

目 录

第一章 材料科学基础知识	(1)
第一节 固体材料中的原子排列	(1)
一、短程有序与长程有序	(1)
二、晶体中原子的结合	(2)
三、晶体结构的一些重要概念	(3)
四、晶体中的晶面、晶向	(6)
第二节 晶体中的缺陷	(8)
一、点缺陷	(8)
二、线缺陷	(9)
三、面缺陷	(10)
第三节 相图	(12)
一、相的基本概念	(12)
二、相图的基本概念	(13)
三、相图的基本类型	(15)
四、具有三相反应的相图	(17)
第四节 工程材料的力学性能	(19)
一、强度与塑性	(19)
二、硬度	(21)
三、韧性	(22)
四、疲劳特性	(24)
五、耐磨性	(24)
第五节 工程材料的物理性能	(25)
一、导电性	(25)
二、磁性	(25)
三、材料的热学性能	(26)
习題	(27)
第二章 金属材料	(28)
第一节 金属材料的强化机制	(28)
一、金属材料的基本强化途径	(28)
二、形变强化	(30)
三、固溶强化	(32)
四、细晶强化	(33)
五、弥散强化	(34)
六、相变强化	(36)
第二节 铁碳相图与铁碳合金	(37)
一、铁碳相图	(37)

二、铁碳合金的结晶过程与平衡组织	(39)
二、碳钢	(40)
第二节 钢的热处理	(42)
一、钢在加热时的转变	(42)
二、TTT图与钢的冷却转变	(43)
三、钢的热处理工艺	(46)
第四节 合金化原理与合金钢	(50)
一、合金元素在钢中的作用	(50)
二、合金钢的分类与编号方法	(53)
三、合金钢的种类及基本用途	(64)
第五节 钢的表面强化	(64)
一、化学热处理	(64)
二、表层快速加热淬火	(65)
三、化学气相沉积	(67)
四、物理气相沉积	(67)
五、离子注入	(67)
第六节 铸铁	(67)
一、铸铁的凝固过程	(67)
二、铸铁的基体组织	(68)
三、铸铁的性能与生产	(80)
第七节 非铁基合金(有色金属及其合金)	(71)
一、铝合金	(71)
二、铜合金	(74)
三、镁合金	(76)
四、钛	(76)
五、镍与钴	(77)
六、钎合金	(77)
习题	(80)
第三章 工程陶瓷材料	(82)
第一节 陶瓷材料的物质结构	(82)
一、陶瓷材料的相组成	(83)
二、陶瓷材料的结合键	(82)
三、陶瓷材料中的晶相	(84)
四、陶瓷材料中的晶体缺陷	(87)
第二节 陶瓷材料的性能特点	(89)
一、陶瓷材料的力学性能	(89)
二、陶瓷材料的热性能	(93)
三、陶瓷材料的电性能	(96)
第三节 普通陶瓷的工艺过程	(98)

一、原料配制	(89)
二、压制成型技术	(98)
三、烧成	(101)
第四节 特种陶瓷的工艺流程	(101)
一、原料配制	(103)
二、成型技术	(103)
三、烧成技术	(104)
第五节 陶瓷材料及其应用	(104)
一、普通陶瓷	(104)
二、耐火材料	(105)
三、特种陶瓷	(110)
四、电子陶瓷	(112)
习题	(113)
第四章 聚合物材料	(113)
第一节 概述	(113)
第二节 聚合物分类	(113)
一、根据聚合物的热行为分类	(113)
二、按主链结构分类	(114)
三、按聚合物性能用途分类	(115)
第三节 聚合物的制备	(115)
一、加成聚合	(117)
二、缩合聚合	(119)
第四节 热塑性聚合物	(119)
一、聚合物结构	(125)
二、聚合物的力学性能	(127)
三、聚合物的粘弹性	(128)
四、温度对聚合物的影响	(131)
第五节 聚合物的液晶态结构	(131)
一、液晶的基本概念	(132)
二、聚合物液晶的结构	(134)
三、聚合物液晶的性质	(135)
第六节 橡胶和热塑性弹性体	(135)
一、橡胶	(136)
二、热塑性弹性体	(138)
第七节 热固性聚合物	(138)
一、热固性聚合物类型	(140)
二、热固性聚合物的温度-形变曲线	(142)
第八节 聚合物合金和互穿聚合物网络	(142)
一、聚合物合金	

