

江西理工大学  
JIANGXI UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY



## 第二章 金属与合金的晶体结构

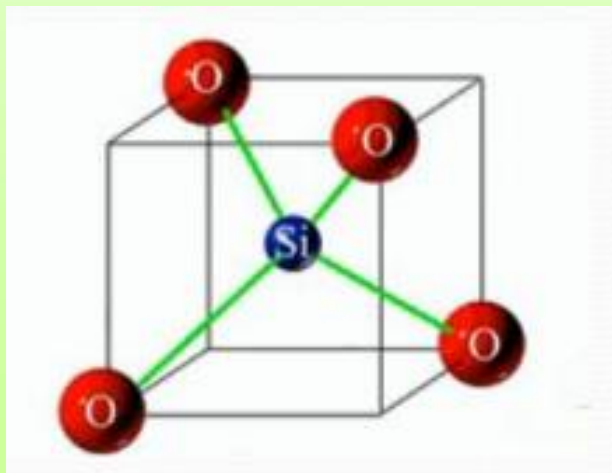
## 2.1 晶体与非晶体

非晶态



玻璃态

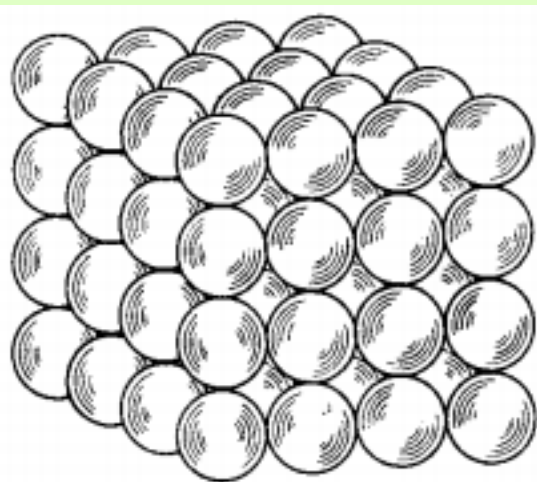
- 原子排列短程（近邻或次近邻）有序
- 长程无序



## 2.1 晶体与非晶体

### 晶体

- 原子排列长程有序
- 原子（或分子）按一定的几何规律作周期性地排列（即三维空间规则排列）；形成空间点阵。



## 2.1 晶体与非晶体

现代使用的材料绝大部分是晶态材料。晶态材料包括单晶材料、多晶材料、微晶材料和液晶材料等。我们日常使用的各种金属材料大部分是多晶材料。



四硼酸铝铍钨晶体



磷酸钛氧钾晶体



四硼酸铝钨晶体

晶体与非晶体在一定条件下可以相互转化。

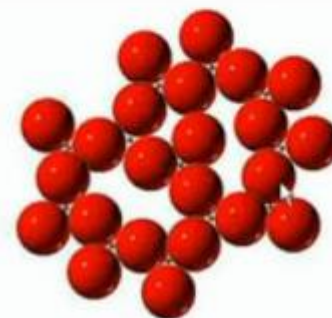
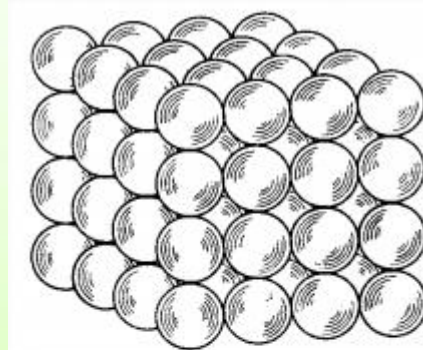
## 2.1 晶体与非晶体

### 晶体与非晶体在性能上的区别：

#### ◆（组织结构决定性能）

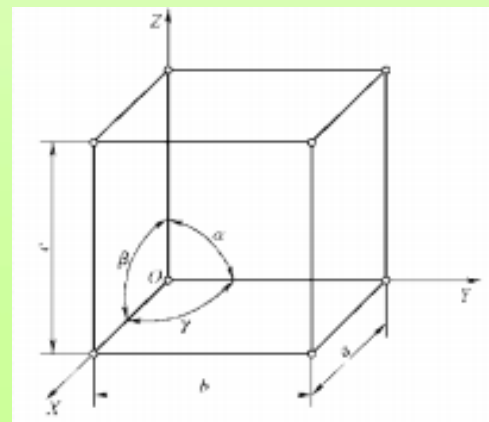
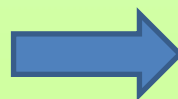
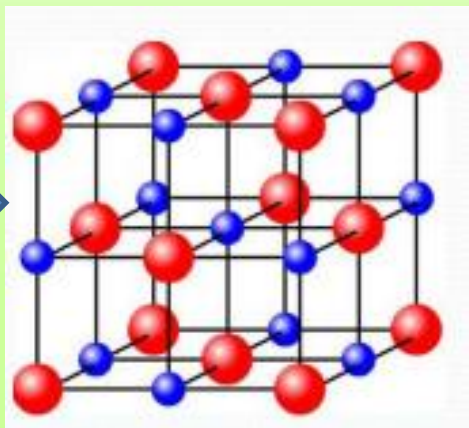
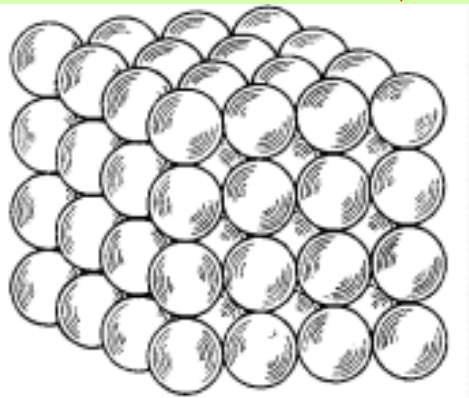
晶体具有**固定的熔点**，且在不同方向上具有不同的性能（**各向异性**）。

