**晶体**—原子（原子团或分子）在空间有规则的周期性重复排列的固体，一般情况下，金属、大多数陶瓷、少数高分子材料为晶体。

**晶体与非晶体性能的主要差别：**有确定熔点、单晶体各向异性、多晶体各向同性//无确定熔点、各向同性。

**几何异构：**双烯类单体定向聚合时，可得到有规立构聚合物。但由于含有双键，且双键不能旋转，从而每一双就可能有顺式、反式，两种异构体之分，称为几何异构。

**旋光异构体**：由烯烴单体合成的高聚物 ，在其结构单元中有一不对称C原子，故存在，两种旋光异构单元 ，有三种排列方式

**一次键（又称化学键）**：通过电子的转移或共享使原子结合的结合键．结合力较强。

**二次键**：通过偶极吸引力使原子结合的结合键．结合力较弱．

**离子键**：通过正负离子间相互吸引力使原子结合的结合键。**特点**：以离子而不是以原子为结合单元，要求正负离子相间排列，且无方 向性，无饱和性。**性质：**熔点和硬度均较高，良好电绝缘体

**离子晶体的性质**：晶体的熔点高，硬度大，韧性差，导电性能差，膨胀系数小。大多数离子晶体对可见光是透明的

**共价键**— 通过共用电子对使原子结合的结合键。**特点**：饱和性 配位数较小 ，方向性（s电子除外）**性质**：熔点高、质硬脆、导电能力差

**极性键**:共用电子对偏于某成键原子 **非极性键**: 共用电子对位于两成键原子中间

**金属键**—— 通过正离子与自由电子之间相互吸引力使原子结合的结合键．**特点**：金属键无方向性和饱和性。

**范德瓦尔斯键**—具有稳定电子结构的原子或分子通过电偶极矩相互 吸引而结合的结合键。**分子晶体的性质**：分子晶体是由分子组成，可以是极性分子，也可以是非极性分子。分子晶体具有较低的熔点、沸点，硬度小，易挥发，在常温下呈气态或液态。分子晶体在固态或熔融状态时都不导电，部分物质水溶液导电。

**氢键**—含氢的分子具有极性，与另一个具有较强电负性的原子(N, O, F)通过氢离子而结合的结合键，具有饱和性。

**氢桥**——氢原子中唯一的电子被其它原子所共有（共价键结合），裸露原子核将与近邻分子的负端相互吸引。

**（氢键）分子晶体的性质**：分子间有氢键时物质的熔沸点都升高，分子内有氢键时熔沸点降低。**性质**：分子间有氢键时物质的熔沸点都升高，分子内有氢键时熔沸点降低。

**混合键：**A、B原子间的电负性差越大，所形成的 AB化合物中离子键结合的比例越高

**结合键的本质**— 结合键的强弱反映了原子或分子间结合时互作 用能降低的程度．**对物理性能的影响** 1) 熔点：共价键、离子键的最高，高分子材料的最低． 2) 密度：金属键的最高，共价键、离子键的较低，高 分子材料的最低． 3) 导电导热性：金属键最好，共价键、离子键最差。**对力学性能的影响**1) 强度：结合键强，则强度也高，但还受组织的影响． 2) 塑韧性：金属键最好，共价键、离子键最低. 3) 弹性模量：共价键、离子键最高，金属键次之，二次键最低。**离子晶体的晶格能**：离子晶体的晶格能与离子电价乘积成正比，与阴阳离子半径和成反比。离子晶体的晶格能越大，内能越小，晶体越稳定，破坏晶体结构越难。晶格能大的晶体熔点高、硬度大、溶解难。

**缺陷**：晶体结构中质点排列的某种不规则性或不完善性，又称晶格缺陷，表现为晶体结构中局部范围内质点的排布偏离周期性重复的空间格子规律而出现错乱的现象，或晶体周期性势场的畸变。**缺陷分类**：按照缺陷的几何形态分类分为:点缺陷、线缺陷、面缺陷、体缺陷等 按照缺陷的形成原因分类分为:热缺陷、杂质缺陷、非化学计量缺陷等。

