



“十二五”国家重点图书出版规划项目
材料科学研究与工程技术系列

材料科学基础 金属材料分册

Foundations of Materials Science *Metal Material*

- 主 编 权力伟
- 副主编 白 静

哈尔滨工业大学出版社

014032242

TB3-43
199
V1

“十二五”国家重点图书出版规划项目
材料科学研究与工程技术系列

内容简介：本书以材料科学为基础，介绍金属材料、无机非金属材料、高分子材料、复合材料、纳米材料、生物材料、能源材料、环境材料、信息材料、先进制造技术等领域的最新研究成果。本书可作为高等院校材料类、机械类、能源类、环境类、信息类等专业的教材，也可供从事材料工作的工程技术人员参考。

材料科学基础

金属材料分册

权力伟 主编
白静 副主编



责任编辑：李江、何淑珍
出版发行：哈尔滨工业大学出版社
地址：哈尔滨市南岗区复华四道街10号
邮编：150008
电话：0451-86414749
网址：<http://www.hit.edu.cn>
印刷：哈尔滨市工大节能印刷厂
开本：787mm×1092mm 1/16 印张17.22 字数394千字
版次：2013年12月第1版 2013年12月第1次印刷
书号：ISBN 978-7-2603-4539-9
定价：38.00元

(如因印装质量问题影响阅读，请及时与本社发行部联系)

哈尔滨工业大学出版社



北航 C1720531

TB3-43

199

V1

014033545

“十二五”国家重点图书出版规划项目

内容简介

本书系统地阐述金属材料的基本理论,注重科学性、先进性和实用性。本书共分7章,主要内容包括金属的晶体结构、晶体的缺陷、固体金属中的扩散、合金相图、金属的凝固、固态相变以及金属的加工特性。各章后均附有习题,供自学以及拓宽知识面。

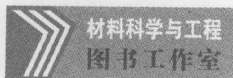
本书可作为高等院校材料科学与工程专业及材料类相关专业的教材,也可供研究生和相关专业的技术人员自学与参考。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学基础. 金属材料分册/权力伟主编. —哈尔滨:哈尔滨工业大学出版社,2013. 12
ISBN 978-7-5603-4239-9

I. ①材… II. ①权… III. ①材料科学-高等学校-教材
②金属材料-高等学校-教材 IV. ①TB3②TG14

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 231599 号



责任编辑 李子江 何波玲
出版发行 哈尔滨工业大学出版社
社 址 哈尔滨市南岗区复华四道街 10 号 邮编 150006
传 真 0451-86414749
网 址 <http://hitpress.hit.edu.cn>
印 刷 哈尔滨市工大节能印刷厂
开 本 787mm×1092mm 1/16 印张 17.25 字数 394 千字
版 次 2013 年 12 月第 1 版 2013 年 12 月第 1 次印刷
书 号 ISBN 978-7-5603-4239-9
定 价 38.00 元

(如因印装质量问题影响阅读,我社负责调换)

哈尔滨工业大学出版社

前 言

随着交叉学科以及新材料新工艺的发展,金属材料学这门传统课程也逐渐与其他课程相互关联与渗透,学好金属材料学这门重要的专业技术基础课,对于更好地学习、理解其他交叉学科的课程有着重要意义,因此需要我们在“广”的范围内进行“专”的学习,一方面培养金属材料专业素质,另一方面为拓宽专业面奠定基础。

本书在论述材料的组织结构、材料性能和应用的基础上,系统阐述了金属材料科学的基础理论知识,探讨了金属材料的晶体结构、晶体的缺陷、固体金属中的扩散、合金相图、金属的凝固、固态相变以及金属的加工特性等内容。本书尽量做到言简意赅、循序渐进、由浅入深,并且理论联系实际,通过实例加深对理论内容的理解。

本书的编写思路是:金属的晶体结构和晶体的缺陷、金属材料微观结构是研究金属材料的基础,能帮助更好地研究金属材料的性能;扩散、相图、凝固以及固态相变,对于生产、使用和发展金属材料有重要的指导作用;金属的加工特性则从金属的变形、回复再结晶、强化机制以及断裂方面阐述,使学生能根据材料的性能要求正确地选择材料和制定工艺。

本书参考了部分国内外书刊,在此编者向原作者致以诚挚的谢意和敬意。

本书由东北大学秦皇岛分校资源与材料学院权力伟、白静编写,其中第1、2、3、5章由权力伟编写,第4、6、7章由白静编写。在本书的编写过程中,得到了李明亚、罗绍华等很多老师的关怀与帮助,在此一并表示感谢。

由于编者水平有限,书中不免存在错误和疏漏之处,恳请广大读者和同行给予指正。

编 者
2013年7月

目 录

第1章 金属的晶体结构	1
1.1 金属原子间的结合力	1
1.2 晶体学基础	3
1.3 典型金属晶体结构	18
1.4 合金相结构	24
习题	29
第2章 晶体的缺陷	30
2.1 点缺陷	30
2.2 线位错	33
2.3 面缺陷	57
习题	61
第3章 固体金属中的扩散	62
3.1 扩散定律及其应用	62
3.2 扩散微观理论与机制	71
3.3 扩散的热力学分析	74
3.4 影响扩散的因素	75
3.5 反应扩散	77
习题	79
第4章 合金相图	80
4.1 相图的基本知识	80
4.2 单元系相图	85
4.3 二元系相图	87
4.4 铁碳相图	99
4.5 三元相图	107
习题	118
第5章 金属的凝固	119
5.1 液态金属结晶的经典理论	119
5.2 纯金属凝固时的生长形态	131
5.3 单相合金的凝固	132
5.4 合金凝固过程中的成分过冷	139
5.5 共晶合金的凝固	146
5.6 合金凝固过程中化学成分的不均匀性	149