二、互穿聚合物网络	(143)
第九节 聚合物添加剂	(145)
一、增塑剂	(145)
二、稳定剂	(146)
三、填充剂、增强剂	(146)
四、着色剂	(147)
五、阻烧剂	(147)
六、抗静电剂	(148)
第十节 聚合物材料的老化	(148)
一、概述	(148)
二、聚合物的光氧老化	(149)
三、聚合物的热氧老化	(150)
四、聚合物材料的化学老化	(151)
第十一节 降解聚合物	(153)
一、概述	(153)
二、生物降解塑料	(154)
三、光降解塑料	(155)
第十二节 聚合物加工成型	(156)
一、热塑性聚合物的加工成型	(156)
二、热固性聚合物的加工成型	(158)
三、泡沫塑料	(158)
习题	(159)
第五章 非晶态材料	(161)
第一节 概述	(161)
一、非晶态材料的基本特征	(161)
二、非晶态材料分类	(161)
第二节 非晶态材料的结构	(162)
一、非晶态聚合物的结构	(162)
二、无机玻璃的结构	(163)
三、非晶态金属的结构	(165)
第三节 非晶态材料的玻璃化转变	(166)
一、非晶态材料的通性	(166)
二、玻璃化转变	(167)
三、玻璃化转变机理	(168)
第四节 非晶态聚合物	(169)
一、非晶态聚合物类型	(169)
二、非晶态聚合物的制备方法	(169)
三、非晶态聚合物的转变	(170)
四、非晶态聚合物的特性和应用	(173)

第五节 无机非晶态材料	(176)
一、玻璃的形成	(177)
二、玻璃生产工艺	(178)
三、玻璃的性质	(180)
四、常见玻璃类别	(182)
五、光学玻璃	(182)
六、有机玻璃	(184)
七、光致变色玻璃	(185)
八、防护玻璃	(187)
九、光导纤维	(187)
第六章 非晶态半导体	(188)
一、概述	(188)
二、非晶态半导体的能带结构	(188)
三、非晶半导体的掺杂效应	(189)
四、非晶硅氢的制备和性质	(189)
五、非晶态半导体的应用	(191)
第七章 非晶态金属	(192)
一、金属玻璃的制造方法	(193)
二、非晶态金属的性能和应用	(194)
习题	(198)
第六章 复合材料	(199)
第一节 概述	(199)
一、复合材料的分类	(199)
二、复合材料的特点	(201)
第二节 粒子改性复合材料	(202)
一、复合原理	(202)
二、增强粒子的种类	(202)
三、聚合物基粒子复合材料	(203)
四、陶瓷基粒子复合材料	(206)
五、金属基粒子复合材料	(207)
第三节 纤维增强复合材料	(208)
一、概述	(208)
二、复合原理	(208)
三、纤维的种类和性能	(211)
四、复合材料的界面	(217)
第四节 聚合物基纤维增强复合材料	(221)
一、聚合物基体	(221)
二、玻璃纤维复合材料	(223)
三、高性能纤维增强塑料	(226)

四、聚合物分子复合材料	(227)
第五节 纤维增强金属基复合材料	(228)
一、概述	(228)
二、金属基复合材料的制备方法	(228)
三、纤维增强铝基复合材料	(228)
四、纤维增强钛基合金复合材料	(230)
五、自增强金属复合材料	(251)
六、 α - Al_2O_3 纤维增强镍基合金复合材料	(230)
第六节 纤维增强陶瓷基复合材料	(230)
一、概述	(230)
二、SiC纤维增强陶瓷	(231)
二、纤维-陶瓷复合材料的制备	(232)
四、碳/碳复合材料	(232)
五、陶瓷增强复合材料	(234)
第七节 层状复合材料	(234)
一、概述	(234)
二、混合定律在层状复合材料中的应用	(235)
三、夹层复合材料	(235)
习题	(236)
第七章 功能材料	(236)
第一节 非金属导电材料	(238)
一、材料的电阻	(238)
二、晶构型导电聚合物	(239)
三、复合导电材料	(243)
四、导电聚合物的应用	(244)
五、聚合物固态离子导体	(247)
第二节 超导材料	(249)
一、超导特性	(249)
二、超导理论	(249)
三、超导材料	(250)
四、超导材料的应用	(253)
第三节 压电材料	(253)
一、压电陶瓷	(253)
二、压电聚合物材料	(256)
二、压电复合材料	(258)
第四节 光学功能材料	(259)
一、光致抗蚀材料	(260)
二、光电导材料	(260)
三、非线性光学材料	(263)

