

谢希文 过梅丽 编著

# 材料科学与工程导论



北京航空航天大学出版社

(京)新登字166号

## 内 容 简 介

本书系统、扼要地阐述了材料科学与工程的基本理论和知识,即材料的性能和行为与其内部结构和组织的关系,并对现代工程材料(包括金属、陶瓷、高聚物、复合材料)作一广泛的初步介绍,为学习后续课程打下坚实的基础。全书共十五章,每章末都附有习题及参考文献,有利于启发学生的思维能力及开拓知识面。

本书可作为高等学校机械制造类和冶金类材料科学与工程系各专业的教科书或主要参考书,也可供上述专业的工程技术人员自学和参考。

## 材料科学与工程导论

CAILIAO KEXUE YU GONGCHENG DAOLUN

谢希文 过梅丽 编著

责任编辑 陶金福

北京航空航天大学出版社出版  
新华书店总店科技发行所发行 各地新华书店经销  
北京农业工程大学印刷厂印装

•  
787×1092 1/16 印张: 20.25 字数: 518千字  
1991年12月第一版 1991年12月第一次印刷 印数: 2800册  
ISBN 7-81012-249-5/TB·041 定价: 5.25元

## 前 言

为了拓宽学生的知识面，从1988学年开始，北京航空航天大学材料科学与工程系的学生，在进入各自的小专业课程学习之前，都要学习一门公共必修课——材料科学与工程导论。这是本系的第一门专业基础课，其中心内容就是阐明材料的性能和行为与其成分、结构、组织、加工工艺之间的关系。

本书比较系统、扼要地阐述了材料科学与工程的基本理论和知识，其中包括：材料（金属、陶瓷、高聚物）的成分、结构（晶态和非晶态）、组织以及状态的变化；材料的力学性能和物理性能；并对现代工程材料（包括金属、陶瓷、高聚物、复合材料）作一广泛的初步介绍，为学习后续课程和以后从事生产及科学研究工作打下良好的基础。

本书是在原编讲义和两年来教学实践的基础上写成的，删去了一些次要内容，个别地方有少量增补。此外，每章均附有习题，我们认为，要求学生按时独立完成这些习题对于学好本门课程是很重要的。

本书的第一、三、四、五（金属和陶瓷部分）、十一、十二、十三各章由谢希文编写，第二、五（高分子材料部分）、六、七、八、九、十、十四、十五各章由过梅丽编写，书中的金相图片及部分附图由唐顺仙提供和复制。全书由沈达钧、吕广庶审阅。

限于编者的水平，书中难免有错误和不妥之处，欢迎使用本书的读者批评指正。

编 者

1990年4月于北航

DAG 73/04

# 目 录

## 第一章 金属及陶瓷的晶体结构

§ 1.1	晶体结构与空间点阵	( 1 )
§ 1.2	点阵的描述	( 2 )
§ 1.3	十四种空间点阵 (Bravais 点阵)	( 3 )
§ 1.4	晶胞中的位置坐标	( 4 )
§ 1.5	晶面指数	( 4 )
§ 1.6	晶向指数	( 5 )
§ 1.7	六方晶系晶面指数和晶向指数的标定	( 6 )
§ 1.8	晶体结构符号	( 7 )
§ 1.9	金属中常见的晶体结构	( 7 )
§ 1.10	密堆积结构中密排原子面的堆积方式	(10)
§ 1.11	密堆积结构中的间隙	(11)
§ 1.12	体心立方结构的间隙	(13)
§ 1.13	同素异构性	(13)
§ 1.14	金属晶体中的原子大小	(14)
§ 1.15	合金相的分类	(15)
§ 1.16	置换固溶体	(16)
§ 1.17	间隙固溶体	(16)
§ 1.18	有序固溶体	(17)
§ 1.19	电子相 (电子化合物)	(17)
§ 1.20	正常价化合物	(18)
§ 1.21	间隙化合物 (间隙相)	(19)
§ 1.22	Laves 相	(20)
§ 1.23	$\sigma$ 相	(21)
§ 1.24	离子 (陶瓷) 晶体中正、负离子的堆积方式	(21)
§ 1.25	简单氧化物的晶体结构	(23)
§ 1.26	比较复杂氧化物的晶体结构	(24)
§ 1.27	硅酸盐的晶体结构	(26)
§ 1.28	二氧化硅的晶体结构	(29)
	习 题	(29)
	参考文献	(31)

## 第二章 高聚物的分子结构与分子聚集态结构

§ 2.1	什么是高分子	( 32 )
-------	--------	--------

§ 2.2	高聚物的合成	( 34 )
§ 2.3	高聚物分子链的化学结构	( 38 )
§ 2.4	高聚物分子的大小与形状	( 41 )
§ 2.5	高聚物的结晶	( 46 )
§ 2.6	高聚物的取向	( 53 )
§ 2.7	高聚物混合体系的织态结构	( 56 )
	习 题	( 58 )
	参考文献	( 59 )