习题	157
第6章 固态相变	158
6.1 固态相变的分类与特征	158
6.2 相变驱动力与形核驱动力	162
6.3 固态相变的形核与长大	164
6.4 过饱和固溶体的脱溶	174
6.5 共析转变	180
6.6 失稳分解	182
6.7 马氏体相变	184
6.8 贝氏体转变	194
6.9 有序-无序转变	197
习题	199
第7章 金属的加工特性	200
7.1 金属的变形	200
7.2 冷变形金属的回复和再结晶	230
7.3 热变形金属的回复和再结晶	248
7.4 金属的强化机制	257
7.5 金属的断裂	262
习题	266
参考文献	268

前... 金属由... 云... 示... 图... 金... 晶... 五...

第 1 章 金属的晶体结构

按照原子(或分子)的排列特征可将固态物质分为两大类:晶体和非晶体。晶体中的原子在空间呈有规则的周期性排列,即长程有序态,而非晶体则是无规则排列的。金属都是晶体,由晶粒组成的。大部分矿物质可以清晰地显示晶体的形状,如图 1.1 所示,分别为 FeS₂(黄铁矿,也称愚人金,具有立方晶体结构)、NaCl(食盐,具有立方晶体结构)、SiO₂(石英,具有三方晶系)。

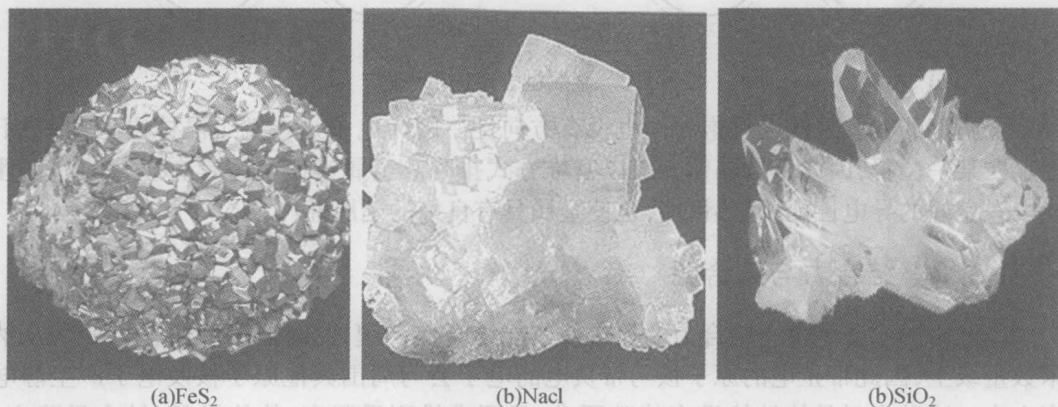


图 1.1 晶体结构

材料的结构决定了材料的性能,因此了解材料的结构是研究材料科学的基础。为了更好地研究金属材料的性能,我们需要了解金属晶体的结构。本章主要讲述金属的晶体结构,包括:金属原子间的结合力、晶体学基础以及典型金属晶体结构和合金相结构等。

1.1 金属原子间的结合力

固体材料之所以能结合在一起,是因为其原子之间存在一种结合力和结合能,这种结合力将各原子相互连接起来,使材料保持一定的形状和物理性能,这种结合力也称为键合。材料的很多性能是与原子间结合力的类型密切相关的。结合键可分为化学键(金属键、离子键、共价键)和物理键(范德华力、氢键)。金属材料是以金属键为主要结合方式的。

1.1.1 金属键

典型的金属晶体如周期表中第 I 族、第 II 族元素及过渡元素的晶体,它们最外层的电子一般为 1~2 个,组成晶体时每个原子的最外层电子都不再属于某个原子,而为所有原子所共有,电子的共有化是金属晶体的基本特点。金属原子的最外层电子数少,较容易失

去外壳层价电子而形成稳定的电子壳层,即形成带正电荷的阳离子,而挣脱原子核束缚的价电子成为自由电子,游离于正离子之间,在整个晶体内运动,形成电子云。这种由金属正离子与金属中的自由电子相互作用所构成的键合称为金属键,如图 1.2 所示。

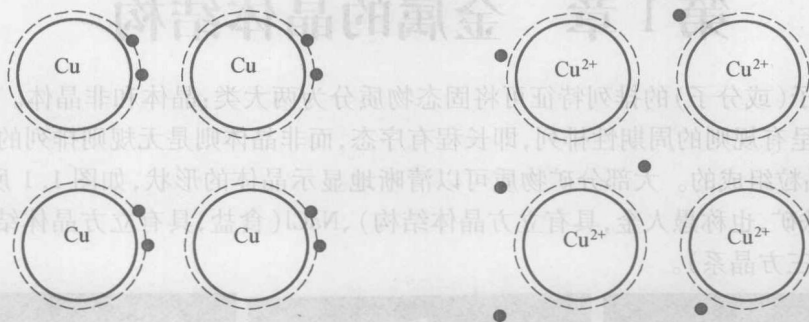


图 1.2 金属键合结构示意图

金属键的实质是既没有饱和性也没有方向性。因为电子是在整个晶体内运动,并不固定在某一位置,因此金属晶体一般以密堆方式排列。金属键使金属具有显著的物理性能——良好的导电性能、导热性能,也使金属具有良好的延展性。