第五节 生物材料	(268)
一、概述	(268)
二、生物聚合物材料	(268)
三、生物陶瓷材料	(272)
四、生物金属材料	(273)
第六节 分离膜	(274)
一、聚合物分离膜	(274)
二、无机陶瓷膜	(280)
第七节 形状记忆材料	(281)
一、形状记忆合金	(281)
二、形状记忆聚合物	(284)
第八节 磁性材料	(288)
一、物质的磁性	(288)
二、软磁材料	(291)
三、硬磁材料	(294)
四、聚合物磁性材料	(297)
第九节 储氢合金	(298)
一、金属中氢的密度	(298)
二、金属与氢的结合	(298)
三、储氢合金的特点	(299)
第十节 智能材料	(299)
一、概述	(299)
二、金属系智能材料	(300)
二、无机非金属系智能材料	(301)
四、高分子系智能材料	(302)
五、展望	(304)
第十一节 梯度功能材料	(304)
一、概述	(304)
二、梯度功能材料的设计	(305)
三、梯度功能材料的制备	(306)
四、梯度功能材料的应用	(307)
习题	(308)

第一章 材料科学基础知识

工程材料可分为四大类：金属材料、无机非金属材料（陶瓷）、有机高分子材料及复合材料。本章涉及的内容是与这四类材料有关的基础知识，包括固体材料的微观结构、晶体缺陷、相图，以及材料的力学性能和物理性能。

第一节 固体材料中的原子排列

原子排列方式对材料的微观结构和性能有重要影响。以金属为例，原子在某种排列方式下，金属具有良好的塑性；在其它的排列方式下，则显示出很高的强度。

一、短程有序与长程有序

若忽略材料中的缺陷，则固体材料的原子排列有两大类。

1. 短程有序排列

原子仅在很小的范围（几个原子的尺度）内呈一定的规则排列。

例如，在非晶玻璃中，硅的四个价电子与四个氧原子共价。由于共价键的方向性，因而硅与氧原子之间呈规则排列（图1-1），从而形成短程有序排列。硅原子与氧原子之间形成 109° 夹角，并构成四面体。然而，这种四面体与四面体之间却是一种无序排列。

高分子材料中的短程有序排列与非晶玻璃非常相似。聚乙烯由碳原子与氢原子构成，每个碳原子周围有两个氢原子。碳与氢之间为共价键。共价键的方向性使得碳原子、氢原子构成四面体（图1-2）。这种四面体单元在空间的随机分布即构成了高分子材料中的无分子链。

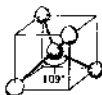


图1-1 非晶玻璃的短程有序排列

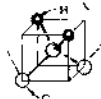


图1-2 聚乙烯中的短程有序排列

若材料中仅存在短程有序排列，则称其为非晶材料或无定形材料。部分高分子材料和陶瓷材料属于非晶材料。例如，普通玻璃就是一种最常见的非晶材料。用特殊工艺方法也可以获得非晶金属或非晶半导体材料。

2. 长程有序排列

原子在很大的范围内均是按一定规则排列的。具有长程有序排列的材料即为晶体材料。

金属、半导体、大部分陶瓷均为晶体材料，某些高分子材料（如等规聚丙烯、尼龙）也是晶体材料。

晶体材料中的原子以一定的方式排列，但不同材料中原子的排列方式各异。各种排列方式即构成了不同的晶体结构。

二、晶体中原子的结合

当原子聚集为晶体时，原子之间产生较强的相互作用。不同类型的原子之间有不同性质的结合键，可分为原子键、共价键、金属键、分子键。相应的晶体为离子晶体、共价晶体、金属晶体和分子晶体。

1. 离子键和离子晶体

周期表中相隔较远的一正电性元素原子和一负电性元素原子结合时，前者失去最外层价电子成为正离子，后者获得电子成为负离子。正、负离子之间的静电作用即形成稳定的离子键。

氯化钠晶体是典型的靠离子键结合的离子晶体（图1-3）。

离子键的结合力较大，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，所以离子晶体都是良好的绝缘体。离子的外层电子比较牢固地束缚在离子的外面，可见光一般不足以使其外层电子激发，因而不吸收可见光，所以典型的高子晶体往往是无色透明的。