### 第三章 凝固、晶体缺陷和扩散

§ 3.1	液体的性质和结构	( 60 )
§ 3.2	凝固的热力学条件	( 61 )
§ 3.3	形核过程	( 62 )
§ 3.4	晶体的长大	( 66 )
§ 3.5	铸锭的组织	( 69 )
§ 3.6	单晶体的凝固	( 70 )
§ 3.7	玻璃态与金属玻璃	( 71 )
§ 3.8	点缺陷	( 72 )
§ 3.9	线缺陷 (位错)	( 75 )
§ 3.10	面缺陷 (界面)	( 77 )
§ 3.11	固体中的速率过程	( 81 )
§ 3.12	固体中的原子扩散	( 82 )
§ 3.13	扩散过程在生产中的应用	( 85 )
§ 3.14	温度对固态扩散的影响	( 87 )
	习 题	( 88 )
	参考文献	( 89 )

### 第四章 相 图

§ 4.1	二元相图的表示和建立	( 90 )
§ 4.2	相律、杠杆定律及其应用	( 92 )
§ 4.3	匀晶系相图	( 93 )
§ 4.4	共晶系相图	( 97 )
§ 4.5	包晶系相图	(102)
§ 4.6	有中间相的二元相图	(104)
§ 4.7	铁碳相图	(106)
§ 4.8	合金的性能与相图的关系	(110)
§ 4.9	三元相图	(113)
	习 题	(116)

参考文献	(118)
------	-------

## 第五章 材料的力学性能

§ 5.1 金属中的应力和应变	(119)
§ 5.2 拉伸试验和工程应力-应变图	(120)
§ 5.3 金属单晶体的塑性变形	(122)
§ 5.4 多晶体的塑性变形	(126)
§ 5.5 冷变形金属的回复和再结晶	(128)
§ 5.6 金属的断裂	(130)
§ 5.7 金属的疲劳	(132)
§ 5.8 金属的蠕变和持久强度	(133)
§ 5.9 陶瓷材料力学性能的特点和变形机制	(135)
§ 5.10 陶瓷材料的应力-应变行为	(136)
§ 5.11 影响陶瓷材料强度的因素	(137)
§ 5.12 陶瓷磨料	(138)
§ 5.13 高聚物的力学状态	(139)
§ 5.14 高弹性	(142)
§ 5.15 粘弹性	(143)
§ 5.16 高聚物的屈服与断裂	(148)
习 题	(153)
参考文献	(155)

## 第六章 材料的电性质

§ 6.1 欧姆定律	(156)
§ 6.2 固体材料中的电子能带结构	(157)
§ 6.3 金属的电阻	(159)
§ 6.4 半导体	(161)
§ 6.5 绝缘体	(167)
§ 6.6 材料的其它电性质	(174)
习 题	(175)
参考文献	(177)

## 第七章 材料的磁性质

§ 7.1 几个基本概念	(178)
§ 7.2 物质的各类磁性	(180)
§ 7.3 温度对磁性的影响	(183)
§ 7.4 磁化与退磁化	(184)
§ 7.5 磁性材料	(185)

习 题	(187)
参考文献	(188)

## 第八章 材料的热性质

§ 8.1 热容	(189)
§ 8.2 热膨胀	(193)
§ 8.3 热传导	(195)
§ 8.4 热应力	(197)
习 题	(198)
参考文献	(199)

## 第九章 材料的光学性质

§ 9.1 基本概念	(200)
§ 9.2 金属的光学性质	(202)
§ 9.3 非金属的光学性质	(203)
§ 9.4 其它光学现象	(209)
习 题	(211)
参考文献	(212)

## 第十章 材料的腐蚀与老化

§ 10.1 腐蚀的概念	(213)
§ 10.2 金属的电化学腐蚀原理	(213)
§ 10.3 腐蚀速度	(219)
§ 10.4 腐蚀形态	(220)
§ 10.5 金属的氧化	(225)
§ 10.6 陶瓷材料的腐蚀	(227)
§ 10.7 腐蚀的控制与防护	(228)
§ 10.8 高分子材料的老化	(230)
§ 10.9 高分子材料的防老化	(235)
习 题	(236)
参考文献	(237)

## 第十一章 金属的热处理

§ 11.1 碳钢的淬火	(238)
§ 11.2 奥氏体的等温分解	(241)
§ 11.3 共析钢的连续冷却转变图	(243)
§ 11.4 碳钢的退火和正火	(245)
§ 11.5 碳钢的回火	(245)