1.1.2 结合力与结合能

晶体中的原子是由于结合力的存在使其能结合在一起,此时原子间距在十分之几纳米数量级上,因此带正电的原子核与带负电的电子会与周围其他原子核及电子产生静电库仑力。这种力对晶体结构没有特殊要求,只要求排列最紧密,势能最低,结合最稳定。原子结合起来后,体系的能量可降低,即分散的原子结合成晶体的过程中,会有一定的能量 E 释放,这个能量称为结合能。

金属晶体中的原子之间既可以相互吸引,也可以相互排斥,这是由相对距离和电荷决定的。在远距离时,吸引作用是主要的,而在近距离时排斥作用是主要的。吸引作用是由于异性电荷间的库仑力,而排斥作用是由于同性电荷间的库仑力和周围电子云相互重叠引起的排斥。

假设 f_{at} 为引力, f_{re} 为斥力, r 为原子间距,引力与斥力的关系为

$$f_{at} = -\frac{a}{r^m} \quad (1.1)$$

$$f_{re} = \frac{b}{r^n} \quad (1.2)$$

式中, a 、 b 、 m 、 n 均为常数,且 $m < n$ 。

原子间总作用力 f 为

$$f = f_{at} + f_{re} = -\frac{a}{r^m} + \frac{b}{r^n}$$

由此可见,当原子间距 r 较大时,斥力很小,而引力相对值较大,因此 $f < 0$, 原子间相互吸引;同理,当 r 较小时,斥力很大,而引力相对值较小,因此 $f > 0$, 原子间相互排斥,如图 1.3 所示。当 $r = r_0$ 时, $f = 0$, 即 f_{at} 与 f_{re} 数值相等,此时原子间作用力达到平衡状态。当

原子被外力拉开时,相互间的吸引力试图使其回到平衡位置;反之,当原子受到压缩时,排斥力试图使其回到平衡位置。

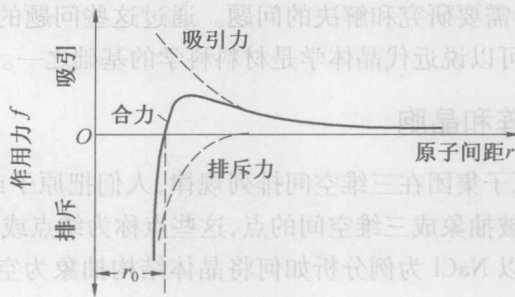


图 1.3 两原子间作用力示意图

在平衡距离 r_0 处,合力为零,原子间的位能处于最低状态,也是晶体的最稳定状态。低于或高于这个位能,能量都变大。在金属晶体中,过渡族元素的结合能最大,为 $400 \sim 800 \text{ kJ/mol}$,碱金属为 $80 \sim 160 \text{ kJ/mol}$,Cu、Ag、Au 为 $300 \sim 350 \text{ kJ/mol}$ 。

1.2 晶体学基础

晶体是指原子、离子或原子集团在三维空间规则地、周期性地重复排列的固体。X 射线衍射的结果表明,一切固体物质,不论其外形及透明度如何,不论是单质还是化合物,是天然的还是人工合成的,只要是晶体,它的结构基元(原子、分子、离子或络合离子等)都具有长程有序的排列。玻璃、石蜡和沥青等,虽然也都是固体的物质,但它们的结构基元仅具有短程有序的排列,而没有长程有序的排列,这些固体物质均称为非晶体。由于非晶体不能自发地生长成规则的几何外形,因而非晶质固体又称为无定形体。晶体分为单晶体和多晶体。单晶体是连续、均匀、各向异性的固体。单晶体通过晶界和相界聚合而成多晶体,若没有择优取向,多晶体大体上是各向同性。

晶体具有一些共同的性质:均匀性,即晶体不同部位的宏观性质相同;各向异性,即在晶体中不同方向上具有不同的性质,见表 1.1;有限性,即晶体具有自发地形成规则几何外形的特性;对称性,即晶体在某些特定方向上所表现的物理化学性质完全相同以及具有固定的熔点等。

表 1.1 单晶体的各向异性

类别	弹性模量/MPa		抗拉强度/MPa		延伸率/%	
	最大	最小	最大	最小	最大	最小
Cu	191 000	66 700	346	128	55	10
α -Fe	293 000	125 000	225	158	80	20

近代科学的许多领域的进展都和近代晶体学密切相关。除了物理、化学等基础学科外,一些尖端科学技术,如自动化技术、红外遥感技术、电子计算机技术和空间技术等,都有其所需要的特殊晶体材料。材料科学在较大程度上得力于晶体结构理论所提供的观

点与知识。各种材料,不管它是金属、合金材料、陶瓷材料、高聚合物材料,还是单晶材料,都存在着内部结构、物相组成和结构与性能关系等问题,即它们有共同相关的问题,这种问题就是近代晶体学中需要研究和解决的问题。通过这几个问题的解决,就可以把晶体材料和应用联系起来,可以说近代晶体学是材料科学的基础之一。

