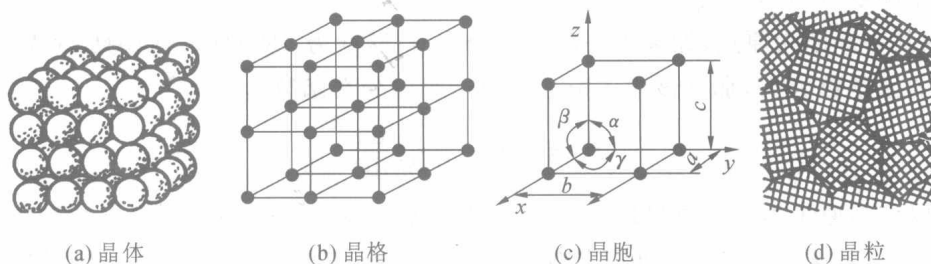


图 1-1 晶体结构

#### 6. 点阵

晶体的基本特征是其原子或原子团的排列具有三维周期性。组成这种三维周期结构的

最小结构单元称为基元,基元在三维空间的周期性排列构成晶体。在每个基元上选择一个环境相同的点,这些点的集合称为空间点阵或简称点阵。显然,点阵只是描述晶体中原子或原子团排列的一种几何抽象,它反映了晶体的对称性,并和基元一起反映了晶体的全部结构信息。为了画图的方便,以二维晶体为例,其示意图如图 1-2 所示。

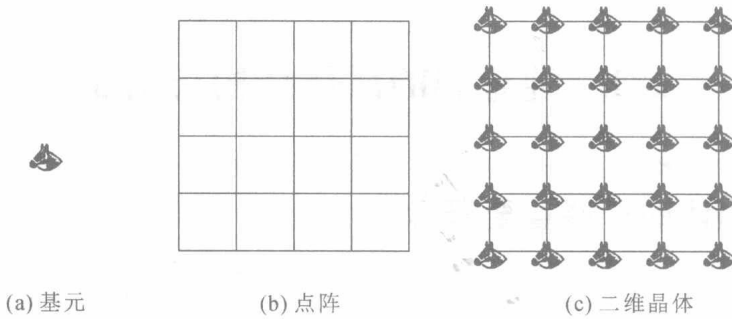


图 1-2 置于点阵上的基元构成二维晶体的示意图

点阵可按其对称性进行分类,这里所说的对称性除平移对称性外,还包括其他对称性,如旋转、反映、反演等。对称性的不同组合决定了三维点阵只能有 14 种,称为 14 种 Bravais 格子,分属于 7 个晶系。任何晶体对应的晶格都是这些 Bravais 格子中的一种。Bravais 格子的格点分别在一系列相互平行的直线或平面上,这些直线或平面称为晶列或晶面。

### 7. 非晶态

晶体中原子的排列具有周期性,称为长程序。非晶态材料原子的排列不具有周期性,但由于各种原子的大小及成键的方向都有自身的规律,非晶态材料原子的排列也并非杂乱无章,虽然没有长程序,但存在短程序。所谓短程序是指近邻原子之间的距离、近邻原子的种类与数目、近邻原子的方位等存在某些规律。当然,短程序不能唯一确定非晶态材料的结构。

非晶态金属又称金属玻璃,由于金属键没有明显的方向性,其结构可用硬球无规堆积模型来描述。这一模型用不同直径的硬球代表不同元素的原子,将这些硬球放入布袋充分混合并敦实压紧,球的排列状态便和金属玻璃中原子的排列状态相近。描述其短程序的参量是径向分布函数  $G(R)$ ,由同一种元素构成的金属玻璃的二维示意图如图 1-3 所示。在三维系统中,取某一原子为原点,如果中心落在半径为  $R$ ,厚度为  $dR$  的球壳内的原子数为  $dn$ ,单位体积中的原子数为  $N$ ,那么该原子附近的原子径向分布函数为

$$G(R) = \frac{1}{4\pi R^2 N} \frac{dn}{dR} \quad (1-1)$$

分别以许多原子为原点重复以上计算过程,然后求平均,便得到该材料的径向分布函数  $G(R)$ 。它实际上描述了在原子外围其他原子分布随距离变化的状况,是统计平均的结果。 $G(R)$ 的具体形式可由 X 射线衍射的试验结果计算得到。非晶态材料中原子和它的第一近邻原子大都非常接近但不能相互重叠,所以在  $R < R_1 + R_2$  (其中  $R_1$ 、 $R_2$  分别为相邻两原子的半径)处  $G(R) = 0$ ;在  $R$  稍大于  $R_1 + R_2$  处  $G(R)$  出现一较尖锐的峰值;而在  $R$  很大处  $G(R) = 1$ ,标志着长程序的消失。对于晶态材料,因为长程序的存在,径向分布函数  $G(R)$  表现为