非晶体没有固定的熔点，在各个方向上的原子聚集密度大致相同，表现出**各向同性**。



## 2.1 晶体与非晶体

- ◆ 钢球模型：用钢球代表晶体中的原子。
- ◆ 晶格：抽象的、用于描述原子在晶体中排列形式的几何空间格架。
- ◆ 晶胞：从晶格中选取一个能够完全反应晶格特征的、最小的几何单元。
- ◆ 边长度 $a$ 、 $b$ 、 $c$ ；棱面夹角 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ ；棱边长度称为晶格常数 $A$ 。



## 2.2 金属的晶体结构

### 引言——结合键

- ◆ 原子、分子和离子之间的结合力，称为结合键
- ◆ 根据电子围绕原子的分布方式不同，结合键又分为化学键和物理键。





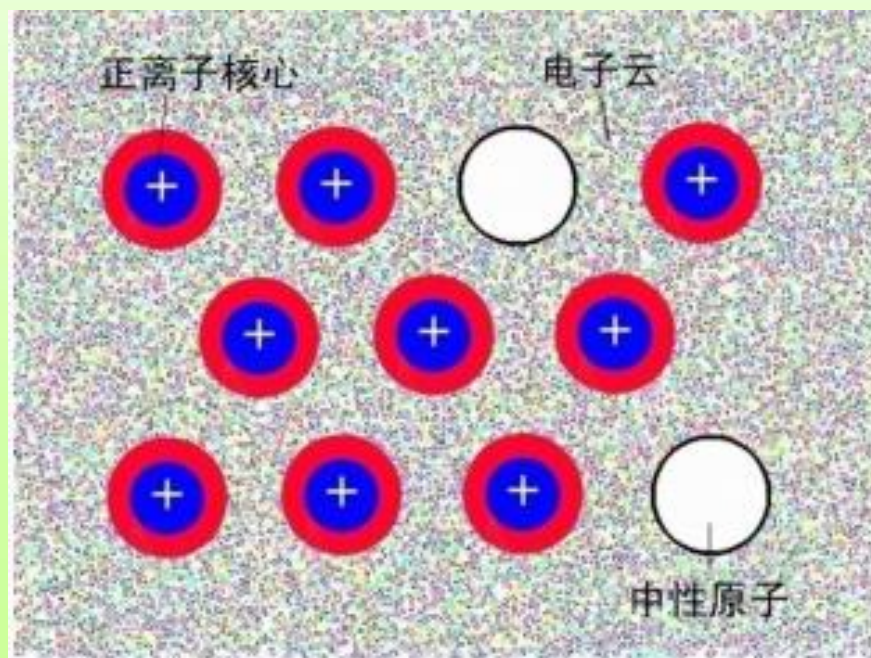
## 2.2金属的晶体结构

### 金属键

金属原子外层电子少，易失去而成为正离子。外层电子脱离原子，而称为自由电子，即电子云，为整个原子所共有。无方向性，无饱和性。

### 离子键

### 共价键





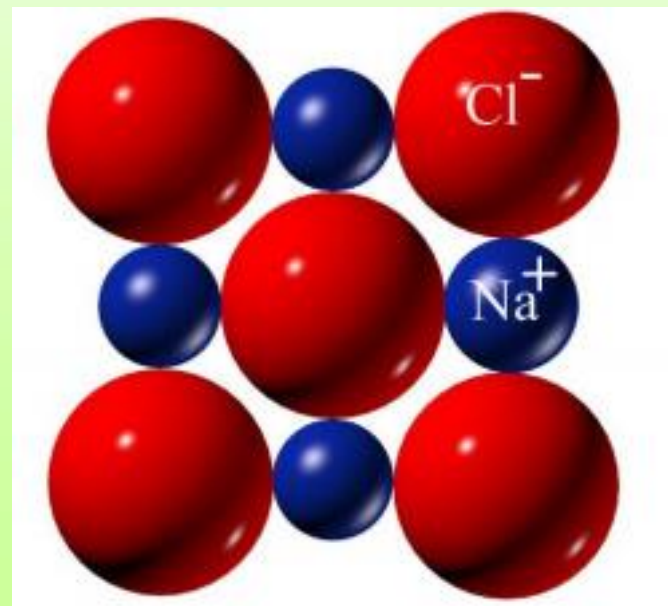