1.2.1 空间点阵和晶胞

为了揭示原子或原子集团在三维空间排列规律,人们把原子或原子集团按某种规律抽象成一个点,晶体则被抽象成三维空间的点,这些点称为结点或阵点。为了描述各种晶体结构的规律和特征,以 NaCl 为例分析如何将晶体结构抽象为空间点阵,并说明它们之间的关系。

NaCl 是由 Na^+ 和 Cl^- 组成。人们实际测定出在 NaCl 晶体中 Na^+ 和 Cl^- 是相间排列的, NaCl 晶体结构的平面图形和平面图形分别如图 1.4、图 1.5 所示。所有 Na^+ 的上下、前后、左右均为 Cl^- ; 所有 Cl^- 的上下、前后、左右均为 Na^+ 。两个 Na^+ 之间的周期分别为 0.562 8 nm 和 0.397 8 nm, 即不同方向上周期不同。两个 Cl^- 之间的周期亦如此。可以发现, 每个 Na^+ 中心点在晶体结构中所处的几何环境和物质环境都是相同的, Cl^- 也同样如此。我们将这些在晶体结构中占有相同几何位置, 且具有相同物质环境的点都称其为等同点。除 Na^+ 中心点和 Cl^- 中心点之外, 尚存在很多类等同点, 例如 Na^+ 和 Cl^- 相接触的 X 点亦是一类等同点。但 Na^+ 中心点、 Cl^- 中心点和 X 点彼此不是等同点。如果将晶体结构中某一类等同点挑选出来, 它们有规则周期性地重复排列所形成的空间几何图形即称为空间点阵, 简称点阵。构成空间点阵的每个点称为结点或阵点。由此可知, 每一个阵点都是具有等同环境的非物质性的单纯几何点, 而空间点阵是从晶体结构中抽象出来的非物质性的空间几何图形, 它很明确地显示出晶体结构中物质质点排列的周期性和规律性。

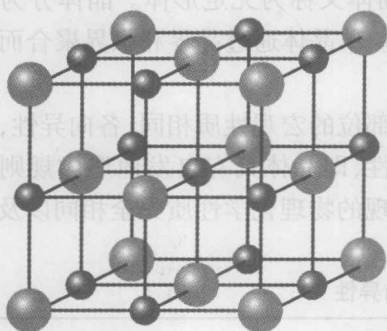


图 1.4 NaCl 结构

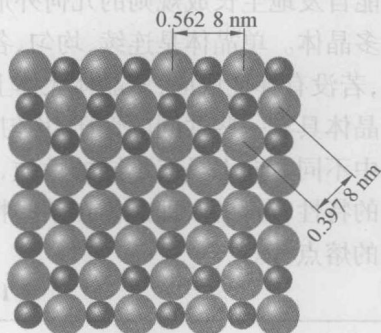


图 1.5 NaCl 结构平面图形

这里需强调, 晶体结构和空间点阵是两个完全不同的概念, 晶体结构是指具体的物质粒子排列分布, 它的种类有无限多, 而空间点阵只是一个描述晶体结构规律性的几何图形, 它的种类却是有限的。二者关系可以表述为: 空间点阵+结构单元 \rightarrow 晶体结构。

点阵是具有代表性的基本单元, 这些基本单元也称为晶胞, 通常选取具有代表性的最小的平行六面体, 在三维空间堆砌成空间点阵。空间点阵中阵点的联法不同, 选取的晶胞形状也不同, 如图 1.6 所示。一般而言, 晶胞的选择原则是: 尽可能反映点阵的对称性, 且

六面体的八个顶角均有阵点,平行六面体的体积最小。

为了描述晶胞的形状和大小,一般以晶胞中某一定点为坐标原点,相交于顶点的平行六面体的三条棱边为 x, y, z 轴,如图 1.7 所示。这样晶胞的大小和形状可以通过棱边长度 a, b, c 及棱边夹角 α, β, γ 6 个参数来表达,这些参数称为点阵常数或晶格常数。

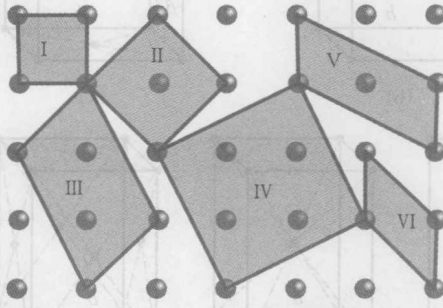


图 1.6 晶体学选取晶胞的原则

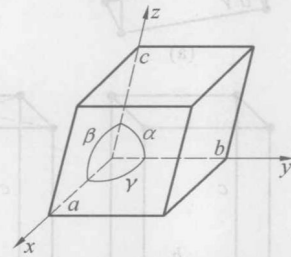


图 1.7 单晶胞及晶格常数

空间点阵存在多种排列形式,按照“每个阵点的周围环境相同”的要求,在这样一个限定条件下,法国晶体学家布拉菲(A. Bravais)首先用数学方法推导出能反映空间点阵全部特征的空间点阵只有 14 种类型,这 14 种空间点阵也称为布拉菲点阵。图 1.8 为 14 种空间点阵的晶胞。若根据晶体的对称特点进一步整理,可将 14 种空间点阵归属于 7 个晶系,见表 1.2。由于金属原子趋向于紧密排列,工业中常用的金属元素中除少数具有复杂晶体结构外,大部分金属具有简单的晶体结构,最典型常见的是体心立方结构、面心立方结构和密排六方结构。

