

第一部分 材料的原子结构

1、原子结构与原子的电子结构；原子结构、原子排列对材料性能的影响。

原子排列对材料性能影响：

固体材料根据原子的排列可分为两大类：晶体与非晶体。（有无固定的熔点和体积突变）

晶体是指原子按一定的方式在三维空间作周期性规则重复排列所形成的固体，晶体材料一般结构有序，物理性能表现为各向异性，有固定的熔点

非晶体指组成物质的分子（或原子、离子）不呈空间周期性规则排列的固体。非晶体材料的原子或分子是无序排列的，物理性能表现为各项同性，没有固定的熔点导热率和热膨胀系数小，塑性变形大，组成的范围变化大。

各向异性：晶体的各向异性即沿晶格的不同方向，原子排列的周期性和疏密程度不尽相同，由此导致晶体在不同方向的物理化学特性也不同，这就是晶体的各向异性。（材料的性能与测量方向无关，称为各项同性）

2、材料中的结合键的类型、本质，各结合键对材料性能的影响，键-能曲线及其应用。

一次键：

离子键：离子键指正、负离子间通过静电作用形成的化学键。（无方向性和饱和性）

共价键：由两个或多个电负性相差不大的原子间通过共用电子对而形成的化学键。（有方向性和饱和性）

金属键：金属中的自由电子与金属正离子相互作用所构成的键合。

本质：电子从一个原子向另外一个原子的转移或电子在原子间共用。

二次键：（不依靠电子的转移或共享，靠原子间的偶极吸引力结合）

范德瓦耳斯力：（又称分子间作用力）产生于分子或原子之间的静电相互作用。

氢键：与电负性大、半径小的原子 X（氟、氧、氮等）以共价键结合，若与电负性大的原子 Y（与 X 相同的也可以）接近，在 X 与 Y 之间以氢为媒介，生成 X-H...Y 形式的键，称为氢键。（X 与 Y 可以是同一种类原子，如水分子之间的氢键）

各结合键对材料性能的影响：物理性能与力学性能 1.2——上交 P4 / 西交——P25

金属键：

金属材料的结合键主要是金属键。由于自由电子的存在，当金属受到外加电场作用时，其内部的自由电子将沿电场方向作定向运动，形成电子流，所以金属具有良好的导电性；金属除依靠正离子的振动传递热能外，自由电子的运动也能传递热能，所以金属的导热性好；随着金属温度的升高，正离子的热振动加剧，使自由电子的定向运动阻力增加，电阻升高，所以金属具有正的电阻温度系数；由于金属键既无方向性，又无饱和性，因而每个原子有可能与更多的原子结合，形成低能量的密堆结构，当金属受力变形而改变原子间的相互位置时不至于破坏金属键，这使得金属具有良好的延展性；自由电子可以吸收光的能量，因而金属不透明；而所吸收的能量在电子回复到原来状态时产生辐射，使金属具有光泽。

离子键：大多数盐类、碱类和金属化合物主要以离子键的方式结合，一般离子晶体中的正负离子静电引力较强，结合牢固，因此，其熔点和硬度均较高；由于离子晶体中很难产生自由运动的电子，因此它们都是良好的电绝缘体，但在高温熔融状态下则呈现离子导电性。

共价键: 共价键在亚金属, 聚合物和无机非金属材料中均占有重要地位, 共价键的结合极为牢固, 故共价晶体具有结构稳定、熔点高、质硬脆等特点; 由于共用电子对不能自由运动, 共价结合形成的材料一般是绝缘体, 导电能力差。

范德华力 (范德瓦尔斯力): 普遍存在于各种分子之间, 对物质的性质、熔点、沸点、溶解度等影响较大, 它的键能比化学键小 1~2 个数量级; 高分子材料的相对分子质量, 其总的范德瓦耳斯力甚至超过化学键的键能, 使得高分子往往没有气态, 只有液态和固态; 范德瓦耳斯力也能在很大程度上改变材料的性质。

氢键: 氢键的键能介于化学键和范德瓦耳斯力之间, 存在于分子内或分子间, 氢键在材料中很重要, 纤维素、尼龙和蛋白质等分子有很强的氢键, 并显示出非常特殊的结晶结构和性能

类型	作用力来源	键强	形成晶体的特点
离子键	原子得、失电子后形成负、正离子, 正、负离子间的库仑引力	最强	无方向性、高配位数、高熔点、高强度、高硬度、低膨胀系数、塑性较差、固态不导电、熔态离子导电
共价键	相邻原子价电子各处于相反的自旋状态, 原子核间的库仑引力	强	有方向性、低配位数、高熔点、高强度、高硬度、低膨胀系数、塑性较差、即使在熔态也不导电
金属键	自由电子气与正离子之间的库仑引力	较强	无方向性、结构密堆、配位数高、塑性较好、有光泽、良好的导热和导电性
分子键	原子间瞬时电偶极矩的感应作用	最弱	无方向性、低熔点、绝缘
氢键	氢原子核与极性分子间的库仑引力	弱	有方向性和饱和性

比较金属键与共价键的异同: 二者在结合形式上都是电子共用, 结合力大, 但二者电子共用的范围不同, 共价键有方向性、有饱和性, 金属键无方向性、无饱和性。

键-能曲线: 西交——P23

定义: 键能曲线表示了当作用于原子或离子上的力仅为引力或斥力时能量随位置的变化

键能曲线可以用来估算键能、平均键长、弹性模量和线膨胀系数等;

施加应力、施加电磁场以及改变温度都可以改变键能曲线的形状;

键能曲线最低点处对应的水平距离 X_0 称为平均键长, 最低点处 (势阱处) 的深度反映了键能的大小, 势阱越深, 则键能越大; 势阱处两边曲线的陡峭程度反映了材料弹性模量的大小, 曲线越陡, 弹性模量越大; 势阱处两边曲线越对称, 势阱越深, 则材料的线膨胀系数越小。

3、原子的堆垛和配位数的基本概念及对材料性能的影响。2.2——上交 P38

配位数：指晶体结构中任一原子周围最邻近且等距的原子个数

原子堆垛的两种方式：原子的最密排面有两种堆垛方式，分别为 ABABAB 或 ACACAC（这种方式构成了密排六方）和 ABCABCABC 或 ACBACBACB（构成了面心立方）。这两种结构的堆垛方式虽有不同，但都是最紧密排列，都具有相同的配位数和致密度。

4、显微组织基本概念和对材料性能的影响。

显微组织：要用金相显微镜或电子显微镜才能观察到的内部组织。

单相组织：具有单一相的组织称为单相组织，即所有晶粒的化学组成相同，晶体结构也相同。

影响：

单相组织：晶粒尺寸：细化晶粒可以提高材料的强度改善材料的塑性和韧性。

晶粒形状：等轴晶趋于各向同性。柱状晶趋于各向异性。

多相组织：力学性能取决于各组成相相对量和各自性能。如果弥散相硬度明显高于基体相，则将显著地提高材料的强度，同时塑性韧性必将下降；如果第二相连续分布于晶界，则将对材料性能产生不利影响。

晶面族：晶体中晶面上的原子排列情况以及晶面间距完全相同但空间位向不同的各组晶面称为晶面族

晶向族：晶体中原子排列情况相同但空间位向不同的一组晶向称为晶向族

第二部分 材料的晶态结构

1、晶体与非晶体、晶体结构、空间点阵、晶格、晶胞、晶格常数、布拉菲点阵、晶面间距等基本概念。

晶体：原子按一定方式在三维空间内周期性地规则重复排列，有固定熔点、各向异性。

非晶体：原子没有长程的周期性规则排列，无固定的熔点，各向同性等。

晶体结构：晶体材料中原子按一定的对称周期性平移重复而形成的空间排列形式。可分为 7 大晶系、14 种平移点阵、32 种点群、230 种空间群。（点阵+基元=晶体结构）

