

机械工程材料

第一章 金属的晶体结构

★ 第一节 金属的晶体结构

★ 第二节 实际金属的微观结构



第一章 金属的晶体结构

主要内容

晶体和点阵的概念

三种常见的金属晶体结构及特征参数：
体心立方、面心立方、密排六方
单胞原子数、致密度、配位数

晶体的描述

晶向指数和晶面指数

晶体缺陷

点缺陷、线缺陷、面缺陷

第一节 金属的晶体结构

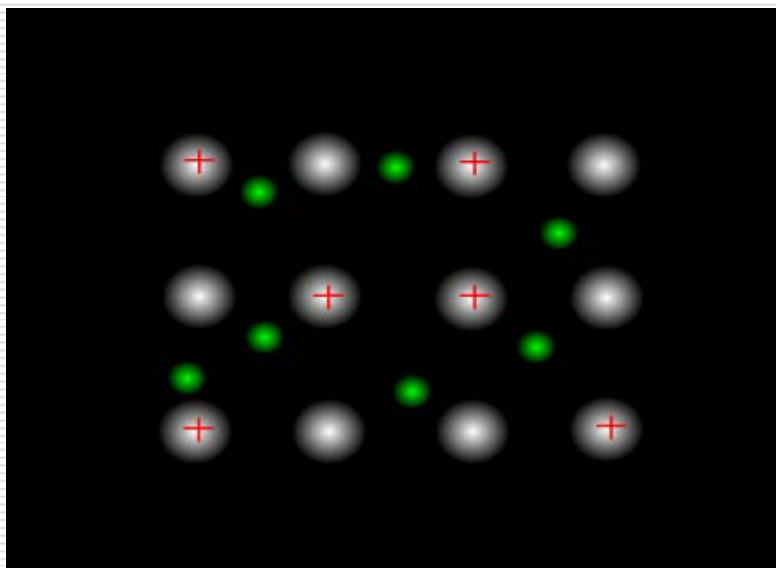
一.金属晶体的形成

1.金属键

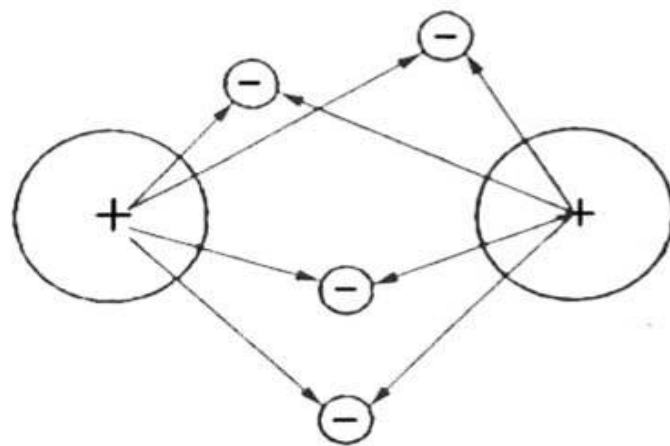
正离子和自由电子之间的正负电荷产生吸引力而使金属原子结合。

自由电子气模型

金属特性：导电、导热性，塑性，强度↑，金属光泽。



play

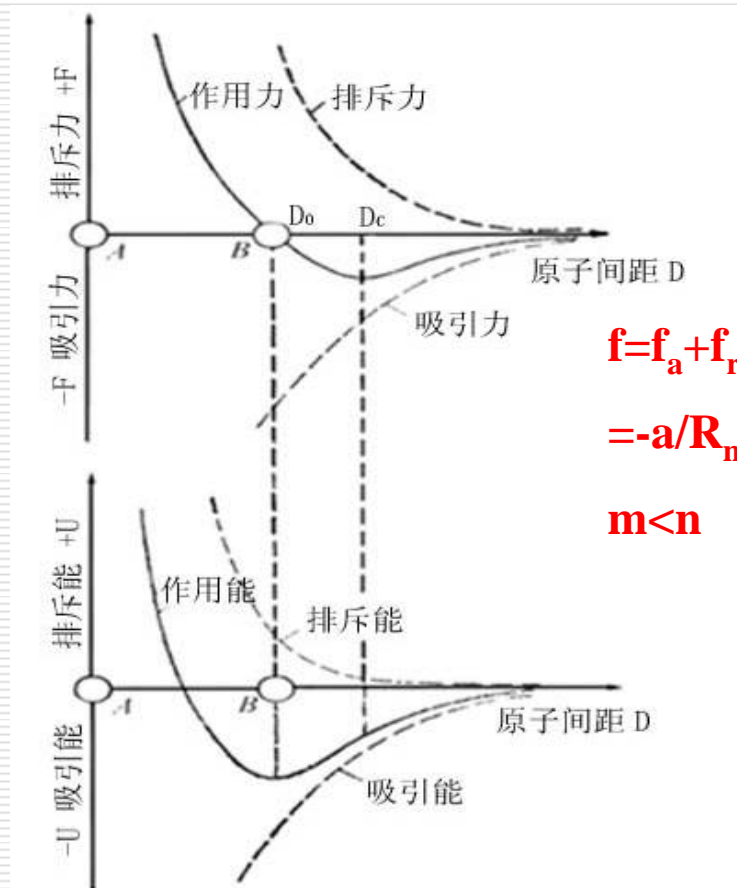


正离子与自由电子之间的吸引力



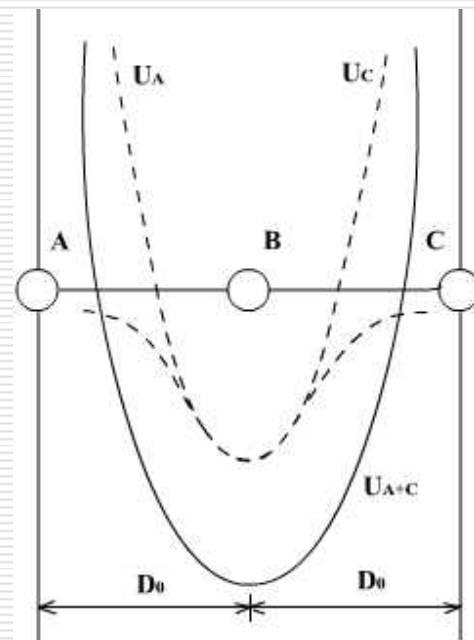
第一节 金属的晶体结构

2. 结合力和结合能



双原子作用模型

$$\begin{aligned} f &= f_a + f_r \\ &= -a/R_m + b/R_n \\ m &< n \end{aligned}$$



三原子作用模型

大量原子保持一平衡距离，使得结合能最低，原子自发趋于紧密排列——固态金属中原子趋于规则排列



第一节 金属的晶体结构

二. 晶体的概念

1. 定义

原子在三维空间作有规则的周期性重复排列的物质

2. 特性

恒定熔点：晶体到液体或液体到晶体的转变为突变

各向异性：强度、弹性、导电性、热膨胀性等

规则外形：个别晶体，如水晶、天然金刚石等

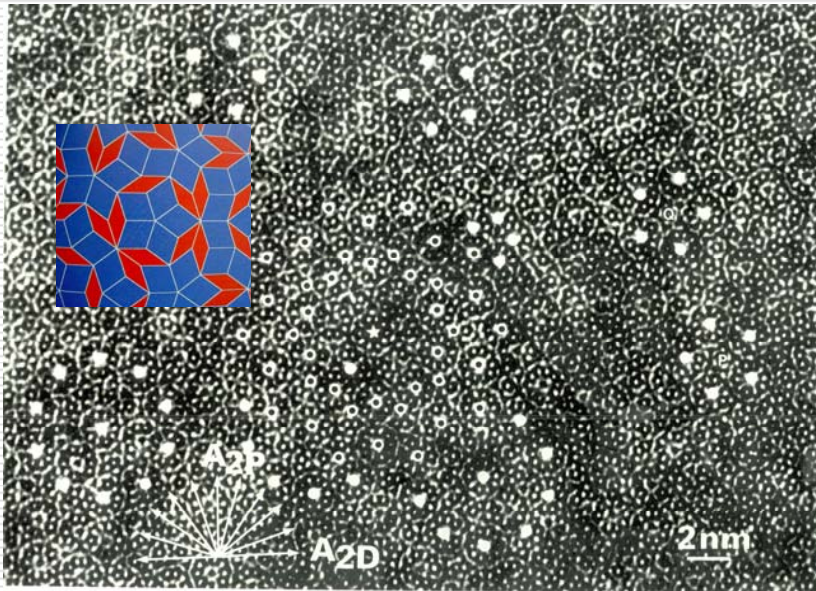


第一节 金属的晶体结构

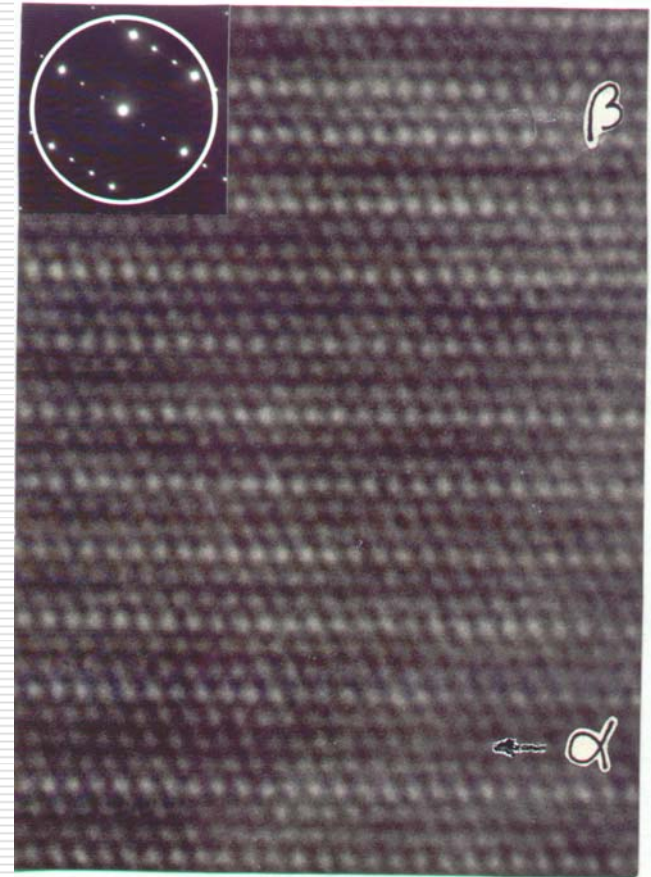
3. 其它金属结构状态

非晶态金属

准晶态金属



准晶体的结构像



晶体的原子像



第一节 金属的晶体结构

三. 晶体的描述

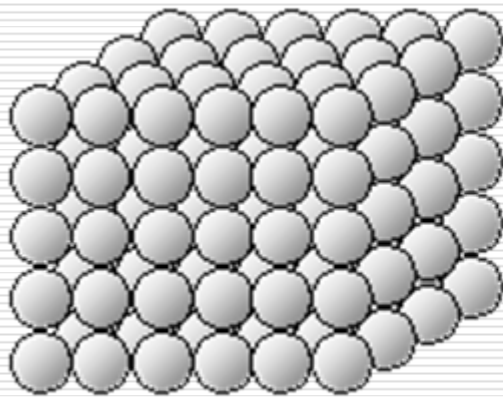
1. 晶格与晶胞

阵点：将晶体的实际质点(原子、分子)抽象为纯粹的几何点