§ 11.6 分级淬火和等温淬火·····	(247)
§ 11.7 沉淀硬化·····	(248)
习 题·····	(251)
参考文献·····	(251)

## 第十二章 工程合金

§ 12.1 碳钢·····	(252)
§ 12.2 合金钢·····	(253)
§ 12.3 不锈钢·····	(255)
§ 12.4 铝及其合金·····	(258)
§ 12.5 铜及其合金·····	(259)
§ 12.6 镁及其合金·····	(260)
§ 12.7 钛及其合金·····	(261)
§ 12.8 镍及其合金·····	(262)
§ 12.9 铸铁·····	(262)
习 题·····	(265)
参考文献·····	(266)

## 第十三章 陶瓷材料

§ 13.1 陶瓷的生产工艺·····	(267)
§ 13.2 传统陶瓷与技术陶瓷·····	(269)
§ 13.3 陶瓷绝缘材料·····	(271)
§ 13.4 陶瓷电容器·····	(272)
§ 13.5 陶瓷半导体·····	(273)
§ 13.6 陶瓷耐火材料·····	(274)
§ 13.7 航天飞机上使用的绝热陶瓷瓦·····	(274)
§ 13.8 玻璃·····	(275)
习 题·····	(281)
参考文献·····	(282)

## 第十四章 高分子材料

§ 14.1 塑料的组成与分类·····	(283)
§ 14.2 各种塑料的特性和典型应用·····	(284)
§ 14.3 塑料制品的成型工艺·····	(291)
§ 14.4 橡胶·····	(292)
§ 14.5 合成纤维·····	(295)
§ 14.6 胶粘剂·····	(296)
习 题·····	(297)



参考文献.....(298)

**第十五章 复合材料**

§ 15.1 复合材料的概念.....(299)  
§ 15.2 弥散增强复合材料.....(300)  
§ 15.3 颗粒增强复合材料.....(300)  
§ 15.4 纤维增强复合材料.....(302)  
§ 15.5 纤维增强复合材料的成型工艺.....(309)  
§ 15.6 夹层结构.....(311)  
§ 15.7 复合材料特点的概述.....(312)  
习 题.....(312)  
参考文献.....(313)

# 第一章 金属及陶瓷的晶体结构

金属和合金都是晶体，在特殊条件下，有些也可以成为非晶体；一些陶瓷材料是晶体，但是也有一些是非晶体，如无机玻璃；高聚物可以完全是晶体，也可以完全是非晶体，也可以二者混合共存。晶体的各种性能都与其结构密切相关。本章分四部分：第一部分（§ 1.1~§ 1.8）是晶体学基础；第二部分（§ 1.9~§ 1.14）是金属中最常见的三种晶体结构及其间隙；第三部分（§ 1.15~§ 1.23）是合金相的晶体结构；第四部分（§ 1.24~§ 1.28）是陶瓷中常见的晶体结构。

## § 1.1 晶体结构与空间点阵

晶体结构的最突出特点就是周期性。一个理想晶体可以看成是由完全相同的基元 (motif) 在空间按一定的规则无限重复得到的，这个基元可以是单个原子，也可以是一组相同或不同的原子。许多金属晶体结构的基元就是单个原子，如铝、铁、铜等，而结构复杂的  $\alpha$ -Mn，其基元则多达26个原子。

周期重复的图形可以用点阵来描述。点阵是一个几何概念，它由一维、二维或三维规则排列的点组成，构成一维、二维或三维点阵，其中每个点都有相同的环境。三维点阵又称空间点阵。如果我们在晶体的基元中任意规定一点，然后在所有其它基元的相同位置也标出一点，这些点的阵列就构成了该晶体的空间点阵。图1.1(a), (b), (c)给出三种不同的二维周期重复图形，这三个图形的基元各不相同，但是具有相同的二维点阵，如图1.1(d)所示。

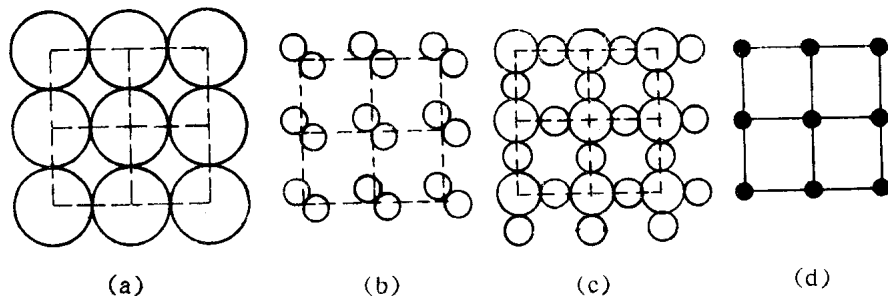


图1.1 二维周期重复图形及其点阵

如果给出晶体基元的原子种类、数目及排列情况，以及基元间的相对位置（这是由空间点阵确定的），这个晶体的结构也就完全确定了。换句话说，如果把基元放在空间点阵中每一个阵点的相同位置上，就可得到该晶体结构。因此，晶体结构与空间点阵及基元的关系可以用