空间点阵：指几何点在三维空间作周期性的规则排列所形成的三维阵列，每个阵点有完全相同的周围环境，是人为的对晶体结构的抽象。

晶格：为了表达空间点阵的几何规律，常人为地将阵点用一系列相互平行的直线连接起来形成空间格架，称之为晶格。

晶胞：构成晶格的最基本单元称为晶胞，它是能够代表晶格中原子排列特征的最小单元体。

晶体结构与空间点阵的区别：晶体结构和空间点阵的关系可用“空间点阵+结构基元=晶体结构”来表示，空间点阵是晶体中质点排列的几何学抽象，用以描述和分析晶体结构的对称性和周期性，没有缺陷，由于各阵点的周围环境相同，故它只能有 14 种类型；而晶体结构则是指晶体中实际质点（原子、分子或离子）的具体排列情况，它们能组合成各种类型的排列，可以有缺陷，因此，实际存在的晶体结构是无限的。具有不同结构的晶体可以有相同的晶体结构，比如 NaCl 和金刚石；由同种物质构成的晶体可以有不同的空间点阵，比如金刚石与石墨。

晶格常数：晶胞的棱边长度（ $a b c$ ），表征晶体结构的一个基本参数。

晶系：除考虑晶胞外形外以棱边长度之间的关系和轴间夹角情况对晶体进行分类。（七大晶系：单斜晶系、三斜晶系、正交晶系、四方晶系、六方晶系、菱方晶系、立方晶系）

布拉菲点阵：布拉菲根据“每个阵点的周围环境相同”的要求，用数学方法证明晶体中的空间点阵只有 14 种，并称为布拉菲点阵。

晶系	空间点阵	棱边与角度的关系	晶系	空间点阵	棱边与角度的关系
三斜	简单三斜	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	六方	简单六方	$a=b, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
单斜	简单单斜	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	四方	简单四方	$a=b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
	底心单斜			体心四方	
正交	简单正交	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	菱方	简单菱方	$a=b=c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
	底心正交			简单立方	
	体心正交		立方	体心立方	$a=b=c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
	面心正交			面心立方	

晶面间距： 相邻两个平行晶面之间的距离。晶面间距越大，则该晶面上的原子排列越密集，反之，越稀疏。

2、晶体晶向指数与晶面指数的标定方法。

晶向指数： [] < >

晶面指数： () { }

3、晶体结构及类型，常见晶体结构(bcc、fcc、hcp)及其几何特征、配位数、堆积因子（致密度）、间隙、密排面与密排方向。

晶体类型	点阵常数	原子半径	晶胞原子数	配位数	致密度	四面体间隙	八面体间隙	密排面	密排方向
面心立方 (fcc)	$2(\sqrt{2})r$	$a\sqrt{2}/4$	4	12	0.74	8 $(\sqrt{3}-\sqrt{2})a/4$	4 $(2-\sqrt{2})a/4$	{111}	<110>
体心立方 (bcc)	$4(\sqrt{3}/3)r$	$a\sqrt{3}/4$	2	8	0.68	12 $(\sqrt{5}-\sqrt{3})a/4$	6 $(2-\sqrt{3})a/4$	{110}	<111>
密排六方 (hcp)	2r	a/2	6	12	0.74	12 $(\sqrt{6}-2)a/4$	6 $(\sqrt{2}-1)a/4$	{0001}	- <1120>

当 $c/a \neq 1.633$ 时，

$$r_a = \frac{\sqrt{a^2/3 + c^2/4}}{2}$$

fcc, bcc, fcp 的滑移系数目分别为 12, 48, 3 个

立方晶系面间距：

六方晶系面间距：

六方晶向指数换算： $[U\ V\ W] \rightarrow [u\ v\ t\ w]$

$U=u-t\ V=v-t\ W=w$

$u=1/3(2U-V)$

$v=1/3(2V-U)$

$t=-(u+v)$

$w=W$

配位数：在晶体结构中任一原子周围最邻近且等距离的原子数；

配位数的意义：反映了晶体中原子排列的紧密程度。配位数越大，原子排列越紧密

配位数的影响因素：

(1) .中心原子的大小，中心原子的最高配位数决定于它在周期表中的周次；

(2) .中心原子的电荷，中心原子的电荷越高，配位数越大；

(3) .配体性质，同一氧化态的金属离子的配位数不是固定的，还取决于配体性质

此外，配位数还受结合键的类型以及原子或离子的尺寸的影响。确定离子配位数的几何因数是正负离子的半径比；对于共价晶体，配位数由每个原子价电子层中电子数决定，符合 8-N 规律（N 为价电子数）；金属中配位数主要受几何因数决定（许多纯金属，其 $r/R=1$ ，配位数为 12，但有些纯金属配位数只为 8）

致密度（堆积因子）：也称堆积密度，晶体结构中原子体积占总体积的百分数，一个晶胞来说就是：晶胞中的原子体积与晶胞体积的比值，反映晶体中原子排列紧密程度。

线密度：在晶体中，沿一个方向单位长度上相同阵点的数目

面密度：晶面中某一晶面单位面积上的原子数目

间隙：八面体间隙：位于 6 个原子所组成的八面体中间的间隙。

四面体间隙：位于 4 个原子所组成的四面体中间的间隙。

密排面：原子密度最大的晶面。

密排面都是最高密度面，但最高密度面不一定是密排面。

密排方向：原子密度最大的晶向。

拓扑密堆相：是由两种大小不同的金属原子构成的中间相，其中大小原子通过适当的配合构成空间利用率和配位数都很高的复杂结构

4、合金相结构，固溶体、中间相的基本概念和性能特点。

合金：指由两种或两种以上的金属或金属与非金属经熔炼、烧结或其他方法组合而成，并具有金属特性的物质。

相：合金中具有同一聚集状态，同一晶体结构及性质并以界面相互隔开的均匀组成部分

置换固溶体：当溶质原子溶入溶剂中形成固溶体时，溶质原子置换了溶剂点阵中部分溶剂原子所形成的固溶体

间隙固溶体：溶质原子分布于溶剂晶格间隙所形成的固溶体

间隙固溶体溶解度较小的原因：在间隙固溶体中，由于溶质原子一般都比晶格间隙的尺寸较大，所以当它们溶入后，都会引起溶剂点阵畸变，点阵常数变大，畸变能升高。因此，间隙

固溶体是有限固溶体，而且溶解度都很小。

固溶体：以某一组元为溶剂，在其晶体点阵中溶入其他组元原子（溶质原子）所形成的均匀混合的固态溶体，它保持着溶剂的晶体结构类型。

中间相：如果组成合金相的异类原子有固定比例，所形成的固相的晶体结构与所有组元均不同，且这种相的成分多数处在A在B的溶解限度和B在A的溶解限度之间，即落在相图的中间部位，叫做中间相（包括正常价化合物、电子化合物、与原子尺寸因素有关的化合物和超结构）

性能特点：

(1.)固溶体可在一定成分范围内存在，性能随成分变化而连续变化。

(2.)中间相的晶体结构不同于此相中的任一组元，不同元素之间所形成的中间相往往在晶体结构、结合键等方面都不同。中间相一般具有较高的熔点和硬度，可使合金的强度、硬度、耐磨性及耐热性提高。

相图杠杆定律：某一成分的二元合金在某温度时处于二元相图的两相区内，则两相之间的质量比可用“杠杆法则”求得。在此温度处做一条水平线与该两相区相界线相交，两交点内的水平线被合金的成分垂直线分成两段，两相的质量比与这两线段的长度成反比，用相对百分数表示，这个现象好像力学中的杠杆，所以称为“杠杆定律”

