晶體概念 www.tool-tool.com

要理解這幾個概念,首先要理解晶體概念,以及晶粒概念。我想學固體物理的或者金屬材料的都會對這些概念很清楚!

自然界中物質的存在狀態有三種:氣態、液態、固態

固體又可分爲兩種存在形式:晶體和非晶體

晶體是經過結晶過程而形成的具有規則的幾何外形的固體; 晶體中原子或分子在空間按一定 規律週期性重複的排列。

晶體共同特點:

均 匀 性: 晶體內部各個部分的宏觀性質是相同的

各向異性: 晶體種不同的方向上具有不同的物理性質。

固定熔點: 晶體具有週期性結構,熔化時,各部分需要同樣的溫度

規則外形:理想環境中生長的晶體應爲凸多邊形。

對稱性: 晶體的理想外形和晶體內部結構都具有特定的對稱性。

對晶體的研究,固體物理學家從成健角度分爲

離子晶體

原子晶體

分子晶體

金屬晶體

顯微學則從空間幾何上來分,有七大晶系,十四種布拉菲點陣,230種空間群,用拓撲學, 群論知識去研究理解。可參考《晶體學中的對稱群》一書 (郭可信,王仁卉著)。

與晶體對應的,原子或分子無規則排列,無週期性無對稱性的固體叫非晶,如玻璃,非晶碳。 一般,無定型就是非晶 英語叫 amorphous,也有人叫 glass(玻璃態).

晶粒是另外一個概念,搞材料的人對這個最熟了。首先提出這個概念的是凝固理論。從液態轉變爲固態的過程首先要成核,然後生長,這個過程叫晶粒的成核長大。晶粒內分子、原子

都是有規則地排列的,所以一個晶粒就是單晶。多個晶粒,每個晶粒的大小和形狀不同,而 且取向也是凌亂的,沒有明顯的外形,也不表現各向異性,是多晶。英文晶粒用 Grain 表示,注 意與 Particle 是有區別的。

有了晶粒,那麼晶粒大小(晶粒度),均勻程度,各個晶粒的取向關係都是很重要的組織(組織簡單說就是指固體微觀形貌特徵)參數。對於大多數的金屬材料,晶粒越細,材料性能(力學性能)越好,好比麵團,顆粒粗的麵團肯定不好成型,容易斷裂。所以很多冶金學家材料科學家一直在開發晶粒細化技術。

科學總是喜歡極端,看得越遠的鏡子叫望遠鏡;看得越細的鏡子叫顯微鏡。晶粒度也是這樣的,很小的晶粒度我們喜歡,很大的我們也喜歡。最初,顯微鏡倍數還不是很高的時候,能看到微米級的時候,覺得晶粒小的微米數量是非常小的了,而且這個時候材料的力學性能特別好。人們習慣把這種小尺度晶粒較微晶。然而科學總是發展的,有一天人們發現如果晶粒度在小呢,材料性能變得不可思議了,什麼量子效應,隧道效應,超延展性等等很多小尺寸效應都出來了,這就是現在很熱的,熱得不得了的納米,晶粒度在1nm-100nm之間的晶粒我們叫納米晶。

再說說非晶,非晶是無規則排列,無週期無對稱特徵,原子排列無序,沒有一定的晶格常數, 描敘結構特點的只有徑向分佈函數,這是個統計的量。我們不知道具體確定的晶格常數,我 們總可以知道面間距的統計分佈情況吧。非晶有很多誘人的特性,所以也有一幫子人在成天 做非晶,尤其是作大塊的金屬非晶。因爲它的應力應變曲線很特別。前面說了,從液態到到 固態有個成核長大的過程,我不讓他成核呢,直接到固態,得到非晶,這需要很快的冷卻速 度。所以各路人馬一方面在拼命提高冷卻速度,一方面在不斷尋找新的合金配方,因爲不同 的合金配方有不同的非晶形成能力,通常有 Tg 參數表徵,叫玻璃化溫度。非晶沒有晶粒, 也就沒有晶界一說。也有人曾跟我說過非晶可以看成有晶界組成。 那麼另一方面,我讓他 成核,不讓他長大呢,不就成了納米晶。 人們都說,強扭的瓜不甜,既然都是抑制成核長大,那麼從熱力學上看,很多非晶,納米晶 應該不是穩態相。所以你作出非晶、納米晶了,人們自然會問你熱穩定性如何。