晶格：描述原子排列方式的几何格架——空间点阵

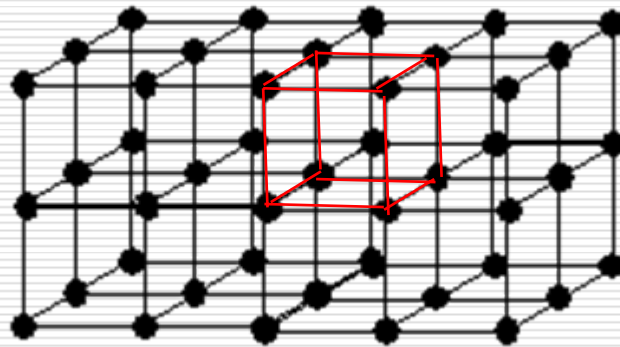
晶胞：晶格中具有代表性的最小的几何单元。

——晶格则由晶胞重复堆砌而成。



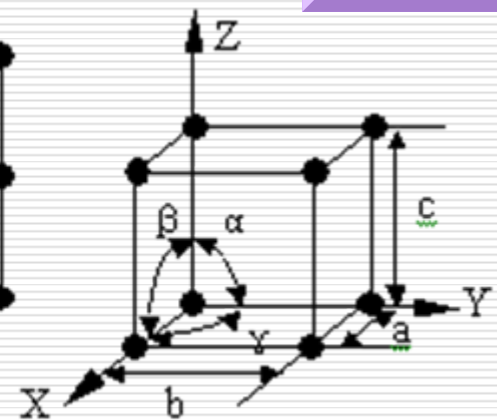
(a)

晶体结构



(b)

晶格



(c)

晶胞



第一节 金属的晶体结构

2. 晶格特征参数

晶格常数：表示晶胞几何形状、大小的参数。如立方晶胞：

三棱边 a 、 b 、 c ； 三棱边夹角 α 、 β 、 γ

晶胞所占原子数：

指一个晶胞所占的原子总数

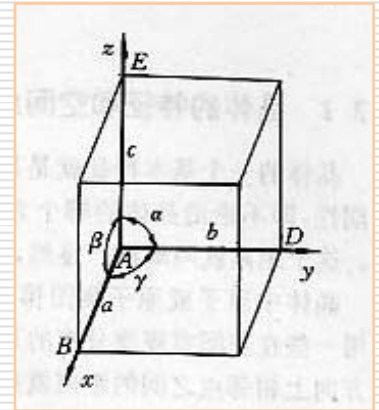
配位数：

指晶体结构中 with 任何一个原子最近邻且等距离的原子数目

致密度：

晶胞中原子所占体积与晶胞体积之比

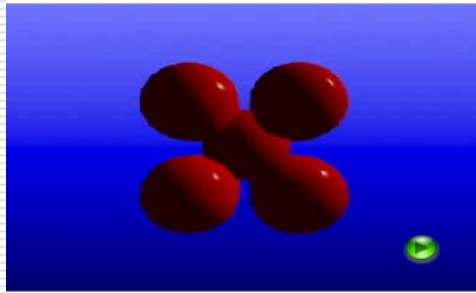
配位数和致密度可衡量晶胞中原子排列的紧密程度



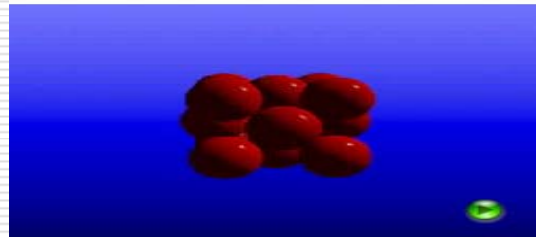
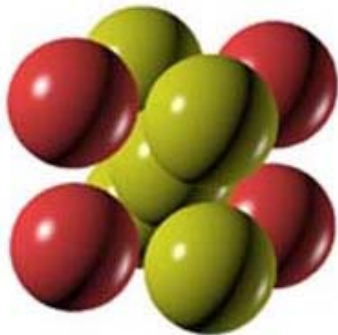
第一节 金属的晶体结构

四、金属中三种常见的晶体结构

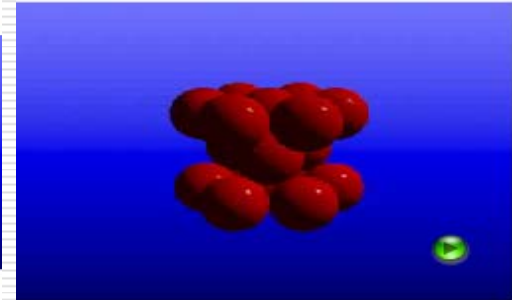
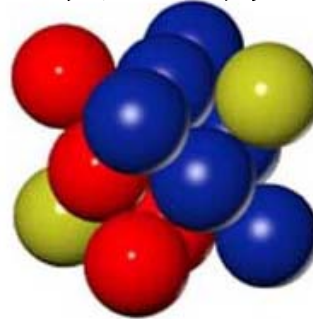
1. 单胞原子排列



体心立方



面心立方



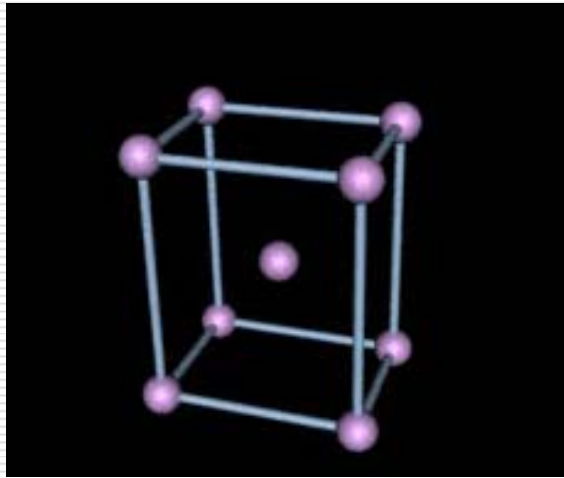
密排六方



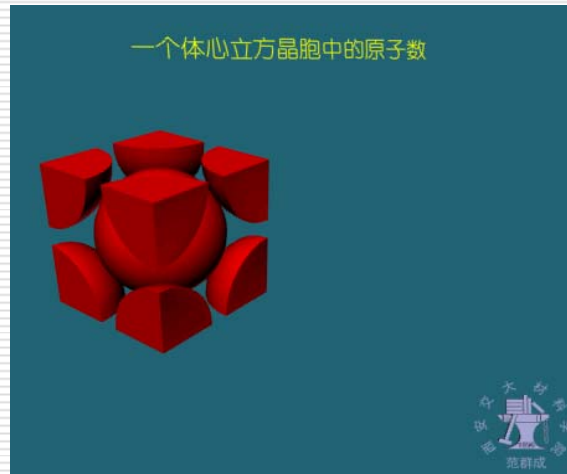
第一节 金属的晶体结构

2. 几何特征

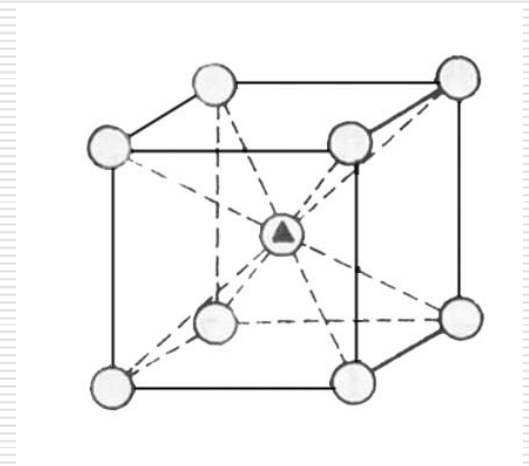
体心立方



点阵模型



晶胞原子数



晶格配位数

特征：在立方体的中心有一个原子，晶格常数 $a=b=c$ ， $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$

单胞原子数：2

配位数：8

致密度：0.68 (68%)