影响固溶体溶解度因素：

(1). 晶体结构，晶体结构相同是组元间能形成无限固溶体的必要条件，两组元的晶体结构越相近，固溶体溶解度越大；

(2). 原子尺寸因素，在其他条件相近的情况下，原子半径差 $<15\%$ 时，有利于形成溶解度较大的固溶体，当 $\geq 15\%$ 时，越大，溶解度越小；

(3). 电负性因素，合金组元间的电负性差越大倾向于形成化合物而不利于形成固溶体，生成的化合物越稳定，则固溶体的溶解度越小。只有电负性相近的元素才可能具有较大的溶解度；

(4). 原子价因素，当原子尺寸因素较为有利时，在某些以一价金属为基的固溶体中，溶质的原子价越高，则溶解度越小。（是由电子浓度决定的，电子浓度即合金中价电子数目与原子数目的比值）

固溶体能够无限互溶的条件是：两者的晶体结构相同，原子尺寸相近，尺寸差小于 15% ，另外，两者有相同的原子价和相似的电负性。

解释间隙固溶体与间隙相的含义，并加以比较：

间隙固溶体为固溶体，它保持着溶剂的晶体结构类型，而且由于溶质原子一般都比晶格间隙的尺寸较大，所以当它们溶入后，都会引起溶剂点阵畸变，点阵常数变大，畸变能升高。因此，间隙固溶体是有限固溶体，而且溶解度都很小；间隙相是中间相，（与原子尺寸有关的化合物），且A、B原子数成比例。它们在性能上有很大差异，前者韧性、塑性好，后者韧性、塑性差。共性是两者中的合金组元都在间隙位置，本身尺寸很小。

简述固溶体与中间相的特点：

(1). 固溶体特点：固溶体保持了溶剂的晶体结构类型，成分可以在一定范围内变化，但不能用一个化学式表示；不一定满足原子比或电子数比；在相图上为一个区域；具有明显的金属性质，如导电性、导热性、塑性等；固溶体中的结合键主要是金属键。

(2). 中间相特点：金属与金属或金属与非金属（C, N, H, B, Si）之间形成的化合物总称为金属间化合物。由于金属间化合物在相图中处于相图的中间位置，故也称为中间相。金属间化合物的晶体结构不同于构成它的纯组元，键合方式也有不同的类型，可能有离子键、共价键，但大多数仍为金属键类型。

与纯组元相比，固溶体有哪些变化：

(1). 固溶体结构变化: 点阵畸变, 点阵常数变化, 出现偏聚或短程有序化, 甚至形成有序固溶体;

(2). 力学性能变化: 硬度、强度提高, 塑性下降;

(3). 物理性能变化: 电阻加大, 导电率下降

固溶体与金属化合物的比较

类别	成分	结构特点	力学性能特点
固溶体	溶质浓度可以在固溶度极限内变化	保持溶剂的点阵结构类型	强度、硬度比溶剂高, 但总体看强度、硬度依然较低, 而塑性、韧性较好
金属化合物	成分固定或一定范围内波动, 可用化学分子式表示	其点阵类型不同于组成它的任一组元	熔点高, 硬度高, 塑性和韧性较差

5、离子晶体和共价晶体结构, 离子晶体结构规则、典型的离子晶体结构。

离子晶体: 由正、负离子或正、负离子集团按一定比例通过离子键结合形成的晶体称作离子晶体。

共价(原子)晶体: 由同种非金属元素的原子或者异种元素的原子以共价键形成的晶体。

离子半径: 由原子核的中心到其最外层电子的平衡距离。

离子晶体配位数: 在离子晶体中, 与某一考察离子邻接的异号离子的数目称为该考察离子的配位数。

离子的堆积: 由于正离子半径一般较小, 负离子半径较大, 所以离子晶体通常看成是由负离子堆积成骨架, 正离子则按其自身的大小, 居留于相应的负离子空隙—负离子配位多面体中。

离子晶体结构规则: 2.4.1——上交 P57

(1.) 负离子配位多面体规则——鲍林第一规则

在离子晶体中, 正离子的周围形成一个负离子配位多面体, 正负离子间的平衡距离取决于离子半径之和, 而正离子的配位数则取决于正负离子的半径比。

(2.) 电价规则——鲍林第二规则

在一个稳定的离子晶体中, 每个负离子的电价等于或接近等于与之邻接的各正离子静电键强度的总和。

(3.) 关于负离子多面体共用点、棱与面的规则——鲍林第三规则

在一配位结构中, 共用棱特别是共用面的存在, 会降低这个结构的稳定性。

(4.) 不同种类正离子配位多面体间连接规则——鲍林第四规则

在含有两种以上正离子的离子晶体中, 一些电价较高, 配位数较低的正离子配位多面体之间, 有尽量互不结合的趋势。

(5.) 节约规则——鲍林第五规则

在同一晶体中, 同种正离子与同种负离子的结合方式应最大限度地趋于一致。

典型的离子晶体结构: 2.4.2——上交 P59

(1). CsCl 型结构, 属简单立方点阵

CsCl 晶体是每个阵点位置由两个不同离子的简单立方点阵组成, 一个离子处在每个阵点的中心, 另一个则处在[111]方向距每个阵点为 $\frac{\sqrt{3}}{2}$ 处, 因为存在两种不同类型的原子, 因此这种结构并非 BCC 结构, 在这种情况下, 中心位置与角上的位置是不等同的。CsCl 结构可看成是一对 SC 点阵穿插而成, 每一种原子可以居于立方的角上, 另一种原子居于立方的中心。(每个离子的配位数均为 8, 每个单胞各有一个离子 (即共有两个离子))

(2). NaCl 型结构, 属面心立方点阵

NaCl 结构中, 完全按 FCC 排列, 而处在八面体间隙位置, 它不是布拉菲点阵, 而是由两种

离子的 FCC 点阵相互在棱边上穿插而成的点阵（晶胞中含和各 4 个，各离子的配位数均为 6）

(3). 钻石立方结构，属面心立方点阵（ r 与 a 的关系是 $r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$ ）

钻石立方结构可以描述为每个位置都含有 2 个原子的 FCC 结构，其中一个处在 FCC 位置中心，另一个在沿方向距每个阵点位置为 $\frac{a}{4}$ 处，每个晶胞有 8 各原子，配位数为 4。

6、高分子材料的组成和结构的基本特征，高分子材料结晶形态、高分子链在晶体中的构象、高分子材料晶态结构模型、液晶态的结构特征与分类。

组成:有机高分子化合物。1.3——上交 P8

结构:包括高分子链结构和高分子聚集态结构。链结构又分近程结构和远程结构。1.3——上交 P8

高分子材料的结晶形态: 2.6.1——上交 P70

单晶 球晶 树枝状晶 串晶 伸直链晶体

高分子链的构象: 西交——P74

由于单键内旋导致了原子排布方式的不断变换，产生了分子在空间中的不同形态，叫构象。

晶态结构模型: 2.6.2——上交 P72

- 1、樱状微束模型
- 2、折叠链模型
- 3、伸直链模型
- 4、串晶结构模型
- 5、球晶结构模型
- 6、Hosemann 模型

液晶态的结构特征和分类: 2.8.1——上交 P77

能够形成液晶的物质通常具有刚性分子结构，呈棒状或近似棒状结构，称为液晶元。刚性的液晶元几乎无一例外的都拥有一个或几个柔性的分子链，同时它还具有在液态下维持分子的某种有序排列所必须的结构因素；刚性基元和极性基团是分子在液态仍保留一定有序性的必要条件，而柔性基团使体系具有液体的形变能力和流动性。