2. 共价键和共价晶体（原子晶体）

由共用电子对产生的化学键叫共价键。共价晶体中的粒子为中性原子，所以又叫原子晶体。

只有代表性的共价晶体为金刚石，其结构示于图1-4。金刚石由碳原子组成，每个碳原子贡献出四个价电子与周围的四个碳原子共有，形成四个共价键，构成四面体结构。一个碳



图1-3 氯化钠离子晶体结构

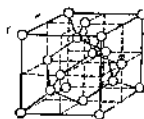


图1-4 金刚石共价晶体结构

原子在中心，与其共价的另外四个碳原子在四个顶角上。硅、锗、锡等元素， SiC 、 Si_3N_4 、 BN 等化合物都是共价晶体。

共价键的结合力很强，所以共价晶体只有强度高、硬度高、脆性大、熔点高、沸点高和挥发性低等性质，结构也比较稳定。由于相邻原子共有的电子不能自由运动，所以共价晶体的导电性很差，是良好的绝缘体。

3. 金属键和金属晶体

化学元素中的80%以上为金属元素。金属原子的价电子不为某个或某两个原子所有，而为全体原子所共有。这些公有化的电子称为自由电子。它们在正离子间运动。金属原子失去价电子后成为正离子，正离子在三维空间呈高度对称的排列分布。正离子和自由电子之间产生强烈的静电吸引力，使全部离子结合起来。这种结合方式称为金属键。由金属键结合起来的晶体为金属晶体。图1-5为例的晶体结构。

由于金属晶体中存在大量自由电子，因而具有良好的导电性与导热性；又因金属晶体是借助自由电子与各离子间公有引力的结合，故金属塑性良好，强度及其它机械性能优良。

4. 分子键和分子晶体

原子状态已经形成稳定电子壳层的惰性气体在低温下可结合成固体。在其结合过程中，没有电子的得失，共存或公有化，原子或分子间的结合力是很弱的分子间力。这种有在于中性原子或分子之间的结合力叫分子键。分子键本质上是一种物理键。形成分子键时，价电子的分布几乎没有变化。

依靠分子键结合起来的晶体是分子晶体。碘的分子晶体如图1-6所示。大部分有机化合物的晶体以及 CO_2 、 SO_2 、 HCl 、 H_2 、 N_2 、 O_2 等在低温下形成的晶体都是分子晶体。

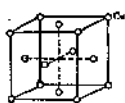


图1-5 铜的晶体结构

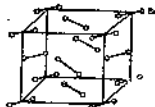


图1-6 碘的晶体结构

由于分子间力很弱，所以分子晶体的熔点低，硬度低。这种结合力也可以存在于其它化学键晶体中，但可以忽略不计。

大多数晶体并不是单一类型的键结合，往往是几种键的混合结合。

三、晶体结构的一些重要概念

讨论晶体学概念与确定方法的基础是晶体的刚性球模型。各类晶体中以金属晶体的结构最简单，而且对这些概念的适用性最强。

1. 晶体、晶格、晶胞及晶系

晶体中原子（分子或离子）在空间有规则排列（图1-7(a)），规则排列的方式称为晶体结构。

假设通过原子（分子或离子）的中心划出许多空间直线，构成空间格架。这种假想的格架称为晶格（图1-7(b)）。

晶格上的节点是原子（分子或离子）平衡中心的位置。晶格中能够反映晶格几何特征的最小几何组成单元是晶胞（图1-7(c)）。晶胞在三维空间的重复排列构成晶格并形成晶体。由晶胞可以描述晶格。所以，研究晶体结构就在于考察晶胞的基本特性。

在三维空间中，晶胞的几何特征可以晶胞的二条棱边长度 a 、 b 、 c 和三条棱边之间的夹角 α 、 β 、 γ 六个参数来描述。 a 、 b 、 c 称为晶格常数。按照这六个参数组合的可能方式，或

