



普通高等教育材料科学与工程“十二五”规划教材

材料科学基础

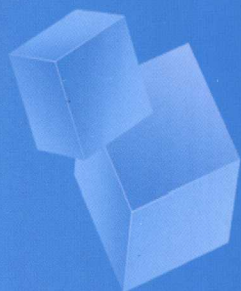
Fundamentals of Materials Science

吴镭 刘瑛 丁锡锋 编著



国防工业出版社

National Defense Industry Press



内 容 简 介

本书为普通高等院校“十二五”规划教材。

第1章~第4章介绍材料结构,包括晶体结构、晶体缺陷、高分子结构与相图;第5章~第8章介绍材料过程,包括扩散、转变、相变、形变和断裂;最后的第9章简单介绍了力学性能。结构(缺陷)与过程是本书的核心。

本书包含大量供学生思考的问题,并设置了“致学生”与“致青年教师”两个较为独特的模块,以便加深认识与理解。

本书可作为高等院校材料科学与工程专业“材料科学基础”的教材或教学参考书。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学基础 / 吴锵, 刘瑛, 丁锡锋编著. —北京: 国防工业出版社, 2012. 3

普通高等教育材料科学与工程“十二五”规划教材

ISBN 978-7-118-07866-4

I. ①材… II. ①吴… ②刘… ③丁… III. ①材料科学—高等学校—教材 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 041886 号

※

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号 邮政编码 100048)

北京奥鑫印刷厂印刷

新华书店经售

*

开本 787×1092 1/16 印张 20 $\frac{3}{4}$ 字数 470 千字

2012 年 3 月第 1 版第 1 次印刷 印数 1—4000 册 定价 38.00 元

(本书如有印装错误, 我社负责调换)

国防书店: (010)88540777

发行邮购: (010)88540776

发行传真: (010)88540755

发行业务: (010)88540717

普通高等教育材料科学与工程“十二五”规划教材 编 委 会

主任委员 朱运田

副主任委员 崔 崇 吴 锵

委 员 (按姓氏拼音排序)

陈 光 丁锡锋 杜宇雷 黄洁雯

刘 瑛 王 雄 熊党生 颜银标

杨 森 张新平 赵 军 赵永好

朱和国 邹友生

代 序

学科基础课的重要性是不言而喻的。材料学科的基础课包括(材料)物理化学、材料科学基础、材料物理基础、材料物理性能、材料力学性能、固态相变、传输原理、材料分析方法等,其中(材料)物理化学、材料科学基础、材料物理基础(简称“三基”)是材料学科基础课群中的基础,因此最为重要。如何进一步强化“三基”,提升教学效果,完成它们的教育使用,既是重要的教学任务,也关乎材料学科建设,因为在西方发达国家,课程建设与教学改革本身就是学科建设的重要组成部分。

一、历史回顾

为了更加清晰地了解“三基”的现状,需要简要回顾它们的“形核与长大”过程。从发展历史看,材料学科源于传统的金属材料、陶瓷材料、高分子材料专业。在加强基础、拓宽专业的教育理念下,逐步融合成为材料科学与工程一级学科。因此,材料学科的基础课自然而然地选取了它们的“公因子”,如物理化学就是这三个专业的公共基础课,而材料科学基础则脱胎于经典的金属学,以金属学的结构框架为基,进一步融合了陶瓷与高分子。至于材料物理基础,则是由于现代材料研究以物理性能为主要诉求,故作为物理性能基础的固体物理在加以改造后变为材料物理基础,以弥补材料科学基础仅关照材料力学性能的缺陷。从时间上看,“三基”的发展历程都不长,其中较为成熟的材料科学基础,也不过十几年,以清华大学潘金生于1998年出版的《材料科学基础》教材为标志;而材料物理基础约为10年。至于材料物理化学,由于其内涵相对于传统的物理化学有明显变化,会在后面专门讨论。因此,“三基”都应该算是比较“年轻”的课程,其历史远不能与无机化学、化工原理、理论力学、机械原理、电工学、电磁场理论、信号与系统、控制理论等发展了几十甚至上百年的工科基础课相比。

历史的短暂与“形核”时拿来主义的操作策略,使得“三基”一方面迅速支撑起材料学科的知识主干,满足了学科发展初级阶段对理论知识的需求,但另一方面也带来了一些深层次问题。