分类:按液晶元所处的位置，可分为主链型液晶、侧链型液晶和不含刚性液晶元的液晶高分子；按液晶的形成方式和性能，可分为溶致型液晶和热致型液晶（热致型又分为近晶型、向列型和胆甾型）

液晶结构:分为近晶型（近晶型液晶在各个方向上一般都是非常粘滞的），向列型（向列型液晶均具有较大流动性），胆甾型（具有彩虹般的颜色和极高的旋光本领）和柱状型

第三部分，点缺陷和扩散

1、点缺陷的类型，肖脱基空位、弗兰克尔空位、间隙原子和置换原子，间隙固溶体和置换固溶体等基本概念，离子晶体中的点缺陷特点，点缺陷的平衡浓度、影响因素及其对材料性能的影响。

点缺陷定义:在结点上或邻近的微观区域内偏离晶体结构正常排列的一种缺陷，是最简单的晶体缺陷。

点缺陷类型:空位，间隙原子，杂质或溶质原子，以及由他们组成的复杂的点缺陷如空位对、空位团等

- **点缺陷**

零维缺陷，包括空位、间隙原子、置换原子等。

- **线缺陷**

一维缺陷，即各种类型位错。

- **面缺陷**

二维缺陷，包括晶界、相界、孪晶界、堆垛层错等。

- **体缺陷**

在任意方向上的缺陷区尺寸都可以与晶体或晶粒的线度相比拟，包括沉淀相、空洞、气泡、层错四面体等缺陷。

(面缺陷有助于扩散和化学反应)

面缺陷特点:

- (1) .界面能会引起界面吸附;
- (2) .界面上原子扩散速度较快;
- (3) .对位错运动有阻碍作用;
- (4) .易被氧化和腐蚀;
- (6) .原子的混乱排列有利于固态相变的形核。

肖脱基 (Schottky) 空位: 在晶体中，当某一原子具有足够大的振动能而使振幅增大到一定程度时，就可能克服周围原子对它的制约作用，跳离其原来位置，迁移到晶体表面或内表面的正常结点位置上而使晶体内部留下空位，称为肖脱基空位。

弗兰克尔 (Frenkel) 空位: 离开平衡位置的原子挤入点阵中的间隙位置，而在晶体中同时形成相等数目的空位和间隙原子。

空位形成能: 在晶体内取一个原子放在晶体表面上(但不改变晶体表面积和表面能)所需要的能量

- **肖脱基 (Schottky) 空位**

原子迁移到晶体表面所形成的空位。

- **弗兰克 (Frenkel) 空位**

原子迁移到晶体点阵的间隙中所形成的空位。

间隙原子: 是原子脱离其平衡位置进入原子间隙而形成的。

置换原子: 占据在原来基体原子平衡位置上的异类原子。

离子晶体中点缺陷的特点: 3.1.1——上交 P84

在离子晶体中，由于要维持电中性，所以离子晶体中的点缺陷是成对存在的。与金属相比，离子晶体的点缺陷形成能一般都相当大。若离子晶体中一个正离子产生空缺，则邻近必有一个负离子空位，形成一个正负离子空位对，即Schottky缺陷；若一个正离子跳到离子晶体的间隙位置，则在正常的正离子位置出现一个正离子空位，这种空位-间隙离子对即为Frenkel缺陷。此外，离子晶体中某些受激活电子逸出，形成载流子，会使晶体内的电场发生变化，造成晶体的不完整性，形成电荷缺陷，明显地改变离子晶体的导电性。

点缺陷的平衡浓度: 3.1.2——上交 P85

空位平衡浓度主要取决于温度和空位形成能， E_f 的减小和T的增高将引起空位平衡浓度呈指

数关系增大。

点缺陷对材料性能的影响：

1. 增大金属的电阻
2. 使晶体体积膨胀，密度减小
3. 过饱和点缺陷，如淬火空位、辐照缺陷等可以提高金属的屈服强度
4. 改善离子晶体的导电性
5. 影响晶体中的扩散过程

2、扩散概念，扩散第一定律、扩散第二定律。

定义： 由于热运动而导致原子（或分子）在介质中迁移的现象称为扩散。（固态扩散）

稳态扩散：在稳态扩散过程中，扩散组元的浓度只随距离变化，而不随时间变化。

非稳态扩散：扩散组元的浓度不仅随距离 x 变化，也随时间变化的扩散称为非稳态扩散。

柯肯达尔效应：在置换固溶体中，由于两种原子以不同的速率相对扩散而引起标记面向扩散快的一侧移动的现象。

扩散第一定律：（菲克第一定律）：扩散中原子的通量与质量浓度梯度成正比。描述了一种稳态扩散，即质量浓度不随时间变化。

$$J = -D \left(\frac{dc}{dx} \right)$$

负号，表示物质扩散方向与浓度梯度方向相反，即物质从高的浓度方向向低的浓度方向区迁移。

J -----,为扩散通量，表示单位时间内通过垂直于扩散方向单位面积的扩散物质质量。

D -----扩散系数，越大，扩散越快

dc/dx -----浓度梯度

$$J = -D \left(\frac{dC}{dx} \right)$$

● **J**：扩散通量，即单位时间内通过垂直于扩散方向的单位截面积的扩散物质流量（ $\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$ 或 $\text{g}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$ ）

● **D**：扩散系数（ m^2/s 或 cm^2/s ）

● **dc/dx** ：浓度梯度； **x** —沿扩散方向的距离； **c** —扩散物质浓度（ g/cm^3 ）

● 负号“—”：物质的扩散方向与浓度梯度 dc/dx 方向相反。

适用范围：只适用于浓度梯度不随时间变化的**稳态扩散**。

扩散第二定律：（菲克第二定律）：表示扩散物质浓度的时间变化率与进出某一体积的通量之间关系。（扩散物质浓度随时间的变化率，与浓度梯度随扩散距离的变化率成正比。（比例系数为**D**））

公式：

)

自扩散：把不依赖于浓度梯度，而仅有热振动产生的扩散称为自扩散

化学扩散：由于浓度梯度引起的扩散。

反应扩散：（相变扩散） 伴随有化学反应而形成新相的扩散称为反应扩散。

3、扩散驱动力及扩散机制。

扩散驱动力：化学势梯度

空位扩散：在自扩散和涉及置换原子的扩散中，原子可以离开其点阵位置，跳入临近的空位，这样就会在点阵的原来位置产生一个新空位，当扩散继续，就产生了原子与空位两个相反的迁移流向，称为空位扩散

上坡扩散：溶质原子从低浓度向高浓度处扩散的过程称为上坡扩散。表明扩散的驱动力是化学势梯度而非浓度梯度。（例如溶质原子在晶界的偏聚、沉淀相的析出、过饱和固溶体的分解及其新相的长大等过程）

下坡扩散：溶质原子从高浓度向低浓度处扩散的过程。

下坡扩散使浓度趋于均匀化，上坡扩散使浓度发生两极分化。

机制：4.3.1——上交 P146

A、交换机制：直接交换机制：两个相邻的原子互换位置；环状交换机制：四个原子同时交换位置

B、间隙机制：（间隙固溶体溶质的扩散）原子从一个晶格间隙位置迁移到另一个间隙位置；推填机制（一个填隙原子可以把它邻近的，在晶格节点上的原子推到附近的间隙中而自己则填到被推出去的原子原来的位置上）