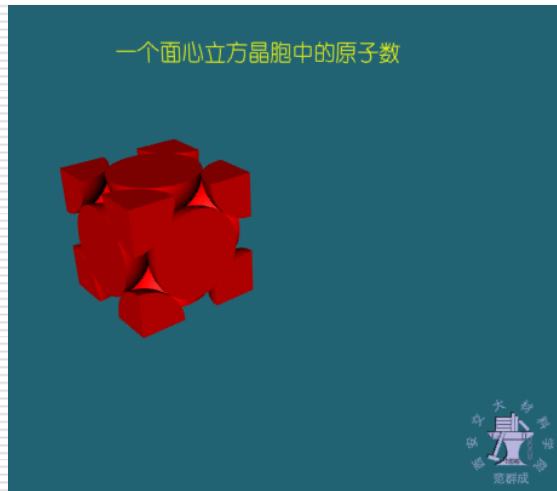
原子半径：
$$\frac{\sqrt{3}}{4}a$$

常见金属： α -Fe、Cr、Mo、W、V等

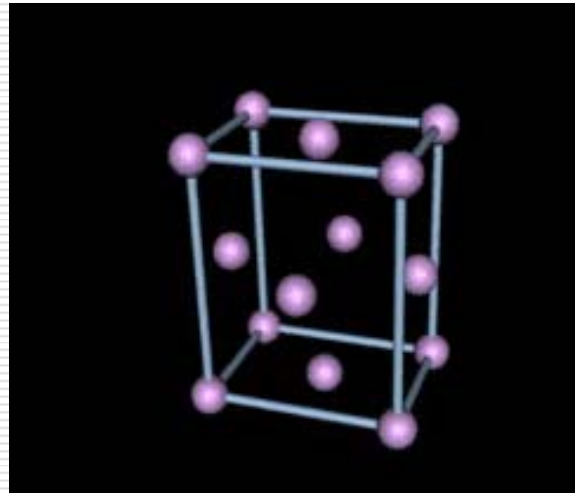
第一节 金属的晶体结构

2 几何特征

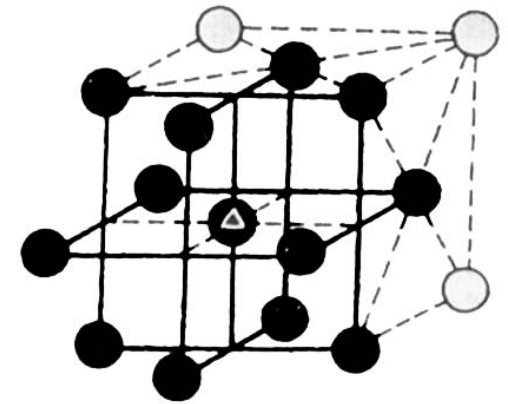
面心立方



晶胞原子数



点阵模型



晶格配位数

特征：立方体六个面的中心各有一个原子，晶格常数用边长 a 表示

单胞原子数： 4

配位数： 12

致密度： 0.74 (74%)

原子半径： $\frac{\sqrt{2}}{4}a$

常见金属： γ -Fe、Al、Cu、Ag、Ni等

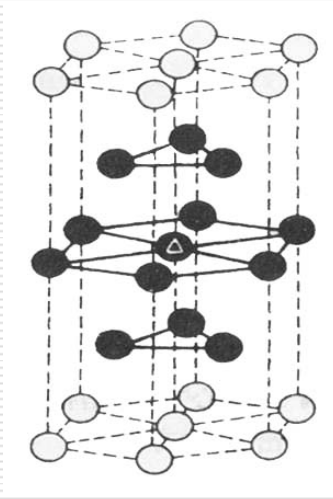
第一节 金属的晶体结构

2 几何特征

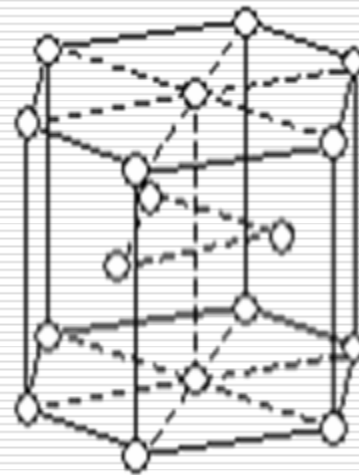
密排六方结构



晶胞原子数



点阵模型



晶格配位数

特征：六方柱体的上下底面中心各有一个原子，晶胞内三个原子。

晶格常数：正六边形边长 a ，上下底距离 c ， $c/a \approx 1.63$ 。

单胞原子数：6 配位数：12

致密度：0.74 (74%)

常见金属：Zn、Mg、 α -Ti等

原子半径：

$$\frac{1}{2}a$$



第一节 金属的晶体结构

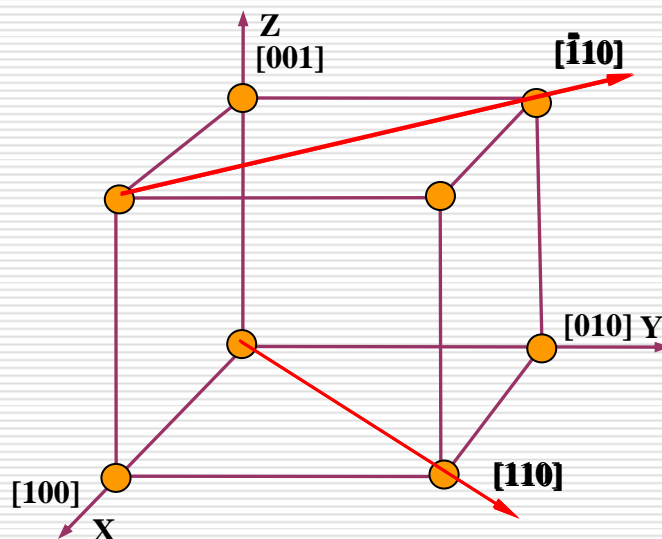
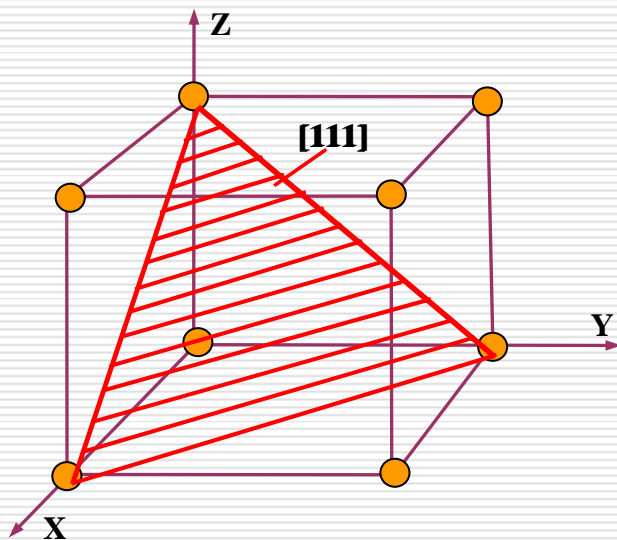
五、晶向指数和晶面指数

