

高等学校教学用书

物理冶金基础

冶金工业出版社

高等学校教学用书

物理冶金基础

中南矿冶学院 曹明盛 主编

冶金工业出版社

高等学校教学用书

物理冶金基础

中南矿冶学院 曹明盛 主编

•

冶金工业出版社出版

(北京东城沙滩嵩祝院北巷 39 号)

新华书店北京发行所发行

冶金工业出版社印刷厂印刷

•

787×1092 1/16 印张 22 3/4 字数 545 千字

1985年5月第一版 1985年5月第一次印刷

印数00,001~5,300册

统一书号: 15062·4264 定价4.30元

前 言

本书是根据1984~1988年冶金高等院校教材编写出版规划编写的。

“物理冶金基础”是金属材料专业的一门专业基础课，着重阐述金属及合金的组成、组织结构与性能之间的内在联系以及在各种条件下的变化规律，为有效地使用金属材料和研制具有特定性能的金属材料提供理论依据和线索。本书结合实例，从组织结构的角度出发来阐明问题，重点放在与金属材料科学有关的基本现象、基本概念、基本规律和基本方法上。

编写时参阅了国内外较新的资料，力求把应讲的问题阐述清楚一些，以便于自学；尽量做到理论联系实际；着重阐明各种现象的物理本质，避免过多的烦琐数学推导。为了使读者更好地了解合金的组成、组织结构与性能之间的内在联系，本书最后一章总结了这方面的规律，它有助于培养学生分析问题和解决问题的能力。

本教材的讲课时数为125学时左右。学习本教材之前，学生应学完物理化学和材料力学课程，并初步具有金属材料生产方面的实践知识。

本教材共十章，第一至第五章由唐远永编写，第六至第十章由曹明盛编写。最后全书由曹明盛校阅定稿。在编写过程中，金属学教研室宋友仁、唐仁政、刘锦文、赖耀伟、丁道云等同志分工审阅了部分初稿，提出了宝贵意见。教研室其他同志也给予了许多帮助。金相实验室韩德伟、谢先娇等同志为本书制备了图片，在此一并表示感谢！

由于编者水平有限，加之时间仓促，书中必然存在某些缺点和错误，敬希读者批评指正。

编 者

1983年10月

目 录

第一章 金属的晶体结构	1
第一节 金属的特性	1
第二节 晶体学基础	1
第三节 金属的晶体结构	12
第二章 金属的凝固	27
第一节 液态金属	27
第二节 金属熔液凝固时的过冷现象和凝固过程	31
第三节 晶核的形成	33
第四节 晶核成长	39
第五节 凝固理论的实际应用	45
第三章 二元合金相图及合金的凝固和组织	52
第一节 二元合金中存在的相	52
第二节 二元相图的表示、含义和杠杆定律	53
第三节 用实验方法测绘二元相图	56
第四节 匀晶相图及固溶体合金的凝固和组织	58
第五节 共晶相图及共晶系合金的凝固和组织	71
第六节 包晶相图及其合金的凝固和组织	82
第七节 偏晶相图及其合金的凝固和组织	85
第八节 形成化合物的二元相图	86
第九节 具有固态转变的二元相图	87
第十节 如何分析和使用二元相图	91
第十一节 相图的热力学基础	99
第四章 三元合金相图 (三元系)	112
第一节 三元相图的成分表示法	112
第二节 三元相图的杠杆定律和重心法则	113
第三节 匀晶三元相图	114
第四节 简单共晶三元相图	118
第五节 固态有限溶解的共晶三元相图	122
第六节 具有包共晶反应的三元相图	128
第七节 具有三元包晶反应的三元相图	132
第八节 形成稳定化合物的三元相图	133
第九节 三元相图总结	135
第十节 三元相图实例分析	139
第五章 合金相的结构及其形成规律	148
第一节 固溶体	148
第二节 金属间化合物 (中间相)	159
第六章 晶体的缺陷	175
第一节 点缺陷	175

第二节	线缺陷	179
第三节	面缺陷	221
第四节	研究晶体缺陷与发展高强度合金的关系	233
第七章	塑性变形及变形后的金属在加热时组织和性能的变化	237
第一节	金属的塑性变形	237
第二节	塑性变形后的金属在加热时组织和性能的变化	266
第三节	金属的热加工(热塑性变形)	291
第四节	超塑性	298
第八章	金属和合金中的扩散	303
第一节	扩散方程	303
第二节	扩散机制	310
第三节	置换式固溶体中的互扩散及Kirkendall效应	312
第四节	扩散的驱动力	314
第五节	影响扩散系数的因素	315
第六节	反应扩散	320
第七节	扩散在冶金方面的应用实例	320
第九章	固态转变导论	327
第一节	固态相变分类	327
第二节	相变热力学	329
第三节	相变动力学	336
第四节	固态相变的结晶学取向关系	338
第五节	固态相变的特点	339
第十章	合金的成分、组织与性能之间的关系	341
第一节	由单相固溶体构成的合金	341
第二节	由两种以上晶体构成的复相合金	348
参考文献		356

第一章 金属的晶体结构

第一节 金属的特性

在日常生活中，我们经常用到各种金属制品。金属材料的突出特性是具有金属光泽，高的导电和导热性，较好的机械强度和塑性，正的电阻温度系数等。但是，当利用这些性质来区分金属和非金属时，就会发现，其中许多性质在金属和非金属之间并没有明显的界线。例如，石墨是非金属，但它有一定的导电能力；锑是金属，但它很脆，不能冷锻也不能热锻。金属最有代表性的一种标志是具有正的电阻温度系数，而非金属却具有负的电阻温度系数。