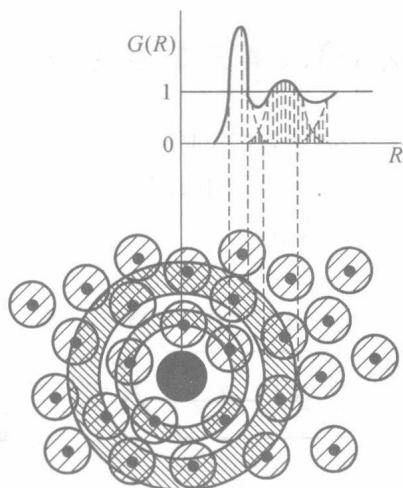
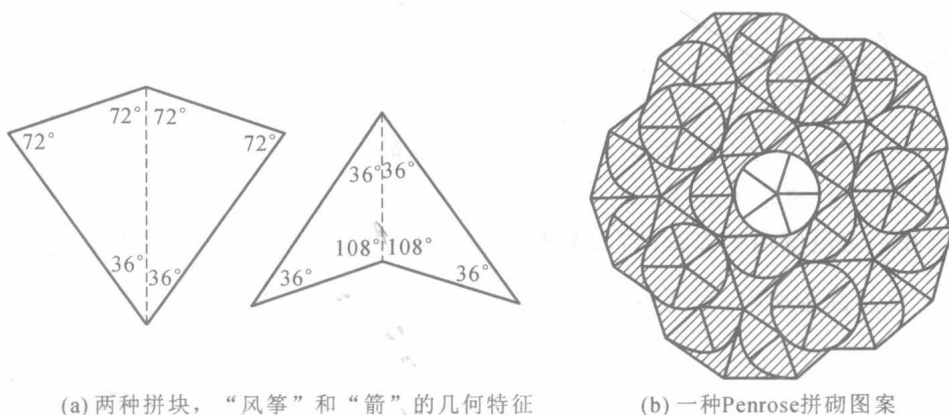


图 1-3 金属玻璃的二维示意图

一系列尖锐的峰。

### 8. 准晶

如前所述,从几何学的角度考虑,将许多同样的晶胞在空间作平移周期性排列填满空间便形成了晶体,其结构与对称性已为人们熟知。但是,放弃了平移周期性,是否可以采用某些基本拼块而无空隙地布满空间呢?答案是肯定的。以二维问题为例,1974年 Penrose 提出,用图 1-4(a)所示的两种拼块,即“风筝”和“箭”完全可以做到这一点。图 1-4(b)是用“风筝”和“箭”拼出的许多种具有五次对称性的图案之一,它不具有平移周期性。



(a) 两种拼块,“风筝”和“箭”的几何特征

(b) 一种 Penrose 拼砌图案

图 1-4 二维 Penrose 拼砌

1984年 Shechtman 等人在快淬的 Al-Mn 合金的电子衍射图中发现了具有五重对称的斑点分布,它和周期结构是相矛盾的,因而在传统晶体结构理论框架内无法予以解释。Steinhardt 等人提出,这种材料结构正是 Penrose 拼砌的三维推广,它具有 20 面体对称性,并称其为“准晶”。准晶态的特点是具有长程取向序而没有长程平移对称性,它是一种新的有序相。按照这一模型计算出来的该种快淬的 Al-Mn 合金的衍射花样,包括斑点的位置与强度,都和试验结果吻合。

### 1.1.2 常用金属的晶格及其主要参数

目前已知的晶格形式分为七种晶系,如图 1-5 所示。每一种晶系又有多种空间点阵,如体心点阵、面心点阵、密排点阵等。然而在常用的金属中,主要的晶格形式只有三种,即体心立方晶格、面心立方晶格和密排六方晶格。