C、空位机制：（置换固溶体中溶质原子和金属原子的扩散）产生空位，原子与空位交换位置。

D、晶界扩散及表面扩散：上交——P148

4、在离子晶体和聚合物中的扩散：

离子晶体中的扩散：4.8——上交 P158（例子）

在离子晶体中，扩散离子只能进入具有同样电荷的位置，不能进入相邻异类离子的位置。离子扩散只能依靠空位来进行，迁移距离较长。并且由于离子键的结合能一般大于金属键的结合能，扩散离子所需克服的能垒比金属原子大得多，而且为了保持局部的电中性，必须产生成对的缺陷，这就增加了额外的能量，这些都导致了离子扩散的速率通常远小于金属原子扩散的速率（阳离子扩散系数通常比阴离子大）（例子）

聚合物中的扩散：

聚合物链中单个原子不能单独自由移动，聚合物中的自扩散是指整个热塑性链的移动。在晶态区域这种移动很困难，所以聚合物中高分子链的移动局限于非晶态区域或者聚合物熔体中。在非晶态聚合物区域中整个杂质分子可以穿过点阵扩散。其机制与间隙扩散机制相似。

恒温下聚合物中的扩散系数随扩散分子尺寸的增加而降低。

5、扩散系数、扩散激活能，影响扩散的因素及原理。

多晶体三种扩散途径：晶内扩散、晶界扩散和表面扩散（其扩散激活能为晶内>表面>晶界）

扩散系数：4.3.2——上交 P150

扩散系数的自然对数与绝对温度的倒数呈线性关系（即 $\ln(D)$ 与 $1/T$ 呈线性关系）

扩散系数可以用阿累尼乌斯方程来描述 $D=D_0 \cdot \exp(-Q/RT)$

扩散激活能：4.4——上交 P152

一般说来，与空位相关的扩散激活能高于间隙扩散激活能，因为前一种机制要求的能量包括空位形成能及原子迁入空位形成的能量，而后一种机制的能量仅是使间隙原子移入间隙位置的能量

(间隙扩散的扩散激活能小于空位扩散和自扩散的扩散激活能)

影响扩散的因素及原理：(主要由扩散激活能和温度的影响)

(1) 温度：最主要的因素，温度越高，原子热激活能量越大，越易发生迁移，扩散系数也越大。温度升高后空位浓度也增大，有利于扩散；

(2) 扩散组元的影响：

a. 组元特性：固体中组元尺寸相差越大，扩散系数越大；组元间亲和力越大，扩散系数越小；组元熔点越高，扩散系数越小；

b. 组元浓度：通过扩散激活能和扩散常数影响扩散系数；

c. 第三组元：影响复杂，有的提高扩散系数，有的降低扩散系数，有的没影响

(3) 晶体结构的影响：密堆结构的扩散比非密堆结构的慢；间隙式扩散较置换式扩散快；各向异性时，沿原子密排的方向扩散慢，非密排的方向扩散快；

(4) 晶体缺陷：晶界、表面和位错等对扩散起着快速通道的作用，由于晶体缺陷处点阵畸变较大，原子处于较高能量状态，易于跳跃，故各种缺陷处的扩散激活能均比晶内扩散激活能小。此外，表面扩散系数远大于晶界扩散系数，两者又远大于体扩散系数；

(5) 扩散元素性质：扩散原子与溶剂金属差别越大，扩散系数越大，差别是指原子半径，熔点，固溶度等；

(6) 应力梯度：应力梯度可以促使原子扩散

第四部分 线、面和体缺陷

1、位错类型，刃型位错、螺型位错、位错线和滑移线的基本概念，柏格斯回路和柏氏矢量的基本概念及物理意义。

位错类型： 刃型位错 螺型位错 混和位错

位错：在点阵中原子排列局部不规则的一维区域，它是晶体内的一种线缺陷，其特点是沿一条线方向原子有规律的发生错排，这种缺陷用一线方向和一个柏氏矢量共同描述。

刃型位错：晶体中的某一晶面，在其上半部有多余的半排原子面，好像一把刀刃插入晶体中，使这一晶面上下两部分晶体之间产生了原子错排，称为刃型位错。其柏氏矢量与位错线垂直。

(刃型位错具有惟一的滑移面)

螺型位错：位错线附近的原子按螺旋形排列的位错称为螺型位错。其柏氏矢量与位错线平行。

(螺型位错的滑移面不是唯一的，螺位错可以在通过位错线的任何晶面上滑移。)

混合位错：滑移矢量既不平行也不垂直于位错线，而与位错线相交成任意角度，这种位错称混合位错。

单位位错：把柏氏矢量等于单位点阵矢量的位错称为单位位错。

刃型位错和螺型位错的异同点：

刃型位错的柏氏矢量与位错线垂直，其位错线可以是直线、折线或曲线，且位错线运动方向与滑移方向平行，位错运动方向始终与位错线垂直而与柏氏矢量平行。刃型位错有多余的半原子面，滑移面只有一个，可以发生攀移，但不能发生交滑移；(记住：晶体滑移方向就是位错运动方向，就是柏氏矢量的方向)

螺型位错的柏氏矢量与位错线平行；且位错线只能是直线。螺型位错没有多余的半排原子面，位错线运动方向与晶体滑移方向垂直，也与柏氏矢量垂直，位错运动方向与位错线和柏氏矢量都平行。螺型位错的滑移面不是唯一的，它可以在通过位错线的任何晶面上滑移。螺型位

错不能发生攀移，但能发生交滑移。

位错线：已滑移区与未滑移区的边界线。

位错的连续性：即一根位错线不能终止于晶体内部，而只能露头于晶体表面（包括晶界）；若它终止于晶体内部，则必与其他位错线相连接，或在晶体内部形成封闭线。

位错环：形成封闭线的位错。

滑移线：晶体塑性变形一般靠滑移进行，即晶体中的两相邻区域在切应力的作用下沿一定的晶面和晶向做相对滑动，滑移的结果在晶体表面上出现明显的滑移痕迹，这条滑移痕迹叫滑移线。

位错密度：单位体积晶体中所含的位错线的总长度（或穿过单位面积的位错数目）

线缺陷：线缺陷指二维尺度很小而三维尺度很大的缺陷，集中表现形式是位错，由晶体中原子平面错动引起。位错从几何结构可分为两种：刃型位错和螺型位错

位错的判断：

刃型位错：柏氏矢量与位错线方向垂直，若柏氏矢量顺时针旋转 90 度后与位错线方向一致，则为正刃型位错，反之，为负刃型位错；

螺型位错：柏氏矢量与位错线方向平行，若柏氏矢量与位错线同向，则为右螺旋，反之为左螺旋。

柏氏回路：在实际晶体中，从任一原子出发，围绕位错（避开位错线附近的严重畸变区）以一定的步数作一定旋向的右旋闭合回路，称为柏氏回路。

柏氏矢量：描述位错特征的一个重要矢量，它集中反映了位错周围点阵畸变总累积量的大小和方向，其方向表示位错运动导致晶体滑移的方向；其模表示畸变的程度（位错强度）

物理意义：柏氏矢量越大，表明该位错导致点阵畸变越严重，他所处的能量也越高。

（① 从位错的存在使得晶体中局部区域产生点阵畸变来说：表示了位错区域点阵畸变总量的大小和方向。

② 从位错运动引起晶体宏观变形来说：

表示该位错运动后能够在晶体中引起的相对位移。）

对一任意给定的位错，柏氏矢量是个不变量，即使是混合位错和位错环也是。

2、金属晶体中的滑移面和滑移方向。西交——P328

滑移是沿着一定的晶面和该面上的一定晶向进行的，此晶面称为滑移面（slip plane），此晶向称为滑移方向（slip direction）。

位错的运动方式：滑移 和 攀移

滑移：是指在切应力作用下晶体中的位错沿滑移面所进行的运动。在外加切应力的作用下，通过位错中心附近的原子沿着柏氏矢量的方向在滑移面上不断地作少量的位移而逐步实现；

攀移：刃型位错除了可以在滑移面发生滑移外，还可以在垂直于滑移面的方向上运动，通常把多余的半原子面向上运动称正攀移，向下运动称为负攀移。位错攀移是一种扩散过程，借助于空位或质点的扩散与运动，刃型位错向上或向下攀移一定的原子间距；（螺型位错无多余半原子面，因此不能发生攀移。也就是说，只有刃型位错既能滑移又能攀移，而螺型位错只能滑移不能攀移；刃位错只有一个滑移面，因此刃型位错不可能产生交滑移。而螺位错的滑移面不唯一，因此螺位错可以发生交滑移。）