$$\text{空间点阵} + \text{基元} = \text{晶体结构}$$

表示。应当注意到，上式并不是一个数学关系式，而是用来表示这三者之间的关系。

## §1.2 点阵的描述

如果点阵只能用画在纸上的点的阵列来描述,那将是非常不便的,特别是对于三维点阵就更加困难。点阵可以用平移基矢来描述,对于三维点阵,需要选择始于同一原点的三个平移基矢  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$ , 使得从一个阵点到任何另一个阵点的平移矢量  $\mathbf{r}$  都可以用下式表示,即

$$\mathbf{r} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c} \quad (1.1)$$

式中,  $u$ 、 $v$ 、 $w$  都是整数,正负均可。

图1.2给出一个空间点阵及其平移基矢 $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{b}$ 、 $\mathbf{c}$ , 图中所示的点阵平移矢量 $\mathbf{r}$ 可以表示为

$$\mathbf{r} = 2\mathbf{a} + \mathbf{b} + \mathbf{c}$$

如果以空间点阵的三个平移基矢为棱边作出一个平行六面体,就可以清楚地看到这个空间点阵的几何特征。这一平行六面体叫做点阵晶胞或简称晶胞,晶胞在空间无限重复堆垛就得到空间点阵。为了表示晶胞的形状和大小,可将晶胞画在空间坐标上,坐标轴(又称晶轴)分别与晶胞的三个棱边重合,坐标的原点在晶胞的一个顶点,坐标轴的顺序按右螺旋规则(也可以按左螺旋规则,本书均采用前者)。晶胞的棱边长以 $a$ 、 $b$ 、 $c$ 表示,其单位为纳米(即 $\text{nm}$ ,  $1\text{nm} = 10^{-9}\text{m}$ )或埃(即 $\text{\AA}$ ,  $1\text{\AA} = 10^{-10}\text{m} = 10^{-8}\text{cm}$ ),棱间夹角(即坐标轴夹角)以 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 表示,如图1.3所示。棱边长 $a$ 、 $b$ 、 $c$ 和棱间夹角 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 共六个参数叫做点阵常数。

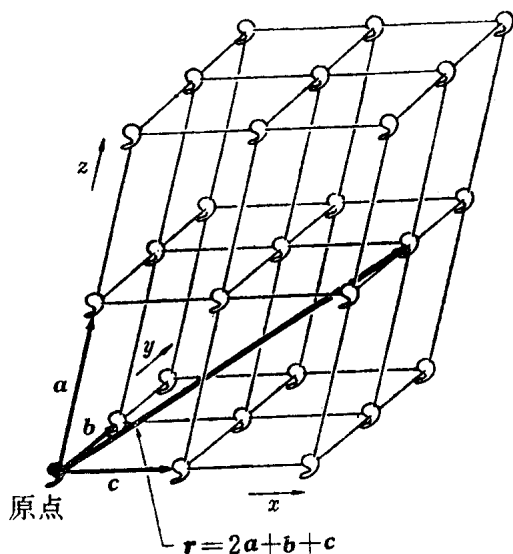


图1.2 空间点阵及其平移基矢

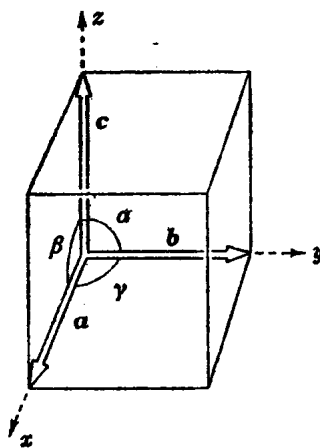


图1.3 晶胞的空间坐标表示法

如果晶胞只在八个顶角各有一个阵点,由于每个阵点为相邻八个晶胞所共有,即只有 $1/8$ 属于该晶胞,因此一个晶胞只有一个阵点,这种晶胞又叫做简单晶胞。只有简单晶胞的三个棱边才能构成平移基矢。

如果在点阵晶胞的范围内,标出相应晶体结构中基元各原子的位置,含有这一附加信息

的晶胞称为结构晶胞。通常把点阵晶胞和结构晶胞都称之为晶胞，但是要注意到这二者是有区别的。当晶体结构的基元只包含一个原子时，结构晶胞与点阵晶胞的结点数目完全一样，但是对于前者，结点代表晶体中原子所在的位置，而对于后者，结点则代表空间点阵中的阵点位置。