表 1.2 空间点阵

晶系	空间点阵	棱边长及夹角关系	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	(a)
单斜	简单单斜	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	mP	1	(b)
	底心单斜		mC	2	(c)
正交	简单正交	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	oP	1	(d)
	底心正交		oC	2	(e)
	体心正交		oI	2	(f)
	面心正交		oF	4	(g)
六方	简单六方	$a_1 = a_2 = a_3 \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	hP	1	(h)
菱方	简单菱方	$a_1 = a_2 = a_3, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	hR	1	(i)
正方 (四方)	简单正方	$a_1 = a_2 \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	tP	1	(j)
	体心正方		tI	2	(k)
立方	简单立方	$a_1 = a_2 = a_3, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	cP	1	(l)
	体心立方		cI	2	(m)
	面心立方		cF	4	(n)

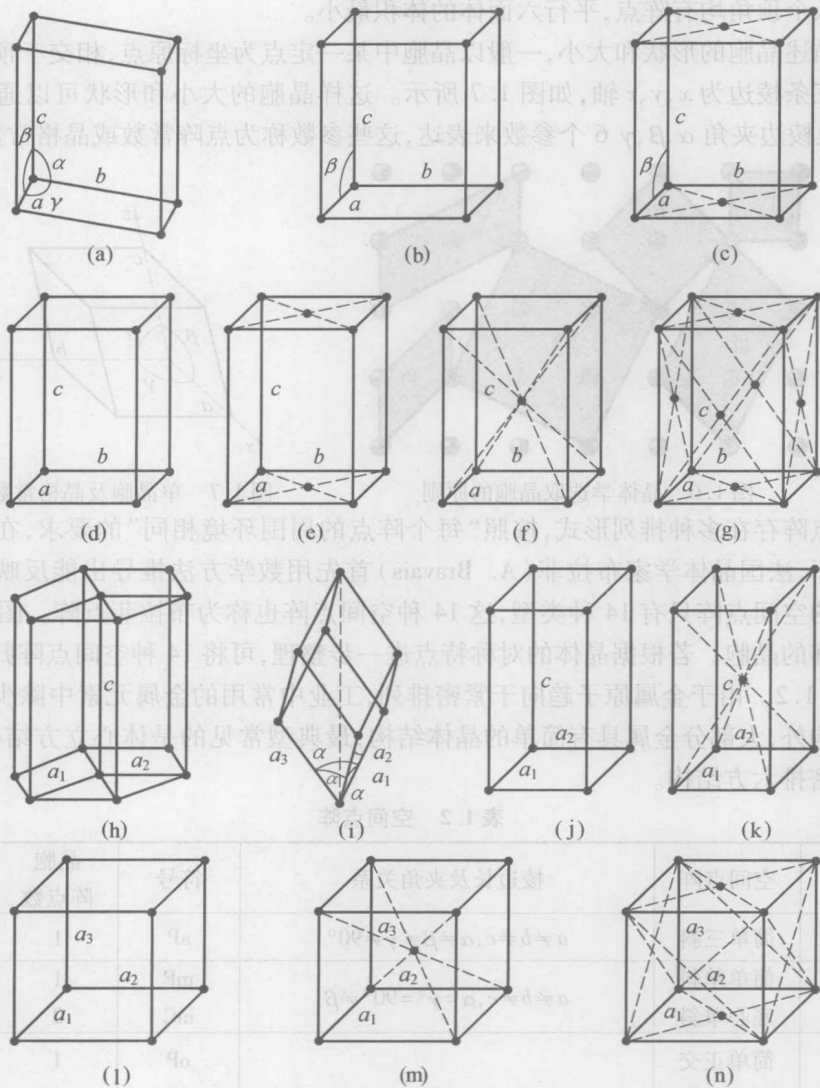


图 1.8 14 种空间点阵的晶胞

1.2.2 晶向指数和晶面指数

在晶体中存在一系列的原子列或原子平面，晶体中原子所组成的平面称为晶面，原子列及其所指的方向称为晶向。不同的晶面和晶向具有不同的原子排列和取向。在分析有关晶体的生长、变形、相变以及性能等方面问题时，涉及晶体中不同晶向晶面上原子的分布状态，为了便于确定和区别晶体中不同方位的晶向和晶面，国际上通常采用密勒 (Miller) 指数来统一标定晶向指数和晶面指数。

1. 晶向指数

晶向指数的确定如图 1.9 所示，步骤如下：

①以晶胞的某一阵点为原点，三个基矢为坐标轴，并以点阵基矢的长度作为三个坐标

的单位长度。

②过原点作一直线 OP ，使其平行于待标定的晶向 AB ，这一直线必定会通过某些阵点。

③在直线 OP 上选取距原点 O 最近的一个阵点 P ，确定 P 点的坐标值。

④将 P 点坐标值乘以最小公倍数化为最小整数 u, v, w ，加上方括号， $[uvw]$ 即为 AB 晶向的晶向指数。如果 u, v, w 中某一数为负值，则将负号标注在该数的上方。