## 2.2 金属的晶体结构

金属键

离子键

共价键

通过得失价电子，靠正负离子库仑力成键。

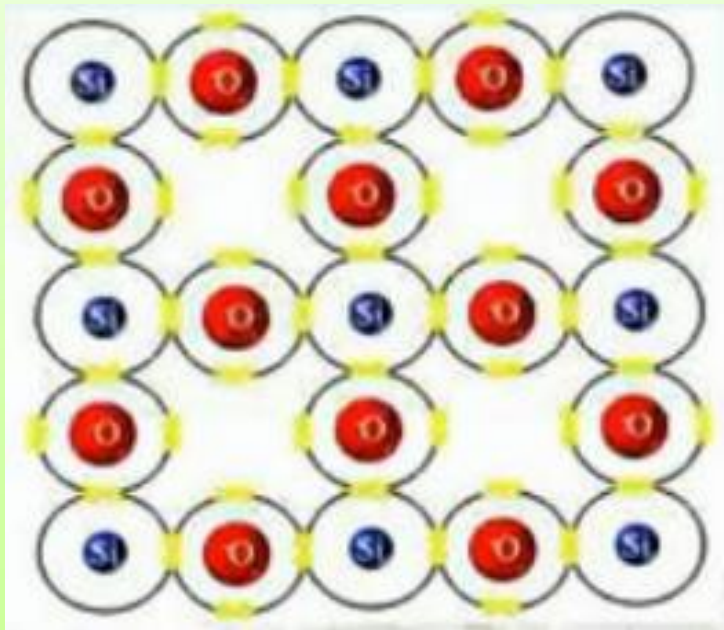


## 2.2 金属的晶体结构

金属键

离子键

共价键



靠共有电子对成键（电子局域化）

## 2.2 金属的晶体结构

### 金属键

金属特性：

- ✓ 良好的导电性；
- ✓ 良好的导热性；
- ✓ 良好的塑性；
- ✓ 正的电阻温度系数；
- ✓ 金属光泽；

### 离子键

### 共价键

电子运动局域化

非金属特性：

- ✓ 高熔点、高硬度；
- ✓ 良好的电绝缘性；
- ✓ 低塑性；

## 2.2金属中常见的晶格

化学元素周期表中，金属元素占80余种，大多数趋于紧密排列的倾向，具有比较简单的高对称性的晶体结构。

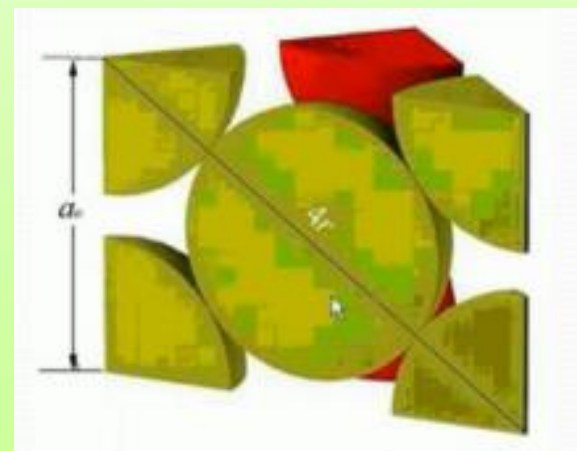
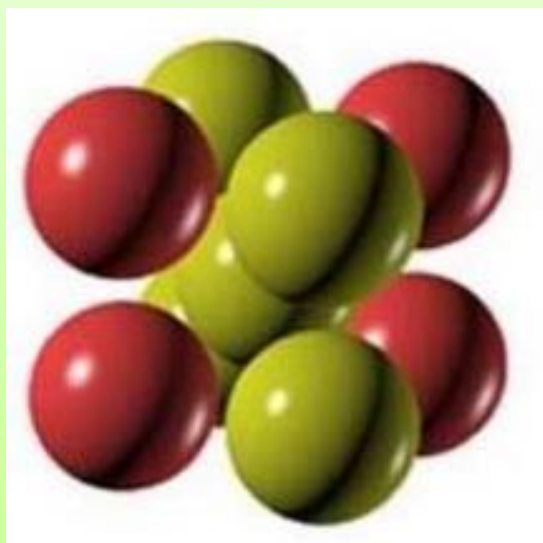
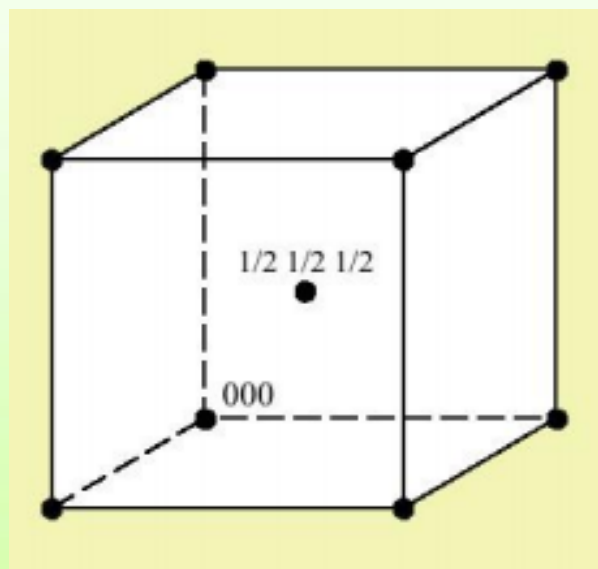