1. 定义

晶面：晶格中一系列原子所组成的平面

晶向：晶格中任意两个原子之间连线所指的方向

晶面指数和晶向指数：确定晶面和晶向在点阵中的几何位置的一套标志参量。



第一节 金属的晶体结构

2. 晶向指数确定方法

(1) 建立坐标系

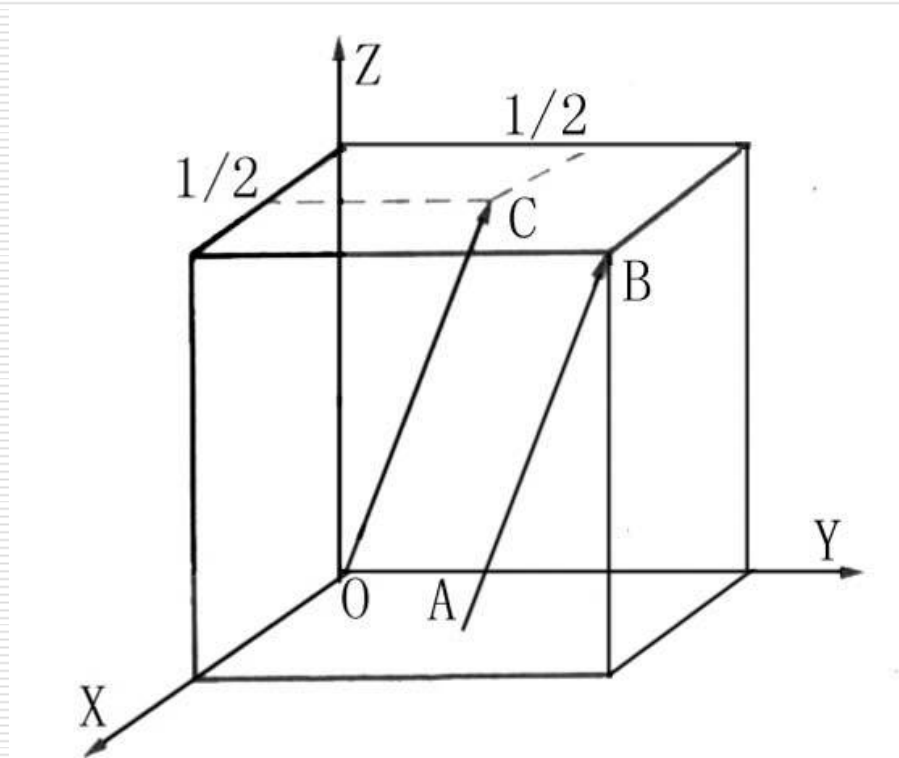
(2) 过O作OC//AB

(3) 求C点坐标值：

例：1/2, 1/2, 1

(4) 化为最小整数

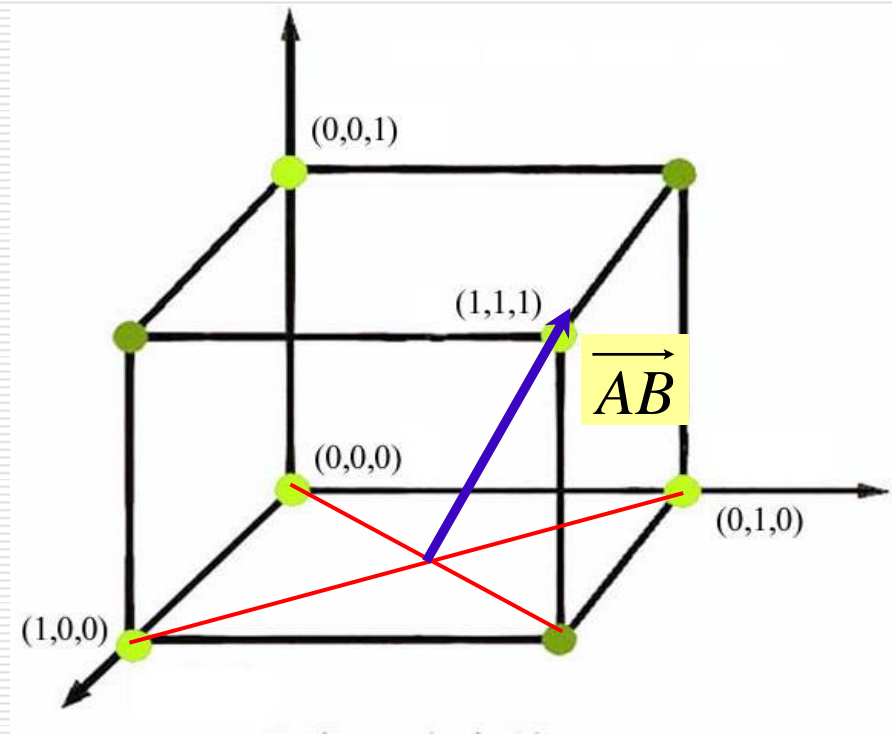
[UVW]: [112]



出现负数时，“-”号放在数字上面，
如 $[\bar{1}12]$ ；

第一节 金属的晶体结构

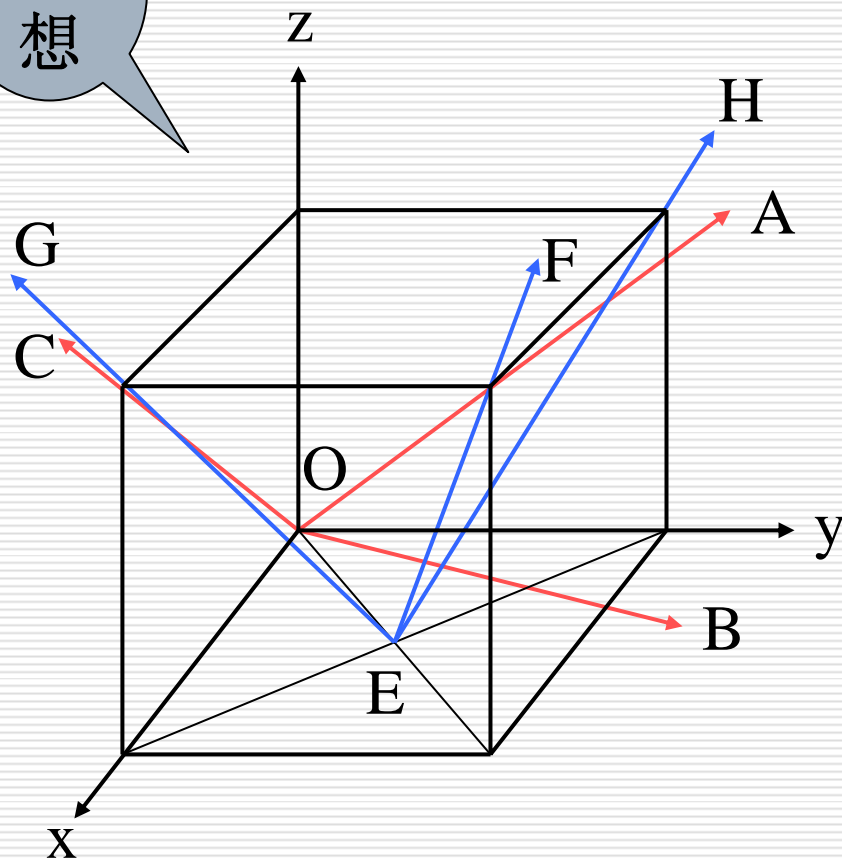
实例



第一节 金属的晶体结构

想想

晶向指数确定？



求晶向OA、OB、OC、
EF、EG、EH的晶向指
数？

例题



第一节 金属的晶体结构

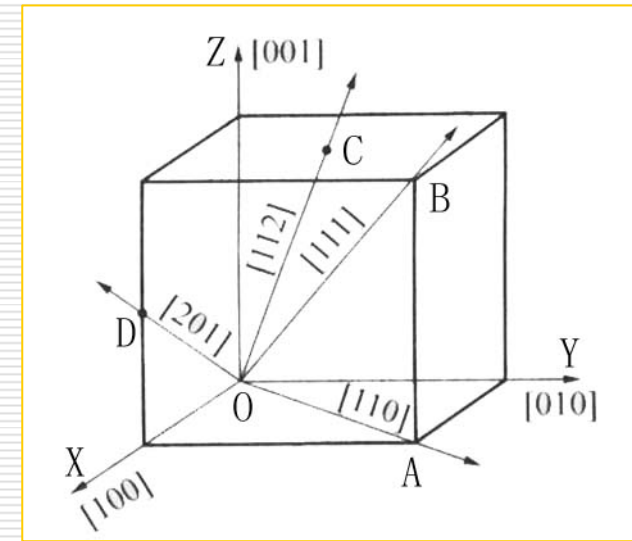
3、用晶向指数分析晶向和特殊晶向

(1) $[UVW]$ 晶向指数：表示一组平行且同向的晶向；

(2) $\langle UVW \rangle$ 晶向族指数：表示原子排列情况相同的所有晶向；

$\langle 100 \rangle$: $[100]$, $[010]$, $[001]$, $[\bar{1}00]$, $[0\bar{1}0]$, $[00\bar{1}]$

(3) 两晶向如指数的数字与顺序相同而完全异号，则互相平行且反向。



第一节 金属的晶体结构

4、晶面指数确定方法

(1) 建立坐标系

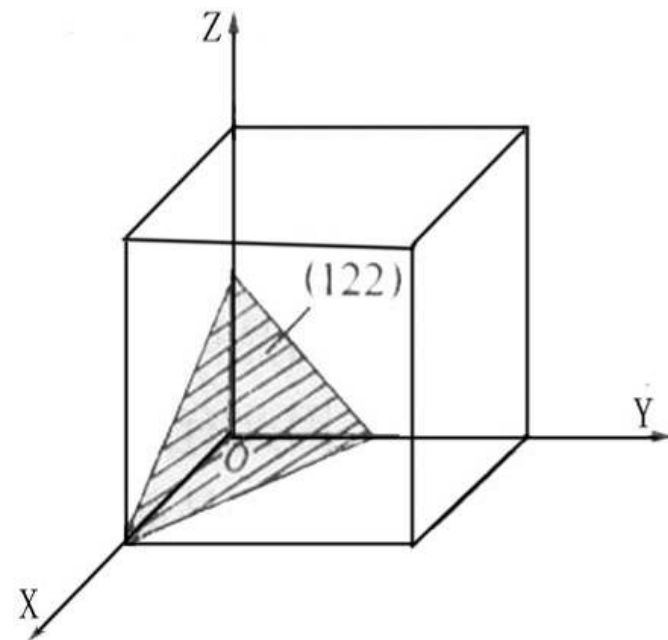
(2) 求出待定晶面在坐标上的截距
例：1, 1/2, 1/2

(3) 取截距倒数：1 2 2

(4) 化成最小整数

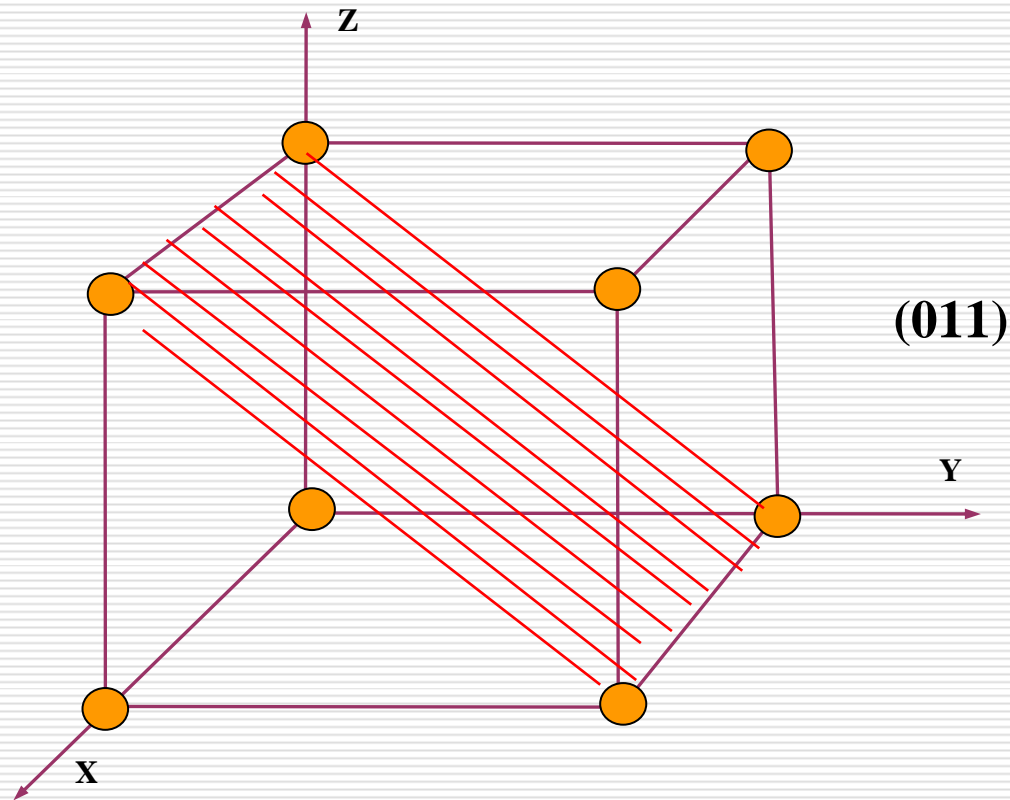
(h k l) : (1 2 2)