二、面临的问题

1. 物理化学的对象与过程存在偏差

对于材料学科而言,以热力学第一、第二定律为基础的经典物理化学,本来不应该存在问题,但实际情况却不尽然。现行的物理化学由于归属化工学科,因此课程体系中带有明显的化工特征。例如,绝大多数物理化学教材以气体为主要物质对象,同时特别重视化学反应。这些侧重对于化工学科是合情合理的,但对凝聚态为主要物质对象,且更为重视相变过程的材料学科,就暴露出理论与应用的双重问题。首先说应用问题,以相图一章为例,现行物理化学都是以气液相图为重点,而对更为丰富多彩、情况更为复杂的凝聚态相图则较少涉及;再如动力学部分,现行物理化学主要介绍化学反应的动力学,而且是气相

化学反应,但就是没有与相变有关、主要研究凝聚态的动力学。不难看出,现行物理化学应该称为化工物理化学,而材料学科需要的是材料物理化学。再说理论体系上的问题,物质对象由气体转移到凝聚态,会带来理论体系不小的变化,因为凝聚态具备一系列不同于气体的特殊性,特别是它对于常压的不敏感,使得通常具有二元函数性质的热力学量(如内能、焓、熵、自由能)变为一元函数,从而使理论大为简化,这对知识体系复杂、公式众多的物理化学意义重大。

综上所述,物理化学既是经典(古老)的课程,也是非常年轻的课程,其经典体现在化工物理化学,而年轻体现在材料物理化学,因为迄今为止还没有一部真正意义上的材料物理化学教材。

2. 材料科学基础面临融合的困难

尽管材料科学基础相对比较成熟,但脱胎于金属学的材料科学基础也面临两个方面的问题。首先,当金属知识扩大到陶瓷,特别是高分子时,由于高分子的结合键分原子键与分子键两个层次,而金属与陶瓷的结合键都是原子(离子)层次的,故带来一些根本性的差异,具体就是高分子材料中熵的作用很大,而金属与陶瓷主要受结合能影响,所以这两类材料的结构与性质,无论在特点和分析方法上,都有很大差异,造成融合的困难。在教学中实践中,虽然三种材料的知识都编入了材料科学基础,但高分子与另外两种材料形同陌路而难以融会贯通。其次,近年来一些教材把能带理论等属于固体物理的知识也纳入其中,但由于传统金属学以弹性力学和热力学为基础,而能带理论以量子力学与统计物理学为基础,两者相去甚远。同时,金属学以原子为最基本的物质层次,且对于原子的认识是几何钢球,而固体物理则以电子、离子、声子等量子为基本物质层次,这就使问题进一步加重。从实际效果看,材料科学基础中引入能带理论等并没有得到实际应用,故并不成功。这种状况警示我们在知识体系设计中,要进行充分的反思,而不能一味地贪多求全。

3. 材料物理基础的难度过大

不难看出,固体物理还是应该独立设课,部分高校因此开设了材料物理基础,即工科版的固体物理,但剔除固体物理中晶体学(部分)、扩散、晶体缺陷等已包含在材料科学基础中的内容。据我们考察,10年来国内材料物理基础的最大问题是,课程难度过大,学生理解非常困难,其原因是工科学生在量子力学、统计物理学和数学等方面知识的欠缺。

三、改革思路

明确了材料学科“三基”存在的问题,教学改革思路变得清晰起来。

1. 知识体系重构

材料学科“三基”知识体系的重构必须内外结合。“内”指从材料学科内部的视角看,知识的逻辑顺序合理、相互融合、体系完备,课程间相互协调,知识重叠较少。换言之,应该把“三基”看成统一的整体,而不是相互独立的“独联体”。“外”指材料知识体系具有外部合理性,因此“三基”不仅要与先修的高等数学、大学物理合理衔接,而且对后续的专业课切实有用。

“三基”的知识体系还应该坚持实事求是的原则,这是对当下流行的贪多求全、一味追逐学科新知识的反思。现在的学科基础课教材以吸收最新科技成果为潮流,似乎知识之新就等于教材的创新,而对传统知识、经典内容却不肯进行深入的教学探索。从知识结构发展的角度看,知识体系的坚实是第一位的,而新知识属于锦上添花,对于学科基础课而

言更是如此!因此,我们主张调整知识体系构建的方向,使流行的新颖性导向回归到坚实性这一根本诉求上,使“三基”扎扎实实地完成奠定知识基础的使命。

最后,还要对知识体系进行创新性的重构,对重点、特别是难点知识进行创新性的阐释,使学生真正建立起能够理解、懂得运用的概念。

2. 认知方法改造

从教育的角度看,比知识体系更为重要的是认知方法,这就著名的鱼一渔之辩。经过十多年的努力,我们逐渐摸索出“概念—问题—探究”的认知方法,以改造传统的“灌输—记忆—计算”模式。认知方法的变化使教材中问题的提炼至关重要,它是“概念—问题—探究”模式中承上启下的关键。问题能够丰富概念认识过程,使学生在概念上花更多的时间、做更多的对比、形成更多的判断,从而使抽象、枯燥、艰涩的概念变得鲜活起来,概念因为大量问题的导引而与实际情况相关联,概念之间形成有机整体。进一步讲,没有大量深入细致的问题,是不可能真正理解概念的。