## A、体心立方金属

英文表示：BCC

常见金属是：

**$\alpha$ -Fe, Cr, W, Mo, V, Nb;**

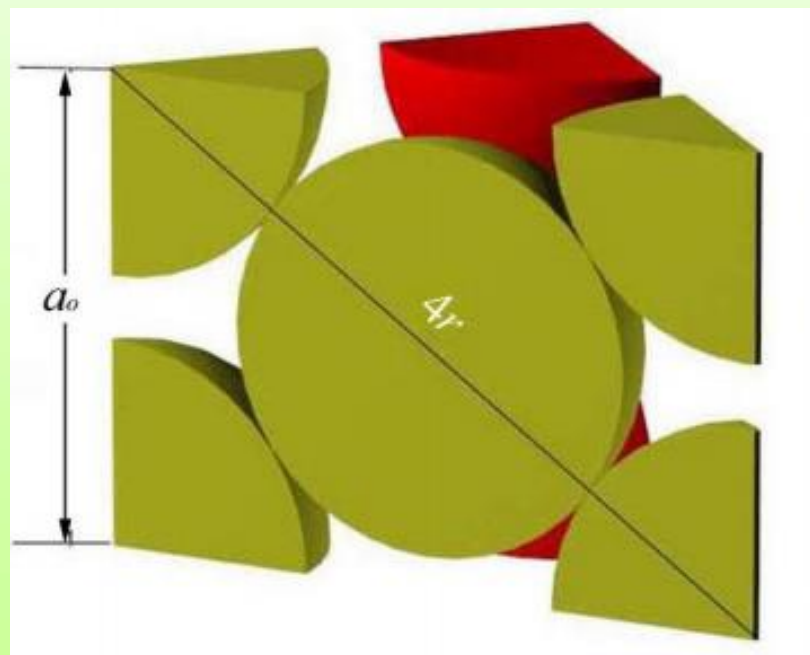


每个晶胞含有原子数：  $1 + 1/8 \times 8 = 2$

## ◆ 晶胞中的原子半径

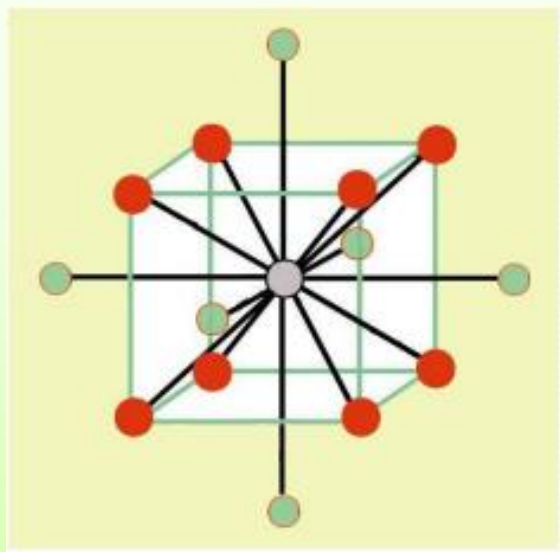
原子半径-晶胞中原子密度最大的方向上相邻原子间平衡距离的一半。

$$4r_A = \sqrt{3}a \Rightarrow r_A = \frac{\sqrt{3}}{4}a$$





## ◆ 配位数与致密度



**配位数：** 原子周围最邻近的原子数

每个原子有8个最近邻原子,有效配位数 (CN) 为8。

**致密度：** 晶胞中原子所占体积和该晶胞体积比

晶胞体积为 $a^3$ ，晶胞内含2个原子，它的致密度为

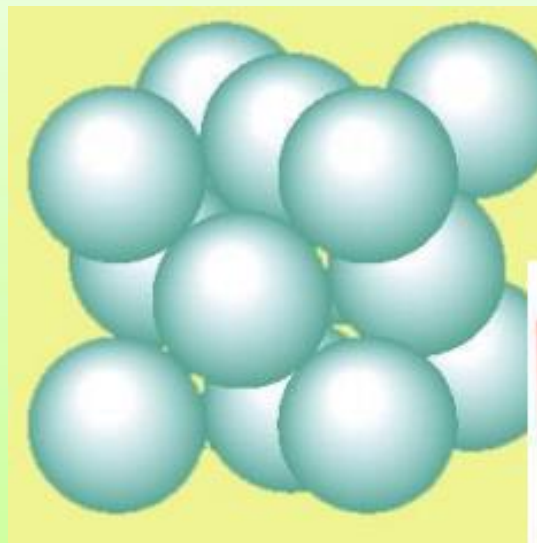
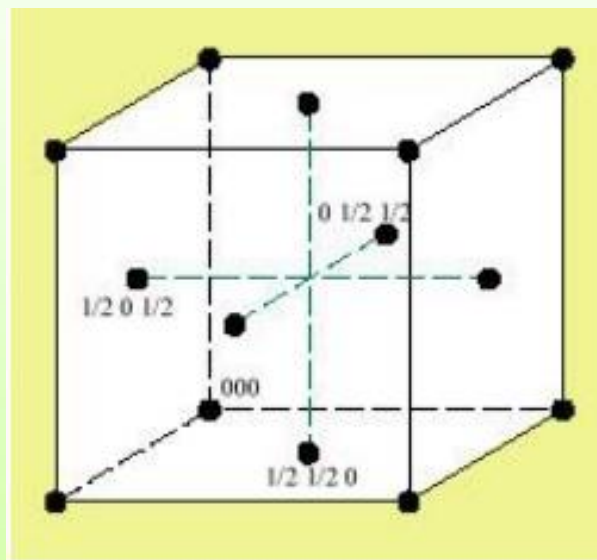
$$\begin{aligned}\eta &= \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi \left( \frac{\sqrt{3}}{4} a \right)^3}{a^3} \\ &= \frac{\sqrt{3}}{8} \pi = 0.68\end{aligned}$$