金属的这些特性只有在宏观的金属材料中才能显示出来。也就是说，当大量的金属原子结合成集体后，才能具有这些性质，而单个孤立的金属原子并没有这些特性，这种巨大的金属原子集体构成了金属状态。另外，即使是同一种原子，若它们的结合方式（包括结合键和晶体结构）不同，性质也会不同。例如常见的白锡（ β -Sn）具有正方晶体结构，有较好的塑性；而灰锡（ α -Sn）为金刚石结构，则性脆。当由白锡转变成灰锡时，体积发生很大的（约27%）膨胀，使之脆裂成灰色粉末，这就是所谓“锡疫”。又如性质特硬的金刚石和性质特软的石墨，都是由碳原子所组成，但二者的原子结合方式不同。

由此可见，金属所具有的性质并不完全决定于单个原子的结构，而且与其原子间的结合键性质及其晶体结构类型有关。往后还会看到，金属和合金的力学性能也与其形成的各种相的本性及其组织有密切关系。这里所指的组织，包括断口组织、宏观组织和显微组织等等。

应该指出，构成金属原子集体的原因，主要是由于金属原子的外层电子数较少，容易脱离原子核而形成金属键的缘故。

本章主要研究金属晶体结构中原子的排列情况及其表示方法。

第二节 晶体学基础

一、晶体与非晶体

按照原子排列的规则性可将固态物质分为两类：晶体和非晶体。晶体可定义为是由许多质点（包括原子、离子或分子）在三维空间呈周期性地规则排列所构成的固体；而非晶体则不呈这种周期性的规则排列。例如，液态金属的原子排列无周期规则性，是非晶体，当凝固成固态后，原子呈周期性规则排列，则变成晶体。在极快冷却的条件下，某些金属合金也可获得固态非晶体，即将液态的原子排列方式保留至固态。所以非晶体又称为“过冷液体”或“金属玻璃”。应该注意，晶体物质并不一定都具有几何规则的外形。

晶体纯物质与非晶体纯物质在性质上的区别主要有两点：（1）前者熔化时具有固定的熔点，而后者却存在一个软化温度范围，没有明显的熔点；（2）前者具有各向异性，而后者却为各向同性。

二、空间点阵和晶胞

晶体是由原子（或离子、分子）按一定形式规则排列而成的，它可能有无限多种排列

形式。当对晶体进行研究时，为了归纳的方便，常常将构成晶体的实际质点（原子、离子或分子）忽略，而将它们抽象成纯粹的几何点，称之为阵点或结点。这些阵点在空间呈周期性规则排列并具有等同的周围环境的模型称为空间点阵，简称点阵，如图1-1所示。

空间点阵也可以这样构成，设想空间存在三组互不平行的平面，而各组平面本身互相平行且间隔相等，这三组平面在空间相交，将空间划分成一系列的平行六面体，各个平行六面体的形状、大小和取向完全相同，这些平行六面体称为晶胞（或单胞、单位晶胞）；三组平面的交点则称为阵点或结点，这些阵点在空间排列成空间点阵。空间点阵的基本特征是：每一个阵点的周围空间均具有等同的环境。所谓等同环境，就是当我们对每一个阵点从相同的方向观察时，均呈现完全同样的景象；如果把连接任意两个近邻阵点的矢量起点放到第三个阵点上来，则此矢量的终点必落在第四个阵点上。

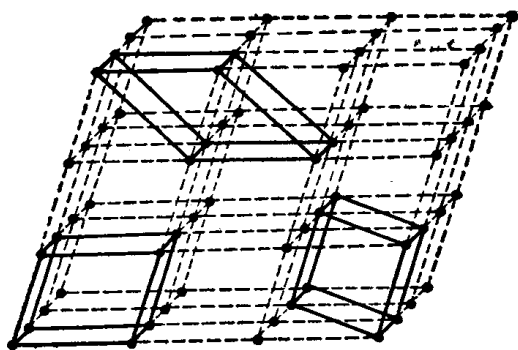


图 1-1 空间点阵及晶胞的不同取法

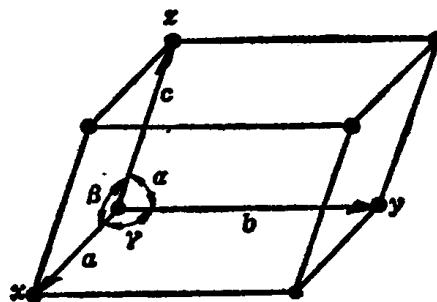


图 1-2 晶胞及其六个参数

当研究空间点阵的结构时，只需在其中选取一种小的平行六面体作为晶胞来进行研究。同一点阵可以划出多种不同形状和大小的平行六面体作为晶胞，如图1-1中的实线六面体所示。究竟取哪一种为标准呢？为了统一和方便，规定了如下几条原则：

- (1) 选取的平行六面体应与宏观晶体具有同样的对称性。
- (2) 平行六面体内的棱和角相等的数目应最多。
- (3) 当平行六面体的棱间存在直角时，直角的数目应最多。
- (4) 在满足上述条件的情况下，晶胞应具有最小的体积。

为了描述晶胞的形状和大小，通常采用平行六面体中交于一点的三个棱边长度 a 、 b 、 c 及棱间夹角 α (b 、 c 之间)、 β (a 、 c 之间)、 γ (a 、 b 之间)等六个点阵参数，如图1-2所示， a 、 b 和 c 称为点阵常数（或晶格常数）。为了描述点阵中的面、方向和点的位置，需设置坐标轴（或晶轴），通常是取晶胞中交于一点（称原点）的三根棱线为晶轴 x 、 y 、 z ，晶轴的正、负方向规定为：在原点的前、右、上方者为正，反之为负。晶轴的单位长度则为相应的点阵常数。

由上所述，空间点阵是由大小、形状和位向相同的晶胞所组成，是晶胞的重复体。

三、七种晶系和十四种空间点阵（布拉菲点阵）

利用三组平面分割空间时，随着各组平面排列的不同，可以构成各种形状（即六个点阵参数不同）的晶胞；反之，由六个不同点阵参数的晶胞堆垛起来，便可产生各种不同的

点阵。根据六个点阵参数间的相互关系，可以将全部空间点阵归属于七种类型，这与晶体学中将所有千万种晶体所归属的七种类型一致，故称之为七种晶系。表 1-1 列出七种晶系及其六个点阵参数之间的关系。