交滑移：当某一螺型位错在原滑移面上运动受阻时，有可能从原滑移面转移到与之相交的另一滑移面上去继续滑移，这一过程称为交滑移（注意：在交滑移过程中滑移面变化但滑移方

向不变。)

双交滑移: 如果交滑移后的位错再转回和原滑移面平行的滑移面上继续运动, 则称为双交滑移

多滑移: 当外力在几个滑移系上的分切应力相等并同时达到了临界分切应力时, 产生同时滑移的现象。

滑移系: 一个滑移面和此面上的一个滑移方向合起来叫做一个滑移系。

位错在滑移系上滑移的主要原因: 滑移面和滑移方向往往是金属晶体中原子排列最密的晶面和晶向。密排面的面间距最大, 点阵阻力最小, 因而容易沿着这些面发生滑移; 密排方向上原子间距最短, 即位错 b 最小, 因而位错容易移动。

临界分切应力: 滑移系开动所需的最小分切应力; 它是一个定值, 与材料本身性质有关, 与外力取向无关。

施密特因子 (取向因子): 拉伸变形时, 能够引起晶体滑移的分切应力 τ 的大小取决于该滑移面和晶向的空间位置 (λ 和 ϕ)。 τ 与拉伸应力 σ 间的关系为: $\tau = \sigma \cos\phi \cos\lambda$; 则 $\cos\phi \cos\lambda$ 被称为取向因子, 或称施密特因子, 取向因子越大, 则分切应力越大。(当滑移面与外力方向平行, 或者是滑移方向与外力方向垂直的情况下不可能产生滑移。)

3、离子晶体、共价晶体和聚合物晶体中的位错。

由于局部电中性的要求, 使离子固体中位错的概念变得复杂。

保持电中性的措施有:

- 在晶体学等同位置间最短矢量不是离子接触的方向;
- 滑移面 (即最高密度面) 不是密排面;
- 有效滑移系的数目有限。

离子晶体:

一般而言, 滑移方向或滑移面都不是密排的, 因而位错在离子晶体中移动的阻力比金属晶体中的高, 此外, 同类离子相接触的可能性进一步限制了离子晶体中的滑移系数目。因此, 这些因素都降低了位错的活动性, 导致脆性断裂的倾向。

共价晶体:

其低的配位数导致它的原子致密度较低, 也导致其线密度和面密度也较低。因此它的柏氏矢量也较长, 位错移动的固有阻力值变高。此外, 位错移动时必须破断高的共价键能, 从而使得它具有高的强度。

聚合物:

聚合物的晶胞尺寸很大, 几何关系较复杂, 所以柏氏矢量比其他晶体结构中大很多, 而且聚合物中分子内共价键比分子间二次键强很多, 使得主滑移方向沿着高分子链的轴方向。

4、晶界、亚晶界、孪晶界、堆垛层错和相界面等基本概念。

晶界: 多数晶体物质由许多晶粒所组成, 属于同一固相而位向不同的晶粒间的界面称为晶界, 它是一种内界面。

亚晶界: 每个晶粒又由若干个位向有差异的亚晶粒组成, 相邻亚晶粒间的界面称为亚晶界。(亚晶界之间的位相差小于 2°)

小角度晶界: 相邻晶粒位向差小于 10° 的晶界;

小角度晶界又分为对称倾斜晶界、非对称倾斜晶界、扭转晶界和重合晶界。对称倾斜晶界可看成是由一系列平行的刃型位错构成, 非对称倾斜晶界可看成是由两组柏氏矢量相互垂直的

刃型位错交错排列而成。扭转晶界可看成是由两部分晶体绕某一轴在一个共同的晶面上相对扭转一个角度构成。

大角度晶界：相邻晶粒位向差大于 10° 的晶界；

孪晶界：两个晶体或一个晶体的两部分沿一个公共的晶面构成镜面对称的位向关系，这两个晶体称孪晶，此公共界面叫孪晶界；孪晶界分为共格和非共格孪晶界

共格孪晶界：在孪晶面上的原子同时位于两个晶体点阵的结点上，为两个晶体所共有，属于自然地完全匹配，是无畸变的完全共格晶面，界面能为普通晶界界面能的 $1/10$ ，很稳定。

非共格孪晶界：孪晶界相对于孪晶面旋转一定角度的到得界面，孪晶界上只有部分原子为两部分晶体所有，原子错排较严重，界面能为普通界面的 $1/2$ ；

堆垛层错：实际晶体结构中，密排面的正常堆垛顺序可能遭到破坏和错排，称为堆垛层错。分插入型和抽出型

晶界能：形成单位面积界面时，系统的自由能的变化，等于界面区单位面积的能量减去无界面时该区单位面积的能量。

相界面：具有不同结构的两相之间的分界面称“相界”

A,共格相界：晶面上的原子同时位于两相晶格的节点上，两相的晶格是彼此衔接的，晶面上的原子为两者共有。

B,半共格相界：若相邻两晶体在相界面处的晶面间距相差较大，则在相界面上不可能做到完全的一一对应，会在界面上产生一些位错，以降低界面的弹性应变能，这时界面上两相原子部分地保持匹配，称为半共格相界。

C,非共格相界：当两相在相界面处的原子排列相差很大时，只能形成非共格相界面，可看成是由原子不规则排列很薄的过渡层构成的。

相界面能包括 弹性畸变能 和 化学交互作用能

共格相界，界面上原子保持着匹配关系，故界面上原子结合键数目不变，以畸变能为主；

非共格相界，界面上原子的化学键数目和强度与晶体内相比发生了很大变化，以化学能为主，而且总的界面能最高。

相界面能由小到大： 共格-----半共格-----非共格（递增）

5、晶粒度和晶粒尺寸的基本概念及测量。

晶粒度：晶粒大小的量度。

晶粒尺寸：即为原始晶粒的尺寸。

6、体缺陷基本概念。

体缺陷：在任意方向上的缺陷区尺寸都可与晶体或晶粒的线度相比拟，包括沉淀相，空洞，气泡，层错四面体。

分为 空洞（孔洞）：材料的开放的体积区域；

沉淀物：自身晶体结构和宿主的点阵不同；

7、材料的强化方法及机制：

A, **固溶强化：**固溶体合金中的溶质原子，不论是以置换方式或间隙方式溶入基体金属，都会对金属的塑性变形产生影响，主要表现是使变形抗力提高，应力—应变曲线升高，变形能力（塑性）下降，这就是“固溶强化”。

固溶强化的本质是位错被溶质原子钉扎而难于启动，增加了位错滑移的阻力

固溶强化的作用机制有以下四种情况：

(1) 溶质原子与位错的弹性交互作用而形成科(柯)垂耳气团(cottrell atmosphere)。位错滑移时,需要拖着气团一起运动,或挣脱气团而运动,故所需切应力增大,强度提高。

(2) 溶质原子与位错的化学交互作用形成铃木(Suzuki)气团(溶质原子在堆垛层错区中形成局部偏聚),使层错宽度增加,对位错的运动起阻碍作用,从而使合金强度提高。