## B、面心立方金属

英文表示：FCC

常见金属是：

**$\gamma$ -Fe, Al, Cu, Ni, Au;**

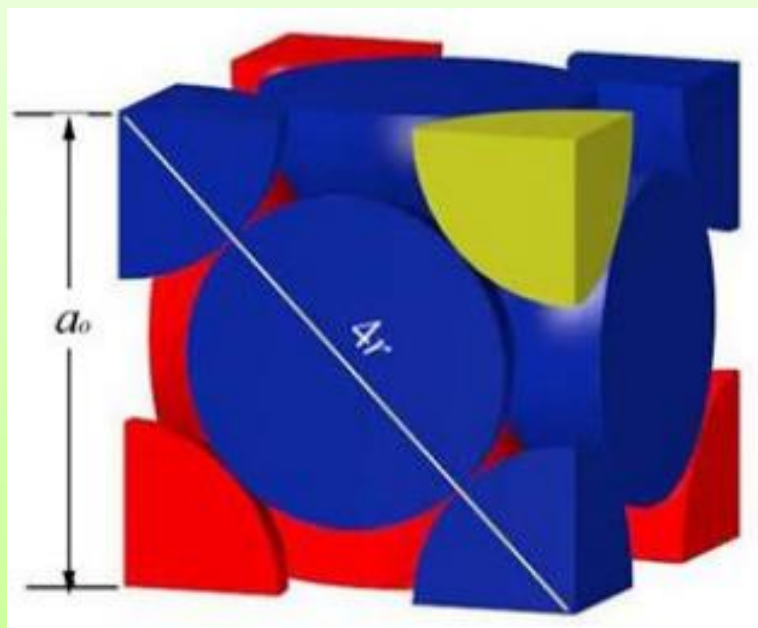


每个晶胞含有原子数：  
 $6 \times 1/2 + 8 \times 1/8 = 4$

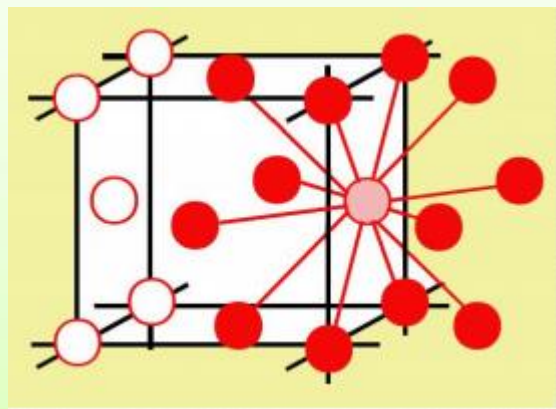
## ◆ 晶胞中的原子半径

原子半径-晶胞中原子密度最大的方向上相邻原子间平衡距离的一半。

$$R = \frac{\sqrt{2}a}{4}$$



## ◆ 配位数与致密度



**配位数：** 原子周围最邻近的原子数

每个原子有12个最近邻原子,有效配位数 (CN) 为12。

**致密度：** 晶胞中原子所占体积和该晶胞体积比

晶胞体积为 $a^3$ ，晶胞内含4个原子，它的致密度为

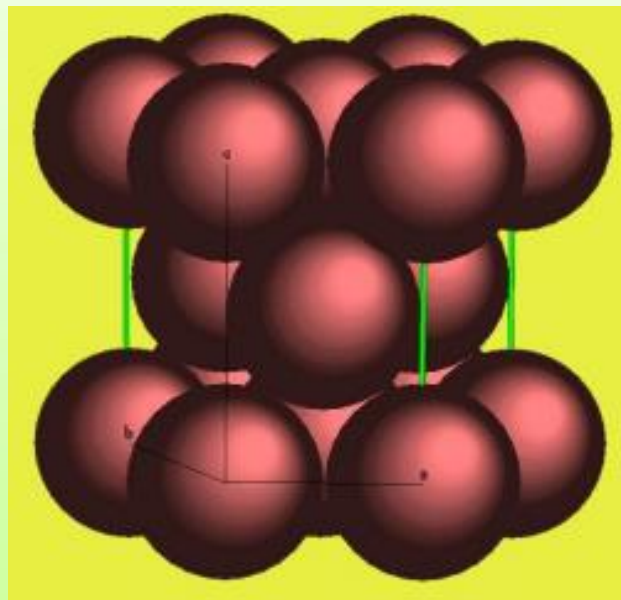
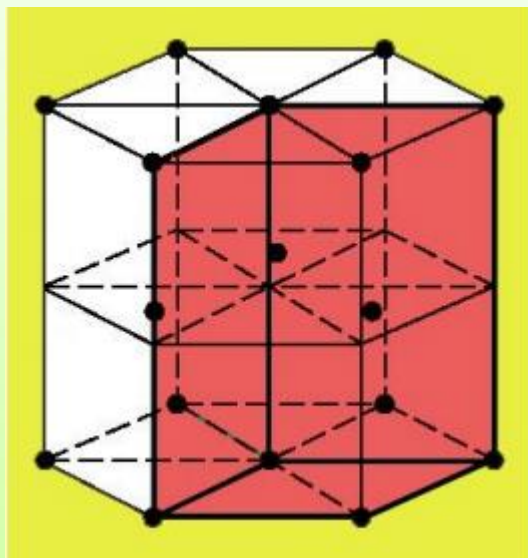
$$\eta = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi \left( \frac{\sqrt{2}}{4} a \right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{2}}{6} \pi = 0.74$$