表 1-1 七种晶系和十四种布拉菲点阵

晶系	晶轴长度和夹角	布拉菲点阵和符号	阵点坐标
立方系	$a=b=c \quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单(P)	000
		体心(I)	$000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
		面心(F)	$000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
正方系 (四方)	$a=b \neq c \quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单(P)	000
		体心(I)	$000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
正交系 (斜方)	$a \neq b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单(P)	000
		体心(I)	$000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
		底心(C)	$000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
		面心(F)	$000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
菱方系 (三角)	$a=b=c \quad \alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	简单(R)	000
六方系	$a=b \neq c \quad \alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$	简单(P)	000
单斜系	$a \neq b \neq c \quad \alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$	简单(P)	000
		底心(C)	$000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
三斜系	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	简单(P)	000

如果仅在七种晶系的晶胞的每一个角上放置一个阵点，便可形成七种不同的点阵。但是，按照点阵的基本特性：每个阵点均有等同的环境。除了在晶胞的每个角上放置一个阵点之外，还可以在晶胞的其它位置安放阵点，同样可满足等同环境的要求。例如，在简单立方点阵的每个晶胞的中心再放上一个阵点，或者在每个面的中心各放上一个阵点，均可在简单立方点阵的基础上，形成另一种点阵（体心立方或面心立方）。法国晶体学家布拉菲 (Bravais) 曾用数学方法证明，仅可能有14种点阵，而不会再多。后来就把这14种点阵称为布拉菲点阵（图1-3）。

在14种布拉菲点阵的晶胞中，又分为简单晶胞（或初基晶胞）和复合晶胞。凡是晶胞中只含有一个阵点，即只有每个角上含有阵点的晶胞，称为简单晶胞，用符号P或R表示；如果在晶胞内部或面上还含有阵点，即晶胞中含有一个以上的阵点，则称为复合晶胞。符号F、I和C分别表示面心晶胞、体心晶胞和底心晶胞。每个晶胞所含有的阵点数可按下式计算：

$$N = N_i + \frac{N_f}{2} + \frac{N_c}{8} \quad (1-1)$$

式中 N_i 为晶胞内的阵点数， N_f 为晶胞面上的阵点数， N_c 为晶胞角上的阵点数。

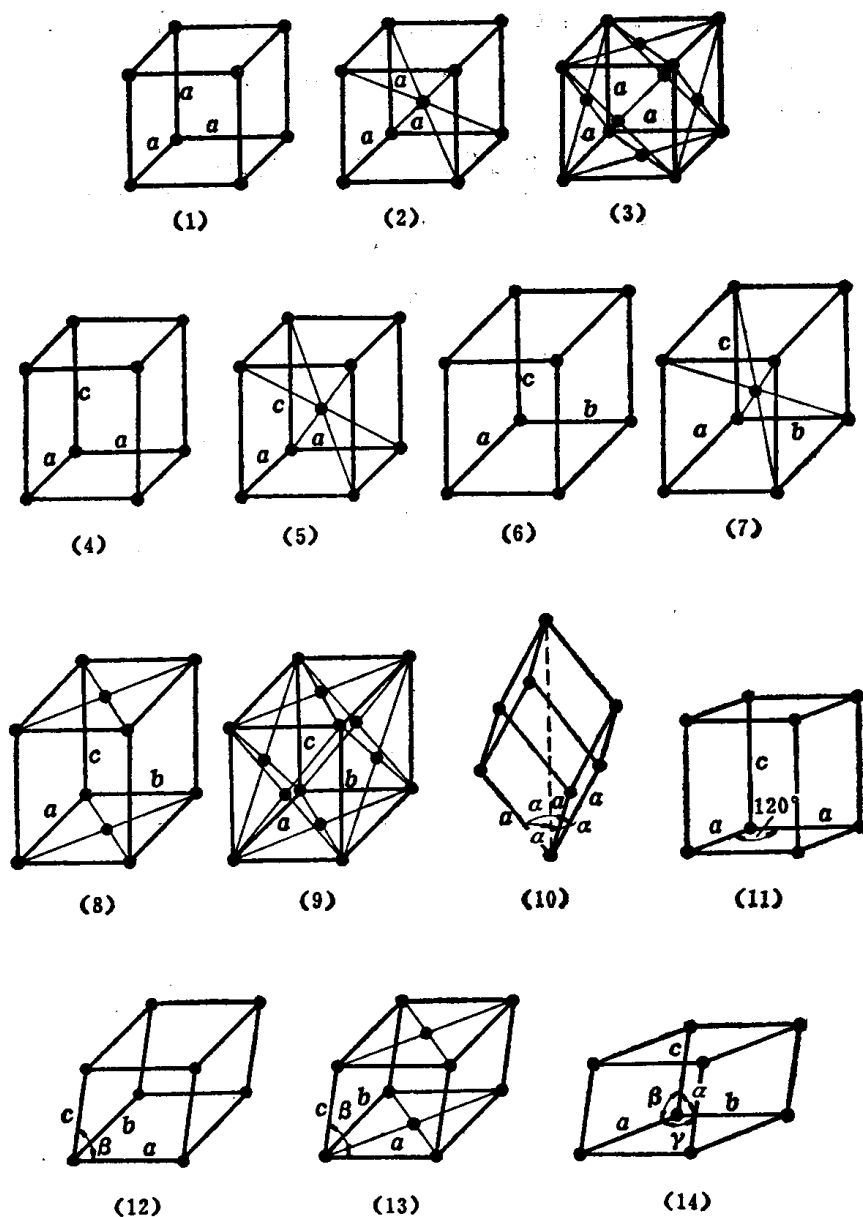


图 1-3 十四种布拉非点阵的晶胞

1—简单立方；2—体心立方；3—面心立方；4—简单正方；5—体心正方；6—简单正交；7—体心正交；8—底心正交；9—面心正交；10—菱方；11—六方；12—简单单斜；13—底心单斜；14—三斜