(5) 晶面与坐标轴平行时，截距为 ∞ ，倒数为0；截距为负数时，“-”号放在数字上面；



第一节 金属的晶体结构

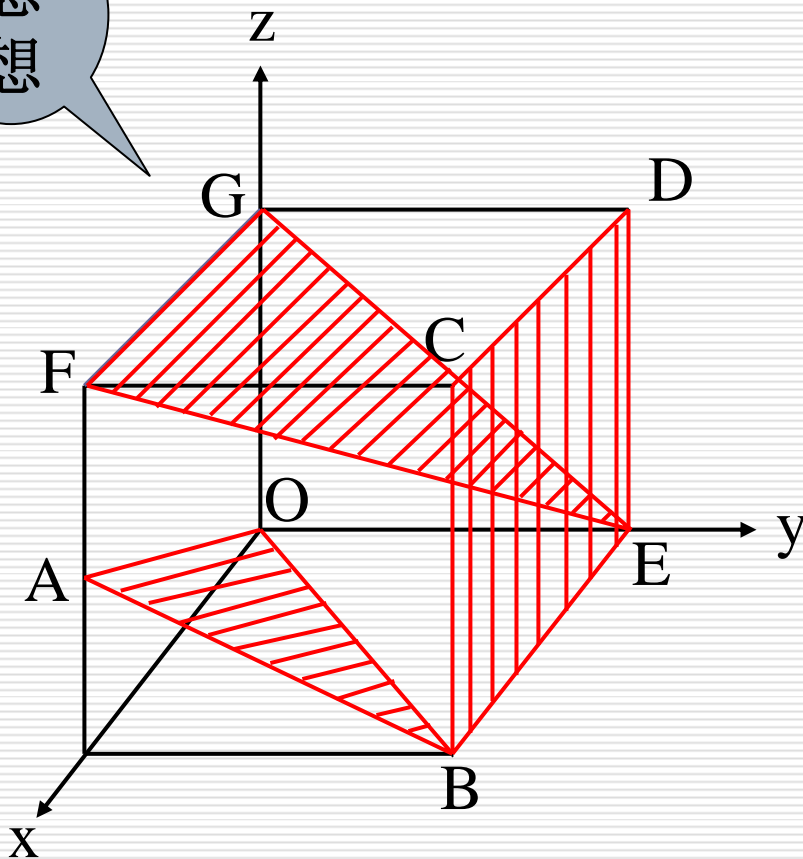
实例



第一节 金属的晶体结构

想想

晶面指数确定？



求晶面OAB、EFG、
BCDE的晶面指数？

例题



第一节 金属的晶体结构

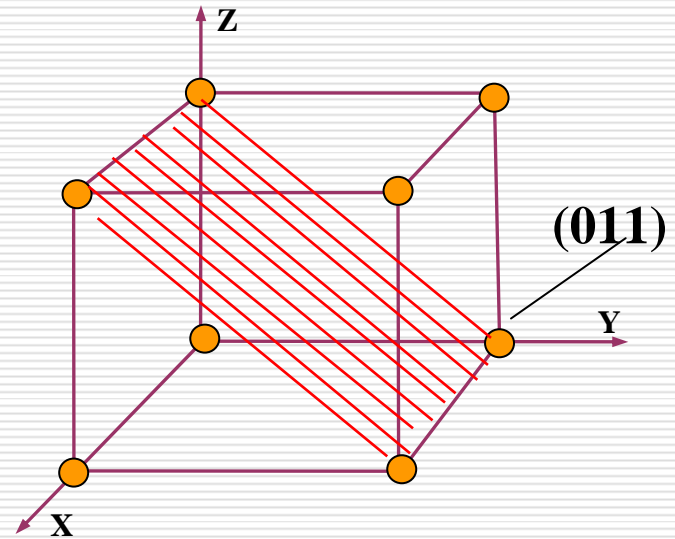
5. 用晶面指数分析晶向和特殊晶面

(1) (hkl) : 表示一组平行晶面;

(2) 低指数晶面

(001) 、 (010) 、 (100)

(110) (111)



(3) $\{hkl\}$ 晶面族指数: 表示原子排列情况相同的所有晶面; $\{100\}$: (100) , (010) , (001)

(4) 两晶面如指数的数字与顺序相同而完全异号, 则互相平行。



第一节 金属的晶体结构

6. 晶向指数和晶面指数的关系

立方晶系中，晶向指数与晶面指数性质：

1) 指数相同： $[uvw] \perp \{hkl\}$ ；

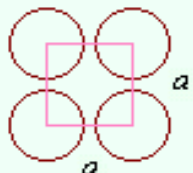
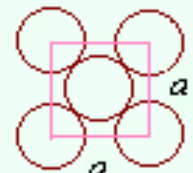
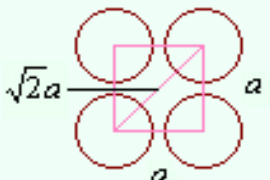
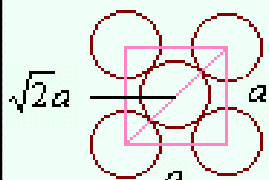
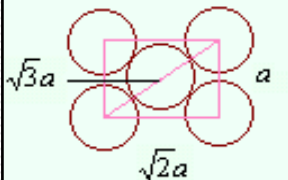
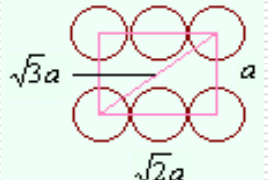
如： $[1\ 1\ 1] \perp \{1\ 1\ 1\}$

2) $hu+kv+lw=0$ 时， $[uvw] \parallel \{hkl\}$ 。



第一节 金属的晶体结构

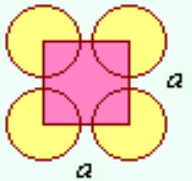
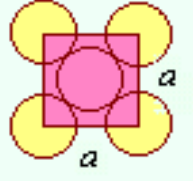
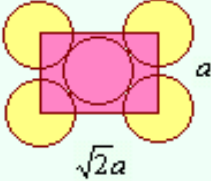
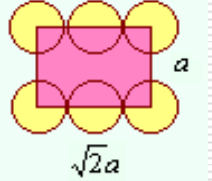
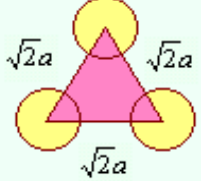
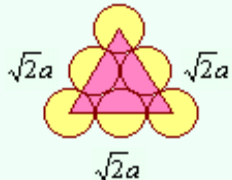
体心立方、面心立方晶格主要晶向的原子排列和密度

	体心立方晶格		面心立方晶格	
晶向指数	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)
$\langle 100 \rangle$		$\frac{2 \times \frac{1}{2}}{a} = \frac{1}{a}$		$\frac{2 \times \frac{1}{2}}{a} = \frac{1}{a}$
$\langle 110 \rangle$		$\frac{2 \times \frac{1}{2}}{\sqrt{2}a} = \frac{0.7}{a}$		$\frac{2 \times \frac{1}{2} + 1}{\sqrt{2}a} = \frac{1.4}{a}$
$\langle 111 \rangle$		$\frac{2 \times \frac{1}{2} + 1}{\sqrt{3}a} = \frac{1.16}{a}$		$\frac{2 \times \frac{1}{2}}{\sqrt{3}a} = \frac{0.58}{a}$



第一节 金属的晶体结构

体心立方、面心立方晶格主要晶面的原子排列和密度

	体心立方晶格		面心立方晶格	
晶面指数	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}		$\frac{4 \times \frac{1}{4}}{a^2} = \frac{1}{a^2}$		$\frac{4 \times \frac{1}{4} + 1}{a^2} = \frac{2}{a^2}$
{110}		$\frac{4 \times \frac{1}{4} + 1}{\sqrt{2}a^2} = \frac{1.4}{a^2}$		$\frac{4 \times \frac{1}{4} + 2 \times \frac{1}{2}}{\sqrt{2}a^2} = \frac{1.4}{a^2}$
{111}		$\frac{3 \times \frac{1}{6}}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{0.58}{a^2}$		$\frac{3 \times \frac{1}{6} + 3 \times \frac{1}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{2.3}{a^2}$

第二节 实际金属的微观结构

一. 实际金属晶体结构特点

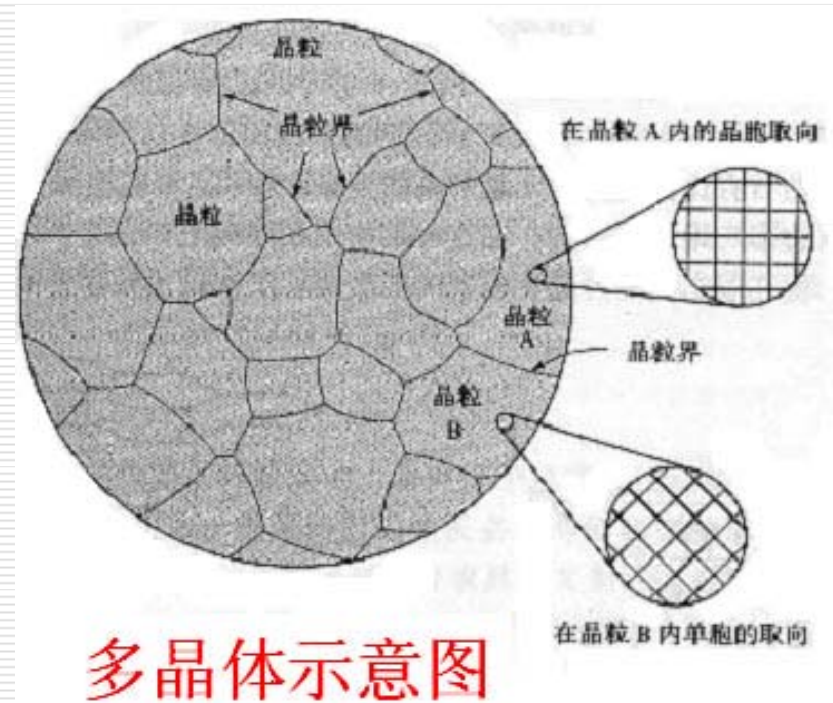
1. 多晶体

实际金属大多是多晶体组织，即由晶粒和晶界组成

晶粒——小的单晶体 ($10^{-1} \sim 10^{-3} \text{mm}$)