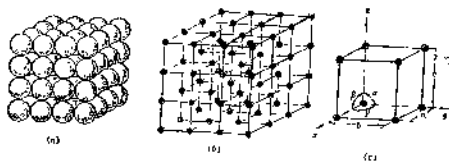


图1-7 晶体、晶格、晶胞示意图
(a) 晶体 (b) 晶格 (c) 晶胞

表1-1 晶体结构的七种晶系

晶 系	轴 (棱边) 之间的夹角
三斜晶系	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
单斜晶系	$a \neq b \neq c$ $\gamma = \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
斜方晶系	$a \neq b \neq c$ $\gamma = \beta = \alpha = 90^\circ$
立方晶系	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
四方晶系	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
六方晶系	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 120^\circ, \gamma = 90^\circ$
立方晶系	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

根据晶胞自身的对称性，可将晶体结构分为七种类型，即七个晶系（表1-1）。布拉维证明，在七个晶系中，存在七种简单晶胞（晶胞原子数为1）和七种复杂晶胞（晶胞原子数在2以上），共14种晶胞（图1-8）。

2. 晶格尺寸

晶格尺寸是指晶胞的大小，用晶格常数表达。立方晶系晶格尺寸用一个晶格常数 a 即可表达。晶格常数的单位为 $\text{\AA}$ （ $1 \text{\AA} = 10^{-8} \text{cm}$ ），晶体的晶格片数多为 $1 \sim 7 \text{\AA}$ 。

3. 晶胞原子数

晶胞原子数是指一个晶胞所包含的原子数目。确定晶胞原子数时，晶胞角上的原子在空间同时属于八个相邻的晶胞，属于一个晶胞的仅为 $1/8$ 个原子。晶胞侧面上的原子同时属于两个相邻的

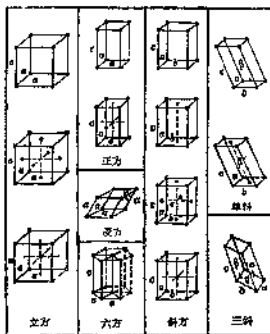


图1-8 14种晶胞示意图

晶胞，属于一个晶胞的为1/2个原子。晶胞中心的原子完全属于一个晶胞所有。

4. 原子半径

原子半径是指晶胞中相距最近的两个原子之间距离的一半。

5. 致密度

晶胞中原子所占体积的百分数为晶格的致密度，即

$$\text{致密度} = \frac{\text{晶胞中原子所占体积}}{\text{晶胞的体积}}$$

6. 配位数

晶格中，与任一原子处于相等距离并相接触的原子数目称为配位数。配位数与致密度同为描述晶体原子排列致密程度的参数。配位数越大，则致密度越高。

金属晶体的结合方式为金属键，这使得金属晶体大都具有紧密排列的趋向，以致原子排列组合的数目大为减少，一般只有少数几种高对称性的晶格。而非金属晶体则一般具有较复杂的结构，且其对称性较低。

除了少数例外，绝大多數金属晶体的结构皆为以下三种晶格（图1-9）。

体心立方晶格：原子分布在立方晶胞的中心和八个角上。属于这种晶格的有， α -Fe、Cr、Mo、W、V等。

面心立方晶格：原子分布在立方晶胞六个面的中心和八个角上。属于这种晶格的有Al、Cu、Ni、Pt等。

密排六方晶格：原子分布在六方晶胞的十二个角上、上下底面的中心以及两底面之间二个均匀分布的间隙里。这类晶格的晶格常数 a 和 c 的比值为 $c/a = 1.633$ 时为紧密。属于这种晶格的有Be、Mg、Zn、Cd等。

三种典型金属晶格的特性参数小于表1-2。面心立方与密排六方晶格的配位数、致密度

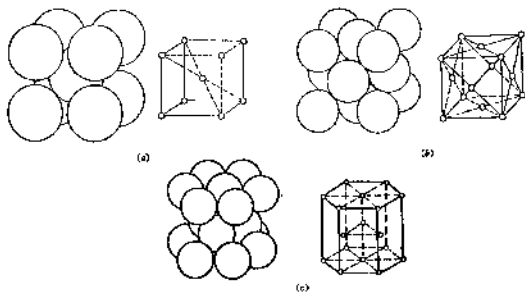


图1-9 金属晶体的典型结构

(a) 体心立方晶格，(b) 面心立方晶格，(c) 密排六方晶格

均大于体心立方晶格。这对于金属的性能和行为有很大影响。例如，铁在912℃以上为面心立方结构（称为 γ -Fe），912℃以下为体心立方结构（称为 α -Fe）。铁从高温急冷至室温时，由于 γ -Fe $\rightarrow$ α -Fe的相变伴随体积膨胀，因而材料内部形成内应力，严重时会导致开裂或变形。