并不是每个晶系都包含有体心、面心和底心点阵，例如，正方晶系中就没有面心正方点阵和底心正方点阵。这是因为底心正方点阵可用简单正方点阵表示，面心正方点阵可用体心正方点阵表示（图1-4），因此重复的就不必另列。

四、晶体结构与空间点阵

上述空间点阵的阵点并不等同于实际晶体中的原子位置，也就是说，晶体结构与空间点阵不是等同的。空间点阵是抽象质点的一种几何规则排列，要求各阵点有完全等到的环境，它只可能有14种类型。而晶体结构是指实际原子、离子或分子的具体排列模型。如果在每个阵点上恰好只存在一个原子，如图1-5(b)所示，则空间点阵(a)和晶体结构一致。但由于每个阵点可以存在一个或多个同种或异种原子、离子或分子，而且它们在阵点上的

排列组合图案可以采取多种形式,如图1-5(c、d、e)所示。由此可见,同一种空间点阵可以具有许多种晶体结构。

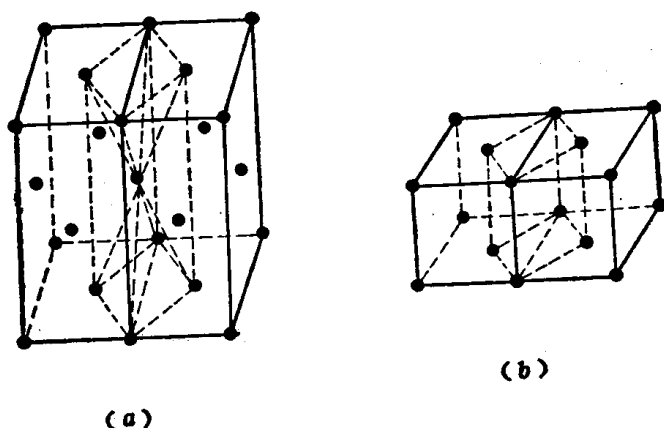


图 1-4 (a) 面心正方点阵和体心正方点阵的关系; (b) 底心正方点阵与简单正方点阵的关系

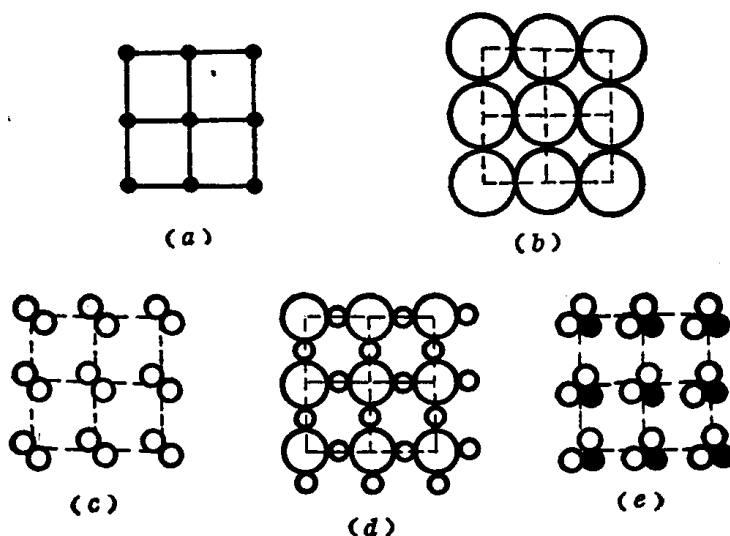


图 1-5 属于同一种空间点阵的几种晶体结构形式

在实际晶体结构中,经常遇到这种情况。例如,图1-6所示的Cu、NaCl和 CaF_2 三种晶体结构,从原子分布情况来看,虽然明显不同,但是,从阵点的等同环境要求来分析,它们却是同归属于面心立方点阵。又如图1-7所示的W和CuZn两种晶体结构,从晶体结构来看,二者都是体心立方结构,但是它们的空间点阵却不相同。W属于体心立方点阵,而CuZn应属于简单立方点阵,因为这是两种不同的原子,看成体心立方点阵就不是等同环境,只有把一个Cu原子和一个Zn原子的连线中点看成一个阵点,才具有等同的环境,这就是简单立方点阵。由此可见,晶体结构的花样是繁多的,它与空间点阵既有联系又有区别。

五、阵点(或原子)坐标、晶面指数和晶向指数

在研究有关晶体的生长、变形、相变以及性能等各方面的问题时,常涉及到晶体中原子的位置、原子列方向(称为“晶向”)和原子平面(称为“晶面”)。因为晶体中的各种不同晶向和晶面上的原子密度不同,这种结构上的差异必然导致晶体在各种晶向和晶面上

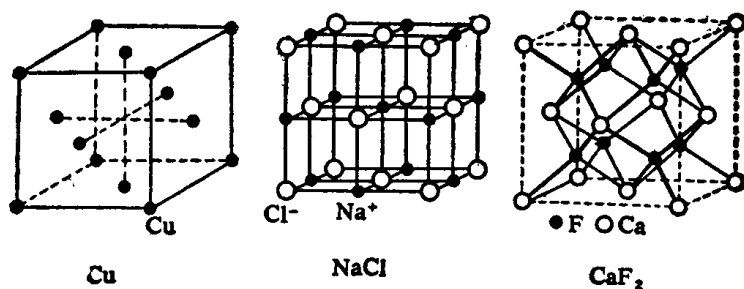


图 1-6 不同的晶体结构属于同一种空间点阵

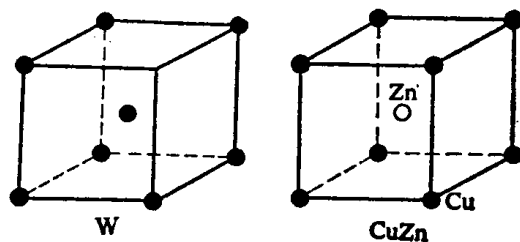


图 1-7 晶体结构相似而属于不同的空间点阵

的物理、化学、力学等性能存在差异，这种在晶体的不同晶向上所出现的性能上的差异称为“晶体的各向异性”。由于不同晶面上的性能不同，所以纯金属金相试样经过浸蚀之后，不同晶粒就显现出深浅不同的颜色。为了表示各种原子的位置、不同的晶向和晶面，必须确定通用的表示符号和方法。现分别介绍如下：