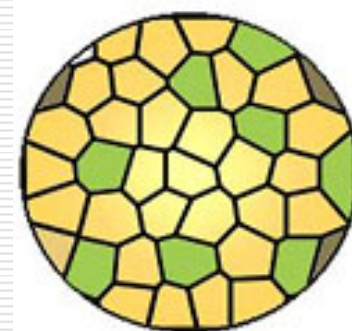
晶界——位向不同的晶粒之间的界

多晶体结构——由许多位向不同的晶粒构成



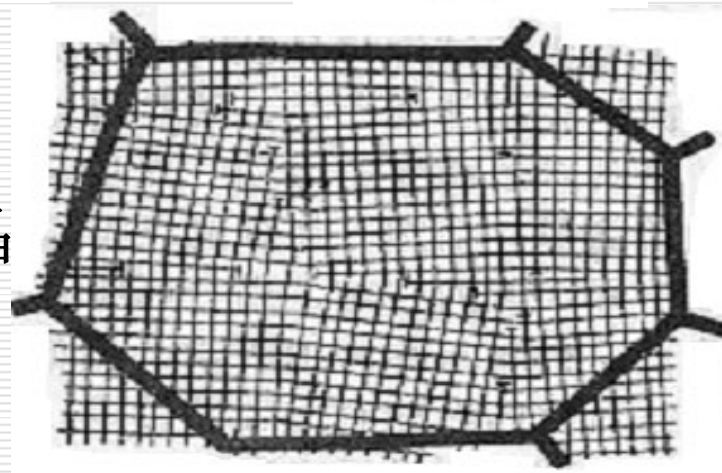
第二节 实际金属的微观结构

显微组织--用放大**50~1000**倍的光学显微镜观察，可看到各种晶粒的大小、形态和分布。



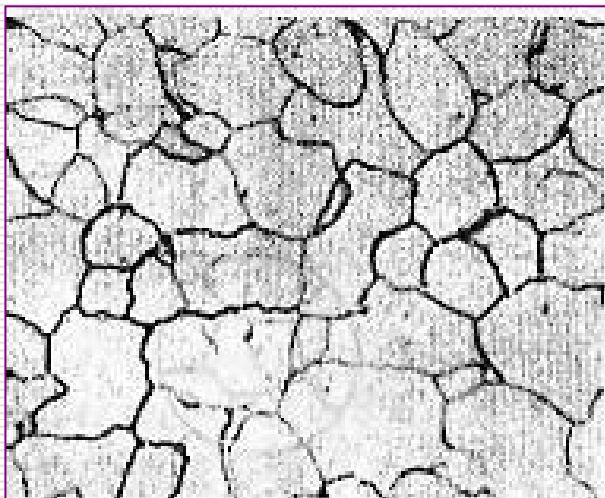
小角度晶界：相邻晶粒的位向差较小（ $< 10^\circ$ ）的晶界（包括亚晶界，即亚晶粒之间的边界）。