图 1.10 给出了正交点阵中几个晶向的晶向指数。可见，晶向指数表示的是一组互相平行、方向一致的晶向。若晶体中两直线相互平行但方向相反，则它们的晶向指数的数字相同，而符号相反。如 $[2\bar{1}1]$ 和 $[\bar{2}1\bar{1}]$ 就是两个相互平行、方向相反的晶向。

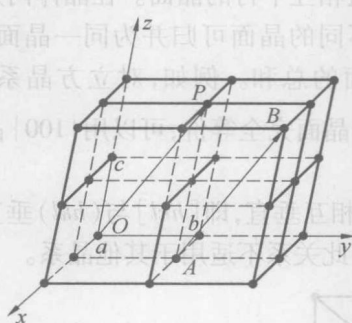


图 1.9 晶向指数的确定

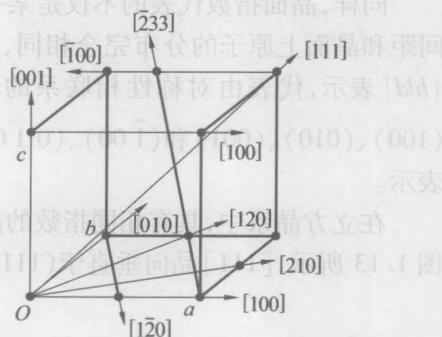


图 1.10 正交点阵中几个晶向的晶向指数

此外，晶体中因对称关系而等同的各组晶向可归并为一个晶向族，用 $\langle uvw \rangle$ 表示。例如，对立方晶系来说， $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 和 $[\bar{1}00]$ 、 $[0\bar{1}0]$ 、 $[00\bar{1}]$ 等六个晶向，它们的性质是完全相同的，就可以用符号 $\langle 100 \rangle$ 表示。需注意的是：如果晶体结构不是立方晶系，改变晶向指数的顺序，所表示的晶向则可能不等同。例如，对于正交晶系 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 这三个晶向并不是等同晶向，因这三个方向上的原子间距分别为 a, b, c ，沿着这三个方向，晶体的性质并不相同。

2. 晶面指数

晶面指数的标定步骤如下：

①在空间点阵中设定参考晶轴坐标系，设定方法与确定晶向指数时相同，但坐标原点需在待定晶面外。

②求出待定晶面在三个晶轴上的截距（如该晶面与某轴平行，则截距为 ∞ ），例如 $1, 1, \infty, 1, 1, 1, 1, 1, 1/2$ 等。

③取这些截距数的倒数，例如 $110, 111, 112$ 等。

④将上述倒数化为最小的简单整数，并加上圆括号，即表示该晶面的指数，一般记为 (hkl) ，例如 (110) ， (111) ， (112) 等。同样若某一数值为负，将负号标注于该数的上方。

例如，图 1.11 中标出的晶面 $a_1 b_1 c_1$ ，相应的截距为 $1/2, 1/3, 2/3$ ，其倒数为 $2, 3, 3/2$ ，化为简单整数为 $4, 6, 3$ ，所

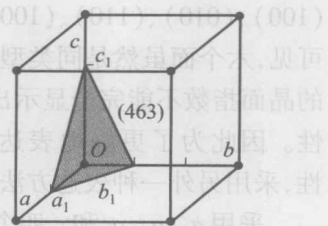


图 1.11 晶面指数的表示方法

以晶面 $a_1b_1c_1$ 的晶面指数为(463)。图 1.12 为立方晶系中几个常见的晶面指数。

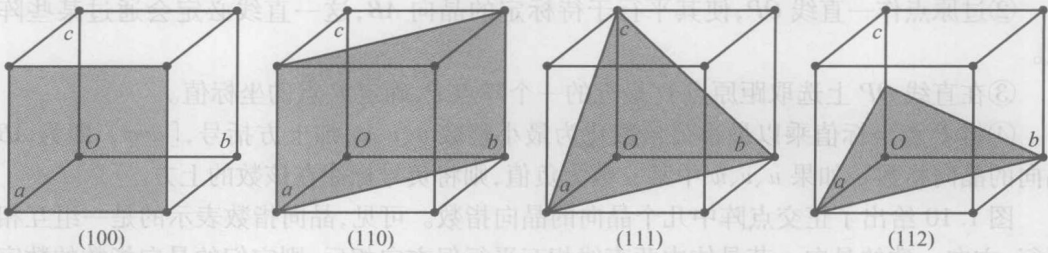


图 1.12 立方晶系中几个常见的晶面指数

同样,晶面指数代表的不仅是某一晶面,而是一组相互平行的晶面。在晶体内凡晶面间距和晶面上原子的分布完全相同,只是空间位向不同的晶面可归并为同一晶面族,用 $\{hkl\}$ 表示,代表由对称性相联系的若干组等效晶面的总和。例如,对立方晶系来说,(100)、(010)、(001)和 $(\bar{1}00)$ 、 $(0\bar{1}0)$ 、 $(00\bar{1})$ 等六个晶面完全等价,可以用 $\{100\}$ 晶面族表示。

在立方晶系中,具有相同指数的晶向和晶面必定相互垂直,即 $[hkl]$ 与 (hkl) 垂直。如图 1.13 所示, $[111]$ 晶向垂直于(111)晶面。需注意,此关系不适用于其他晶系。