1. 阵点（或原子）坐标 标定原子坐标和标定空间点阵的阵点坐标一样。即从点阵的原点到某一阵点沿晶轴所作的矢量分量，以点阵常数 a 、 b 、 c 为度量单位。设某阵点距原点的矢量分量为 xa 、 yb 、 zc ，不管 x 、 y 、 z 是整数还是分数，此 x 、 y 、 z 即是该点的坐标。例如，体心立方晶胞，其 8 个角上的原子的坐标均为 000，因为每个角上的阵点均可定为坐标的原点；体中心原子的坐标则为 $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ 。表 1-1 列出了 14 种空间点阵晶胞中的阵点坐标。

2. 晶面指数 在晶体中，通过若干个原子中心而连成的平面称为晶面（或原子平面）。晶面的位置用晶面指数表示，它的求取方法如图 1-8 所示，步骤如下：

- (1) 在点阵中设置坐标轴，其原点应位于待定指数的晶面之外；
- (2) 求取该晶面在各坐标轴上的截距长度，截距单位采用晶轴的单位长度（即晶胞的点阵常数）。由图 1-8 可见，该晶面截 x 轴为 $2a$ ， y 轴为 $3b$ ， z 轴为 $1c$ ，即在 x 、 y 、 z 三轴上的截距长度分别为 2、3、1；
- (3) 取截距的倒数，即得 $1/2$ 、 $1/3$ 、 1 ，然后通分，化成最小的简单整数，并加上小括号，得 $(3 \ 2 \ 6)$ ，即为该晶面的晶面指数。

为什么要取截距的倒数呢？一方面是为了避免出现无穷大（与轴平行的截距为无穷大），另一方面因为该平面的截距方程为 $\frac{1}{2}x + \frac{1}{3}y + 1z = 1$ ，方程中参变量的系数恰为该平面截距的倒数。

图 1-9 绘出立方晶系中几种常见的晶面并列出其指数。如果晶面与晶轴截于负方向，则

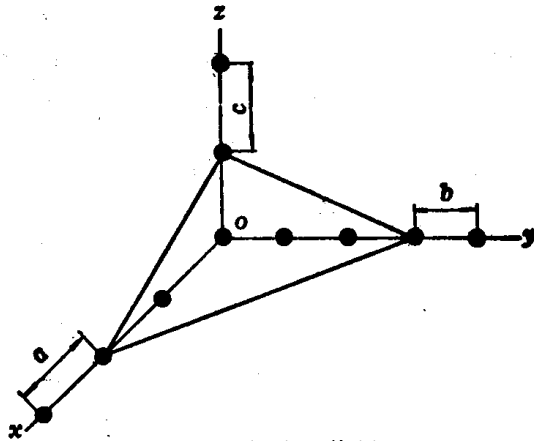


图 1-8 晶面与各轴的截距

在其相应的指数符号上加一横，表示负数，如 $(\bar{1}11)$ 、 $(1\bar{1}1)$ 、 $(11\bar{1})$ 。小括号内的指数不仅代表与该指数相当的晶面，还代表与其平行和等距离的一组等同晶面。如果对晶面指数加上大括号 $\{100\}$ ，则不仅表示互相平行的一组等同晶面，还代表所有性质相同但不互相平行的各组等同晶面，称为晶面族。例如，立方点阵中的 $\{100\}$ 晶面族包括 (100) 、 (010) 和 (001) ； $\{110\}$ 包括 (110) 、 (011) 、 (101) 、 $(\bar{1}10)$ 、 $(\bar{1}01)$ 和 $(0\bar{1}1)$ ； $\{111\}$ 包括 (111) 、 $(\bar{1}11)$ 、 $(1\bar{1}1)$ 和 $(11\bar{1})$ ，如图1-9所示。可以看出，同族晶面指数具有三个指数数字相同的特点（不包括其位置和正负号）。

晶面指数又称密勒 (Miller) 指数，其通用符号记为 (hkl) 。已知晶面指数 (hkl) ，就可用取倒数方法求取该晶面与晶轴的实际截距，即 a/h 、 b/k 、 c/l 。

应该注意，确定是否同族晶面时，不能只看晶面指数的数字是否相同，还要看晶面的面间距和原子密度是否相等。如果面间距和原子密度不相等，尽管晶面指数的数字相等，也不是性质相同的等同晶面，而不属于同族晶面。例如在正方晶系中，由于 $a=b \neq c$ ， $\{100\}$ 所代表的仅有四个侧面： (100) 、 (010) 、 $(\bar{1}00)$ 和 $(0\bar{1}0)$ ，而不包括 (001) 和 $(00\bar{1})$ 上下两个底面，因为它们的面间距和原子密度都不相同。

在六方晶系中标定晶面指数时，通常采用四轴坐标系，如图1-10 (a) 所示，在六方柱体底面上采用 a_1 、 a_2 和 a_3 三根坐标轴，互成 120° 角。求取晶面指数的方法与上面相同。图1-10 (b、c) 绘出一系列晶面指数： (0001) ， $(1\bar{1}00)$ ， $(\bar{1}2\bar{1}0)$ ， $(10\bar{1}1)$ ，其一般表示符号为 $(hkil)$ 。由于其中存在 $i = -(h+k)$ 关系，故有时将 i 省略不写，而用圆点代替，写成 $(hk \cdot l)$ 。