## C、密排六方金属

英文表示：HCP

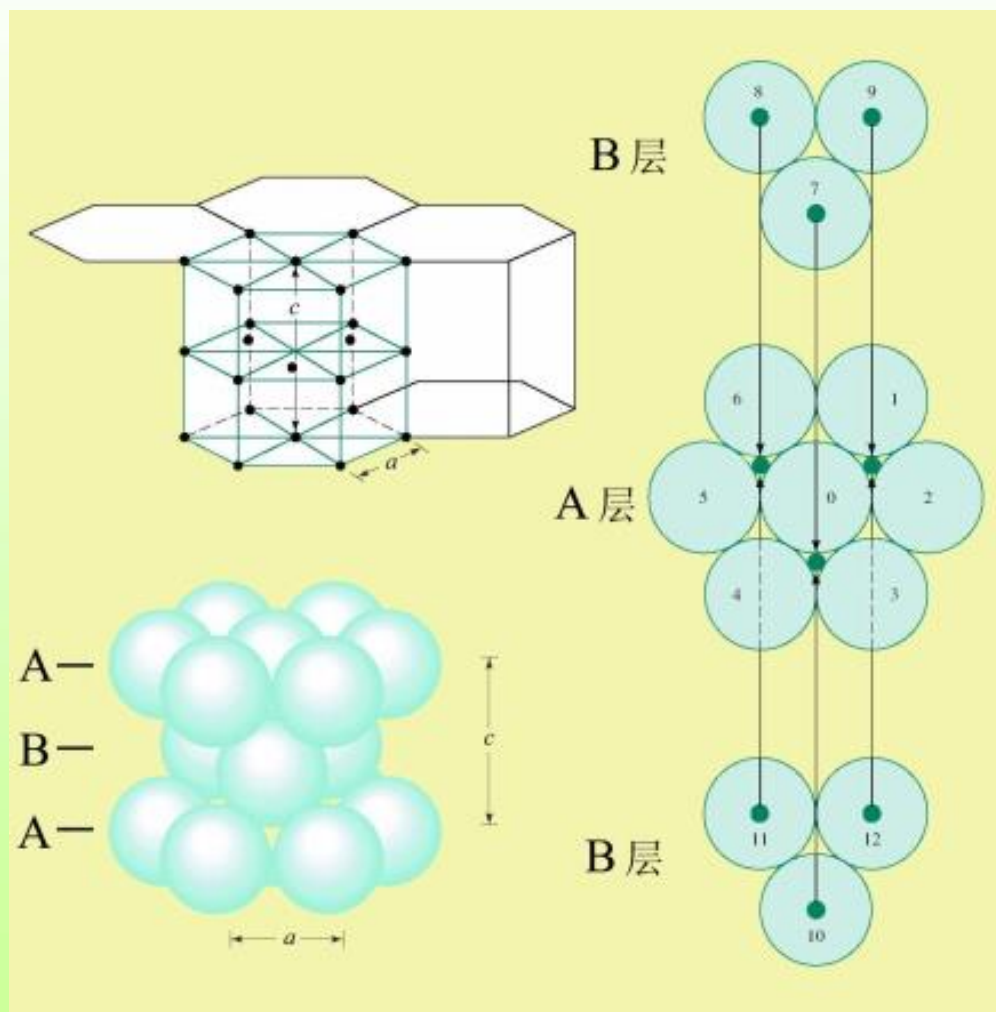
常见金属是：

$\alpha$ -Ti, Be, Zn, Mg



每个晶胞含有原子数：  
 $3+2\times 1/2+12\times 1/6=6$

原子半径  $R=a/2$



若每层的原子球都相切，则它的堆垛密度和配位数与面心立方的完全一样，即致密度为0.74，配位数为12。





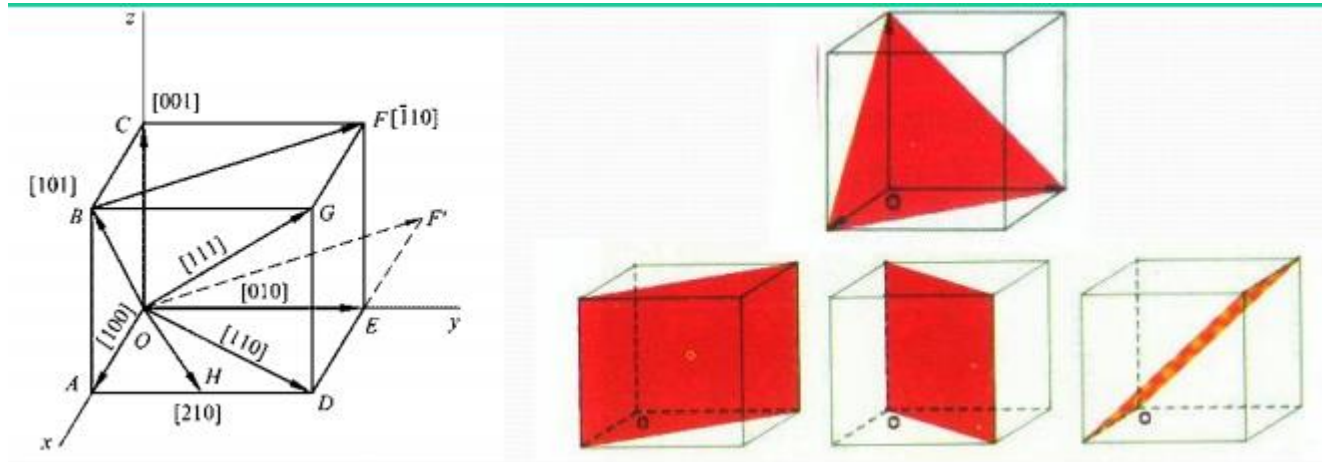
晶体结构	原子数	配位数	致密度	原子密排面	原子密排方向
体心立方	2	8	0.68	(110)	[111]
面心立方	4	12	0.74	(111)	[110]
密排六方	6	12	0.74	(0001)	[1120]

# 晶向指数与晶面指数

晶胞的几何特征：晶格常数、晶面、晶向

晶向：晶体中任意两个原子连线所指的方向，表示晶体原子的特定排列方向

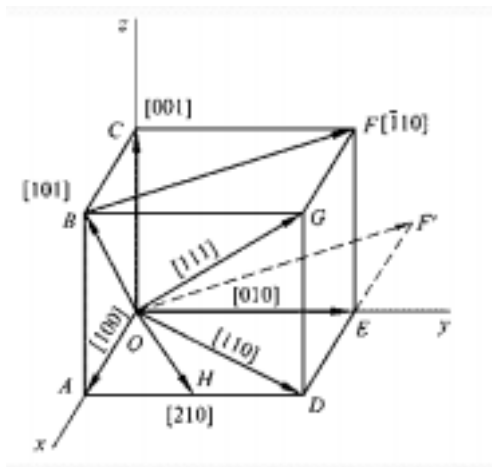
晶面：一系列原子构成的平面，晶体原子堆垛的质心平面。



如何描述晶向？

晶向指数：

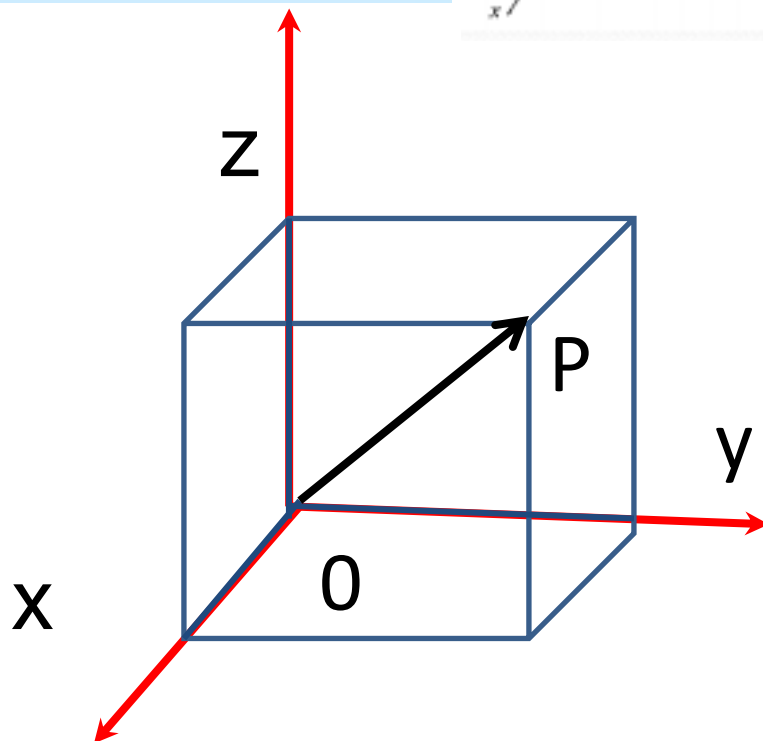
用  $r = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$  表示。用  $[\mu\nu w]$  表示晶向指数。