按现代教育理论,教材中所提问题的价值不仅限于让学生知道答案、增加知识,更为重要的是这些问题能够产生激发作用,在学生头脑中形成个性化的、真正属于学生的新问题,这样的问题是学生最为关心的,因此最有价值。学生问题的普遍特点是一知半解,有时甚至是完全茫然,这既是学生状况的写照,也衬托出教师的真正作用,即引导学生展开分析、明确概念、剔除谬误、形成新概念,而这些就是思维意义下的探究了。不难看出,“概念—问题—探究”的教学模式与科学研究过程中人的思维模式极为相似,尽管科研中表面上以问题为开端,但科学问题的背后一定是科学概念。这样一来,教学与科研有了思维意义下的直接联系,强化教学就是强化科研中的思维部分。在互联网普及,信息获取方便,国内实验仪器水平大幅度提升的时代背景下,科学研究中思维的重要性与日俱增,因此“概念—问题—探究”的认知模式具有巨大的价值。

3. 教育理念落实

教育教学之复杂还在于,仅仅解决知识体系与认知方法的问题是远远不够的,还必须在教学过程中秉承先进的教育理念,如以人为本、探索创新、自主学习、速度与效率;对于工科学生,还要重视实践,在理论课中就要传递实践第一的理念。

教育理念的课程落实一直是难题,其难度首先在于理念众多、莫衷一是;其次是教育理念要落实到课程的具体要素之中,即落实到教材、教师与学生;而最为困难的可能是理念如何转化为操作与行动,以便让先进的理念发挥实际的效能。

教育内部问题的解决有时需要从教育学的外部(如哲学)入手。从哲学的高度看教育理念众多的问题,自然会联想到抓主要矛盾的哲学方法。如果始终坚持以人为本这一核心教育理念,同时借鉴实事求是、深入实际的哲学方法,则绝大多数问题都能得到解决。例如,创新能力是现代教育理念的重要内容,而在实际操作中,如果能够很好地诠释人之“本”的教育教学含义,实事求是地在教学中体现这个根本,则创新能力培养会转化为创新意识强化,进而与问题意识挂钩,最终真正落实到教学过程。

综上所述,拿来主义的材料学科知识构建方式,已经不能适应学科发展与人才培养要求,因此需要通过教学改革,对材料学科“三基”的课程知识体系与认知方法进行改造,在秉承先进教育理念的基础上,使材料学科基础课在教学与教育两个层次上得到长足发展。

目 录

第 1 章 晶体结构	1
1.1 几何晶体学	1
1.1.1 晶体结构与晶胞	1
1.1.2 对称性与晶系	2
1.1.3 阵点与布拉菲点阵	2
1.1.4 晶向指数、晶面指数、晶面间距	4
1.2 纯金属的晶体结构	7
1.2.1 典型的金属晶体结构	8
1.2.2 晶体结构的几何性质	9
1.3 原子结合理论	13
1.3.1 双原子结合的一般规律	13
1.3.2 晶体的结合能计算	15
1.4 合金的晶体结构	19
1.4.1 固溶体	19
1.4.2 中间相(金属间化合物)	27
1.5 陶瓷的晶体结构	31
1.5.1 离子晶体结构	31
1.5.2 共价晶体结构	35
1.6 非晶体与准晶	36
1.6.1 非晶金属的结构	37
1.6.2 非晶陶瓷的结构	39
1.6.3 准晶	40
1.7 本章评述与重要概念	41
1.7.1 本章评述	41
1.7.2 本章重要概念	42
第 2 章 晶体缺陷	43
2.1 点缺陷	43
2.1.1 点缺陷的种类	43
2.1.2 点缺陷的热力学分析	46

2.2	位错的基本概念	49
2.2.1	位错的种类	49
2.2.2	柏氏矢量与位错密度	50
2.3	位错应力场与位错运动	53
2.3.1	位错应力场	53
2.3.2	位错的运动	57
2.3.3	位错应变能与位错线张力	61
2.4	实际晶体中的位错	62
2.4.1	金属晶体中的位错	62
2.4.2	陶瓷晶体中的位错	69
2.5	界面	71
2.5.1	晶体表面	71
2.5.2	晶界	73
2.5.3	相界	78
2.5.4	界面的平衡偏析	81
2.6	晶体缺陷间应力场的交互作用	82
2.7	显微组织与其他缺陷	82
2.7.1	显微组织	82
2.7.2	其他缺陷	84
2.8	本章评述与重要概念	84
2.8.1	本章评述	84
2.8.2	本章重要概念	85
第3章	高分子结构	86
3.1	基本概念	86
3.2	高分子链结构	87
3.2.1	近程结构	88
3.2.2	远程结构	90
3.3	高分子凝聚态结构	94
3.3.1	高分子非晶态	94
3.3.2	高分子晶态	94
3.3.3	高分子取向结构	96
3.3.4	高分子合金	98
3.4	本章评述与重要概念	98
3.4.1	本章评述	98
3.4.2	本章重要概念	99