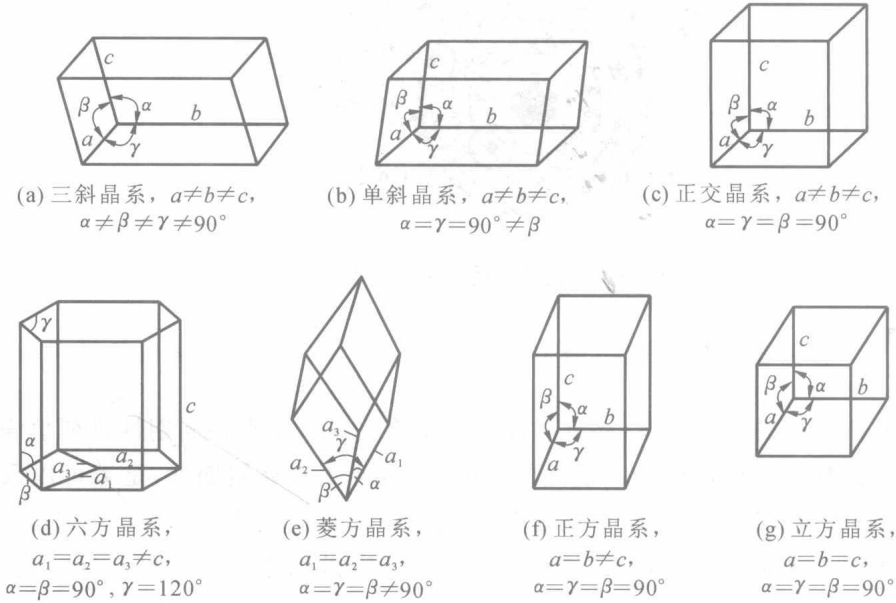


图 1-5 七种晶系

#### 1. 体心立方晶格

如图 1-6 所示,体心立方晶格的晶胞是立方体。晶格常数  $a=b=c$ ,三棱边的夹角  $\alpha=\gamma=\beta=90^\circ$ 。立方体的 8 个顶点各有 1 个原子,立方体的中心有 1 个原子,各原子紧密堆积,故立方体内对角线上的原子靠紧,而 8 个顶点的原子彼此有一定间隙(假定原子呈球形,下同)。晶格在一定范围内是连续的,故晶胞各顶点的原子均属相邻 8 个晶胞共有,只有晶胞中心的原子属该晶胞所有,因此每个晶胞实际包含的原子数为  $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$ 。若以晶格常数

来表示原子的大小,则原子直径  $d = \frac{\sqrt{3}a}{2}$ (立方体对角线包含两个原子直径)。晶胞内原子实际占有的体积与晶胞体积之比称为晶格致密度,用符号  $\eta$  表示。体心立方晶格的致密度  $\eta_{\text{体}}$  约为 68%。属于这类晶格的金属有  $\alpha$ -Fe、铬、钼、钨、钒等。

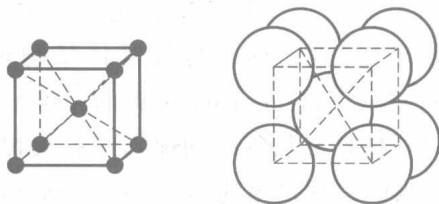


图 1-6 体心立方晶胞

## 2. 面心立方晶格

如图 1-7 所示,面心立方晶格的晶胞也呈立方体。立方体的 8 个顶点各有 1 个原子,立方体 6 个面的中心各有 1 个原子。各原子紧密堆积,故立方体 6 个面的对角线上原子靠紧。晶胞各顶点的原子属 8 个晶胞共有,6 个面中心的原子属 2 个晶胞共有,故每个晶胞实际包含的原子数为  $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ 。原子直径  $d = \frac{\sqrt{2}a}{2}$ ,晶格致密度  $\eta_{\text{面}}$  约为 74%。属于这类晶格的金属有  $\gamma$ -Fe、铜、铝等。