对于六方晶系也可以采用三轴坐标 (a_1 、 a_2 和 c)，而不用 a_3 轴。确定晶面指数的方法与前述相同，只是用三轴坐标求得的同族晶面不能在指数数字上反映出来，例如六方柱体的六个侧面上的原子排列相同，面间距相等，应属于同族晶面，而它们的晶面指数却分别为 (100) ， (010) ， $(\bar{1}10)$ ， $(\bar{1}00)$ ， $(0\bar{1}0)$ ， $(1\bar{1}0)$ [图1-10(c)]，其指数数字不完全相同。如果采用四轴坐标，则六个侧面的晶面指数分别为 $(10\bar{1}0)$ ， $(01\bar{1}0)$ ， $(\bar{1}100)$ ， $(\bar{1}010)$ ， $(0\bar{1}10)$ ， $(1\bar{1}00)$ ，都是由1、 $\bar{1}$ 、0、0四个数字按不同排列组成，在指数上就可反映出同族晶面的特性，故常采用四轴坐标而不用三轴坐标。

3. 晶向指数 晶向指数是表示点阵 (或晶体) 中穿过某些阵点 (或原子中心) 的直线的方向。可通过以下方法求得晶向指数：

(1) 如果所求晶向通过坐标系的原点，则在该晶向上取任一阵点，求出它在各个坐

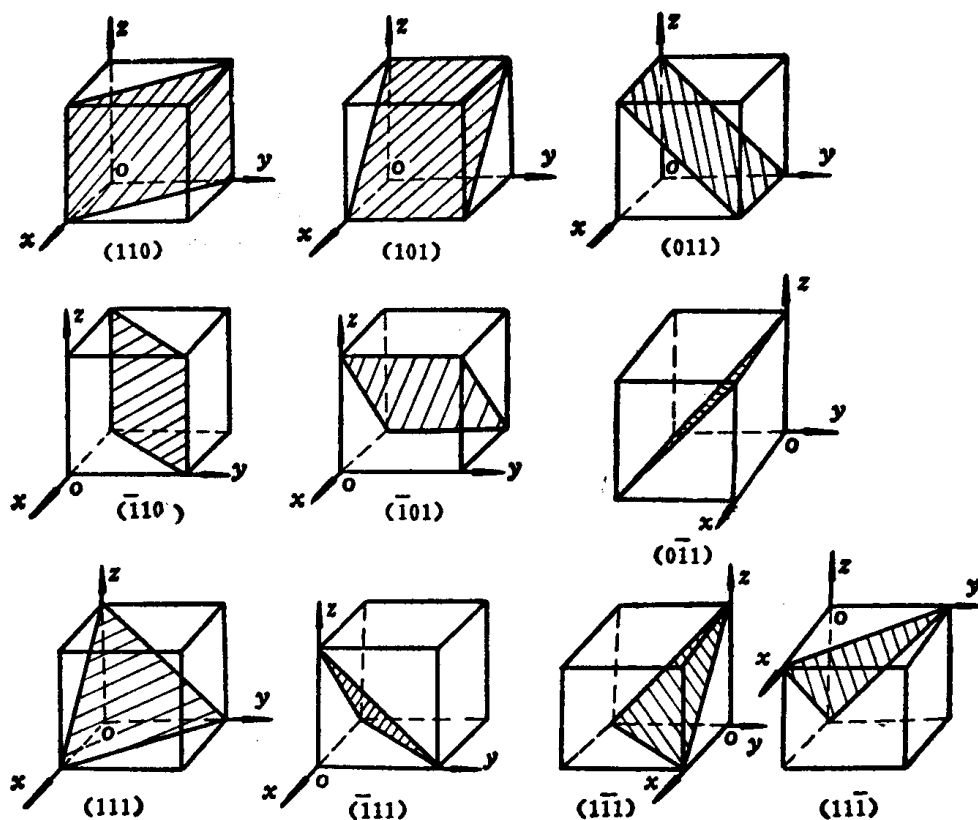


图 1-9 立方晶胞的 $\{110\}$ 、 $\{111\}$ 晶面族

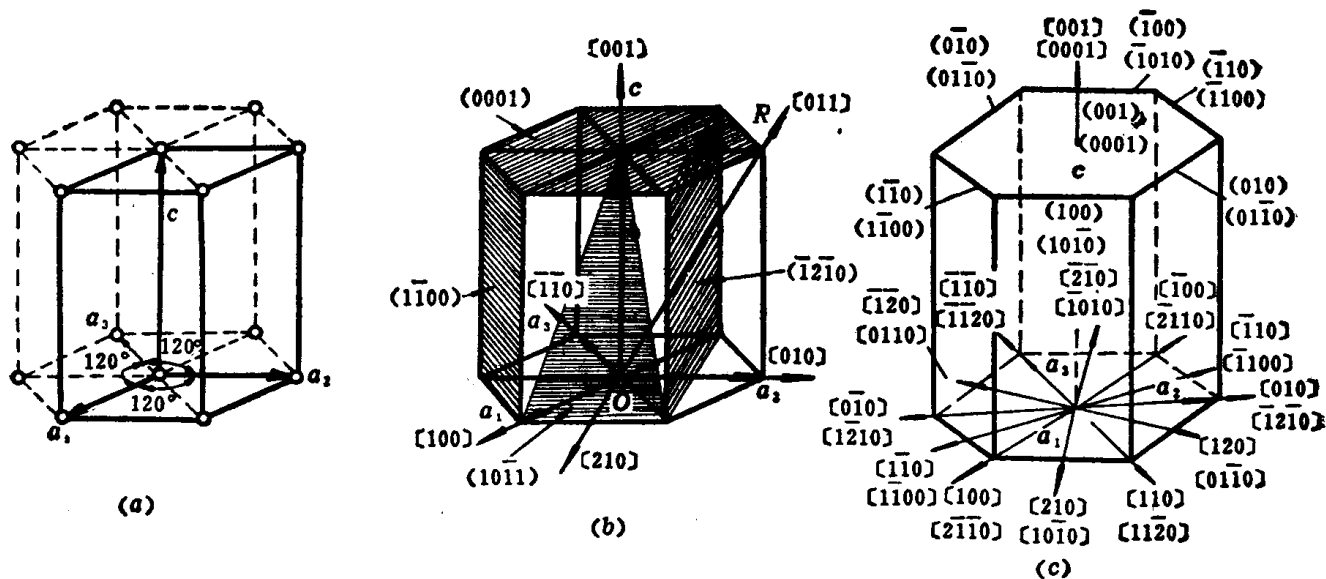


图 1-10 六方晶系的晶胞坐标轴 (a) 以及晶面指数和晶向指数 (b)、(c)