第 4 章 相图	100
4.1 一元相图	100
4.2 二元相图	103
4.2.1 二元相图的热力学分析	103
4.2.2 典型的二元相图	109
4.2.3 重要的二元相图	121
4.2.4 相接触规则与假想相图	130
4.3 三元相图	131
4.3.1 成分表示法	131
4.3.2 三元相图热力学分析	132
4.3.3 三元匀晶相图	134
4.3.4 三元共晶相图	136
4.3.5 三元相图应用举例	146
4.4 本章评述与重要概念	152
4.4.1 本章评述	152
4.4.2 本章重要概念	152
第 5 章 扩散	153
5.1 扩散的宏观理论	153
5.1.1 扩散第一定律	153
5.1.2 扩散第二定律	155
5.1.3 扩散方程的解	156
5.1.4 坐标变换	159
5.2 扩散的微观理论	160
5.2.1 扩散机制	160
5.2.2 扩散系数	164
5.2.3 陶瓷中扩散的特点	168
5.3 反应扩散	169
5.4 本章评述与重要概念	171
5.4.1 本章评述	171
5.4.2 本章重要概念	171
第 6 章 相变	172
6.1 液—固相变	172
6.1.1 纯金属的凝固	172
6.1.2 二元合金的非平衡凝固	188

6.1.3 凝固组织及其控制	207
6.2 相变分类与固态相变热力学	210
6.2.1 相变的分类及特点	210
6.2.2 固态相变的热力学分析	217
6.3 固态相变过程	227
6.3.1 合金的脱溶(沉淀)	227
6.3.2 块形转变	235
6.3.3 调幅分解	236
6.4 本章评述与重要概念	240
6.4.1 本章评述	240
6.4.2 本章重要概念	241
第7章 转变	242
7.1 奥斯瓦尔德熟化	242
7.1.1 弯曲界面的性质	242
7.1.2 奥斯瓦尔德熟化	244
7.2 烧结	246
7.2.1 烧结的驱动力	247
7.2.2 烧结中固相扩散模型	247
7.3 回复与再结晶	249
7.3.1 回复	249
7.3.2 再结晶	251
7.3.3 晶粒长大	256
7.4 非晶转变	260
7.4.1 过冷液体平衡状态的实现	260
7.4.2 非晶转变	261
7.4.3 非晶形成条件	262
7.5 高分子的热转变	267
7.6 本章评述与重要概念	268
7.6.1 本章评述	268
7.6.2 本章重要概念	268
第8章 形变与断裂	269
8.1 力学性能概述	269
8.1.1 应力分解与应力—应变曲线	269
8.1.2 本构方程	270
8.1.3 变形的分类	274

8.2	弹性变形的微观机制及影响因素	274
8.2.1	弹性变形的微观机制	274
8.2.2	弹性变形的影响因素	279
8.3	塑性变形的微观机制	280
8.3.1	单晶体的塑性变形	280
8.3.2	多晶体的塑性变形	289
8.4	黏性变形的微观机制	291
8.4.1	金属多晶体的黏性变形	291
8.4.2	高分子的黏性变形	296
8.4.3	金属非晶体的黏性变形	296
8.5	断裂简介	297
8.5.1	断裂强度	297
8.5.2	裂纹形成机制	300
8.5.3	高分子的断裂	300
8.6	本章评述与重要概念	301
8.6.1	本章评述	301
8.6.2	本章重要概念	302
第9章	强化与韧化	303
9.1	金属的强化	303
9.1.1	细晶强化	303
9.1.2	应变强化	303
9.1.3	固溶强化	305
9.1.4	弥散强化(沉淀强化)	305
9.1.5	相变强化	306
9.1.6	高温合金强化	306
9.2	陶瓷的韧化	307
9.3	高分子的强化	308
9.4	复合材料强化	310
9.4.1	长纤维复合材料的力学行为	310
9.4.2	短纤维复合材料的力学行为	312
9.4.3	复合材料的界面	313
9.5	本章评述与重要概念	314
9.5.1	本章评述	314
9.5.2	本章重要概念	314
	参考文献	315