### § 1.3 十四种空间点阵 (Bravais点阵)

法国晶体学家Bravais (1811-1863) 于1850年用数学方法推导出空间点阵只能有14种，根据其对称特点，分属于七个晶系。图1.4为14种空间点阵的晶胞，表1.1给出每种晶胞的名称、所属晶系、棱边及夹角关系，Pearson符号以及晶胞阵点数。

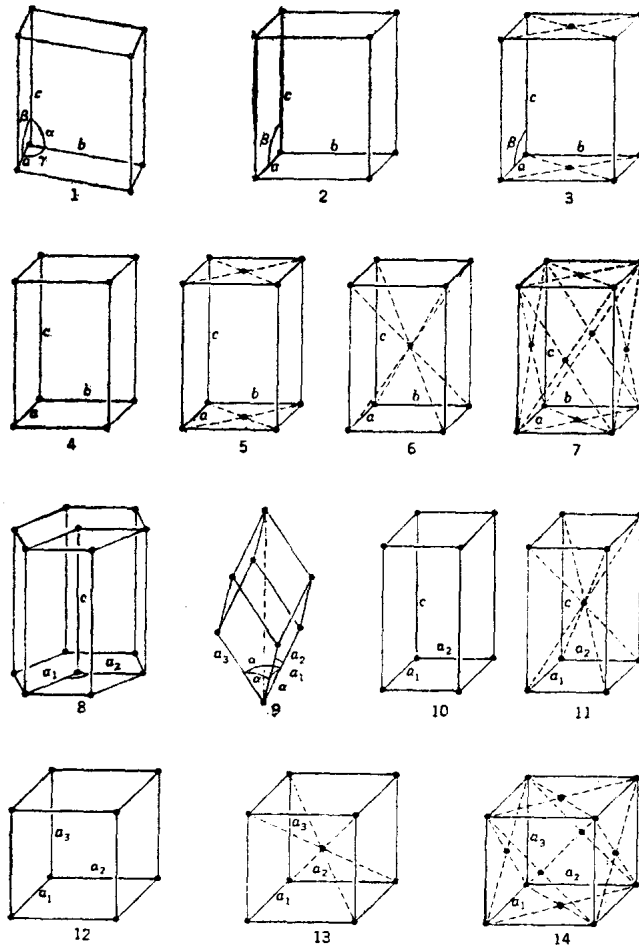


图1.4 14种空间点阵的晶胞

空间点阵的类型可以用Pearson符号表示，该符号第一个为小写字母，代表所属晶系，第二个为大写字母，代表点阵类型。虽然菱方晶系的晶胞是简单晶胞，但是却用R作为其点阵类型符号。简单六方点阵的晶胞可以有两种表示方式，一种是平行六面体，一个晶胞有一个阵点；另一种是六方棱柱，其体积为前者的三倍，一个晶胞有三个阵点（见图1.4第8分

表1.1 空间点阵 (参看图1.4)

晶系	空间点阵	棱边长及夹角关系	Pearson 符号	晶胞阵点数	分图号
三斜	简单三斜	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	aP	1	1
单斜	简单单斜	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	mP	1	2
	底心单斜		mC	2	3
正交	简单正交	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	oP	1	4
	底心正交		oC	2	5
	体心正交		oI	2	6
	面心正交		oF	4	7
六方	简单六方	$a_1 = a_2 = a_3 \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	hP	1	8
菱方	简单菱方	$a_1 = a_2 = a_3, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	hR	1	9
正方 (四方)	简单正方	$a_1 = a_2 \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	tP	1	10
	体心正方		tI	2	11
立方	简单立方	$a_1 = a_2 = a_3, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	cP	1	12
	体心立方		cI	2	13
	面心立方		cF	4	14

图)。六方棱柱形晶胞可以更好地显示出点阵的六方对称性，但是这种晶胞需要用四坐标轴系来表示，Pearson 符号都是采用三坐标轴系的。

### § 1.4 晶胞中的位置坐标

位置坐标用来表示晶胞中阵点或原子的位置，通常采用Wyckoff符号，即如果从原点到  $(x, y, z)$  点的平移矢量为  $r_{xy,z} = xa + yb + zc$ ，则此点的坐标为  $xyz$ 。因此，位置坐标是以晶胞棱边长为度量，而不是以某一长度单位（例如纳米或埃）来表示。坐标为负值时，在相应数字上加一横线。对于晶胞的阵点坐标或原子坐标，通常只给出晶胞含有的阵点（或原子）数并距原点最近的那些阵点（或原子）的坐标。例如，简单晶胞的阵点（或原子）坐标为  $000$ ；体心晶胞的阵点（或原子）坐标为  $000$  和  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ ；面心晶胞的阵点（或原子）坐标为  $000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$ 。