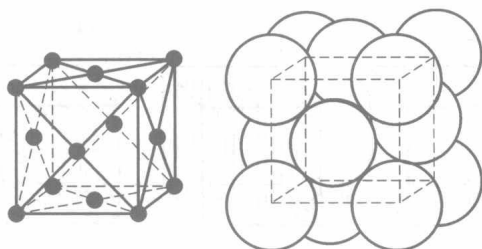


图 1-7 面心立方晶胞



## 3. 密排六方晶格

如图 1-8 所示,密排六方晶格的晶胞呈六方柱体。六方柱的 12 个顶点各有 1 个原子,上下面的中心各有 1 个原子,上下面之间有 3 个原子。上下面边长为  $a$ ,六方柱高  $c = 1.633a$ 。每个晶胞实际包含的原子数为  $12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} + 3 = 6$ 。原子直径  $d = a$ 。晶格致密度  $\eta_{\text{密}}$  约为 74%。属于这类晶格的金属有铍、镁、锌等。

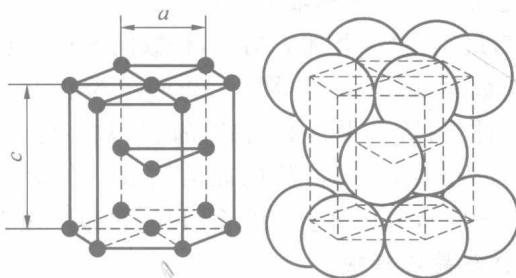


图 1-8 密排六方晶胞



### 1.1.3 晶面与晶向的表示方法

晶体中,通过原子中心的平面称为晶面,通过原子中心的原子列方向称为晶向。不同晶面和不同晶向上原子排列的状态不同,为便于分析,用晶面指数和晶向指数来表示晶面的方位和晶向的方向。

#### 1. 立方晶系的晶面指数

立方晶系晶面指数的计算步骤如下:

- (1) 选定晶胞的一个节点为坐标系原点,以与该点连接的三条棱边为坐标轴;
- (2) 以晶格常数作为坐标轴上的度量单位,求出欲定晶面在 3 个坐标轴上的截距(截距为负值时,在指数上方加“—”号);

- (3) 求 3 个截距的倒数并将它们化为最小整数；
- (4) 将 3 个整数加圆括号, 整数间不加标点。

用符号将所得晶面指数写成  $(hkl)$ 。图 1-9 所示为立方晶系 3 个主要晶面的晶面指数。 $(hkl)$  是以某个特定晶面求得的晶面指数, 由于坐标系可以平移, 故此晶面指数实际上代表了原子排列相同的所有平行晶面的晶面指数。某些晶面虽然彼此不平行, 但原子排列情况相同, 这些晶面称为晶面族, 以  $\{hkl\}$  表示晶面族的晶面指数。在立方晶系中,  $\{100\}$  包含 3 个  $(100)$ ,  $\{110\}$  包含 6 个  $(110)$ ,  $\{111\}$  包含 4 个  $(111)$ 。

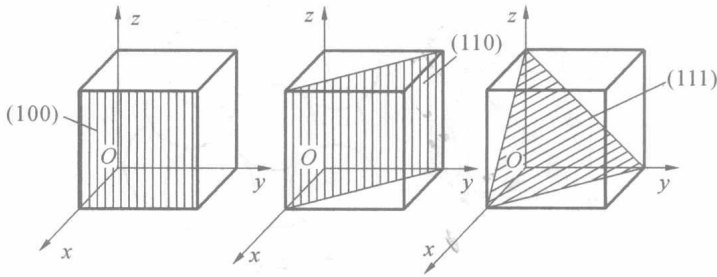


图 1-9 立方晶系 3 个主要晶面的晶面指数

### 2. 立方晶系的晶向指数

立方晶系晶向指数的计算步骤如下：

- (1) 同计算立方晶系晶面指数的方法一样选定坐标系；
- (2) 过坐标原点作一直线平行于指定晶向；
- (3) 求出该直线上任意点在 3 个坐标轴上的投影值；
- (4) 将 3 个投影值化为最小整数, 并加方括号, 整数间不加标点。