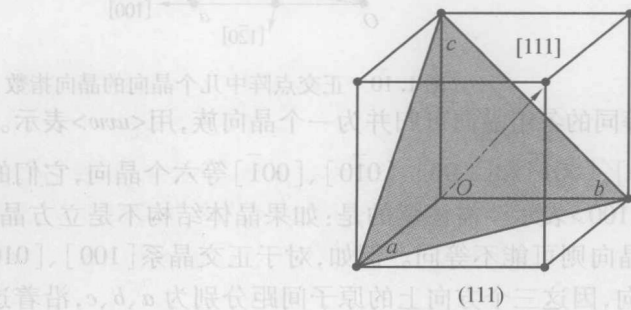


图 1.13 晶面指数(111)与晶向指数 $[111]$ 相互垂直示意图

六方晶系的晶向指数和晶面指数同样可以应用上述方法标定,取 a_1 、 a_2 和 c 为晶轴, a_1 轴与 a_2 轴之间的夹角为 120° , c 轴与 a_1 、 a_2 轴相垂直,如图 1.14 所示。按此方法标定六方晶系的六个柱面的晶面指数分别为: (100) 、 (010) 、 $(\bar{1}10)$ 、 $(1\bar{1}0)$ 、 $(0\bar{1}0)$ 、 $(11\bar{0})$ 。可见,六个面虽然是同类型的晶面,但所标定的晶面指数不能完全显示出六方晶系的对称性。因此为了更好地表达六方晶系的对称性,采用另外一种表达方法。

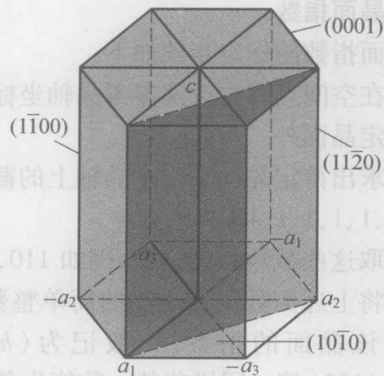


图 1.14 六方晶系面指数

采用 a_1 、 a_2 、 a_3 和 c 四个轴为晶轴, a_1 、 a_2 、 a_3 彼此间的夹角均为 120° , 晶面指数采用 $(hkil)$ 四个指数来表示。根据立体几何学,在三

维空间中独立的坐标轴不会超过三个。上述方法中,位于同一平面上的 h, k, i 中有两个是独立的。 h, k, i 之间存在下列关系

$$i = -(h+k) \tag{1.3}$$

此时六个柱面的指数成为 $(10\bar{1}0)$ 、 $(01\bar{1}0)$ 、 $(\bar{1}100)$ 、 $(\bar{1}010)$ 、 $(0\bar{1}10)$ 、 $(1\bar{1}00)$, 数字全部相同, 可把它们归并为 $\{1010\}$ 晶面族。

采用四轴坐标标定时, 晶向指数的确定方法也和采用三轴系时基本相同, 晶向指数用 4 个数 $[uvtw]$ 来表示。同理 u, v, t 三个数中也只能有两个是独立的, 仿照晶面指数的标注方法, 它们之间的关系为

$$t = -(u+v) \tag{1.4}$$

三轴坐标系标出的晶向指数 $[UVW]$ 与四轴坐标系标出的晶向指数 $[uvtw]$ 的互换关系为

$$\begin{cases} u = (2U - V) / 3 \\ v = (2V - U) / 3 \\ t = (U + V) / 3 \\ w = W \end{cases} \tag{1.5}$$

1.2.3 晶带与晶带定律

所有平行或相交于某一晶向直线的晶面构成一个晶带, 此直线称为晶带轴, 属于此晶带的晶面称为晶带面, 如图 1.15 所示。

设立方晶系中, 有一晶带轴 $[uvw]$ 与该晶带的晶面 (hkl) 关系如下

$$hu + kv + lw = 0 \tag{1.6}$$

满足此关系式的晶面都属于以 $[uvw]$ 为晶带轴的晶带, 此关系式称为晶带定律。

晶带定律是非常有用的工具, 对分析立方晶系的晶体学问题有很大帮助。下面是几例常见的应用。

① 已知某晶带中任意两个非平行晶面 $(h_1 k_1 l_1)$ 和 $(h_2 k_2 l_2)$, 则该晶带的晶带轴方向 $[uvw]$ 为

$$\begin{aligned} u:v:w &= \begin{vmatrix} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} l_1 & h_1 \\ l_2 & h_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{vmatrix} \\ &= k_1 l_2 - k_2 l_1 : l_1 h_2 - l_2 h_1 : h_1 k_2 - h_2 k_1 \end{aligned} \tag{7.1}$$

② 已知某晶面同属于两个晶带 $[u_1 v_1 w_1]$ 和 $[u_2 v_2 w_2]$, 则该晶面的晶面指数 (hkl) 为

$$h:k:l = \begin{vmatrix} v_1 & w_1 \\ v_2 & w_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} w_1 & u_1 \\ w_2 & u_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} u_1 & v_1 \\ u_2 & v_2 \end{vmatrix} \tag{8.1}$$

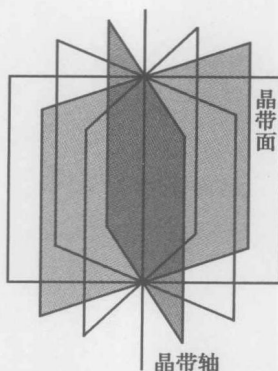


图 1.15 晶带、晶带面与晶带轴

$$\begin{aligned}
 h &= v_1 w_2 - v_2 w_1 \\
 k &= w_1 u_2 - w_2 u_1 \\
 l &= u_1 v_2 - u_2 v_1
 \end{aligned}
 \tag{1.1}$$