(3) 溶质原子与位错的静电交互作用。在刃位错周围,因应力场的不同而引起自由电子重新分布,形成电偶极子,与溶质原子发生不同程度的静电交互作用,使溶质原子在刃位错周围偏聚。这也对位错的滑移产生阻力,引起强化。但其强化效果不很显著。

(4) 在固溶体中,存在溶质原子偏聚区和短程有序。当位错运动通过这些区域时会使短程有序态和偏聚区遭到破坏,引起能量升高,从而增加位错运动的阻力,导致强化。

说明:化学交互作用对提高强度的贡献比弹性交互作用小,但弹性交互作用随温度上升而减小,而铃木效应随温度变化不大,故在高温时化学交互作用显得比较重要。

(即:溶质原子使溶剂晶格发生畸变增加位错移动阻力;溶质原子在位错周围形成柯氏气团对位错运动起钉扎作用;溶质原子在层错区的偏聚阻碍扩展位错的运动;所有阻止位错运动,增加位错阻力的因素都可使强度提高)

影响固溶强化的因素:

- (1) 在固溶体的溶解度范围内,溶质的质量分数越大,强化作用越大;
- (2) 溶质原子与溶剂原子尺寸相差越大,强化作用大;
- (3) 形成间隙固溶体的溶质元素的强化作用大于形成置换固溶体的元素;
- (4) 溶质原子与溶剂原子的价电子数相差越大,强化作用越大

B, 应变硬化:金属材料在再结晶温度以下塑性变形时强度和硬度升高,而塑性和韧性下降的现象。

加工硬化的产生原因:

位错之间的交互作用阻碍了位错的运动。随着塑性变形量的增大,位错密度增加,位错之间的交互作用加剧,形成了塞积群、缠结和胞状亚结构等,减小了位错运动的平均自由程,增大了位错运动的阻力,大大增加了不能移动位错的数量,因此显著提高了继续变形的流变应力,使合金产生强化。

C, 细晶强化:晶粒愈细小,晶界的总长度逾长,对位错滑移的阻碍越大,材料的屈服强度愈高。

细晶强化的产生原因:根据霍尔佩奇公式,晶粒的平均直径越小,强度越高,因为晶粒越细,位错塞积群中的位错数目越少,应力集中越小,需要在较大的外加应力下才能使相邻的晶粒发生塑性变形,所以屈服强度提高。

(常温下晶界具有阻碍变形的强化作用。一方面,晶界的存在会阻碍位错运动。当位错运动到晶界处时发生塞积,产生应力集中。另一方面,晶界的存在降低了多晶体均匀变形的能力。因此常温下晶界对多晶体的变形过程具有明显的阻碍作用,会增大多晶体的塑性变形抗力,使多晶体产生强化。

晶界数量取决于晶粒大小。一定体积内晶粒越小,晶界数量越多,则晶界的强化作用越大,即产生细晶强化现象。)

必须指出,细晶强化不适应于高温,因为高温下的晶界在应力作用下会产生粘滞性流动,发生晶粒沿晶界的相对滑动。所以,细晶粒组织的高温强度反而较低。

细化晶粒不但可提高材料的强度,同时还可改善材料的塑性和韧性,使材料具有较好的

综合力学性能。因此，一般在室温使用的结构材料都希望获得细小而均匀的晶粒。

原因：晶粒越细，一定体积内的晶粒数目越多，在同样的变形量下，变形可以分散在更多的晶粒内进行，变形的不均匀性变小，相对来说引起的应力集中也较小，开裂的机会也就相应地减少了。此外，晶粒越细，晶界的弯折越多，越不利于裂纹的传播，从而使金属在断裂前可以承受较大的塑性变形，即表现出较高的塑性。同时裂纹不易产生也不易传播，从而在断裂过程中吸收了更多的能量，即表现出较高的韧性。

D，第二相强化：当合金中的第二相以细小弥散的质点均匀分布在基体相上时，通过对位错运动的阻碍作用而产生很大的塑性变形抗力，使合金表现出显著的强化效果，称为第二相强化

第二相强化原因：

细小弥散分布的第二相质点（微粒）与位错交互作用，阻碍了位错的运动，增大了塑性变形抗力，从而提高了合金的强度。第二相是片状分布时，片层间距越小，相界越多，强度越高；第二相是粒状分布时，颗粒越细小，位错运动阻力越大，强度越高。通常可将第二相粒子分为“不可变形的”和“可变形的”两类。这两类粒子与位错交互作用的方式不同，其强化的途径也就不同。

E，时效强化：在金属基体中加入固溶度随温度降低而降低的合金元素，通过高温固溶淬火处理，形成过饱和固溶体。通过时效，过饱和固溶体分解，合金元素以一定的方式析出，弥散分布在基体中形成沉淀相，而沉淀相能有效阻止位错运动，从而提高合金强度。（在要求写多一点时加上这一点）

（固溶强化、应变强化、细晶强化、弥散强化）

晶体缺陷对材料性能的影响：晶体缺陷包括点缺陷（如空位、间隙原子、置换原子）、线缺陷（如位错）和面缺陷（晶界、相界、亚晶界、层错）。间隙原子和置换原子可以造成晶格畸变，阻止位错的运动；可以形成柯氏气团钉扎位错，提高材料强度。增加位错运动的阻力是提高材料强度的主要方法，形变强化的本质就是位错密度的增加而使强度增加；晶界越多，晶粒越细，应力集中越小，强度就越高，遵循霍尔佩奇关系式；相界越多，片层间距越小，或颗粒越细小，则强度越高。总之，晶体缺陷之间的相互作用及分布规律不同，对强度的影响不同。

第 5 部分 高聚物和非晶态结构

1，高分子的结构 链结构和聚集态结构

高分子链结构：分 近程结构和远程结构

近程结构：构造和构型，属于化学结构，叫“一次结构”

构造：研究分子链中的原子类型和排列、化学结构分类，结构单元的链接顺序，交联等内容。

构型：研究取代基围绕特定原子在空间的排列规律。

- （1）无规立构：取代基在主链两侧不规则的排布，随机排布。
- （2）全同立构：所有取代基位于主链的同一侧；
- （3）间同立构：取代基交替地分布在主链两侧；

远程结构：“二次结构”指单个高分子的大小、形态、链的柔顺性及分子在各种环境下采取的构象。

聚集态结构：高分子材料整体的内部结构，包括**晶态结构**、**非晶态结构**、**取向态结构**、**液晶态结构**（这四种描述高分子间是如何堆砌的“三次结构”）及**织态结构**（不同分子间或高分子与添加剂分子间的排列“高次结构”）等。

2, 玻璃化转变：

玻璃化转变现象：非晶态的高分子可以按其力学性质分为玻璃态、高弹态、黏流态三种状态，高分子材料随着温度的变化会在玻璃态与高弹态之间相互转化。材料在玻璃态与高弹态之间转化的温度叫**玻璃化转变温度**。