大角度晶界：相邻晶粒的位向差较大（ $> 10^\circ$ ）的晶界

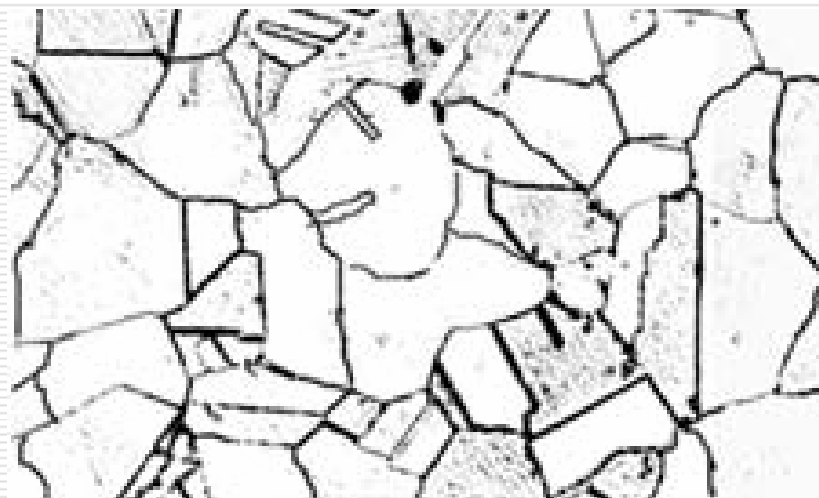


金属晶粒内的结构示意图

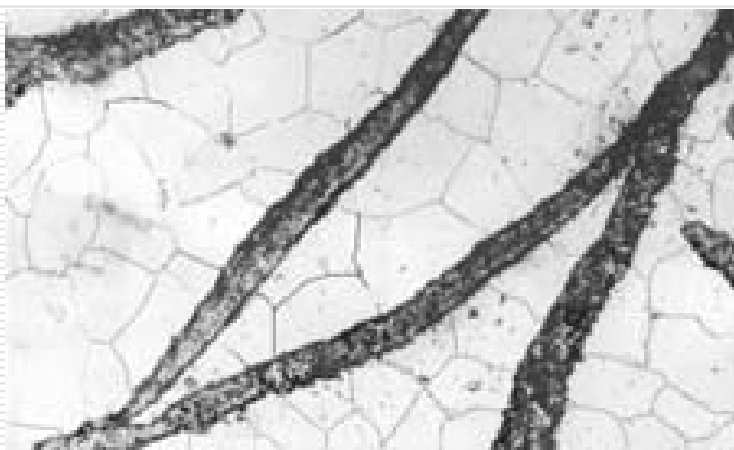




工业纯铁的显微组织



奥氏体不锈钢的显微组织



铸铁的显微组织

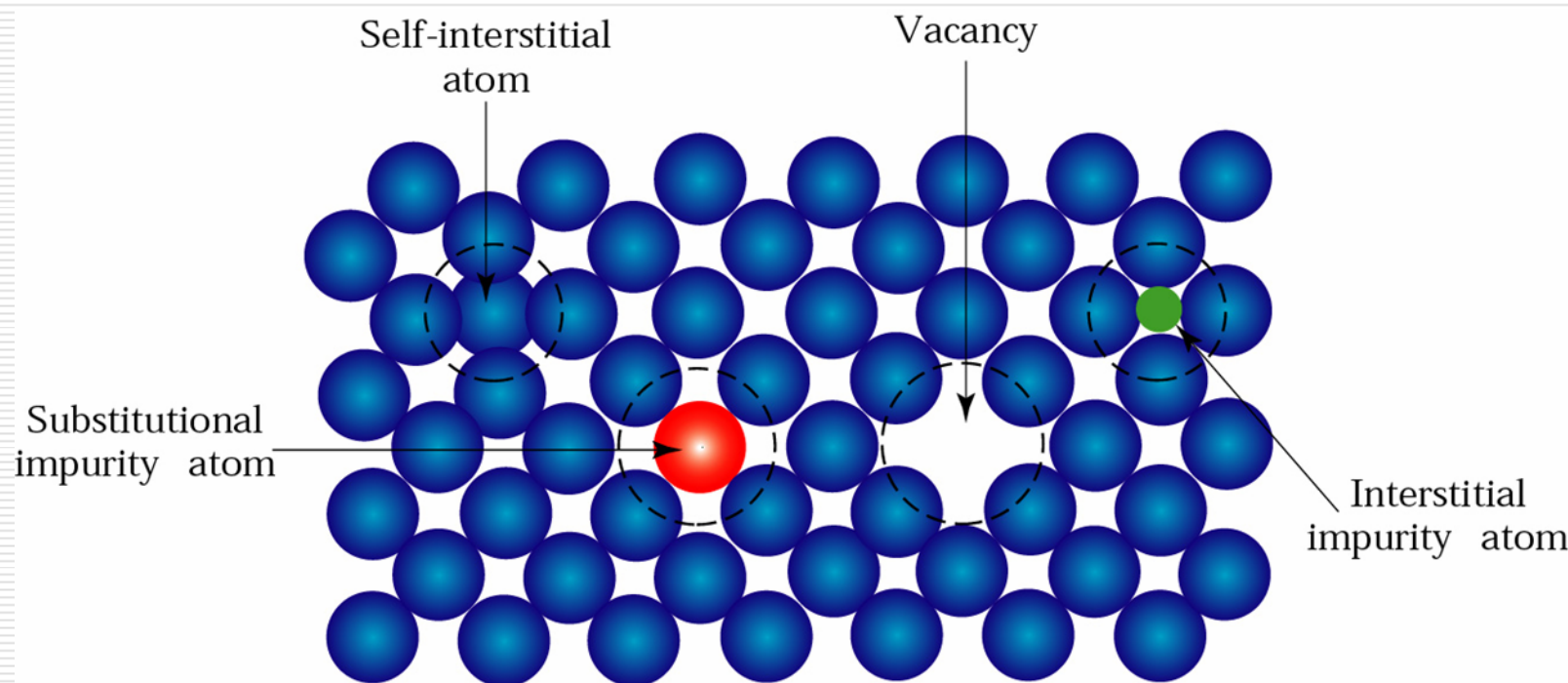
第二节 实际金属的微观结构

二. 晶体缺陷

1. 晶体缺陷的概念

点缺陷

空位、间隙原子、异类原子

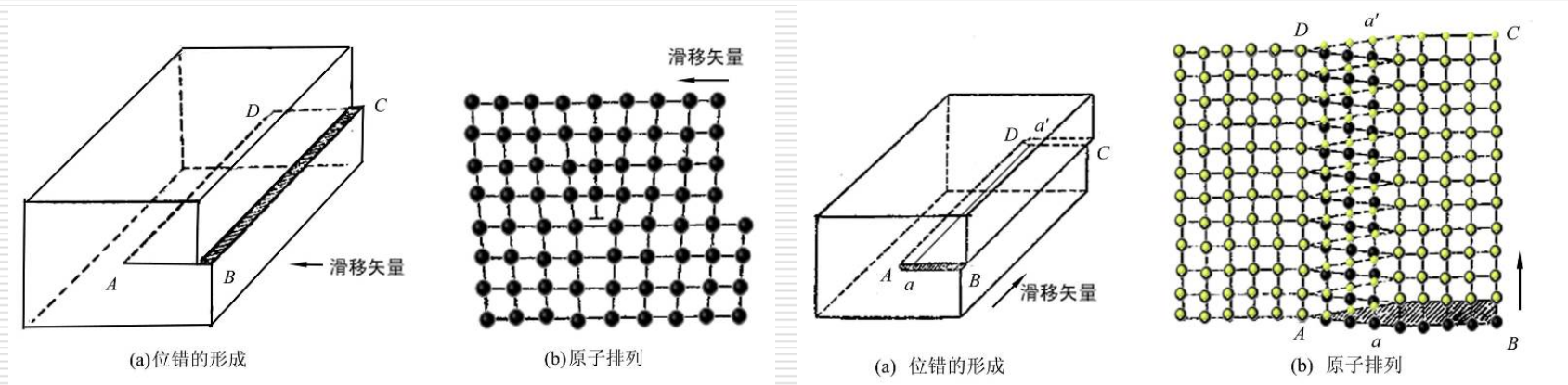


第二节 实际金属的微观结构

线缺陷

位错：晶体滑移区与未滑移区的边界线

各种类型的位错



刃型位错

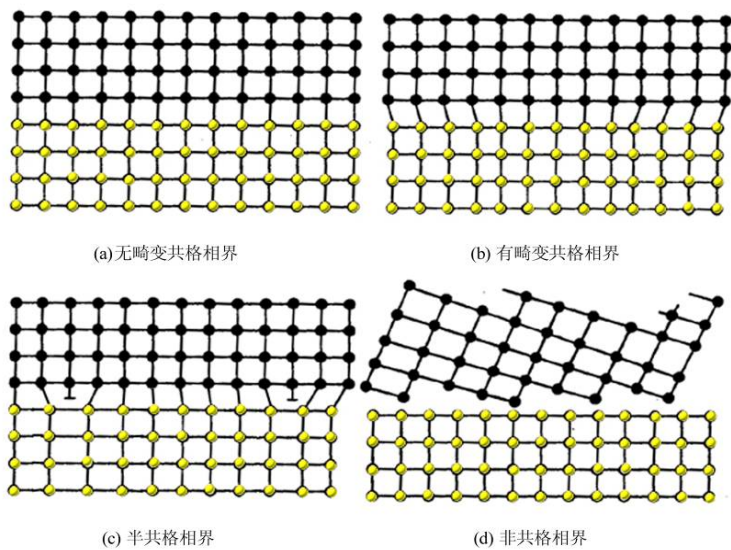
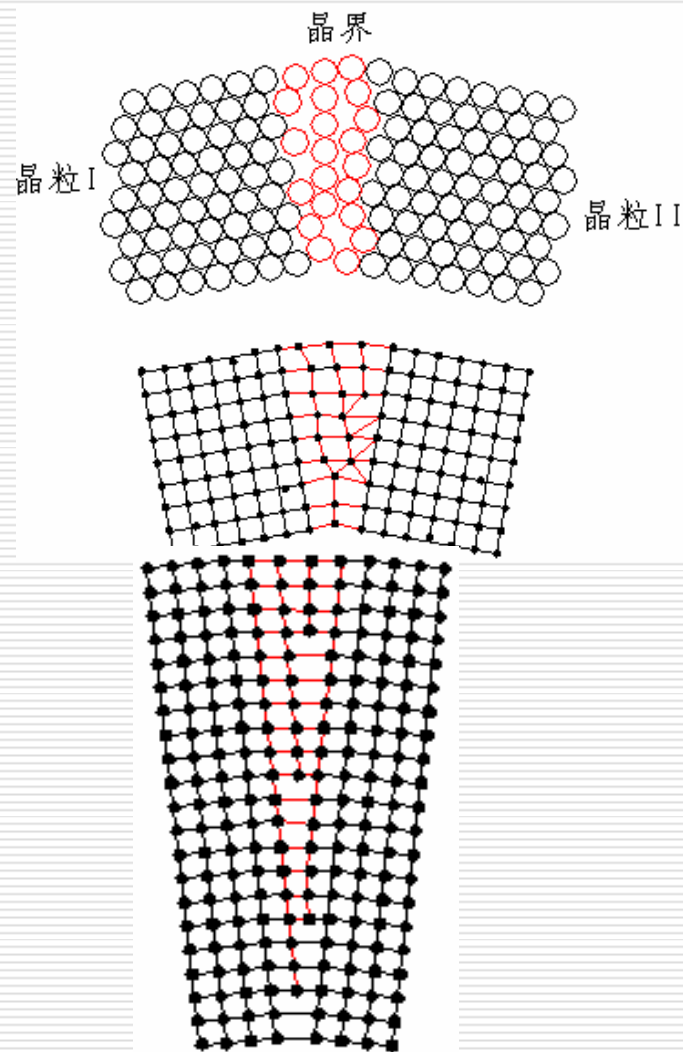
螺型位错

第二节 实际金属的微观结构

面缺陷 晶界、亚晶界、相界

晶界：晶体结构相同但位向不同的晶粒之间的界面

相界：具有不同晶体结构的两相之间的分界面



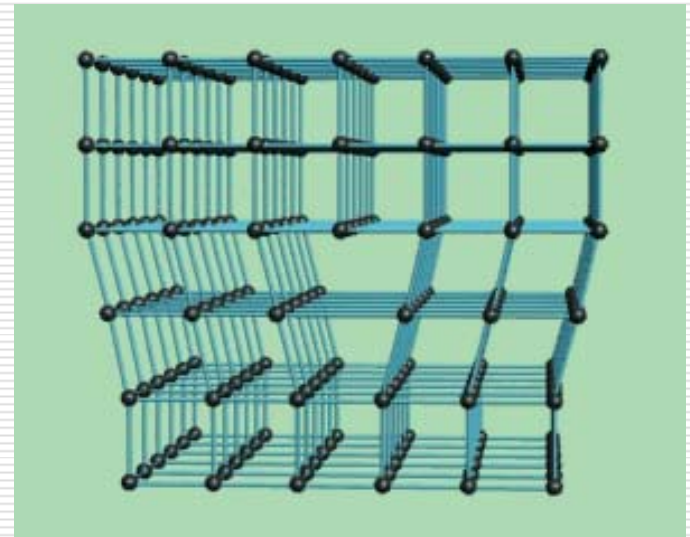
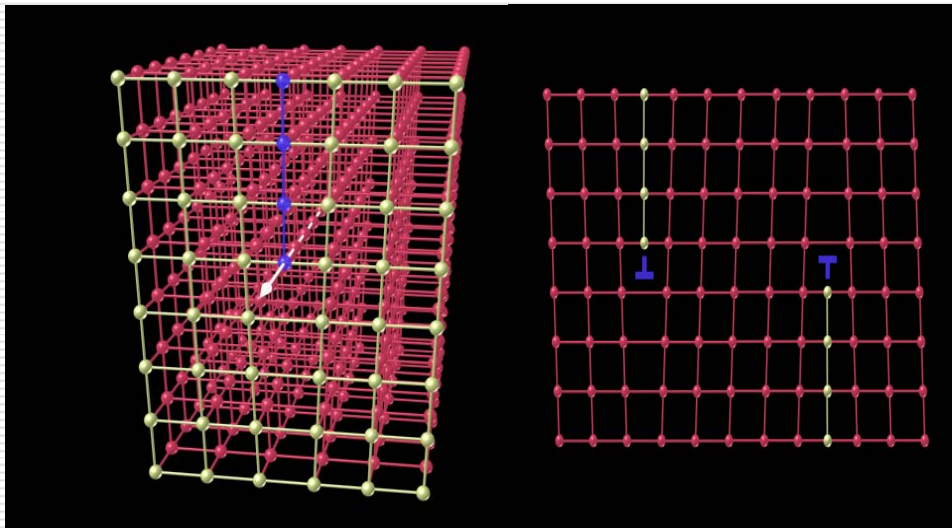
第二节 实际金属的微观结构