**点缺陷：**点缺陷是最简单的晶体缺陷,它是在结点上或邻近的微观区域内偏离晶体结构的正常排列的一种缺陷**。五种类型：**肖托基空位、弗兰克缺陷、异类间隙原子、小置换原子、大置换原子。**点缺陷运动形式：**1.间隙原子(实体运动) 2.空位(虚拟运动)周边原子运动的结果.3、置换原子(实体运动)需要借助于空位运动

**杂质缺陷特点**:缺陷浓度取决于掺杂浓度，与温度无关。

**置换原子形成能力：**1.尺寸差●<15%(任意固溶)●15%~ 30%(有限固溶)●>30%(难固溶)2.电负性:相当(保证电子全局共享)3.化合价:类似(保证骨架离子稳定)4.晶体结构:相同(保证相结构稳定)

**离子晶体点缺陷：**需保持电中性。高价阳离子直换低价阳离子时，电中性要求必然产生阳离子空位(或阴离子填隙)。高价阴离子置换低价阴离子时，电中性要求必然产生阴离子空位(或阳离子填隙)

**杂质缺陷反应方程式:(1)**电中性原则:电中性要求缺陷反应方程式两边的有效电荷数必须相等，晶体必须保持电中性。**(2)**质量平衡:缺陷反应方程式两边的质量必须相等。需要注意的是缺陷符号的右下标表示缺陷所在的位置，对质量平衡无影响。空位及自由电子和自由空穴的质量为零。**(3)**位置关系:在化合物M.X中，无论是否存在缺陷，其正负离子位置数(即格点数)之比始终是一个常数a/b。

**位错特性**：滑移面上已滑动区域与未滑动区域的边界 晶体局部滑动的推进=位错运动 **运动前方**：未滑动区域 **运动后方**：已滑动区域

**边界**：位错所在位置，位错线

两个几何参量（矢量）表征**位错的几何特征:**线缺陷（不考虑位错核心结构）1位错线方向矢量（切矢量）2滑移矢量（柏氏矢量）

**位错分类**：刃型位错、螺型位错、混合位错。

**刃型位错：**若一个晶面在晶体内部突然终止于某一条线处，而该晶面将近邻两个晶面像刀刃一样分开而形成的不规则原子排列为一个刃位错。

**刃型位错特征：**1）有一额外原子面， 额外半原子面刃口处的原子列称为位错2）位错线垂直于滑移矢量，位错线与滑移矢量构成的面是滑移面， 刃位错的滑移面是唯一的。 3） 半原子面在上,正刃型位错 ┻；在下, 负刃型位错 ┳ 4）刃位错的位错线不一定是直线， 可以是折线， 也可以是曲线， 但位错线必与滑移矢量垂直。 5）刃型位错周围的晶体产生畸变，上压， 下拉， 半原子面是对称的， 位错线附近畸变大， 远处畸变小。6）位错周围的畸变区一般只有几个原子宽（一般点阵畸变程度大于其正常原子间距的1/4的区域宽度， 定义为位错宽度， 约2~5个原子间距。）\* 畸变区是狭长的管道， 故位错可看成是线缺陷。

**螺型位错**：一个晶体的某一部分相对于其余部分发生滑移，原子平面沿着一根轴线盘旋上升，每绕轴线一周，原子面上升一个晶面间距。

**混合位错**：在外力t作用下，两部分之间发生相对滑移，在晶体内部已滑移和未滑移部分的交线既不垂直也不平行于滑移方向，这样的位错称为混合位错。位错线上任意一点，经矢量分解后，可分解为刃位错和螺位错分量。

**位错线与滑移方向的关系**：刃型位错（总是垂直） 螺型位错（总是平行） 混合位错（既不总垂直，也不总平行）

**伯格斯矢量**：晶体中有位错存在时，滑移面一侧质点相对于另一侧质点的相对位移矢量。**性质**：大小表征了位错的单位滑移距离，方向与滑移方向一致。**确定伯格斯矢量的步骤**(1)对于给定点的位错，人为规定位错线的方向。(2)用右手螺旋定则确定伯格斯回路方向。即用右手大拇指确定位错线的方向，右手其余四指确定矢量封闭回路的方向。(3)在完美晶体和有位错的晶体上选定一个晶格的格点做起点，按右手其余四指所指方向围绕位错线走封