### § 1.5 晶面指数

为了更精确地研究晶体的结构，需要用一种符号来表示晶体中的平面和方向（即晶面和晶向）。现在广泛使用的密氏指数是由英国晶体学家Miller提出的。

确定晶面指数的具体步骤如下：

- (1) 以各晶轴点阵常数为度量单位，求出晶面与三晶轴的截距  $m, n, p$ ；

(2) 取上述截距的倒数  $\frac{1}{m}$ 、 $\frac{1}{n}$ 、 $\frac{1}{p}$ ;

(3) 将以上三数值化简为比值相同的三个最小简单整数, 即  $\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} = \frac{h}{E} : \frac{k}{E} :$

$\frac{l}{E} = h:k:l$ , 其中  $E$  为  $m$ 、 $n$ 、 $p$  三数的最小公倍数,  $h$ 、 $k$ 、 $l$  为简单整数。

(4) 将所得指数括以圆括号, 即  $(hkl)$ 。

图1.5为正交晶系的一些重要晶面及其密氏指数。

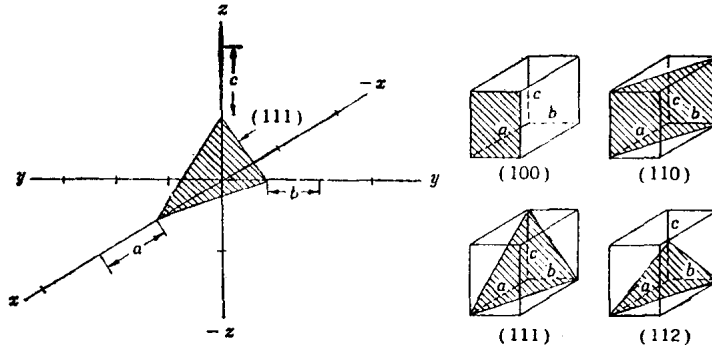


图1.5 正交晶系的一些重要晶面及其密氏指数

如果晶面通过原点, 可将坐标轴适当平移, 再求截距。当晶面与某个坐标轴的截距为负值时, 则在相应指数之上加一横线。例如  $(\bar{h}kl)$  表示该晶面与  $x$  轴的截距为负值。凡是相互平行的晶面, 其指数相同; 同理,  $(hkl)$  与  $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$  代表相同的晶面。此外,  $\{hkl\}$  表示同一晶面族的各晶面, 这些晶面在晶体中是等效的, 即晶面上原子的排列情况完全相同, 例如立方晶系的立方体面都属于  $\{100\}$  晶面族, 它包括以下各晶面:

$$\{100\} = (100) + (010) + (001) + (\bar{1}00) + (0\bar{1}0) + (00\bar{1})$$

## §1.6 晶向指数

晶向指数用来表示连接晶体结构中任何两个结点的直线方向, 确定晶向指数的步骤如下:

(1) 通过晶轴原点作一有向直线平行于该晶向 (或将原点平移到该晶向上);

(2) 在这条直线上任取一适当结点并求出此点的位置坐标;

(3) 将上述位置坐标的比化为最小简单整数比, 如  $u:v:w$ ;

(4) 将所得指数括以方括号  $[uvw]$ 。

图1.6为面心立方晶胞中的一些晶向及其指数。当某一指数为负值时, 则在该指数之上

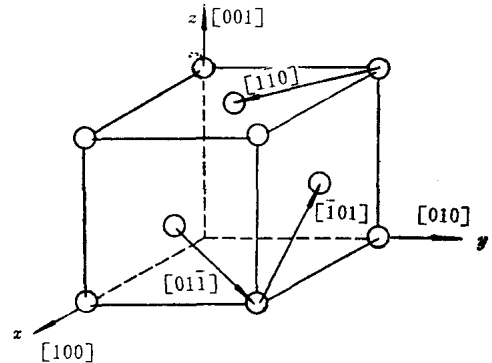


图1.6 面心立方晶胞中的一些晶向及其指数

加一横线，如 $[u\bar{v}w]$ 。相互平行的晶向具有相同的指数，但是 $[100]$ 与 $[\bar{1}00]$ 是一条线上的两个指向相反的方向，不能等同看待。此外， $\langle uvw \rangle$ 表示同一晶向族的各晶向，这些晶向在晶体中都是等效的。例如立方晶系中各棱边都属于 $\langle 100 \rangle$ 晶向族，它包括以下各晶向：

$$\langle 100 \rangle = [100] + [010] + [001] + [\bar{1}00] + [0\bar{1}0] + [00\bar{1}]$$