标轴上的矢量分量，即它的坐标值，再将此值化为简单整数 u ， v ， w ，加上方括号，则 $[uvw]$ 即为该方向的晶向指数。它代表所有与此方向平行和方向一致的晶向指数。图1-11示出立方晶系中一些重要的晶向指数。如 OA 方向，此方向上 A 点的坐标为100，故其晶向指数为 $[100]$ ； OD 方向上 D 点的坐标为110，故 OD 方向的晶向指数为 $[110]$ ，同理， OG 对顶角方向的晶向指数为 $[111]$ ， OH 方向的晶向指数为 $[210]$ 。若所指的方向相反，

则晶向指数的数字相同，但符号相反。

如果还要代表那些不互相平行，但其原子密度相同的等同晶向，则用尖括号 $\langle uvw \rangle$ 表示，称为晶向族。例如，立方晶系的 $\langle 100 \rangle$ 晶向族，代表 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 、 $[\bar{1}00]$ 、 $[0\bar{1}0]$ 、 $[00\bar{1}]$ 等六个晶向，它们的性质是完全相同的。但是应该注意，如果是正交晶系，则其 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 三个晶向并不是性质相同的等同晶向。因为其三个方向上的 a 、 b 、 c 并不相等，其性质也不相同。

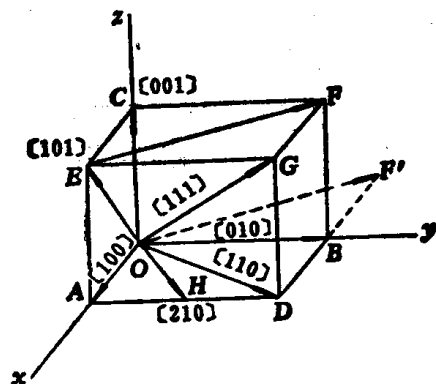


图 1-11 立方晶系中一些重要的晶向指数

(2) 如果该晶向不通过晶胞的原点，则需要将它平移至原点，再按(1)法求取晶向指数。如图1-11中的 $\overrightarrow{EF}$ 方向，可将 $\overrightarrow{EF}$ 平移至 $\overrightarrow{OF'}$ ， F' 的坐标为 $\bar{1}10$ ，故 $\overrightarrow{OF'}$ 的晶向指数为 $[\bar{1}10]$ 。因为 $\overrightarrow{EF}$ 与 $\overrightarrow{OF'}$ 平行，故其晶向指数也应相同。如果改取 E 点为原点，亦可获得同样结果。

(3) 如果已知 A 、 B 两阵点在坐标系中的坐标分别为 $x_1y_1z_1$ 和 $x_2y_2z_2$ ，则求 A 、 B 连线的方向指数可将 x_2-x_1 、 y_2-y_1 、 z_2-z_1 三个数值化为互质整数，再加上 $[\]$ 号，即为其方向指数。

在立方晶系中，只要晶面指数和晶向指数的数字相同(即 $h=u$ 、 $k=v$ 、 $l=w$)，则二者互相垂直，即 $[uvw] \perp (hkl)$ 。例如， $[100] \perp (100)$ ， $[110] \perp (110)$ ， $[111] \perp (111)$ 等等。

六方晶系的晶向指数既可用三坐标系，也可用四坐标系来标定。前一标定方法与立方晶系的完全相同[见图1-10(b)]。后一标定法由于多了一晶轴而稍有不同(但基本原则相同)，现结合图1-12来说明。例如，要标定通过原点的 OP 晶向，则可从原点 O 出发，沿着各晶轴方向按一适当路线移动，使沿 a_3 轴移动的距离等于沿 a_1 、 a_2 两轴移动距离之和的负值，最后到达 P 点，将沿各晶轴移动的距离(用相应晶轴的单位长度来度量) -1 、 $+2$ 、 -1 、 0 (这些数值如不是整数则须化为互质整数)填入 $[\]$ 内，即得出 OP 的晶向指数为 $[\bar{1}2\bar{1}0]$ 。四轴坐标中同一方向的晶向指数的普遍表达式为 $[uv tw]$ ，并存在以下关系： $u+v=-t$ ，如不满足这种关系则所求出的指数是错误的。对于那些方向不同而原子密度相同的等同晶向则用 $\langle uv tw \rangle$ 表示之。

图1-10(b、c)同时标出了三轴坐标和四轴坐标的一些晶向指数。由图1-10(c)可见，六方柱体底面三根对角线本来是性质相同的晶向，采用三轴坐标时，其晶向指数 $[UVW]$ 分别为 $[100]$ 、 $[\bar{1}00]$ 、 $[110]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 、 $[010]$ 、 $[0\bar{1}0]$ ，三个指数数字不同。如果采用四轴坐标，则其四个晶向指数数字 $[uv tw]$ 就变得相同了，分别为： $[2\bar{1}10]$ 、

$[\bar{2}110]$ 、 $[11\bar{2}0]$ 、 $[\bar{1}1\bar{2}0]$ 、 $[\bar{1}2\bar{1}0]$ 、 $[\bar{1}2\bar{1}0]$ 。这样，就能更好地反映同族晶向的性质，因此通常采用四轴坐标。三轴坐标的晶向指数 $[UVW]$ 与四轴坐标的晶向指数 $[uvw]$ 之间的换算关系为：

$$U=u-t, V=v-t, W=w \quad (1-2)$$

$$u=(2U-V)/3, v=(2V-U)/3, t=-(U+V)/3, w=W \quad (1-3)$$

六、晶带

所谓晶带，是指许多不同的晶面组都平行于同一直线时，则前者总称为一个晶带（或共带面），后者称为晶带轴。图1-13示出立方晶系一些共带面 $(0\bar{1}0)$ 、 (010) 、 (110) 、 (120) 、 $(\bar{1}20)$ 均平行于晶带轴 $[001]$ 。共带面中的各组晶面指数和面间距并不相同，也不包括同一晶面族中的所有晶面，如 $\{100\}$ 晶面族中的 (001) 面就不包括在这一晶带中，因为它不平行于 $[001]$ 晶带轴。