四、晶体中的晶面、晶向

晶面：通过晶体中原子（分子或离子）中心的平面叫晶面。

晶向：通过原子（分子或离子）中心的直线所代表的方向叫晶向。

表1-2 三种典型金属晶体结构的特征参数

晶体类型	晶胞中的原子数	原子半径	配位数	致密度
体心立方	2	$\frac{\sqrt{3}}{4}a$	8	0.68
面心立方	4	$\frac{\sqrt{2}}{4}a$	12	0.74
密排六方	6	$\frac{a}{2}$	12	0.74

晶体的许多性能和行为都和晶体中特定晶面和晶向密切相关。在晶体学中，通常用晶面指数和晶向指数来分别表示晶面和晶向。晶面指数与晶向指数又统称晶轴指数。

1. 立方晶系晶面指数的确定方法

确定立方晶系晶面指数的步骤如下：

（1）选定立方晶系晶面上的晶格中任一节点为空间坐标系的原点；以晶格三棱边为坐标轴 ox 、 oy 、 oz ，以晶格常数 a 、 b 、 c 分别作为 ox 、 oy 、 oz 轴的长度度量单位。

（2）求出欲定晶面在一个轴上的截距。

（3）取欲定晶面的三轴截距的倒数，并将其化为最小整数。

（4）把三整数写在圆括号内，整数之间不用标点分开。这样，即得“ hkl ”晶面指数（ hkl ）。

由上坐标原点选定的任意晶面，（ hkl ）晶面实际上是表示一组原子排列相似的平行晶面。图1-10所示为立方晶系中几种重要的晶面。

2. 立方晶系晶向指数的确定方法

确定晶向指数的步骤如下：

（1）选坐标轴系，其方法与晶面指数的方法相同。

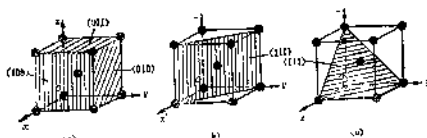


图1-10 立方晶系中的主要晶面

(2) 过坐标原点作一平行于欲求晶面的直线, 求出该直线上任一节点的坐标值, 并将其化为最小整数。

(3) 将整数记在方括号内, 整数之间不用标点分开。这样, 即得到晶面指数(h k l)。与晶面指数的情况相类似, 由于坐标系原点选择上的任意性, (h k l)晶面实际上只是表示一组原子排列相同的平行晶面。

在立方晶系中, 晶面指数与晶面记号相同时, 则晶面与晶向垂直。例如, (111) 晶面与[111]晶向垂直。

3. 晶面族与晶向族

在晶体中, 特别在立方晶系中, 由于原子的排列具有高度的对称性, 往往存在许多原子排列完全相同但彼此不平行的对称晶面。例如面心立方晶体的{100}、{010}、{001}面彼此在空间不平行, 但其面上的原子排列是等同的。等同而彼此不平行的晶面总称为晶面族, 用大括号表示, 即{h k l}。如晶面族{100}包括{100}、{010}、{001}一个晶面。

同理, 等同而彼此不平行的晶向统称晶向族, 用尖括号表示<h k l>。如晶向族<100>包括{100}、{010}、{001}三个等同晶面。

在立方晶系中, 同一晶面族(或晶向族)中各晶面(或晶向)的指数数值相同, 而符号和次序不同。例如, {111}晶面族中包括下列晶面:

{111}, {11 $\bar{1}$ }, {1 $\bar{1}$ 1}, {11 $\bar{1}$ }

{ $\bar{1}$ 11}, {1 $\bar{1}$ $\bar{1}$ }, {11 $\bar{1}$ }, {1 $\bar{1}$ $\bar{1}$ }