## § 1.7 六方晶系晶面指数和晶向指数的标定

六方晶系的晶面指数和晶向指数可以用两种指数来表示。

### 1. 密氏指数

密氏指数采用三轴坐标系 $(a_1, a_2, c)$ ，晶面指数和晶向指数的求法及§1.5与§1.6相同。对于六方晶系，密氏指数的缺点是：同一晶面族或晶向族，其指数不类似。例如， $[100]$ 与 $[\bar{1}10]$ ， $(100)$ 与 $(\bar{1}10)$ ， $(1\bar{2}0)$ 与 $(110)$ 分别属于同一晶面族或晶面族，但从其指数却看不出这一关系。

### 2. 密布氏 (Miller-Bravais) 指数

密布氏指数采用四轴坐标系 $(a_1, a_2, a_3, c)$ ，其中 $a_1, a_2, a_3$ 轴在同一平面上，轴间夹角均为 $120^\circ$ ，并都与 $c$ 轴垂直。

#### (1) 晶面指数 $(hkil)$

密布氏晶面指数的求法与密氏指数求法相同，即首先求晶面与四个晶轴的截距，取倒数，再化成最小简单整数。可以证明，任一晶面与 $a_1, a_2, a_3$ 轴截距的倒数之间存在如下关系：

$$i = -(h+k) \tag{1.2}$$

因此，如果已经求出某晶面的密氏指数，就可利用上式关系直接得出相应的密布氏指数。密布氏指数的优点是同一晶面族具有类似的指数，例如 $\{10\bar{1}0\}$ 晶面族为晶胞的六方棱柱面，它包括以下晶面：

$$\{10\bar{1}0\} = (10\bar{1}0) + (01\bar{1}0) + (\bar{1}100) + (\bar{1}010) + (0\bar{1}10) + (1\bar{1}00)$$

#### (2) 晶向指数 $[uvw]$

在四轴坐标系中，如果也按照三轴坐标系中的办法求晶向指数，则同一晶向可以有无数多的不同指数。例如，按照三轴坐标系，图1.7中 $\overrightarrow{OP}$ 的密氏指数为 $[\bar{4}30]$ ，而按照四轴坐标系，其晶向指数可以是 $[\bar{2}\bar{1}20]$ ， $[1250]$ ， $[0140]$ ， $[\bar{3}\bar{2}10]$ ……，这显然是不合适的。如果再增加一个条件，即晶向指数 $[uvw]$ 中 $t = -(u+v)$ ，则晶向指数就只有一个解，而且同一晶向族具有类似的指数。

作 $\overrightarrow{OP}$ 在 $a_1, a_2, a_3$ 轴的垂直投影 $OA, OB, OC$ ，则 $OA + OB = -\frac{5}{2} + (-1) = -\frac{7}{2} = -OC$ ，即这三个垂直投影值满足 $t = -(u+v)$ 条件。此外，还可以证明： $\overrightarrow{OA} + \overrightarrow{OB} + \overrightarrow{OC} = \overrightarrow{OP}' = \frac{3}{2}\overrightarrow{OP}$ 。因

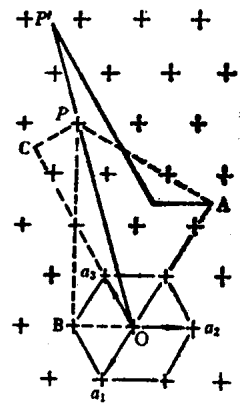


图1.7 六方晶系密布氏晶向指数的标定

此，在求三维晶向的密布氏指数时，首先求出晶向上任一结点在四晶轴的垂直投影（以各晶轴点阵常数为度量单位），然后将前三个数值乘以 $\frac{2}{3}$ ，再和第四个数值一起化为最小简单整数即可。例如，图 1.7 中  $\overrightarrow{OP}$  在四晶轴的垂直投影分别为  $-\frac{5}{2}$ 、 $-1$ 、 $\frac{7}{2}$ 、 $0$ ，其晶向指数为  $[\bar{5}270]$ 。

## § 1.8 晶体结构符号

晶体结构的类型可以用一定的符号来表示，常用的有以下两种：

### 1. 《结构报告》符号

这是由每年出版一次的《结构报告》的编者提出的，该报告最初是用德文名称 Strukturbericht，后改为英文名称 Structure Report。《结构报告》所用符号，第一个大写字母表示类型（参看表 1.2），后面的数字为顺序号，表示在该类中的不同晶体结构。

表 1.2 《结构报告》符号

符 号	晶 体 类 型
A	纯元素
B	AB型化合物
C	AB <sub>2</sub> 型化合物
D	A <sub>n</sub> B <sub>m</sub> 型化合物
E-K	更复杂的化合物
L	合金
O	有机化合物
S	硅酸盐