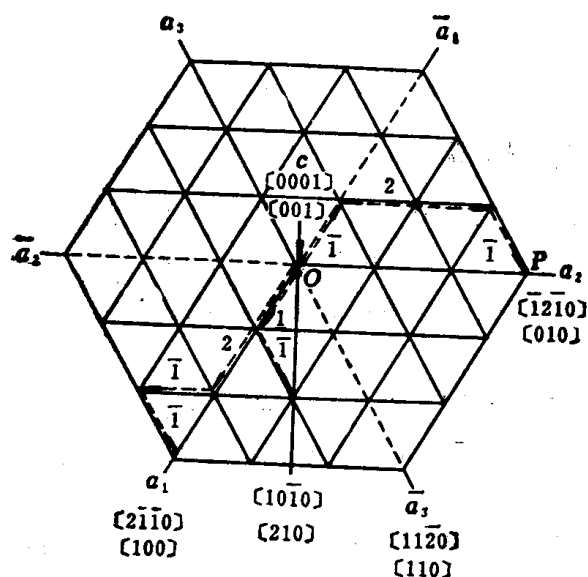


图 1-12 六方晶系底面的四轴坐标的晶向指数求法

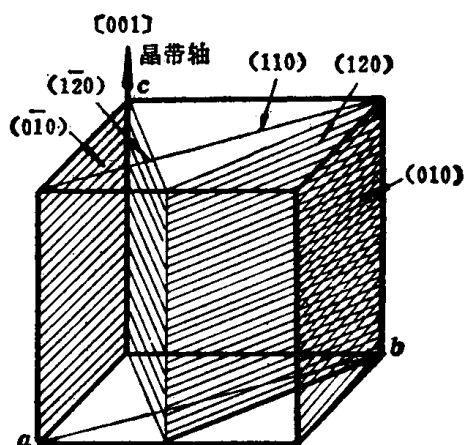


图 1-13 共带面和晶带轴

因为同一晶带中的各组晶面均平行于同一晶向，故共带面中各面的法线必定都垂直于晶带轴，而处于同一平面上。上述晶带面的法线平面为 (001) 。

如果晶带轴的指数为 $[uvw]$ ，共带面中任何一个晶面的指数为 (hkl) ，因为二者互相平行，必然具有下列关系：

$$hu + kv + lw = 0 \quad (1-4)$$

任何两个非平行的晶面都属于同一个晶带，其交线即为其晶带轴。如果此二晶面的指数分别为 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$ ，则其晶带轴的指数 $[uvw]$ 可按下式求得：

$$\left. \begin{aligned} u &= k_1l_2 - k_2l_1 \\ v &= l_1h_2 - l_2h_1 \\ w &= h_1k_2 - h_2k_1 \end{aligned} \right\} \quad (1-5)$$

七、晶面间距

晶面间距是指两邻近平行晶面间的垂直距离。了解晶面间距与晶胞参数和晶面指数之间的关系，对计算X射线衍射图形有重要意义。某晶面族的晶面间距通常用 d_{hkl} 表示。现

以正交晶系为例，求取一组平行晶面的面间距计算式。如图1-14所示， ABC 面为具有指数 (hkl) 的一个晶面，设其近邻晶面通过原点 O ，两晶面间的垂直距离 OR 就是该晶面族的面间距 d_{hkl} 。设 OR 与 x 、 y 、 z 轴的夹角分别为 α 、 β 、 γ ，从直角三角形 $\triangle ORA$ 、 $\triangle ORB$ 和 $\triangle ORC$ 可以得出下列关系式：

$$\left. \begin{aligned} \cos\alpha &= \frac{OR}{OA} = \frac{d_{hkl}}{OA} \\ \cos\beta &= \frac{OR}{OB} = \frac{d_{hkl}}{OB} \\ \cos\gamma &= \frac{OR}{OC} = \frac{d_{hkl}}{OC} \end{aligned} \right\} \quad (1-6)$$

ABC 晶面在坐标轴上的截距可以用晶面指数和点阵常数表示：

$$OA = \frac{a}{h}, \quad OB = \frac{b}{k}, \quad OC = \frac{c}{l}$$

代入上式得：

$$\begin{aligned} \cos\alpha &= \frac{d_{hkl}}{\frac{a}{h}} \\ \cos\beta &= \frac{d_{hkl}}{\frac{b}{k}} \\ \cos\gamma &= \frac{d_{hkl}}{\frac{c}{l}} \end{aligned}$$

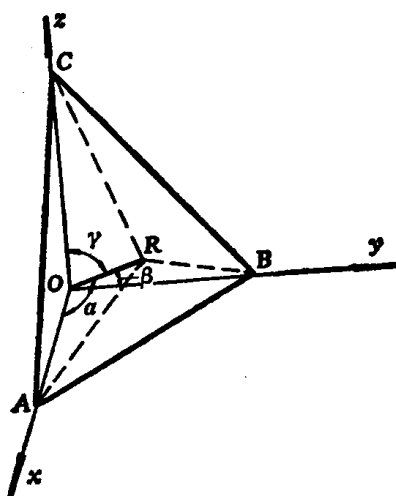


图 1-14 晶面间距的公式推导

将上式各自平方然后相加，得

$$\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = \frac{d_{hkl}^2}{\left(\frac{a}{h}\right)^2} + \frac{d_{hkl}^2}{\left(\frac{b}{k}\right)^2} + \frac{d_{hkl}^2}{\left(\frac{c}{l}\right)^2}$$

因为

$$\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1$$