2. 位错的基本概念

刃型位错

运动图：

顶视图、前视图、位错线简图、
原子面简化图



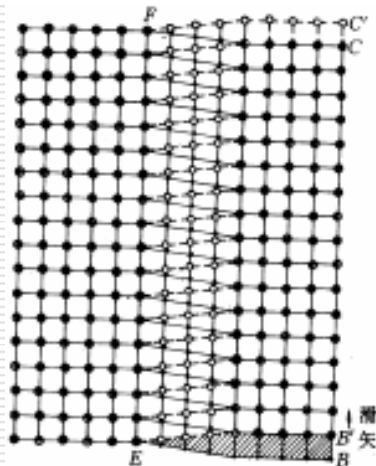
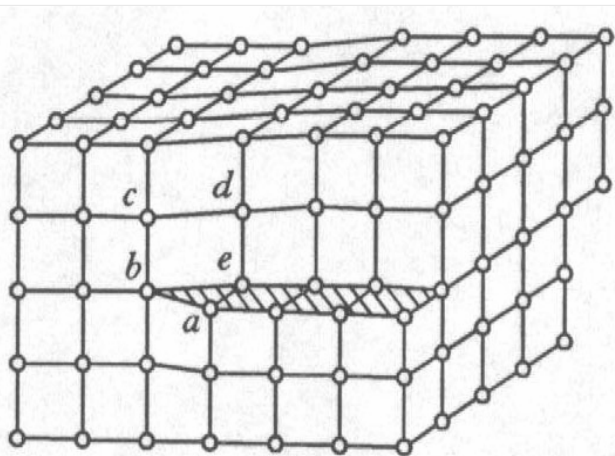
- 特征：
- 1、有一个额外半原子面
 - 2、存在晶格畸变，既有正应变，又有切应变。
 - 3、与晶体滑移方向垂直，位错线运动的方向垂直于位错线



第二节 实际金属的微观结构

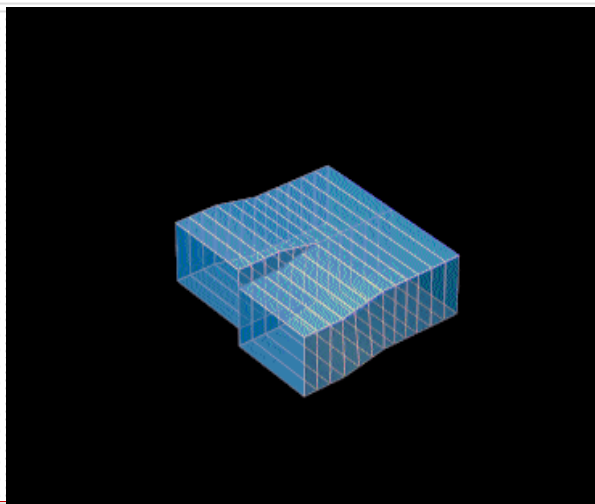
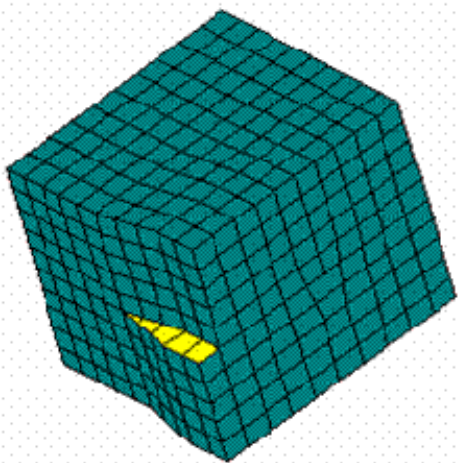
螺型位错

运动图：[简化图](#)、[顶视图](#)、[原子面简化图](#)



螺型位错的特征：

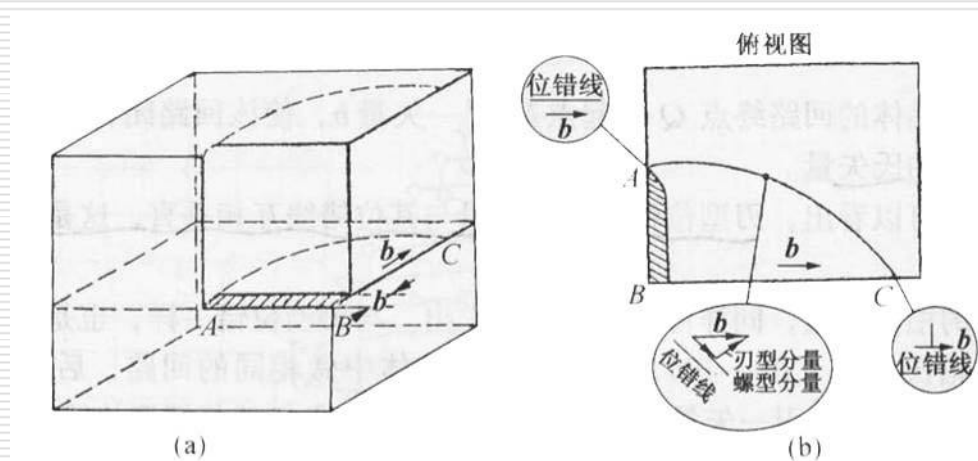
- 1、没有一个额外半原子面，位错线附近呈螺旋形排列；
- 2、晶格畸变管道，只有正应变，而无切应变。
- 3、与晶体滑移方向平行，位错线运动的方向垂直于位错线



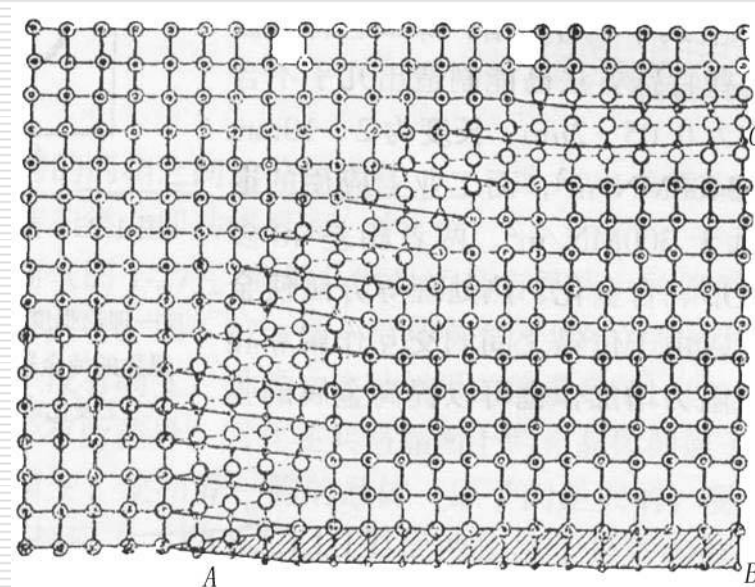
第二节 实际金属的微观结构

混合位错

柏氏矢量与位错线既不垂直也不平行——呈任意角度。



混合位错的产生



混合位错的结构

混合位错可分解为刃型位错和螺型位错



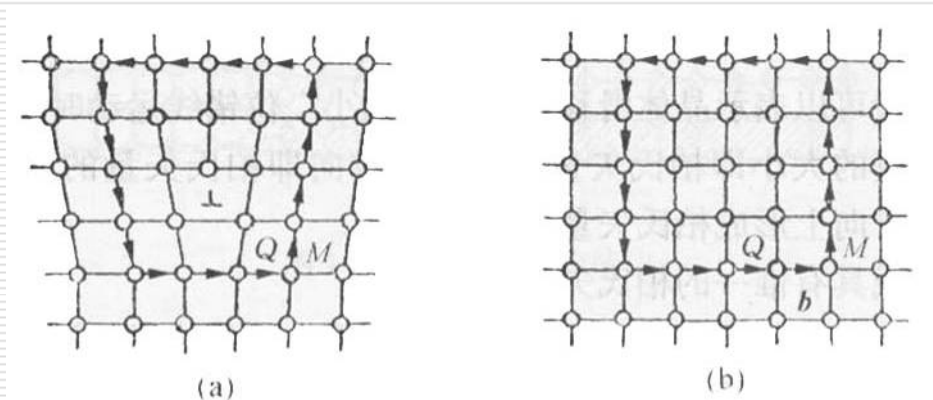
第二节 实际金属的微观结构

位错的表征

柏氏矢量：反应位错性质及晶格畸变大小和方向的量。

确定方法：

- 1、沿实际晶体中的位错线做一闭合回路——**柏氏回路**。
- 2、完整晶体中以同样的方向和步数做相同的回路——未封闭。
- 3、回路终点(Q)到起点(M)引一矢量 **b** ，使该回路闭合。 **b** 即为该位错线的**柏氏矢量**。



(a)实际晶体的柏氏回路；(b)完整晶体的相应回路

柏氏矢量与其位错线**互相垂直**——**刃型位错**

柏氏矢量与其位错线**互相平行**——**螺型位错**

第二节 实际金属的微观结构

位错密度和位错运动

位错密度:

- 1) 单位体积晶体中所包含的位错线长度;
- 2) 穿过单位截面积的位错线数目;

单位: $1/\text{m}^2$

位错运动:

平行于滑移面移动——位错滑移

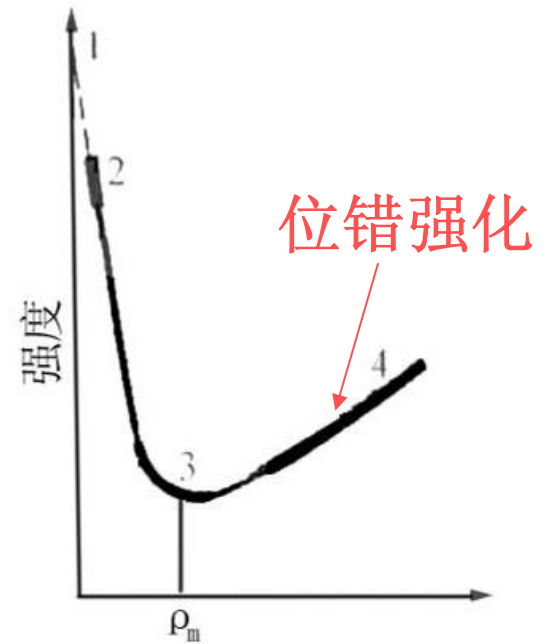
垂直于滑移面移动——位错攀移

实际晶体强度远低于理论强度

——位错易动性

位错密度对晶体强度的影响

——位错强化



晶体的塑性变形抗力与位错密度的关系

1-理论强度; 2-晶须强度; 3-未强化的纯金属强度; 4-合金化、加工硬化或热处理的合金强度