晶向指数的确定方法：

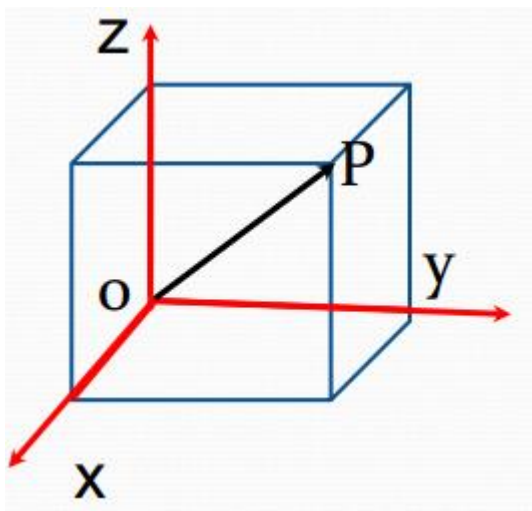
1) 设坐标：

在晶格中设坐标轴x、y、z, 但坐标轴的原点0应为待定晶向的矢量箭尾



## 2) 求坐标值:

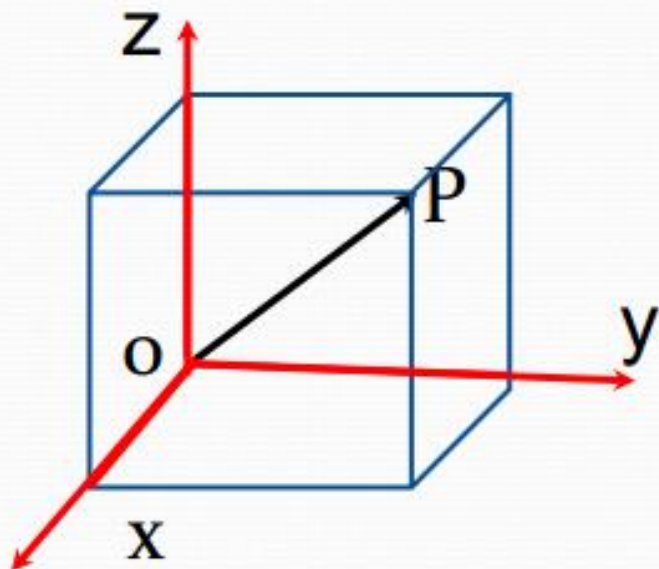
以晶格常数为度量单位，在待定晶向矢量上任选一点，并求出该点在X、Y、Z轴上的坐标值。



**OP:  $x=1, y=1, z=1$**

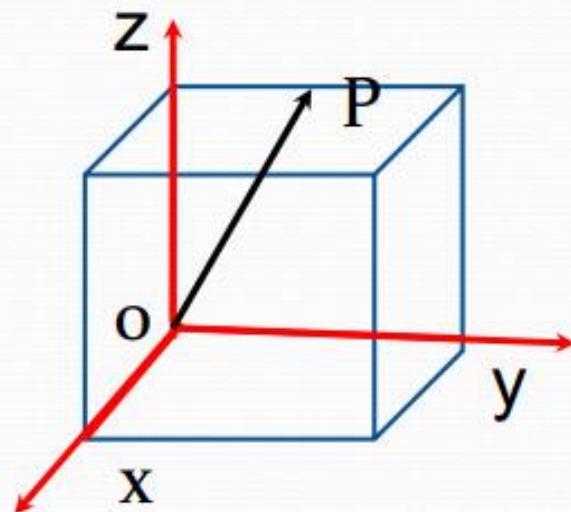
### 3) 化整数、列括号:

将3个坐标值化为最小整数 $u, v, w$ , 如果某数为负值, 在其上方标负号, 并以中括号标注。



OP:  $x=1, y=1, z=1$

$[111]$



OP:  $x=0, y=1/2, z=1, [012]$

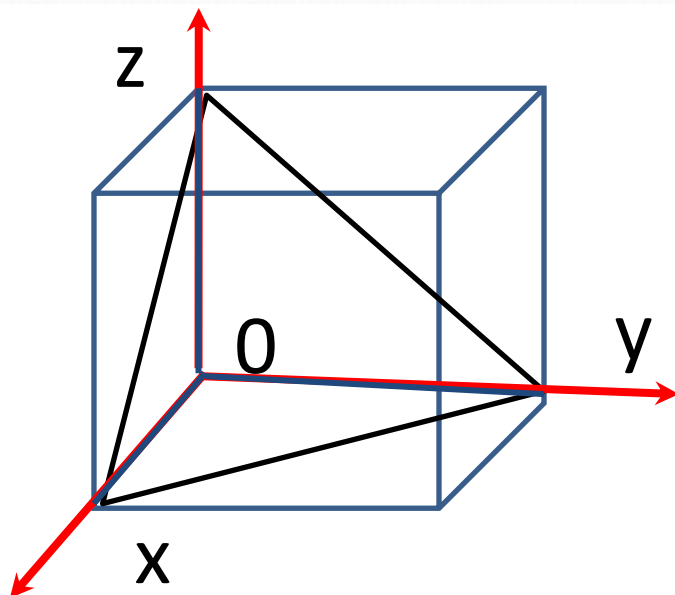
如何描述晶面？

晶面指数：

晶面指数的确定方法：

1) 确定坐标系：

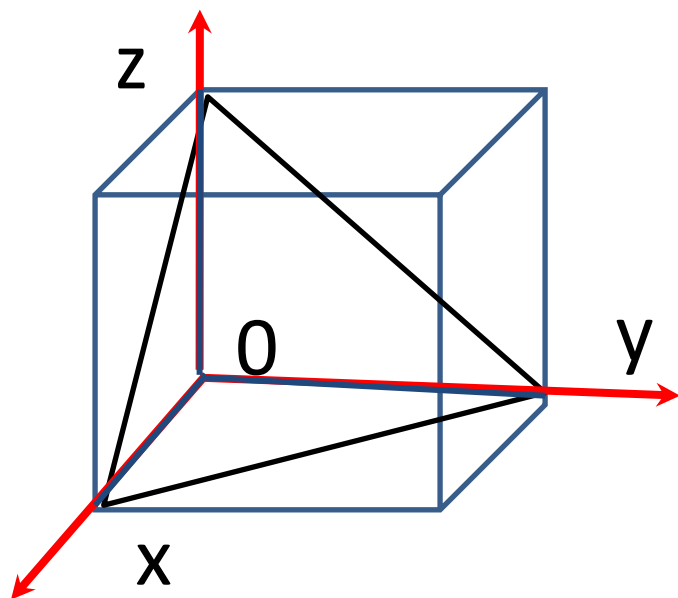
以晶胞的某一阵点为0为原点，过原点的晶轴为坐标轴 $x$ 、 $y$ 、 $z$ ，以晶胞的点阵矢量作为坐标轴的长度单位。（原点应位于待定晶面之外，以免出现零截距）



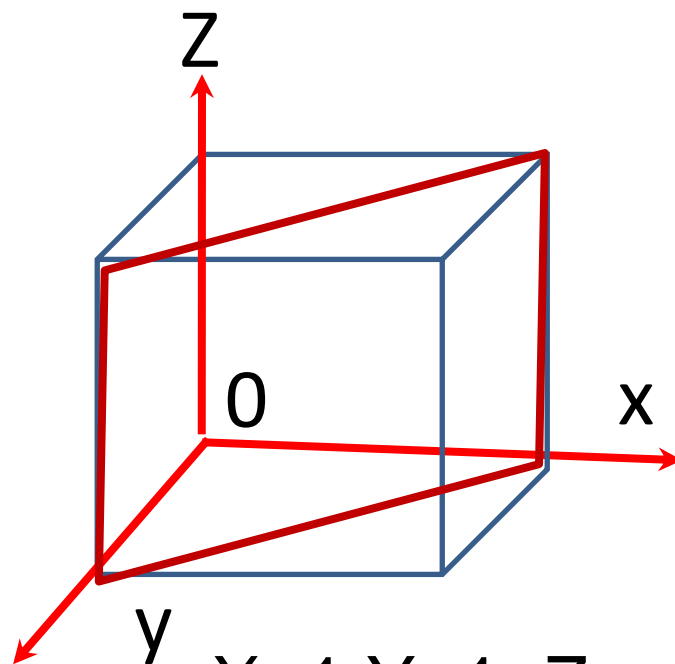


## 2) 求截距:

求得待定晶面在三个晶轴上的截距，若该晶面与某个轴平行，则在此轴上截距为无穷大；若该晶面与某轴负方向相截，则在此轴上截距为一负值



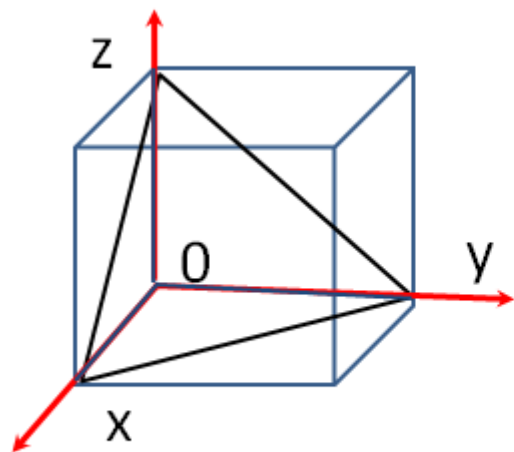
$$X=1, Y=1, Z=1$$



$$X=1, Y=1, Z=\infty$$

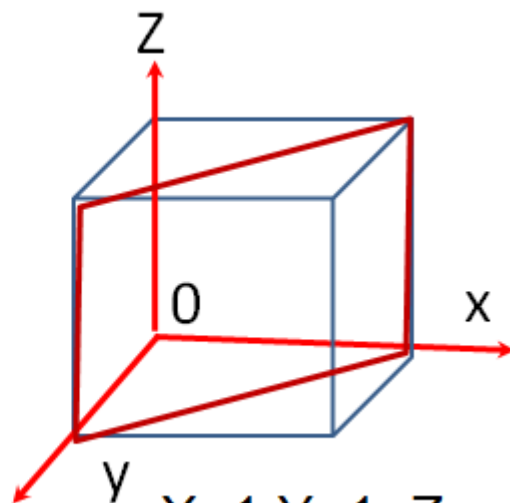
3) 取倒数，化整数，列括号：

取各截距的倒数，并化为互质数，加上园括号，既表示该晶面指数，(hkl)



$$X=1, Y=1, Z=1$$

(111)



$$X=1, Y=1, Z=\infty$$

(110)