後來,又有一個牛人叫盧柯,本來他是搞非晶的,讀研究生的時候他還一直想把非晶的結構 搞清楚呢(牛人就是牛人,選題這麼牛,非晶的結構現在人們還不是很清楚)。他想既然我 把非晶做出來了,爲什麼我不可以把非晶直接晶化成納米晶呢,納米晶熱啊,耶,這也是一 種方法,叫非晶晶化法。

既然晶界是一種缺陷,缺陷當然會影響材料性能,好壞先不管他,但是總不好控制。如果我 把整個一個材料做成一個晶粒,也就是單晶,會是什麼樣子呢,人們發現單晶確實會有多晶 非晶不同的性能,各向異性,誰都知道啊。當然還有其他的特性。所以很多人也在天天搗鼓 著,弄些單晶來。

現在不得不說准晶。准晶體的發現,是 20 世紀 80 年代晶體學研究中的一次突破。這是我們做電鏡的人的功勞。1984 年底,D.Shechtman 等人宣佈,他們在急冷凝固的 Al Mn 合金中發現了具有五重旋轉對稱但並無無平移週期性的合金相,在晶體學及相關的學術界引起了很大的震動。不久,這種無平移同期性但有位置序的晶體就被稱爲准晶體。後來,郭先生一看,哇,我們這裡有很多這種東西啊,抓緊分析,馬上寫文章,那段金屬固體原子像的 APL,PRL 多的不得了,基本上是這方面的內容。准晶因此也被 D.Shechtman 稱爲"中國像"。

斑竹也提到過彎晶,英文叫 twinning,彎晶其實是金屬塑性變形裡的一個重要概念。彎生與滑移是兩種基本的形變機制。從微觀上看,晶體原子排列沿某一特定面鏡像對稱。那個面叫樂晶面。很多教科書有介紹。一般面心立方結構的金屬材料,滑移系多,已發生滑移,但是特定條件下也有彎生。加上面心立方結構層錯能高,不容易出現彎晶,曾經一段能夠在面心立方裡發現彎晶也可以發很好的文章。前兩年,馬恩就因爲在鋁裡面發現了彎晶,發了篇 S cience 呢。盧柯去年也因爲在納米銅裡做出了很多彎晶,既提高了銅的強度,又保持了銅良好導電性(通常這是一對矛盾),也發了個 Science.這年頭 Science 很值錢啊。像一個窮山溝,除了個清華大學生一樣。

現在,從顯微學上來看單晶,多晶,微晶,非晶,准晶,納米晶,加上學晶。單晶與多晶,一個晶粒就是單晶,多個晶粒就是多晶,沒有晶粒就是非晶。單晶只有一套衍射斑點;多晶的話,取向不同會表現幾套斑點,標定的時候,一套一套來,當然有可能有的斑點重合,通過多晶衍射的標定可以知道晶粒或者兩相之間取向關係。如果晶粒太小,可能會出現多晶衍射環。非晶衍射是非晶衍射環,這個環均勻連續,與多晶衍射環有區別。

納米晶,微晶是從晶粒度大小角度來說的,在大一點的晶粒,叫粗晶的。在從衍射上看,一般很難作納米晶的單晶衍射,因爲最小物鏡光欄選區還是太大。有做 NBED 的麼,不知道這個可不可以。

學晶在衍射上的表現是很值得我們學習研究的,也最見標定衍射譜的功力,大家可以參照郭可信,葉恒強編的那本《電子衍射在材料科學中應用》第六章。

准晶,一般晶體不會有五次對稱,只有 1,2,3,4,6 次旋轉對稱(這個證明經常作爲博士生入學考試題,呵呵)。所以看到衍射斑點是五次對稱的,10 對稱的啊,其他什麼的,可能就是准晶。