第1章 晶体结构

1.1 几何晶体学

1.1.1 晶体结构与晶胞

晶体:原子在三维空间作周期排列的物质称为晶体(图 1-1(a))。晶体中原子的具体排列方式称为晶体结构。在通常情况下,将晶体中的原子看成刚球。

晶胞:构成晶体的基本单元。这种基本单元一般取最小平行六面体(图 1-1(c))。

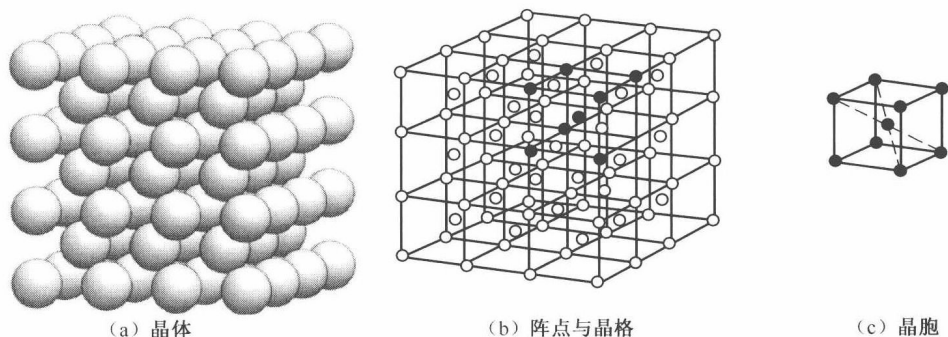


图 1-1 晶体结构

晶胞参数:决定晶胞大小、形状的独立参数。对平行六面体,晶胞参数有六个:决定边长的 a, b, c 和决定夹角的 α, β, γ , 其中 a, b, c 称**点阵常数**。晶胞参数还可用三个独立矢量表示: a, b, c 。晶胞及其参数如图 1-2 所示。

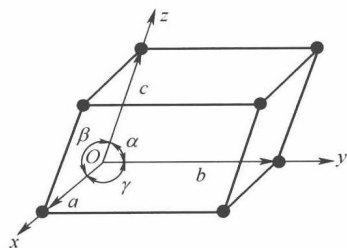


图 1-2 晶胞与基矢

例 1.1 计算 Cu 的密度。已知 Cu 的点阵常数为 $a=0.3614\text{nm}$, 其原子量为 63.5。Cu 的晶体结构是立方的, 每个晶胞中有 4 个原子。

解

$$\rho = \frac{\frac{4}{6 \times 10^{23}} \times 63.5}{(0.3614 \times 10^{-7})^3} = 8.97 (\text{g/cm}^3)$$

致 学 生

这个例题尽管非常简单,但还是有需要说明的地方:

(1) 对于晶体的密度,以前都是作为已知量给出的。现在学习了晶胞概念之后,却能计算了。之所以能计算,从方法论的角度讲应用了概念组合,即把晶胞概念与密度的概念组合起来,具体就是在一个晶胞中计算密度,因为晶胞是整个晶体的代表。这里要强调的是概念组合,它是非常重要的认识事物与创造事物的方法,如计算机病毒、知识经济、网络战争,这些都是概念组合的产物。

(2) 对于计算公式,重要的是物理含义的清晰。如上面的式子中,分子的 $4/(6 \times 10^{23})$ 代表一个晶胞中有多少摩尔原子,再乘以 63.5,则表示一个晶胞中有多少克;而分母是一个晶胞的体积。换言之,上面的书写格式是最为简洁清晰的,而本课程就是要求简洁清晰。

1.1.2 对称性与晶系

对称性的高低通过对称要素的多少来确定。球体有无穷多个对称面,立方体只有有限个对称面,所以球体的对称性高于立方体。

根据晶胞所具有的对称性的高低,可以将晶体分为七个大类,称为七大晶系(表 1-1)。

表 1-1 晶系

晶 系	棱边长度及夹角关系	举 例
三 斜	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	K_2CrO_7
单 斜	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	$\beta\text{-S}, CaSO_4 \cdot 2H_2O$
正 交	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\alpha\text{-S}, Ga, Fe_3C$
六 方	$a_2 = a_2 = a_3 \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$Zn, Ca, Mg, NiAs$
菱 方	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	As, Sb, Bi
四 方	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\beta\text{-Sn}, TiO_2$
立 方	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Fe, Cr, Cu, Ag, Au