### 2. Pearson 符号

Pearson 符号可用来表示晶体结构所属的晶系（第一个小写字母）、点阵类型（第二个大写字母）、以及晶胞原子数（大写字母后的数字），前两个字母的规则可参看表 1.1。例如，金刚石的《结构报告》符号为 A4，它的 Pearson 符号为 cF8，这表明金刚石的晶体结构属于立方晶系的面心立方空间点阵，每个晶胞有八个碳原子。

## § 1.9 金属中常见的晶体结构

金属中最常见的晶体结构有面心立方、体心立方和密排六方三种。

### § 1.9.1 面心立方结构

《结构报告》符号为 A1，Pearson 符号为 cF4。图 1.8(a) 为面心立方结构的晶胞，晶胞的八个顶角各有一个原子，但顶角上的每个原子同时为八个相邻晶胞所共有，这八个原子只有一个属于这个晶胞；晶胞六个面的中心各有一个原子，每个面心原子同时又为相邻的另一



个晶胞所共有，这六个原子只有三个属于这个晶胞。因此，每个晶胞共有四个原子，其原子坐标为： $0\ 0\ 0$ 、 $\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$ 、 $0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$ 、 $\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$ ，与面心立方空间点阵的阵点坐标完全一样，面心立方结构的基元就是单个原子。

金属晶体中原子的排列是相当致密的，如果粗略地把原子看成是不可压缩的圆球，那么由互相接触的圆球构成的模型能够更确切地表示晶体结构中原子的排列，如图1.8(b)所示。

晶体结构中任一原子的最近邻原子数叫做该晶体结构的配位数。配位数愈大，晶体中原子排列的致密度愈大。由图1.9可以看出，面心立方结构中任一原子（例如A原子）的最近邻原子有12个（图中用“●”表示的原子），A原子与这些原子的距离都是 $\sqrt{2}a/2$ （ $a$ 为点阵常数）。因此，面心立方结构的配位数为12（可写成 $CN=12$ ）。

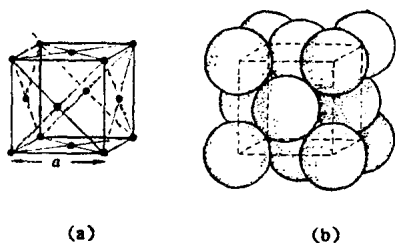


图1.8 面心立方结构的晶胞

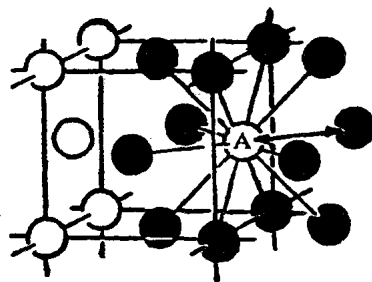


图1.9 面心立方结构的配位数

在由相互接触圆球构成的晶胞模型内，原子所占体积（ $V_1$ ）与晶胞体积（ $V$ ）的比值叫做致密度（ $\eta$ ）， $\eta = V_1/V$ 。在面心立方晶胞中，立方体面对角线长等于原子半径  $r$  的四倍，点阵常数与原子半径的关系为  $a = (4/\sqrt{2})r$ 。因此，面心立方结构的致密度为

$$\eta = V_1/V = 4 \times \frac{4}{3} \pi r^3 / a^3 = \sqrt{2} \pi / 6 \approx 0.74$$

具有面心立方结构的金属中，常见的有： $\gamma$ 铁、铝、铜、镍、铅、金、银、铂等。

### § 1.9.2 体心立方结构

《结构报告》符号为A2，Pearson符号为cI2，图1.10为其晶胞，每个晶胞有两个原子，其坐标为  $0\ 0\ 0$ 、 $\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$ 。体心立方结构的基元也是单个原子。

由图1.11可以看出，体心立方结构中任一原子（例如A原子）的最近邻原子有8个（图中用“●”表示的原子），原子间距为 $\sqrt{3}a/2$ 。因此，体心立方结构的配位数为8（ $CN=$

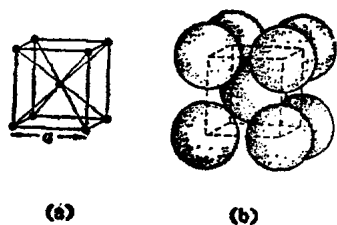


图1.10 体心立方结构的晶胞

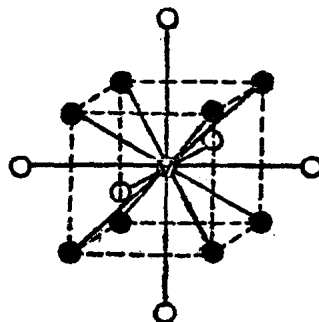


图1.11 体心立方结构的配位数