闭回路，最后两个封闭回路之间的矢量差即是要求的伯氏矢量。

**柏氏矢量的确定**：1首先选定位错的正向2然后绕位错线周围作右旋（RH）闭合回路--柏氏回路；在不含有位错的完整晶体中作同样步数的路径，

3由终点向始点引一矢量， 即为此位错线的柏氏矢量， 记为 **柏氏矢量的物理意义**：1、反映位错周围点阵畸变的总积累（包括强度和取向）2、该矢量的方向表示位错运动导致晶体滑移的方向， 而该矢量的模表示畸变的程度称为位错的强度。 **柏氏矢量的守恒性**：柏氏矢量的守恒性：与柏氏回路起点的选择无关， 也与回路的具体途径无关。1。一根位错线具有唯一的柏氏矢量， 其各处的柏氏矢量都相同， 且当位错运动时 ， 其柏氏矢量也不变。2。位错的连续性：位错线只能终止在晶体表面或界面上， 而不能中止于晶体内部；在晶体内部它只能形成封闭的环线或与其他位错相交于结点上。

**扭折**—位于原滑移面上的弯折，不影响原位错滑移

**割阶**—垂直原位错滑移面的弯折，可能阻碍原位错滑移。不论原位错属于什么类型，**割阶的最终状态一定是刃型位错。**

**两刃位错*b*1⊥*b*2：**割阶滑移方向和原位错一致，所以*ξ*2可以带着滑移割阶运动。

**两刃位错,*b*1∥*b*2 ：**两段弯折是在原滑移面上的螺位错，是扭折，不稳定，在线张力作用下，使其变直，直到最后消失。

**刃螺位错,*ξ*e⊥*ξ*s ，*b*e⊥*b*s：**两位错运动交割后，在*ξ*s上产生扭折，在*ξ*e上产生割阶，可以和位错一起运动（非滑移攀移）

**两螺位错，*ξ*1⊥*ξ*2 ，*b*1⊥*b*2：**交割后各自在垂直滑移面的方向上产生割阶。*ξ*1和*ξ*2在原滑移面上滑移时，割阶只能一起攀移，称此割阶为攀移割阶。

**说明：**1带扭折或割阶的位错,其柏氏矢量与携带它们的位错相同。2扭折可因位错线张力而消失，但割阶不会因此而消失。’3扭折可随位错线一道运动，几乎不产生阻力，割阶与原位错不在同一滑移面上，一般只能通过攀移随原位错一起运动，即使能随新位错一起滑移，也增加其滑移阻力。

**带割阶的刃位错运动：**割阶的滑移方向和原位错线运动方向平行，因而位错可以带着割阶在原运动方向滑移，只是割阶的滑移面未必是晶体的密排面，滑动时所受的点阵阻力要大些。

**带割阶的螺位错运动：**割阶长度为1个原子间距时称为基本割阶，大于1个原子间距时称为超割阶。

**超割阶的形成**：当一个螺位错在滑移过程中切过一系列螺位错时，该螺位错上就会形成一系列刃型割阶。在位错线张力的作用下，相邻的割阶或相互抵消（异号位错）或相互叠加为超割阶。根据长度超割阶分为短割阶、中割阶和长割阶。**短割阶：**长度为几个原子间距。滑移时拖着割阶一起运动，而在晶体中留下若干空位。**中割阶：**长度为几个~20个原子间距。**长割阶：**长度>20个原子间距，钉扎作用更明显。

**所有的割阶都是刃型位错，扭折可以是刃位错也可以是螺位错**

**位错来源**1）凝固时在晶体长大相遇处，因位向略有差别而形成；2）因熔体中杂质原子在凝固过程中不均匀分布使晶体的先后凝固部分成分不同，从而点阵常数也有差异，而在过渡区出现位错；3）流动液体冲击、冷却时局部应力集中导致位错的萌生。4）晶体裂纹尖端、沉淀物或夹杂物界面、表面损伤处等都易产生应力集中，这些应力也促使位错的形成。5）过饱和空位的聚集成片也是位错的重要来源。

**位错的增殖：**塑性变形时，有大量位错滑出晶体，所以变形以后晶体中的位错数目应当减少。但实际上，位错密度随着变形量的增加而加大，在经过剧烈变形以后甚至可增加４～５个数量级。此现象表明：变形过程中位错肯定是以某种方式不断增殖，而能增值位错的地方称为位错源。