例 1.2 对比立方体与长方体对称性的高低。

解 立方体有(3+6)个对称面,(3+4)个对称轴;而长方体只有 3 个对称面,3 个对称轴。所以立方体对称性高于长方体。

1.1.3 阵点与布拉菲点阵

阵点:由晶体中原子抽象而成的、周围环境完全相同的几何点。周围环境完全相同的要求是针对每一个点的,这是一个限制性很强的要求。

布拉菲点阵:由于阵点有周围环境完全相同的要求,空间点阵的种类受到限制。例如,二维点阵的类型只有如图 1-3 所示的五种。布拉菲(A. Bravais)证明:在三维空间中,点阵类型只有 14 种,称布拉菲点阵。14 种布拉菲点阵的晶胞如图 1-4(1)~(14)所示,它们与七大晶系的关系见表 1-2。

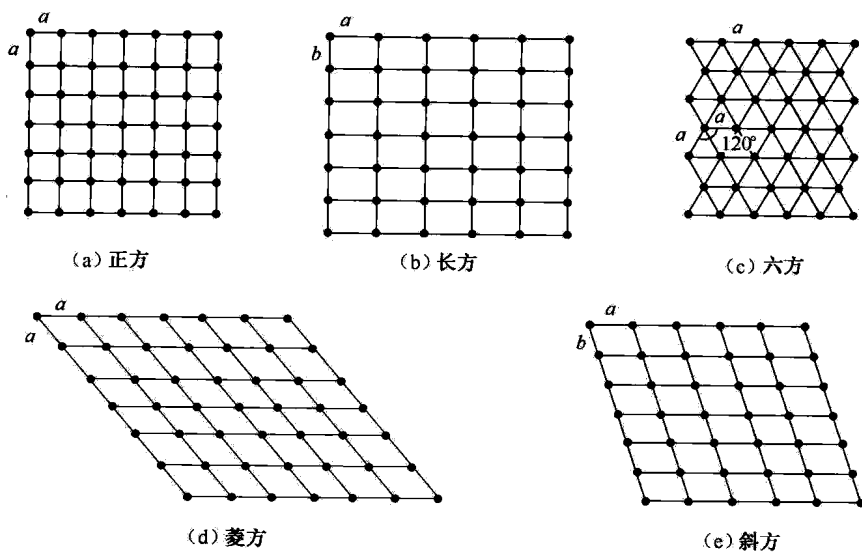


图 1-3 二维布拉菲点阵

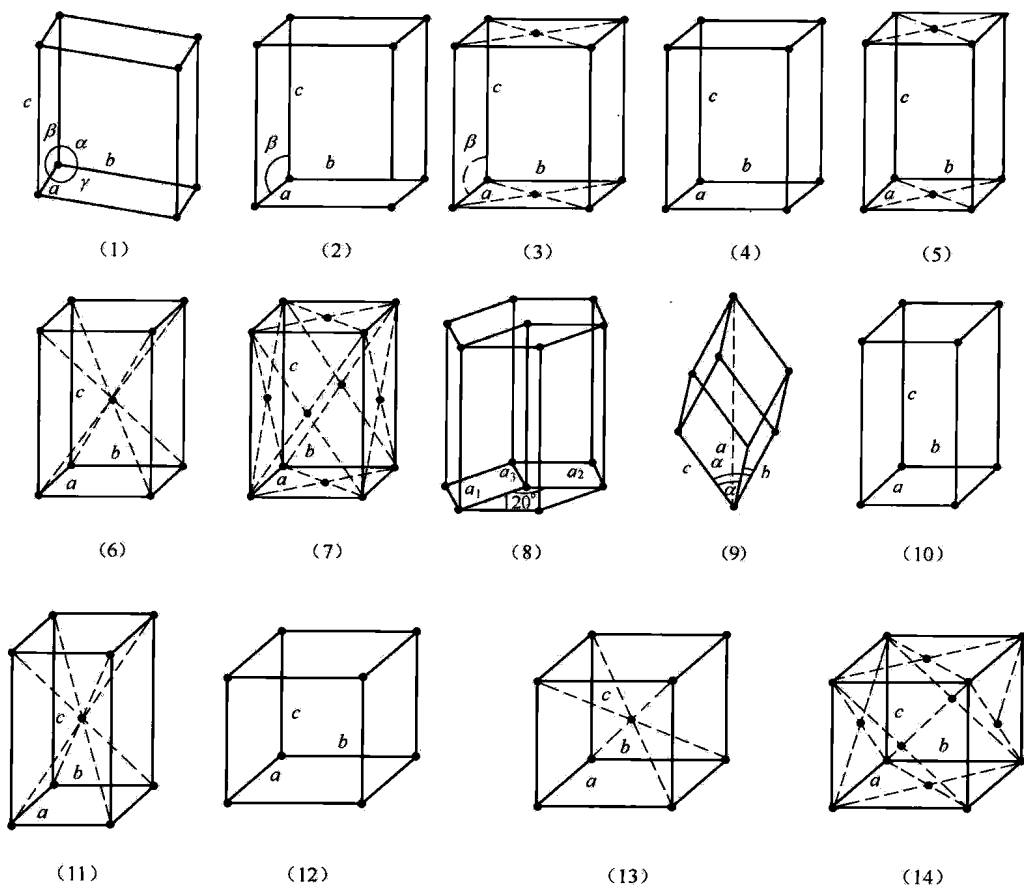


图 1-4 14 种布拉菲点阵的晶胞

表 1-2 空间点阵与晶系

序 号	点阵类型	晶 系	序 号	点阵类型	晶 系
1	简单三斜	三 斜	8	简单六方	六 方
2	简单单斜	单 斜	9	菱形(三角)	菱 方
3	底心单斜		10	简单四方	四方(正方)
4	简单正交	正 交	11	体心四方	
5	底心正交		12	简单立方	立 方
6	体心正交		13	体心立方	
7	面心正交		14	面心立方	

问题 1.1.1 对 14 种布拉菲点阵中的体心立方,说明其中每一个阵点周围环境完全相同。

问题 1.1.2 在二维布拉菲点阵中,具体说明正方点阵的对称性高于长方点阵。

1.1.4 晶向指数、晶面指数、晶面间距

1. 晶向指数与晶面指数的标定

晶向:任意两阵点的连线构成晶向。

晶面:三个非共线阵点构成晶面。

不同的晶向(或晶面)可以用密勒(Miller)指数表示,其中晶向(或晶面)不同是指方向或阵点排列方式不同。

1) 晶向指数的标定

(1) 在晶胞中确定原点及 x 、 y 、 z 三轴,用点阵常数 a 、 b 、 c 作为 x 、 y 、 z 三轴的单位长度(图 1-5)。

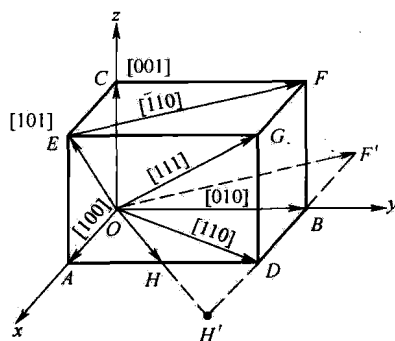


图 1-5 晶向指数标定