玻璃化转变温度是所有非晶态材料的特征

影响因素：

因为玻璃化转变温度是高分子链段从冻结到运动的一个转变温度，所以凡是影响高分子柔顺性的因素都影响 T_g ；

影响（柔顺性）因素：

A, 主链的结构：主链全由单键构成时，具有较好的柔顺性。主链结构的不同也会导致内旋的难易差异（如含有芳杂环时，柔顺性差）

B, 取代基的特性：取代基的极性越强，其相互间的作用力越大，柔顺性越差；取代基体积越大，柔顺性越差；取代基对称性越好，柔顺性越好。

C, 链的长度：分子链的长度和相对分子质量有关，相对分子质量越大，则分子链越长，柔顺性越好些。

D, 交联度：越大，柔顺性越差；

E, 结晶度：越大，柔顺性越差。

一方面，引入刚性基团或极性基团，交联，结晶，使得 T_g 升高，

另一方面，加入增塑剂、溶剂，引入柔性基团会使 T_g 降低。

3, 结晶能力，结晶速度，结晶度的影响因素；

影响结晶能力的因素：

(1) 链的对称性，对称性越高，越容易结晶

(2) 链的规整性，对于主链完全是无规的，不具有对称中心的高分子，一般都失去了结晶能力

(3) 共聚效应，无规共聚通常会破坏链的对称性和规整性，从而使结晶能力降低或丧失殆尽

(4) 链的柔顺性，使链的柔顺性降低的结构因素都会降低高分子的结晶能力

结晶度：聚合物中晶态的质量分数或体积分数。

结晶度的影响因素：

A, 侧基的尺寸：具有尺寸大的侧基聚合物难于结晶；

B, 链的分支：有分支的链比没有分支的难结晶些，

C, 立构的规整度：全同立构和间同立构易于结晶；

D, 重复单元的复杂性：有长的复杂单元的聚合物，难结晶；

E, 链间的二次键：极性侧基有利于晶体的形成；

4, 玻璃态高聚物的结构与性能；高弹态高聚物的力学性质，高弹性的特点；橡胶弹性对温度的依赖关系；高聚物粘弹性力学松弛现象，粘弹性与时间、温度的关系；热固性与热塑性聚合物的概念及材料特性

高弹态特点：在高弹态下，高分子受外力时，分子链通过单键内旋和链段的改变构象，以对外力做出响应。高弹态的弹性变形具有明显的时间依赖性（即松弛现象），

这种弹性变形是外力的作用促使高分子主链发生内旋的过程，它所需的外力比高分子在玻璃态时变形的应力小得多。高弹态主要涉及链段的运动，而链段运动是高分子所独有的，所以高弹态是高分子所独有的一种力学行为。（弹性模量小，弹性应变大，主链的构象可以改变，是柔软的固体，弹性变形具有明显的时间依赖性（松弛现象），是高分子独有的一种力学行为）

玻璃态高聚物的结构与性能：玻璃态高聚物短程有序，长程无序，其变形小（约为0.01%~0.1%），弹性模量高（约~Pa），应力与应变满足胡克定律，没有构象变化，类似于刚硬的玻璃体

热固性和热塑性聚合物概念和特性：

热固性塑料：由许多线型或支链型大分子通过化学键连接而成的交联体形聚合物，许多大分子键合在一起，已无单个大分子可言。这类聚合物受热不软化，也不易被溶剂所溶胀。

特性：比热塑性具有更高的硬度，强度，脆性大，但有尺寸稳定性。

热塑性聚合物（Thermoplastics Polymer）：聚合物大分子之间以物理力聚而成，加热时可熔融，并能溶于适当溶剂中。热塑性聚合物受热时可塑化，冷却时则固化成型，并且可以如此反复进行。

特性：较好的塑性及冲击韧性。

数均摩尔质量：试样的总重量除以试样中的分子数目

玻璃的网络修饰体：因为满足扎卡赖亚森规则的氧化物能大面积的形成三维玻璃网络，所以称它们为网络形成氧化物或简称网络形成体，其他的称作网络修饰体，它们不能形成大的一次键网

对材料的影响：对于不满足扎卡赖亚森规则的氧化物，当它与一个或多个网络形成氧化物联合时会引起玻璃的键的结构改变。网络修饰体能破断三维网格中的一次键，从而降低一次键的密度，由于玻璃中的一次键的密度降低，玻璃的转变温度会降低。

第六部分，材料凝固和结晶

相律的基本概念：相律表示了平衡条件下，系统的自由度与相数、组元数之间的关系。 $f = C - P + 2$ ，式中， f —自由度，它是指不影响体系平衡状态的独立可变参数的数目； C —组元数； P —相数；2表示温度与压力两个因素。

1, 基本概念：

凝固：物质从液态冷却转变为固态的过程；

结晶：凝固后的物质是晶体，这种凝固叫结晶；

匀晶转变：由液相结晶出单相固溶体的过程称为匀晶转变

包晶转变：已结晶的固相与剩余液相反应形成另一固相的恒温转变

各种相变：

匀晶转变：液 \rightleftharpoons 固（一般不是恒温转变）

包晶转变：液+固1 \rightleftharpoons 固2（恒温转变）（ $L + \beta \rightleftharpoons \alpha$ ）

共晶转变：液 \rightleftharpoons 固1+固2（恒温转变）（ $L \rightleftharpoons \alpha + \beta$ ）

偏晶转变：液1 \rightleftharpoons 固+液2（恒温转变）（ $L_1 \rightleftharpoons L_2 + \alpha$ ）

共析转变：固1 \rightleftharpoons 固2+固3（恒温转变）（ $\gamma \rightleftharpoons \alpha + \beta$ ）

包析转变：固1+固2 \rightleftharpoons 固3（恒温转变）（ $\gamma + \beta \rightleftharpoons \alpha$ ）

结构起伏：液态结构的原子排列为长程无序，短程有序，并且短程有序原子团不是固定不变的，它是此消彼长，瞬息万变，尺寸不稳定的结构，这种现象称为结构起伏。

能量起伏：体系中每个微小体积所实际具有的能量，会偏离体系平均能量水平而瞬时涨落的现象。

临界晶核：当晶胚的 r 小于 r^* 时，其长大将导致体系自由能增加，故这种尺寸晶胚不稳定，难以长大，最后消失；当 $r > r^*$ 时，晶胚长大使体系自由能降低，这些晶胚成稳定晶核，因此这种半径为 r^* 的晶核叫临界晶核。

过冷度越大，临界半径越小，则形核几率也越大，晶核数目也增多；

形核功：形成临界晶核所需的功，它与过冷度的平方成反比，过冷度越大，所需的形核功越小。

成分三角形：表示三元系成分的点位于两坐标轴所限定的三角形内，这个三角形叫做成分三角形

等温截面：三元相图中温度轴与浓度三角形垂直，所以固定温度的截面圆必定平行于浓度三角形，这样的截面称为水平截面，又叫等温截面

垂直截面：固定一个成分变量并保留温度变量截面，必定与浓度三角形垂直，所以称为垂直截面

均匀形核：新相晶核是在母相中均匀地成长的，即晶核由液相中的一些原子团直接形成，不受杂质粒子或外表面的影响。

形核率：当温度低于熔点时，单位体积液体内，在单位时间所形成的晶核数。其受两个因素影响：形核功因子和原子扩散几率因子；

非均匀形核：新相优先在母相中存在的异质处形核，即依附于液相中的杂质或外来表面形核。

非均匀形核功与均匀形核功：

非均匀形核的影响条件：

A，基底晶体与结晶相的晶格错配度的影响：错配度越小，共格情况越好，界面张力越小，越容易进行非均匀形核。

B，过冷度的影响：越大，促使非均匀形核的外来质点的种类和数量越多，非均匀形核能力越强；

材料成分过冷：

界面前沿液体中的实际温度低于由溶质分布所决定的凝固温度时产生的过冷。

晶体的生长机制：

液固界面分类：

粗糙界面：界面的平衡结构约有一半的原子被固相原子占据而另外一半位置空着。也称“非小平面”

光滑界面：固相一侧几乎全部为固相原子所占据，只剩下少数空位和台阶；

第 7 部分 固态相变基础

固态相变的特点及分类；均匀形核和非均匀形核等基本概念。相变驱动力，界面能与畸变

能在形核中的作用。

相变驱动力：液相和固相的体积自由能之差

相变阻力：由于晶胚构成新的表面，又会引起表面自由能的增加，这构成相变阻力。