③已知三个晶面 $(h_1 k_1 l_1)$ 、 $(h_2 k_2 l_2)$ 和 $(h_3 k_3 l_3)$ 之间的关系,即

$$\begin{vmatrix}
 u_1 & k_1 & l_1 \\
 h_2 & k_2 & l_2 \\
 h_3 & k_3 & l_3
 \end{vmatrix} = 0$$

则三个晶面在同一个晶带上。同理,若三个晶向也存在如上关系,则三个晶向属于同一个晶面上。

1.2.4 晶面间距和晶面夹角

晶面指数不同的晶面,其晶面间距各不同。晶面指数确定后,晶面的位向和晶面间距也随之确定。低指数的晶面间距大,晶面上原子排列密度越密集。图 1.16 为简单立方点阵中不同晶面的晶面间距的平面图。可见,(100)面的晶面间距最大,原子排列密度最密集;而(320)面的面间距最小,原子排列密度最稀疏。由于不同晶面或晶向上原子排列情况不同,使得晶体呈现出各向异性。

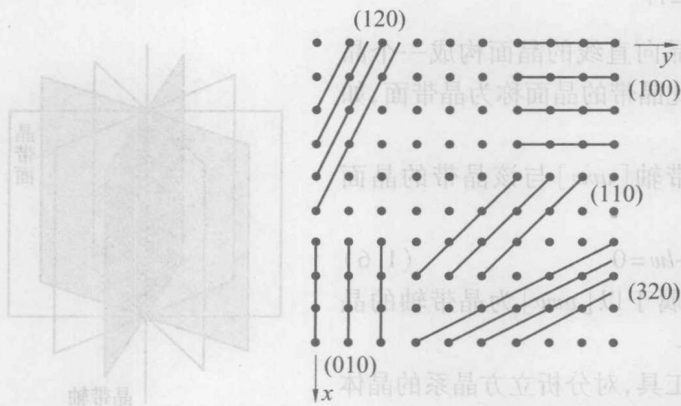


图 1.16 简单立方点阵中不同晶面的晶面间距示意图

不同的晶系,其晶面间距 d_{hkl} 与晶面指数 (hkl) 的关系为:

(1) 立方晶系

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}
 \tag{1.7}$$

(2) 正交和正方晶系

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}
 \tag{1.8}$$

(3) 六方晶系

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right)^2 + \left(\frac{l}{c} \right)^2}} \quad (1.9)$$

需注意,这些公式只适用于简单晶胞,对于复杂晶胞,如体心立方、面心立方等,在计算时应考虑到晶面层数增加的影响。

两个晶面的夹角,可用其法线的夹角,即晶向的夹角来表示。已知两个晶面 $(h_1 k_1 l_1)$ 、 $(h_2 k_2 l_2)$ 及其夹角 φ ,则 φ 与晶面指数之间的关系为:

(1) 立方晶系

$$\cos \varphi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}} \quad (1.10)$$

(2) 正交晶系

$$\cos \varphi = \frac{\frac{h_1 h_2}{a^2} + \frac{k_1 k_2}{b^2} + \frac{l_1 l_2}{c^2}}{\sqrt{\left(\frac{h_1}{a} \right)^2 + \left(\frac{k_1}{b} \right)^2 + \left(\frac{l_1}{c} \right)^2} \sqrt{\left(\frac{h_2}{a} \right)^2 + \left(\frac{k_2}{b} \right)^2 + \left(\frac{l_2}{c} \right)^2}} \quad (1.11)$$

(3) 六方晶系

$$\cos \varphi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + \frac{1}{2}(h_1 k_2 + h_2 k_1) + \frac{3a^2}{4c^2} l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + \frac{3a^2}{4c^2} l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + \frac{3a^2}{4c^2} l_2^2}} \quad (1.12)$$

1.2.5 晶体的对称性

自然界的某些物体如晶体中存在可分割成若干个形态相同的部分,将这些形态部分借助某些假想的辅助性的点、线、面等几何要素变换,它们自身重合复原或能有规律地重复出现,这种性质称为对称性。假想的几何要素称为对称元素,变换或重复称为对称操作。对称性是晶体的基本性质之一。自然界中,如雪花、花瓣、天然金刚石等呈现出各种各样的规则排列和对称分布,各具有不同的对称规律。晶体外形的宏观对称性是其内部晶体结构微观对称性的表现。晶体的某些物理参数如热膨胀、弹性模量和光学常数等也与晶体的对称性相关。因此了解晶体的对称性对于更好地研究晶体结构及性能有重要作用。

晶体的对称元素可分为宏观和微观两类。宏观对称元素反映出晶体外形和其宏观性质的对称性,而微观对称元素与宏观对称元素相结合可反映出原子排列的对称性。

1. 宏观对称元素

(1) 对称面

晶体通过某一平面作镜像反映而能复原,则该平面称为对称面或晶面(图 1.17 中的 P 面),用符号 m 表示。对称面通常是晶棱或晶面的垂直平分面或者为多面角的平分面,且必定通过晶体的几何中心。