(2) 过原点作所需标定晶向的平行线,该平行线必过某一阵点,这个阵点在 $Oxyz$ 坐标系中的坐标为 u 、 v 、 w 。

(3) 将 u 、 v 、 w 化为最小整数并加上方括号,所需标定晶向的指数即为 $[uvw]$ 。如果有负值,负号记在数字上面。例如,若 u 是负的,则记为 $[\bar{u}vw]$ 。

一个确定的 $[uvw]$ 表示所有相互平行、方向相同的晶向。立方系中一些重要的晶向指数,如图1-5所示。

晶向指数标定还有“反问题”,即给定某一 $[uvw]$,然后画出它。为了在一个晶胞中画出该晶向,可以采取以下措施:①移动坐标原点,原则是“谁负移谁”。例如 $[0\bar{1}0]$,原点就向 y 轴正向移动;再如 $[\bar{3}1\bar{2}]$,原点先向 x 轴正向移动,然后向 z 轴正向移动。②除以指数最大者。如 $[\bar{4}21]$ 就都除4,否则晶向的末端会落在晶胞的外面。

在立方系中, u 、 v 、 w 数值相同但正负号及排列顺序不同的一组晶向称为晶向族,记为 $\langle uvw \rangle$ 。例如, $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 、 $[\bar{1}00]$ 、 $[0\bar{1}0]$ 、 $[00\bar{1}]$ 同属 $\langle 100 \rangle$ 晶向族。两个不同晶向若属于同一晶向族,它们的方向虽不相同,但阵点间距一定相同。

2) 晶面指数的标定

(1) 在晶胞中确定原点及 x 、 y 、 z 三轴,以点阵常数 a 、 b 、 c 为 x 、 y 、 z 三轴的单位长度(图1-6)。

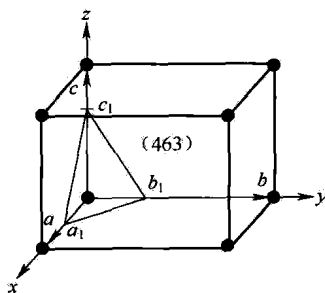


图1-6 晶面指数标定

(2) 求出待定晶面在 x 、 y 、 z 三轴上的截距(晶面如平行某轴,相应的截距取 ∞)。

(3) 取每个截距的倒数,然后化为最小整数并加圆括号,记为 (hkl) 。

以图1-6中晶面 $a_1b_1c_1$ 为例,它在 x 、 y 、 z 三轴上的截距依次为 $1/2$ 、 $1/3$ 、 $2/3$,所以晶面指数为 (463) 。一个确定的 (hkl) 代表所有相互平行的晶面。对于晶面指数标定中的“反问题”,原点的处理方式与晶向指数一致。