在上述八个晶面中, 后四个晶面与前四个晶面是对应的相同晶面。所以, 该晶面族实际上包括四个晶面。

4. 晶面及晶向的原子密度

晶面原子密度是指该晶面单位面积中的原子数。晶向原子密度是指该晶向单位长度上的原子数。体心立方与面心立方晶体各主要晶面和晶向的原子密度见表1-3与表1-4。

由于不同晶面与晶向具有不同的原子密度, 因而晶体在不同方向上表现出不同的性能。

表1-3 体心立方与面心立方晶体各主要晶面的原子排列与密度

晶面指数	体心立方晶体		面心立方晶体	
	晶面原子排列示意图	晶面原子密度 (原子数/面积)	晶面原子排列示意图	晶面原子密度 (原子数/面积)
{100}		$4 \times \frac{1}{4} = 1$ $\frac{1}{a^2}$		$4 \times \frac{1}{4} + 1 = 2$ $\frac{2}{a^2}$
{110}		$2 \times \frac{1}{2} = 1$ $\frac{1}{\sqrt{2} a^2}$		$2 \times \frac{1}{2} + 2 \times \frac{1}{2} = 2$ $\frac{2}{\sqrt{2} a^2} = \frac{1.4}{a^2}$
{111}		$3 \times \frac{1}{6} = \frac{1}{2}$ $\frac{1}{\sqrt{3} a^2} = \frac{0.58}{a^2}$		$3 \times \frac{1}{6} + 3 \times \frac{1}{2} = \frac{2.5}{2}$ $\frac{2.5}{\sqrt{3} a^2}$

表1-4 体心立方与面心立方晶体各主要晶向的原子排列与密度

晶向指数	体心立方晶体		面心立方晶体	
	晶向原子排列示意图	晶向原子密度 (原子数/长度)	晶向原子排列示意图	晶向原子密度 (原子数/长度)
$\langle 100 \rangle$		$2 \times \frac{1}{a} = \frac{1}{a}$		$2 \times \frac{1}{a} = \frac{1}{a}$
$\langle 110 \rangle$		$\frac{2 \times \frac{1}{2}}{\sqrt{2}a} = \frac{0.7}{a}$		$\frac{2 \times \frac{1}{2}}{\sqrt{2}a} = \frac{1.4}{a}$
$\langle 111 \rangle$		$2 \times \frac{\frac{1}{2} + 1}{\sqrt{3}a} = \frac{1.76}{a}$		$\frac{2 \times \frac{1}{2}}{\sqrt{3}a} = \frac{0.46}{a}$

即晶体各向异性。例如：体心立方的铁晶体在原子密度最高的 $\langle 111 \rangle$ 方向上弹性模量 $E = 285 \text{ GPa}$ ，而在原子密度较低的 $\langle 100 \rangle$ 方向上 $E = 134 \text{ GPa}$ 。

多晶材料通常并不表现出各向异性。如多晶铁在不同方向上的弹性模量均约 $E = 210 \text{ GPa}$ 左右。

第二节 晶体中的缺陷

实际晶体并非是由晶胞规则地重复排列而成的理想结构。由于多种因素的影响，晶体中存在许多缺陷。缺陷的存在对晶体的特性产生重大影响，例如，工业金属材料强度随缺陷密度的增加而提高，而导电性随晶体缺陷的增加而下降。例如，晶体缺陷可用于提高陶瓷材料的导电性。

按照晶体缺陷的几何特征，可将其分为点缺陷、线缺陷、面缺陷三种类型。每类缺陷都对晶体的特性产生重大影响。

一、点缺陷

点缺陷是指在三维尺度上都很小（不超过几个原子直径）的缺陷。主要有以下二种。

1. 空位

晶格上没有原子的节点称为空位(图1-11(a))。

产生空位的主要原因在于晶体中原子的热振动。一些原子的动能大大超过给定温度下的平均动能而离开原来的位置，造成原位原子的空缺。温度的升高使原子动能增大，空位浓度增加。

此外，塑性变形、高能粒子辐射等也促进空位的形成。

2. 间隙原子

在晶格节点以外位置上存在的原子为间隙原子(图1-11(b))。间隙原子一般比格点上的原子小。

由第一节，即使是排列方式最为紧密的面心立方晶体中，致密度也仅为74%，其余26%均为空隙。因此，较小的异类原子很容易进入某体晶格的间隙位置。实际上，任何所谓的纯金属中均含有杂质。当杂质原子半径较小时（如B、C、H、N、O等），间隙原子的浓度可达10%（原子百分数）。

3. 置换原子

占据晶格节点的异类原子为置换原子[图1-11(c)、(d)]。从来说，置换原子的半径与基体原子相当或较大。当异类原子半径较小时，更易于进入晶格的间隙位置而成为间隙原子。