**双交滑移增殖机制**：通常把螺位错由原始滑移面转至相交的滑移面，然后又转移到与原始滑移面平行的滑移面上的滑移运动，称为双交滑移运动。此位错增殖机制称为位错的双交滑移增殖机制。

**晶体缓慢生长过程中产生的位错**：成分不同=〉晶块点阵常数不同=〉位错过渡///晶块偏转、弯曲=〉位相差=〉位错过渡///晶体表面受到影响=〉台阶或变形=〉产生位错///快速凝固=〉过饱和空位=〉聚集=〉位错///热应力=〉界面和微裂纹处应力集中=〉局部滑移=〉位错

**全位错**：柏氏矢量 = n\*点阵矢量n=1: 单位位错 **不全位错**（imperfect dislocation): 柏氏矢量 != n\* 点阵矢量n<1: 部分位错

**实际晶体中的位错须满足两大条件**：1**结构条件**：连接一个平衡位置与另一个平衡位置。2**能量条件**：b 越小越稳定

**实际晶体中的堆垛顺序：**1不全位错：与堆垛层错有关2堆垛层错: 实际晶体中的密排面的正常堆垛顺序遭到破坏3实际晶体中的堆垛顺序：密排原子面按一定顺序堆垛而成。

**堆垛层错**: 实际晶体中的密排面的正常堆垛顺序遭到破坏。**面心立方晶体中存在的层错**1抽出型：2插入型: **特点**: 一个插入型层错相当于两个抽出型层错

**层错能：1**形成层错几乎不产生点阵畸变，但会破毁晶体的正常周期完整性=> 晶体能量升高2增加的能量称为“堆垛层错能”或“层错能（J/m2)层错能越低，3层错出现的几率越大，越易观察到，例如奥氏体不锈钢中。

**不全位错**：堆垛层错与完整晶体的分界线（b矢量不等于点阵矢量）

**肖克莱不全位错：**特点：1）b矢量永远平行于层错面2）层错为一平面=>其边界在一平面内3）可以为刃型、螺形、混和位错4）滑移的结果是层错面的扩大或缩小。但不能攀移，因它必须和层错始终相连。

**弗兰克不全位错：**插入或抽出半原子面所形成的层错与完整晶体的边界，特点：a) (a/3)\*<111>，纯刃型位错b）不能在滑移面上滑移，只能攀移c）属不动位错**。**

**界面包括**：外表面（自由表面）和内界面。**表面**：固体与气体或液体的分界面‘’界面：几个原子层厚，原子排列于成分不同于内部。

**表面能：**定义为形成单位面积的新表面所需做的功

 

**晶界：**属于**同于固相内，但**取向不同的晶粒之间的界面（内界面） 晶界具有**5个自由度**：两晶粒的位相差（3），界面的取向（2）

**晶界能**：形成单位面积晶面时，系统Helmholtz自由能的变化，即dg/dA。它等于接口区单位面积的能量减去无界面时该区单位面积的能量。

也可看成由于晶界上点阵畸变增加的那部分额外自由能

**晶界特性**：1）晶界处点阵畸变大，存在晶界能，故晶粒长大和晶界平直化是一个自发过程2）晶界处原子排列不规则→阻碍塑性变形→Hb，sb↑（细晶强化）3）晶界处存在较多缺陷（位错、空位等）→有利原子扩散 4）晶界能量高→固态相变先发生，d↓形核率↑ 5）晶界能高→晶界腐蚀速度↑**孪晶界：**孪晶——指两个晶体（或一个晶体的两部分）沿一个公共晶面构成对称的位相关系，这两个晶体就称为孪晶，这个公共的晶面即成为孪晶面。

**共格孪晶界：**即孪晶面，其上的原子同时位于两侧晶体点阵的节点上，为两者共有。无畸变的完全共格界面，界面能（约为普通晶界能1/10）很低很稳定 **非共格孪晶界：**孪晶界相对于孪晶面旋转一角度，其上的原子只有部分为两者共有，原子错排校严重，孪晶能量相对较高，约为普通晶界的1/2

**相界：**具有不同结构的两相之间的分界面称为相界。**共格界面：**界面上的原子同时位于两相晶格**的节点上，半共格相界：**两相结构相近而原子间距相差较大时，部分保持匹配。**非共格相界：**两相在界面处的原子排列相差很大，相界与大角度晶界相似