在立方系中,有类似于晶向族的概念,即晶面族,记为 $\{hkl\}$ 。两个不同晶面若属于同一晶面族,它们的方位虽然不相同,但这两个晶面上的阵点排列方式完全相同。

在立方系中,晶面 $(h_1k_1l_1)$ 与 $(h_2k_2l_2)$ 之间的夹角公式如下:

$$\cos\theta = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

不难证明,两个晶向之间,或一个晶面与一个晶向之间,也有类似的公式。因此,指数相同的晶向与晶面必然垂直,即 $[hkl] \perp (hkl)$ 。上式还表明,两个晶向相互垂直的充要条件是它们的矢量点积为零,两个界面相互垂直的充要条件也是它们的矢量(面的法线矢量)点积为零。

3) 六方系的指数标定

六方系晶面指数的标定也可以按上述方法进行,这时的三轴为 a_1 、 a_2 、 c (图1-7)。由于 a_1 与 a_2 不垂直等原因,很难看清标定出的晶面之间的关系。例如,六个柱面上的阵点排列方式虽然完全一致,但从晶面指数上却看不出这种等同关系,因为这六个晶面的指数

分别是 (100) 、 (010) 、 $(\bar{1}10)$ 、 $(\bar{1}\bar{0}0)$ 、 $(0\bar{1}0)$ 、 $(1\bar{1}0)$ 。

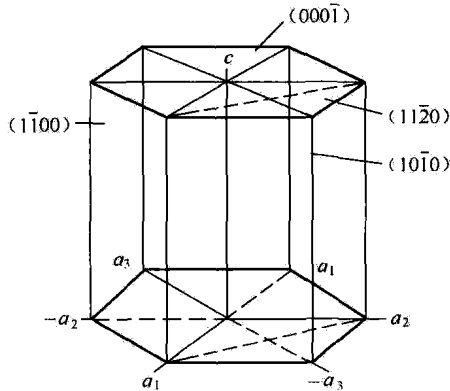


图 1-7 六方系晶面指数

为了克服六方系中三指数的上述缺陷,专门设计了 (hkl) 四指数法,其确定步骤如下:

- (1) (hkl) 中的 h, k, l 与一般的晶面指数标定一致。
- (2) $i = -(h+k)$ 。

用四指数标定后,六个柱面的指数变为 $(10\bar{1}0)$ 、 $(01\bar{1}0)$ 、 $(\bar{1}100)$ 、 $(\bar{1}010)$ 、 $(0\bar{1}10)$ 、 $(1\bar{1}00)$,它们同属 $\{10\bar{1}0\}$ 晶面族。

六方系中晶向指数的标定方法如下:

- (1) 先求出被标定晶向在坐标系 a_1, a_2, c 中的指数,记为 $[UVW]$;
- (2) 用以下公式将三指数 $[UVW]$ 转化为四指数 $[uvw]$:

$$u = (2U - V)/3, \quad v = (2V - U)/3, \quad t = -(u + v), \quad w = W$$

例如, a_1 轴的 $[UVW] = [100]$ 。根据转化公式,其四指数为 $[2\bar{1}\bar{1}0]/3$ 。

2. 晶面间距 d_{hkl}

晶面间距:平行晶面间的最近距离称为晶面间距。

1) 简单晶胞的晶面间距

在 14 种布拉菲点阵构成的晶胞中(图 1-4),第 1、2、4、8、10、12 号晶胞为简单晶胞,其余为复杂晶胞。简单晶胞的晶面间距为

$$\text{正交系} \quad d_{hkl} = \left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \right)^{-1/2} \quad (1-1)$$

$$\text{立方系} \quad d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (1-2)$$

$$\text{六方系} \quad d_{hkl} = \left[\frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \frac{l^2}{c^2} \right]^{-1/2} \quad (1-3)$$

2) 复杂晶胞的晶面间距

- (1) 先用同一晶系的简单晶胞的晶面间距公式计算。
- (2) 根据复杂晶胞的具体情况除以某一正整数。

例如:体心立方的 d_{100} 除以 2, d_{111} 除以 2, d_{110} 除以 1;面心立方的 d_{100} 除以 2, d_{110} 除以 2, d_{111} 除以 1。