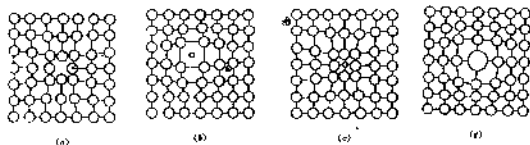


图1-11 晶体中的点缺陷

无论哪一类点缺陷，都会造成晶格扭曲，在点缺陷的周围产生弹性应力场，使体系内能升高。晶体中的点缺陷对材料的性能有很大影响。异类原子进入基体晶格后形成间隙固溶体（异类原子作为间隙原子）或置换固溶体（异类原子作为置换原子）。由上形成固溶体而造成的弹性应力场，使金属的强度提高，电阻率增大（详见第4章）。

二、线缺陷

线缺陷是指晶体中一维尺度很小而第二维尺度较大的缺陷。这类缺陷就是位错。当晶体的一部分相对于另一部分进行局部滑移时，晶体的已滑移部分与未滑移部分的交界线即为位错，称之为位错或位错线。有两类典型位错：螺型位错与刃型位错。图1-12与图1-13用以形象地说明存在位错时的原子组态。

1. 螺型位错

图1-12所示为螺型位错。在位错线的附近区域（过渡区），原子排列脱离理想状态；而

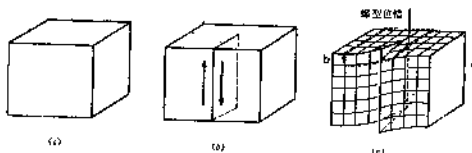


图1-12 螺型位错

(a) 理想晶体；(b) 晶块切口，(c) 露出一个原子间距的切口，并沿晶体表面，原子层易沿切口正边缘为位错线

在过盈区以外，原子仍规则排列。由于过盈区中原子位置的扰动有螺旋形的特征，因而称其为螺型位错。

2. 刃型位错

图1-13为刃型位错。在半原子面边缘区域，晶体产生畸变，在此区域之外，原子仍规则排列。形成这种位错时有半个原子面可入晶体的内部，因此称之为刃型位错，但应指出，刃

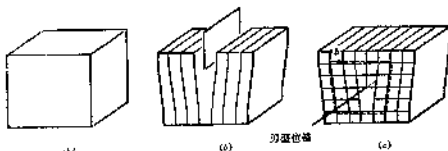


图1-13 刃型位错

(a) 完美晶体。(b) 刃型位错。(c) 刃型位错。

(a) 完美晶体。(b) 刃型位错。(c) 刃型位错。

型位错的产生是晶体局部滑移的结果（见图1-14），“插入半个原子面”的提法，仅仅是为了说明产生这种位错时的原子组态。

由于位错线附近晶格畸变，因而产生弹性应力场。例如，图1-13所示刃型位错，在上一排原子的上半部晶体受到压应力，而下半部受到拉应力。

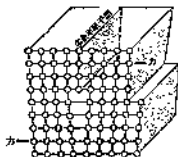


图1-14 刃型位错的产生

位错对材料性能的影响比点缺陷更大，对金属材料性能的影响尤甚。可以说，金属材料各种强化机制几乎都是以位错为基础的。

通过电子显微镜可以直接观察到位错。图1-15所示为Ti、Al中的位错堆积与位错网络。

三、面缺陷

面缺陷是指晶体中尺寸尺度很小而其它两尺度很大的缺陷。晶体中的面缺陷主要是晶界与亚晶界。

实际应用的金属材料绝大部分是多晶体。多晶体是由大量外形不规则的小晶体（晶粒）组成的（图1-16）。每个晶粒基本上可视为单晶体。不同晶粒原子排列的取向各不相同。晶粒之间的分界面即为晶界。晶界处原子排列较为混乱，晶界的宽度仅为几个原子间距。一般将晶粒晶粒位向差在 $10^\circ \sim 15^\circ$ 以下的晶界称为小角度晶界，大于 $10^\circ \sim 15^\circ$ 的晶界称为大角度晶界。

晶粒也并非严格意义上的单晶。通常晶粒是由许多取向差很小的所谓亚晶粒组成，亚晶粒之间的位错密度只有几秒或几分，远多不过 $1 \sim 2 \times 10^8$ 。亚晶粒之间的边界叫亚晶界。亚