用符号将所得晶向指数写成  $[uvw]$ 。图 1-10 所示为立方晶系 3 个主要晶向指数。 $[uvw]$  同样表示原子排列相同的所有平行晶向的晶向指数。将 3 个指数加尖括号  $\langle uvw \rangle$ , 则表示彼此不平行但原子排列相同的晶向族的晶向指数。在立方晶系中,  $\langle 100 \rangle$  包含 6 个  $[100]$  (其中 3 个对应负号, 下同),  $\langle 110 \rangle$  包含 12 个  $[110]$ ,  $\langle 111 \rangle$  包含 8 个  $[111]$ 。

### 3. 六方晶系的晶面指数与晶向指数

六方晶系的坐标系由 4 个坐标轴组成, 如图 1-11 所示。在底平面上选择 3 个坐标轴并互成  $120^\circ$  夹角, 三轴交点为原点  $O$ , 过原点与三轴垂直的方向为第四坐标轴。晶面指数为  $(hkil)$ , 晶面族指数为  $\{hkil\}$ 。晶向指数为  $[uvw]$ , 晶向族指数为  $\langle uvw \rangle$ 。指数确定方法与立方晶系相同。

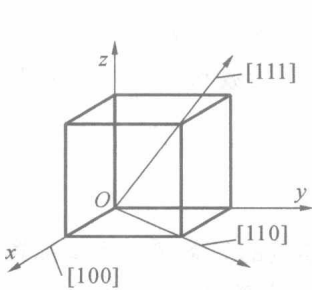


图 1-10 立方晶系 3 个主要晶向指数

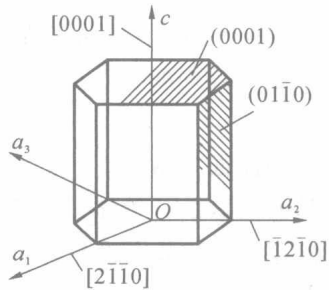


图 1-11 六方晶系的晶面指数与晶向指数

### 1.1.4 晶体结构缺陷

晶体结构中,若全部原子按一定的晶格形式规则地排列在各节点上,既不多一个原子,也不缺一个原子,也无原子偏离节点位置,这种晶体称为理想晶体。

实际晶体中存在晶体缺陷,即晶体中存在原子的周期性排列受到破坏的微小区域。通常人们按缺陷的维数将其分类:零维缺陷主要指点缺陷,一维缺陷主要指位错,二维缺陷主要指表面与界面缺陷。材料的许多性质,如强度、扩散、离子导电等,对缺陷的存在极为敏感。

在实际金属中,绝大多数原子按一定的晶格形式排列在晶格的各节点上,但由于原子热振动的作用和其他原因,有少数原子偏离正常位置,或余、缺原子,或局部原子错排。这种现象称为晶体结构的不完整性,或称晶体缺陷。按照缺陷的形态特征和区域大小,可分为以下三种。

#### 1. 点缺陷

点缺陷表示晶格的周期结构在某些点受到破坏,通常是由于晶格中个别原子的缺失或错位造成的。在热力学平衡态下点缺陷是存在的,这是因为点缺陷使系统的熵和内能都增加,所以一定浓度点缺陷的存在可使系统的自由能降为最低,相应的点缺陷浓度称为平衡浓度。由于经历多种非平衡过程,例如淬火、机械加工、粒子辐射、合金化等,晶体中的实际点缺陷浓度可高于甚至远高于其平衡浓度。按其原子的构成,点缺陷可分为自身点缺陷和杂质点缺陷。前者包括空位和自间隙原子,后者包括置换原子和杂质间隙原子。在有序合金中还会存在反位原子。注意点缺陷往往伴随着周围的晶格畸变。在半导体晶体中,杂质原子不仅会造成晶格周期性的破坏,而且经常导致禁带中的缺陷电子能态的产生,这对半导体材料制备是非常重要的。点缺陷的移动是材料中原子扩散的主要机制之一。离子晶体中点缺陷在电场作用下的定向移动就是离子导电现象。

##### 1) 空位

空位指在晶格的某个节点上没有原子存在,如图 1-12(a)所示。晶体中空位的位置是变化的,而且有时是连续几个节点空位。空位主要由原子的热运动产生,因此晶体的空位平衡浓度(晶体中的空位数与总原子数之比)随温度的升高而增大。

##### 2) 置换原子

置换原子指晶体中的异类原子不是位于晶格的间隙处,而是取代晶体的原子位于晶格的节点上,如图 1-12(b)所示。这种缺陷通常在异类原子与晶体原子大小相近时存在。

##### 3) 间隙原子

间隙原子指在晶体的非节点位置存在原子,这种缺陷又可分为自间隙原子(见图 1-12(c))和杂质间隙原子(见图 1-12(d))。自间隙原子是晶体本身的原子偏离节点位置存在于晶格的间隙中形成的,杂质间隙原子则是由于晶体中存在异类原子而形成的。

以上几种点缺陷都使缺陷周围的晶格发生畸变,提高晶体的内能,从而使晶体抵抗外力作用的能力增强。

点缺陷的平衡浓度可根据热力学公式进行计算。以空位为例,如果空位的形成能为  $E_v$ ,按 Boltzmann 统计,在热平衡状态下任一格点被空位占据的概率  $P$ ,亦即空位的平衡浓



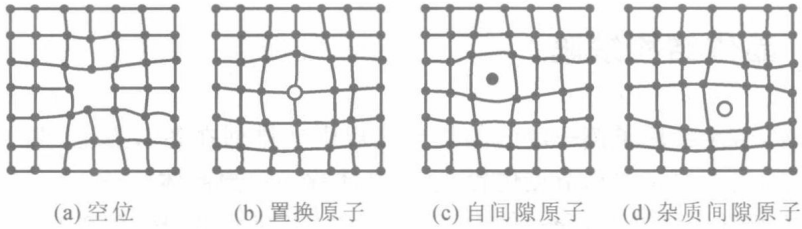


图 1-12 晶体点缺陷

度  $C_0$ , 为

$$P = C_0 = \exp\left(-\frac{E_v}{k_B T}\right) \quad (1-2)$$

式中:  $k_B$  为玻尔兹曼常数;  $T$  为绝对温度。

式(1-2)中, 如果  $E_v = 1 \text{ eV}$ ,  $T = 1000 \text{ K}$ , 可以求出空位的平衡浓度  $C_0 = 10^{-5}$ 。利用类似的方法不难求出其他点缺陷的平衡浓度表达式。在某些情况下, 由于点缺陷之间的交互作用, 两个或几个点缺陷会形成点缺陷复合体, 如氯化钠晶体中的二价杂质钙离子旁边总存在一个钠离子空位以保持电中性, 如图 1-13 所示。而体积较大的杂质原子旁边往往伴有一个空位以减小弹性畸变。纯净的碱卤晶体对可见光是透明的, 不显示任何颜色。在这些晶体中加入多余的一价金属离子或以少量二价杂质金属离子取代一价金属离子可产生阳离子-阴离子空位复合体。它们可吸收某些波长的光而使晶体显示某些颜色。这些缺陷复合体称为“色心”。

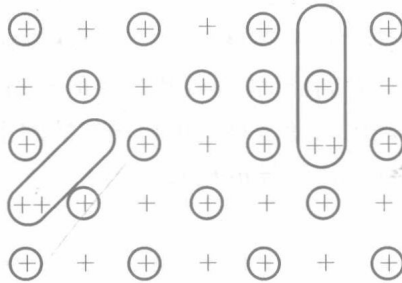


图 1-13 氯化钠晶体中的杂质钙离子与伴生的钠离子空位

“+”表示纸面内的正离子; “⊕”表示纸面上或下的正离子; “++”表示二价杂质正离子

## 2. 线缺陷

晶体中的线缺陷主要指位错, 位错是一种非平衡态缺陷, 是因晶体生长条件偏离平衡态、机械加工或异质外延等过程引入的。正是位错的存在及其易动性使实际晶体的屈服强度大大低于完美晶体屈服强度的理论计算值。弗仑克尔(Frenkel)用图 1-14 所示的简单模型来估算完美晶体的屈服强度, 考虑二维晶格, 图示为平衡位置。对于小的弹性应变, 切应力  $\sigma$  与两原子面相对位移  $x$  的关系可表示为

$$\sigma = G \frac{x}{d} \quad (1-3)$$

式中:  $G$  为晶体剪切模量;  $d$  为相邻原子面间距。

随着相对位移的增大, 当 A 原子到达 B 原子上方时, 切应力为 0 而系统处于不平衡状态。作为粗略近似, 不妨假定切应力与位移满足以下关系: