



普通高等教育“十一五”国家级规划教材



机械设计制造及其自动化

专业系列教材

工程材料及 成形技术基础

(第二版)

吕广庶 张远明 主编



高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

普通高等教育“十一五”国家级规划教材
机械设计制造及其自动化专业系列教材

工程材料及 成形技术基础

Gongcheng Cailiao ji
Chengxing Jishu Jichu
(第二版)

吕广庶 张远明 主编



高等教育出版社·北京
HIGHER EDUCATION PRESS BEIJING

内容简介

本书是在 2001 年第一版的基础上修订而成的，是普通高等教育“十一五”国家级规划教材，高等教育出版社机械设计制造及其自动化专业系列教材之一。

本书将工程材料与热加工工艺基础两门课程的内容进行了有机整合，打破了原来工程材料与成形工艺技术分别自成体系、模块割裂的格局，建立了避免重复、互动有序、相互联系的材料与成形技术统一的新体系。

本书以材料的成分—工艺—结构—性能—应用为主线组织教学内容，全面系统地阐述了金属材料、陶瓷材料、高分子材料和复合材料及其成形工艺的基本原理、基础知识和工程应用。本书共 12 章，第 1 章工程材料的结构与性能，第 2 章金属材料的凝固与固态相变，第 3 章金属材料的塑性变形，第 4 章金属材料热处理，第 5 章金属材料表面改性处理，第 6 章金属材料，第 7 章铸造，第 8 章塑性加工，第 9 章焊接，第 10 章非金属材料及其成形，第 11 章材料质量检验与零件失效分析，第 12 章机械零件材料及成形工艺的选用。

本书可作为高等学校机械设计制造及其自动化专业的教材，也可供有关工程技术人员参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

工程材料及成形技术基础 / 吕广庶，张远明主编。—2 版。—北京：高等教育出版社，2011.6

ISBN 978 - 7 - 04 - 031397 - 0

I. ①工… II. ①吕… ②张… III. ①工程材料 - 成形 - 工艺 - 高等学校 - 教材 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2011) 第 049774 号

策划编辑 卢 广 责任编辑 卢 广 封面设计 李卫青
版式设计 王 莹 责任校对 刘 莉 责任印制 朱学忠

出版发行	高等教育出版社	网 址	http://www.hep.edu.cn
社 址	北京市西城区德外大街 4 号		http://www.hep.com.cn
邮 政 编 码	100120	网上订购	http://www.landraco.com
印 刷	山东省高唐印刷有限责任公司		http://www.landraco.com.cn
开 本	787×1092 1/16	版 次	2001 年 9 月第 1 版
印 张	21.25		2011 年 6 月第 2 版
字 数	520 000	印 次	2011 年 6 月第 1 次印刷
购书热线	010-58581118	定 价	33.20 元
咨询电话	400-810-0598		

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题，请到所购图书销售部门联系调换

版权所有 侵权必究

物 料 号 31397-00

前　　言

工程材料及成形技术基础是在原工程材料、热加工工艺两门课程的基础上，重新组建的一门机械制造类专业的主要技术基础课。

编写本书的主要依据是教育部制定的《工程材料及机械制造基础课程教学基本要求》，以及高等教育面向 21 世纪教学内容和课程体系改革项目“机械类专业人才培养方案及教学内容和课程体系改革的研究与实践”的研究成果。在编写过程中，结合目前教改的基本指导思想和原则，以及实施素质教育和加强技术创新的精神，根据机械设计制造及其自动化专业的实际需要，进行了课程体系改革的大胆尝试。力图使教材内容与课程定位相统一，与机械设计及制造密切配合，以培养学生使用和选择工程材料及成形工艺的能力为主要目的，去掉繁冗的工艺细节，保留必要的理论基础。在教材结构上，试图打破原来工程材料与工艺技术分别自成体系、模块割裂的格局，建立避免重复、互动有序、相互联系的材料与成形技术统一的新体系。

本书以材料的成分—工艺—结构—性能—应用这一材料普遍规律为主线，系统阐述金属材料、陶瓷材料、高分子材料和复合材料及其成形工艺的基本原理、基本知识和工程应用三个层次的内容。考虑到本课程是在工程训练实践之后开设，学生已具备了工艺的感性认识基础和初步知识，因此将材料及成形工艺原理直接进行了整合。为适应机械设计制造及其自动化专业发展的需要，除以结构材料为主重点介绍力学性能之外，也介绍功能材料及其物理性能的知识。为了树立产品—质量—效益的意识，增加了材料及成形质量检验的内容。在介绍成形技术时，充分注意零件结构工艺性与设计的关系、成形工艺与质量的关系。在分析材料与成形工艺的选用时，强调综合分析能力的运用，并增加了介绍新材料、新工艺、新技术的篇幅，增加了计算机在材料及成形技术中应用的介绍。

本书适用教学时数为 64 学时，主要授课对象是机械设计制造及其自动化专业学生，对于其他机械类专业，可根据具体情况进行删减或补充。

当前，随着“质量工程”的实施，工程教育改革的不断深入，加强和提高学生的创新能力已成为课程改革和教材建设的重要原则。据此，本教材进行了修订。

参加本书修订工作的有：北京理工大学吕广庶（绪论、第 11、12 章），东南大学张远明（第 1、6、10 章及第 2 章 1—3 节），北京理工大学李树奎（第 2 章 4—6 节），哈尔滨工业大学邢忠文（第 3、8、9 章），天津大学倪为国（第 4、5 章），北京科技大学张锁梅（第 7 章）。全书由吕广庶、张远明担任主编。

本书第一版由清华大学郑明新教授和严绍华教授主审，本版由北京理工大学刘颖教授主审，在此一并表示深切的谢意！

由于编者水平所限，书中缺点在所难免，恳请广大读者指正。

编者

2011 年 3 月

目 录

绪论	(1)
第 1 章 工程材料的结构与性能	(4)
1.1 材料原子(或分子)的相互作用	(4)
1.2 晶体材料的原子排列	(6)
1.3 非晶态材料中的原子排列	(11)
1.4 合金的晶体结构	(11)
1.5 高聚物的结构	(14)
1.6 陶瓷的结构	(17)
1.7 工程材料的性能	(18)
思考题	(32)
第 2 章 金属材料的凝固与固态相变	(34)
2.1 纯金属的结晶	(34)
2.2 合金的凝固	(39)
2.3 铁碳合金平衡态的相变基础	(47)
2.4 钢在加热时的转变	(54)
2.5 钢在冷却时的转变	(56)
思考题	(62)
第 3 章 金属材料的塑性变形	(64)
3.1 单晶体和多晶体的塑性变形	(64)
3.2 金属的形变强化	(67)
3.3 塑性变形金属在加热时组织和性能 的变化	(68)
3.4 塑性加工性能及影响因素	(72)
思考题	(74)
第 4 章 金属材料热处理	(75)
4.1 退火与正火	(75)
4.2 钢的淬火	(78)
4.3 钢的表面淬火	(82)
4.4 钢的回火	(84)
4.5 钢的淬透性	(88)
4.6 固溶热处理与时效强化	(93)
4.7 钢的化学热处理	(94)
4.8 热处理零件的结构工艺性及技术条件 标注	(100)
4.9 热处理技术新进展	(104)
思考题	(109)
第 5 章 金属材料表面改性处理	(110)
5.1 转化膜处理	(110)
5.2 电镀	(112)
5.3 离子沉积	(114)
5.4 热喷涂	(115)
5.5 涂装	(117)
5.6 表面着色和染色	(119)
思考题	(121)
第 6 章 金属材料	(122)
6.1 工业用钢概述	(122)
6.2 合金元素在钢中的作用	(125)
6.3 结构钢	(128)
6.4 工具钢	(134)
6.5 特殊性能钢	(139)
6.6 铸铁	(143)
6.7 铝及其合金	(148)
6.8 铜及其合金	(152)
6.9 轴承合金	(156)
6.10 新型金属材料	(157)
思考题	(162)
第 7 章 铸造	(163)
7.1 砂型铸造及其工艺设计	(163)
7.2 特种铸造	(171)
7.3 金属或合金的铸造性能	(179)
7.4 铸件结构工艺性	(187)
7.5 常用合金铸件的制造	(196)
7.6 铸造新技术及计算机在铸造中的 应用	(206)
思考题	(211)
第 8 章 塑性加工	(212)
8.1 锻造成形	(212)
8.2 板料冲压成形	(223)
8.3 挤压、轧制、拉拔成形	(232)
8.4 特种塑性加工方法	(236)

8.5 塑性加工零件的结构工艺性	(244)	思考题	(306)
8.6 塑性加工技术新进展	(249)	第 11 章 材料质量检验与零件失效分析	
思考题	(251)	11.1 材质检验在机械制造中的作用	(307)
第 9 章 焊接	(252)	11.2 材料及工艺质量标准化体系	(309)
9.1 电弧焊	(252)	11.3 材料质量检验规程	(310)
9.2 电阻焊	(261)	11.4 材质检验技术	(312)
9.3 摩擦焊、钎焊	(265)	11.5 零件失效分析	(315)
9.4 其他焊接方法	(267)	思考题	(318)
9.5 焊接件结构工艺性	(275)		
9.6 常用金属材料的焊接	(283)		
9.7 焊接技术新进展	(288)		
思考题	(289)		
第 10 章 非金属材料及其成形	(291)		
10.1 工程塑料及成形	(291)	第 12 章 机械零件材料及成形工艺的选用	(319)
10.2 橡胶及其成形	(296)	12.1 工程材料及成形工艺选用的基本原则	(319)
10.3 胶粘剂及粘接成形工艺	(298)	12.2 具体成形方法及改性工艺的选用	(324)
10.4 工业陶瓷及其成形	(299)	12.3 典型零件的材料及成形工艺选择	(326)
10.5 复合材料及其成形	(303)	思考题	(332)
		参考文献	(333)

绪 论

1. 工程材料与成形技术的经济地位

材料是人类生产和社会发展的重要物质基础，也是我们日常生活基本资源中不可分割的一个组成部分。材料与人类文明的关系非常密切，在人类文明史上还曾以材料作为划分时代的标志，如石器时代、青铜器时代、铁器时代等。由于材料对社会、经济、技术发展有巨大的影响，所以到了20世纪60年代，人们把材料、能源、信息并列称为现代技术和现代文明的三大支柱，70年代又把新型材料、信息技术和生物技术列为新技术革命的主要标志。这都说明，材料的应用和发展与社会文明进步有着十分密切的关系。

材料选用与材料成形技术是机械制造生产过程的重要组成部分。材料的选用与成形技术是紧密相关的。材料只有经过各种加工，包括材料的成形、改性、连接等，最终形成产品，才能体现其功能和价值。加工工艺技术的突破往往成为新产品能否问世，新技术能否产生的关键。新材料、新工艺、新技术常常是相关联的。对机械制造业而言，其生产过程就是将原材料加工成为产品的过程。而不同的产品，则应选择相应的材料，采用与之相适应的成形方法及加工过程。在现代生产中，整个机械制造系统流程总是由信息流、物质流、能量流联系起来的。这里的信息流主要是指计划、管理、设计、工艺等方面的信息；能量流主要是指动力能源系统；而物质流则主要指从原材料经过加工、制造、装配到成品的过程。可见，材料及加工工艺在制造业中占有重要的位置。

材料的选用与成形工艺是机械零件获得所需性能的重要保证。原材料本身的性质是使机械零件使用性能达到设计要求的基本保证，因此对于不同产品，应选用不同的材料显然是很重要的。事实上，在很多情况下，材料的成形加工不仅是使零件或毛坯获得一定形状的制造工艺方法，也是最终使零件或毛坯获得具有一定组织结构和性能的重要途径。例如，通过铸造成形的金属铸件，其形状尺寸是否符合设计要求，当然是由铸造成形工艺所决定的，而金属铸件的性能除与所使用的合金类型、成分有关外，在很大程度上也取决于铸造成形的工艺方法。又如通过热塑性成形的塑料制品，通过粉末冶金成形的制品，通过烧结成形的陶瓷产品，乃至焊接结构的局部组织和性能也是如此。因此，材料的选用及成形工艺的选择也是提高产品质量的前提。

材料不仅是满足机械乃至物件各种使用性能的载体，而且新材料的使用、新工艺的选择，还可以简化加工，简化机构。例如超塑性金属材料，塑性变形可达100%~300%，比一般金属材料一次最大变形仅百分之十几到百分之几十大得多，用这种材料制做大变形的零件可以一次形变完成。又如形状记忆合金材料，由于它可以在温度变化的情况下恢复原来的形状，在设计人造卫星天线时便采用了Ni-Ti形状记忆合金材料，当卫星发射时可将天线折叠起来，卫星升空后经太阳照射，天线可以自动打开，从而免去了一套繁琐的机构及自动开启装置。可见，材料与成形技术在机械制造中具有不可忽视的重要作用。

工程材料及成形技术还与人类社会有密不可分的关系。工程材料及其加工技术的地位和作用，早已超出了技术经济的范畴。高新技术的发展、资源和能源的有效利用、通信技术的进步、工业产品质量和环境保护的改善、人民生活水平的提高等都与材料及其加工密切相关。从材料的设计、制备、加工、检测，到器件(零件、部件、装备)的制造、使用，直到回收利用，已经形成了一个巨大的社会循环。这一循环的概念提示了材料、能源和环境之间具有强烈的交互作用。

这里还应特别指出器件的回收利用问题。当前各国都在积极研究和探寻有效利用资源、最低限度地减少废弃物的合理方法，这就产生了全新的概念——“再制造工程”。再制造工程不只是把废弃零件简单地修复，而是将大量相似的报废产品，经过检测后，利用高新技术对其进行批量化修复、性能升级。这样，批量回收的废弃器件就成为再制造毛坯，所获得的再制造新产品在技术性能和产品质量上都能达到甚至超过原新品的水平。材料和加工技术在再制造工程中将发挥更大的作用。

在材料的生产和使用以及成形技术方面，中华民族在人类文明历史的进程中有过辉煌的成就，为人类文明做出了巨大的贡献。这也是鼓舞我们不断进步和创造的永恒力量。

新中国成立后，特别是改革开放以来，我国工农业生产、国防、科技事业形成了一支能够攻坚的科研队伍，创造了显著的经济效益与社会效益，为中国高科技事业(例如国防、核能、卫星发射)做出了贡献。近年来，新材料产值已超过几十亿元，表明新材料技术已形成了稳定的产业。近期中国学者提出了建立大型多功能材料设计系统的研究计划，利用大型材料数据库，进行计算机材料辅助设计，为材料的生产、研制和应用提供多种水平的服务。

2. 本课程在机械类专业人才培养中的地位和作用

工程材料及成形技术基础是机械类专业一门重要的技术基础课。

在机械工程领域里，作为一名工程技术人员，无论其工作性质是侧重于设计，还是制造、运行、维护等，都必然要面对工程材料以及成形工艺的选择、使用等问题。因此，工程材料及成形工艺的理论及专业知识是必不可少的。

就设计而言，在设计过程中不仅要确定产品及各种零部件的结构，还必须同时确定所选用的材料及相应的加工方法。设计、选材、加工三者之间是有机关联的关系，不能单独简单处理，在设计时往往需要在预先确定的范围内将几种方案进行分析比较。每一种结构都要选择相应化学成分的材料来满足性能的要求，而每种材料的性能又不是一成不变的，它又取决于材料的组织结构，凡能改变组织结构的加工和使用过程，也必然改变材料的性能。因而，所使用的加工工艺方法应与所选用的材料及所具有的结构相适应。这样，结构的设计、材料的选择、加工工艺方法的选择就成了相互关联的综合性的技术问题，不能把它们割裂开来，孤立地一个个加以解决，更何况还有经济的、社会的因素。因而，工程材料及成形技术是机械设计的重要基础之一。

就加工制造而言，其过程常常是很复杂的，加工工序也是很多的，包括成形、连接、切削加工、特种加工、装配、检测、调试等，其间又可能穿插不同的整体强化、改性处理和表面改性处理等加工工序。合理选择不同的加工工艺方法并安排好工艺路线，是使产品最终达到技术经济指标要求的重要因素之一。其中，零件的成形工艺，包括金属铸造、材料的塑性加工、材料的焊接与粘接等通常是零件制造过程中最基本的，也是对材料性能影响最大的加工工艺。因

此，工程材料及成形技术在机械制造中占有重要的地位。

3. 本课程的内容和要求

教材是教学内容、教学思维方式以及教学改革方案的载体之一，是为课程教学服务的。因此，本教材的内容体系及特点是与目前的教学改革要求密切相关的，是与上面谈到的本课程在专业人才培养中的地位和作用密切相关的。

本教材的内容体系是建立在材料科学基础之上，并紧紧围绕材料及成形工艺的选用这一主线构建和展开的。当然，根据培养目标和课程教学任务的要求，该内容体系中涉及的材料科学方面的知识仅是以必需、够用为度，主要突出结构工程材料及其成形方法的选择、使用等工程技术应用的内容。

本教材在内容结构上大体可分为材料与成形技术的基本原理、基本知识与工程应用三个层次。

在工程材料与成形技术的基本原理方面，主要明确三种关系，即：材料三要素（成分、结构、微观组织）与使用性能的关系；材料改性及表面强化工艺与材料成分、性能间的关系；材料成形工艺与材料组织、性能间的关系。这三种关系也可以简化为材料的成分、改性工艺及成形工艺对结构、微观组织、性能影响的规律。这些规律是制造、开发材料及确定改性与成形工艺的理论基础。

在工程材料与成形技术的基本知识方面，包括下列五类问题，即：①各类工程材料的特点及应用，主要包括金属材料、工程陶瓷材料、高分子材料、复合材料；②材料改性工艺的特点及应用，主要是热处理工艺及表面改性工艺；③各种成形工艺的特点与应用，包括液态成形技术、固态成形技术及连接成形技术，主要以金属材料的铸造、塑性加工及焊接工艺为主；④零件材料质量的控制，包括质量检验标准、检验项目及方法；⑤新材料的发展及现代改性与成形工艺的进展。

工程材料与成形技术的工程应用是本教材的核心内容。基本原理与基本知识的学习，要落实在机械设计与机械制造的具体工程应用上。学习这部分内容主要应注意下述几个方面的问题：掌握工程材料与成形工艺的合理选用；掌握材料改性与成形工艺在工艺流程中的合理位置；掌握各种成形零件的结构工艺性；掌握材料及其成形工艺的技术条件在图样中的标注方法；初步掌握主要改性工艺及主要成形工艺的应用；了解材料质量检验方法及零件失效分析方法；初步具有对工程材料选用及改性与成形工艺合理性的分析能力。

学习本课程，达到了上述三个层次的基本要求，就可以避免单纯查机械设计手册带来的选材不当和改性与成形工艺不合理的问题，避免零件早期失效。应当指出，按材料力学计算应力时，总是假定材料为均质的连续体，实际上，各种工程材料均是包含有各种缺陷的、多相组成的非均质材料。因此，选材时除应力满足设计要求外，还应考虑诸如金属冶金缺陷、晶粒度、不良显微组织、淬不透、锻造比与锻造流线、铸件与焊接件的组织缺陷等诸多因素。通过综合分析，使选材及改性与成形工艺更为合理，以保证零件的可靠性。

第1章 工程材料的结构与性能

材料都是由一种或一种以上的元素组成的。在一定条件下，材料具有一定的聚合状态，或呈气态或呈液态或呈固态。当条件改变时，材料的状态可以互相转化。材料的性能主要取决于成分、结构和组织。在这一章里所涉及的材料结构，除了原子(或分子)结构之外，重点在于材料原子(或分子)的相互作用和排列方式上。

1.1 材料原子(或分子)的相互作用

当原子相互靠近时，它们之间的相互作用将以键合方式进行。由于组成不同，材料的原子(或分子)结构各不相同，原子间的结合键性质和状态存在很大差别。

1.1.1 离子键

当正电性金属原子与负电性非金属原子接触时，前者失去最外层电子变成正离子，后者获得电子变成负离子，正、负离子由于静电引力而相互结合成化合物，这种相互作用就称为离子键。

图 1.1a 为离子键结合的示意图。离子键有较强的结合力；因此离子化合物的熔点、沸点、硬度很高，热膨胀系数很小。大部分盐类、碱类和金属氧化物多数以离子键方式结合，部分陶瓷材料(MgO 、 Al_2O_3 、 ZrO_2 等)及钢中的一些非金属夹杂物也以此方式结合。

1.1.2 共价键

当两个相同的原子或两种不同的原子相互作用时，原子间以形成公用价电子对而结合，这种结合方式称为共价键。图 1.1b 为共价键结合的示意图。共价键结合极为牢固，共价晶体(如金刚石)具有高的熔点、硬度和强度。由于全部外层电子束缚于共价键，所以它们不是导体(金刚石是绝缘体，硅、锗是半导体)。碳、硅、锡、锗、铅等亚金属主要以共价键方式结合，一些陶瓷(如碳化硅、氧化硅)和一些聚合物也是通过共价键使它们的原子结合在一起的。

1.1.3 金属键

由于金属原子结构外层电子数较少，且电离能也很小，极易失去外层价电子而成为正离子。当金属原子相互接近时，金属原子的外层价电子便从各个原子中脱离出来，为整个金属原子所共用，它们可在整个金属内自由运动而形成“电子气”。金属正离子与自由电子间的静电引力作用，形成金属整体，这种结合方式称为金属键，如图 1.1c 所示。

用金属键可以粗略地解释金属的一般特性：金属中的自由电子在一定的电位差条件下作定向运动，形成电流，从而显示出良好的导电性；自由电子的运动以及金属正离子的振动使金属具有良好的导热性；随着温度的升高，金属正离子振动加剧，阻碍电子通过，电阻升高，因而

金属具有正的电阻温度系数；金属内原子间作相对位移时，正离子与自由电子之间的结合键仍旧保持着，使金属显示出良好的塑性；自由电子能吸收可见光的能量使金属具有不透明性，而吸收了能量被激发的电子回到基态时产生辐射，使金属具有光泽。

除铋、锑、锗、镓等亚金属为共价键结合外，绝大多数金属均以金属键方式结合。

1.1.4 分子键

He、Ne、Ar 等原子态惰性气体和 H₂、N₂、O₂ 等分子态气体在低温时都能结合成液体和固体，这类原子或分子间相互作用并没有价电子的得失、共有或公有化。它们的结合是依靠分子(或原子)偶极间的作用力(色散力、诱导力、取向力)来完成的。这种相互作用称为分子键，也称为范德华(Vander Waals)力。图 1.1d 为分子键示意图。

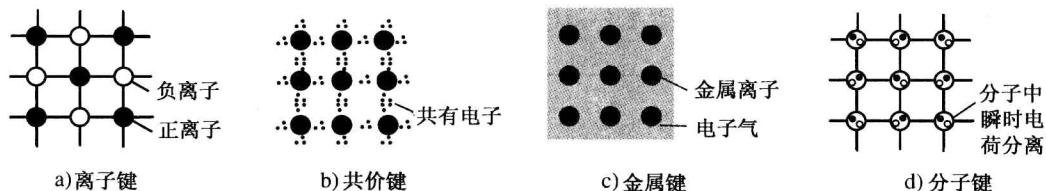


图 1.1 原子结合键的类型

由于分子键很弱，故结合成的晶体具有低熔点、低沸点、低硬度、易压缩等性质。例如，石墨的各原子层之间为分子键结合，从而易于分层剥离，强度、塑性和韧性极低，接近于零，是良好的润滑剂。塑料、橡胶等高分子材料中的链与链间的结合力为范德华力，故它们的硬度比金属低，耐热性差，不具有导电能力。

1.1.5 氢键

氢键是一种特殊的分子间作用力。当两种负电性大而原子半径较小的原子与氢原子结合时，氢原子与一种原子之间形成共价键，与另一种原子之间形成氢键。如 F—H ----- F，O—H ----- O，N—H ----- O 等，其中实线为共价键，虚线表示氢键。氢键的本质是静电吸引力，具有饱和性和方向性。氢键比一般范德华力强得多，但比离子键、共价键等要小。

氢键的形成对化合物的物理性质和化学性质有各种影响。比如水的物理性质，如密度、比热容、熔点、沸点等都较同类化合物高。

以上讨论的几种结合键的强度，以离子键和共价键最强，金属键次之，分子键最弱。

实际上，只有一种结合键的材料并不多见，大多数材料往往是几种键的混合结合，而以一种结合键为主。表 1.1 列出了常用工程材料的结合键及其性能特点。

表 1.1 四大类工程材料的原子间结合键及其性能特点

种类	结合键	熔点	弹性模量	强度硬度	塑性韧性	导电性导热性	耐热性	耐蚀性	其他性能
金属材料	金属键为主	较高	较高	较高	良好(铸铁等脆性材料除外)	良好	较高	一般	密度大, 不透明, 有金属光泽
高分子材料	分子内共价键, 分子间分子键	较低	低	较低	变化大	绝缘, 导热不良	较低	高	密度小, 热膨胀系数大, 抗蠕变性能低, 易老化, 减摩性好
陶瓷材料	离子键或共价键为主	高	高	抗压强度与硬度高, 抗拉强度低	差	绝缘, 导热不良	高	高	耐磨性好, 热硬性高, 抗热振性差
复合材料	取决于组成物的结合键	能克服单一材料的某些弱点, 充分发挥材料的综合性能							

1.2 晶体材料的原子排列

当材料处于固体状态时, 若组成它的离子、原子或分子在三维空间呈有规则的长距离(大大超过原子或分子尺寸)的周期性重复排列, 即具有长程有序, 这一类固态物质称为晶体。而它们离子、原子或分子规则排列的方式就称为晶体结构。

1.2.1 理想晶体结构

1. 晶格

为了便于描述晶体中的原子排列规律(图 1.2a), 把晶体中的原子(或离子等)想象成几何结点, 并用直线从其中心连接起来而构成的空间格架, 称为“晶格”, 如图 1.2b 所示。晶格形象地表示了晶体中原子排列的方式。晶格中的结点为原子(或离子等)平衡中心的位置, 通

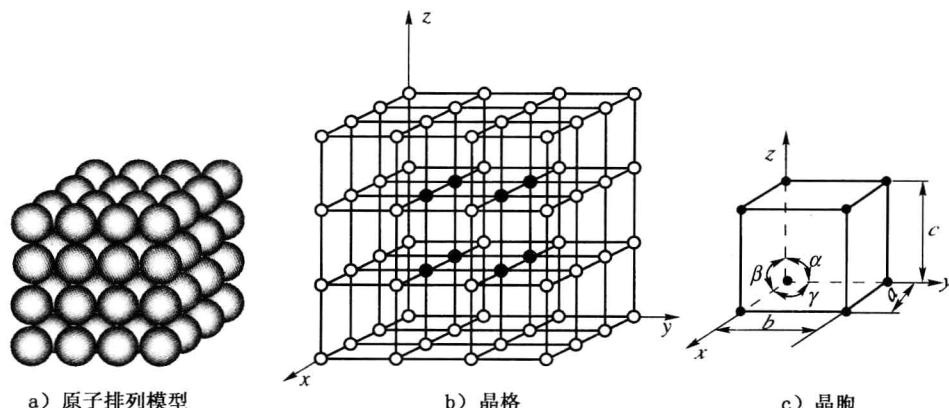


图 1.2 晶体中原子排列示意图

过结点的任一平面称为晶面，通过结点的任一直线所指的方向称为晶向。把能反映空间晶体排列方式的基本单元称为晶胞，如图 1.2c 所示。可见，晶胞在三维空间的重复排列就构成晶格并形成晶体。晶胞大小和形状可用其三条棱边长度 a 、 b 、 c 和棱边夹角 α 、 β 、 γ 来描述，其中 a 、 b 、 c 称为晶格常数，长度单位为 10^{-10} m。

根据晶胞的几何形状或自身的对称性，可把晶体结构分为七大晶系十四种晶格。由于金属晶体是通过较强的金属键结合，故原子趋于紧密排列，构成少数几种高对称性的简单晶体结构。约有 90% 以上的金属晶体都具有以下三种晶格形式。

2. 常见的金属晶体结构

(1) 体心立方晶格

体心立方晶格的晶胞如图 1.3 所示，由八个原子构成一个立方体，在立方体的中心还有一个原子。其晶格常数可用 $a (= b = c)$ 来表示。由于晶胞在其立方体对角线方向上的原子是彼此紧密相接触排列的，故晶胞中的原子半径 $r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$ 。体心立方晶胞每个顶点上的原子同属于相邻八个晶胞所共有，因此每个晶胞实际包含原子数为 $(1/8) \times 8 + 1 = 2$ 。

晶胞中原子排列的紧密程度可用致密度 K 来表示。致密度是指晶胞中原子所占的总体积与该晶胞体积之比。对于体心立方晶格，可求出其致密度 $K = 0.68$ ，即晶胞中有 68% 的体积被原子所占据，32% 的体积则为空隙。

属于体心立方晶格的金属有 α -Fe(912 °C 以下的纯铁)、Cr、Mo、W、V、Nb、 β -Ti、Na、K 等。

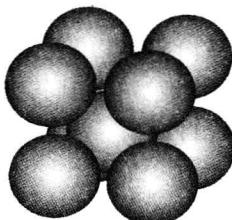


图 1.3 体心立方晶胞

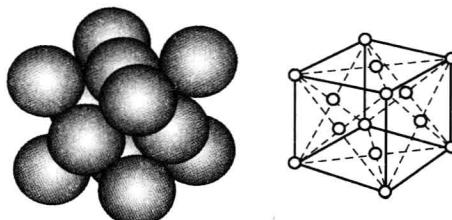
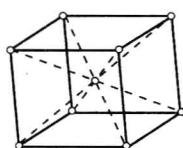


图 1.4 面心立方晶胞

(2) 面心立方晶格

面心立方晶格的晶胞如图 1.4 所示。由图可见，在晶胞每个角及每个面的中心各分布着一个原子，在每个面对角线上各原子彼此相互接触，因而其原子半径 $r = \frac{\sqrt{2}}{4}a$ 。由于每个面心位置上的原子同属于两个晶胞所共有，故每个面心立方晶胞中实际包含的原子数为 $(1/8) \times 8 + (1/2) \times 6 = 4$ 。其致密度 K 经计算为 0.74。

属于面心立方晶格的金属有 γ -Fe(912 ~ 1 394 °C)、Cu、Al、Ni、Au、Ag、Pt、 β -Co 等。

(3) 密排六方晶格

密排六方晶格的晶胞如图 1.5 所示，是一个六方柱体。柱体的上、下底面六个角及中心各有一个原子，柱体中心还有三个原子，其晶格常数为六方柱体底面的边长 a 和上下底面间距 c ，在上述紧密排列情况下， $c/a \approx 1.633$ 。最近邻原子间距为 a ，所以其原子半径 $r = \frac{1}{2}a$ 。由图 1.5 可见，每个角上的原子同时为六个晶胞所共有，上下底面中心的原子同时为两个晶胞所

共有，再加上晶胞内的三个原子，故密排六方晶胞的原子数为： $(1/6) \times 12 + (1/2) \times 2 + 3 = 6$ 个。同样可求出其致密度为 0.74。

属于密排六方晶格的金属有 Be、Mg、Zn、Cd、 α -Co、 α -Ti 等。

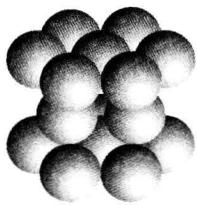


图 1.5 密排六方晶格

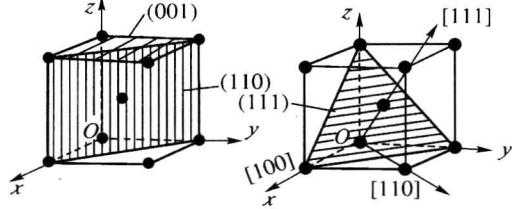
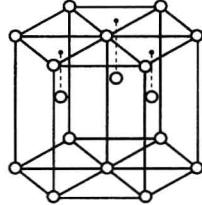


图 1.6 体心立方晶格中几个主要晶面和晶向

3. 晶面和晶向的表示方法

由于金属的许多性能和金属中发生的许多现象都与晶体中的特定晶面和晶向有关，所以这些晶面和晶向的表达就具有特别的重要性。晶面和晶向的表达分别采用晶面指数(hkl)和晶向指数[uvw]的形式(hkluvw 为整数)。体心立方晶格中几个主要晶面和晶向指数如图 1.6 所示。

值得指出的是，(hkl)晶面或[uvw]晶向实际上表示一组原子排列相同的平行晶面或晶向。晶面指数或晶向指数可以为负数。负指数的表达是把负号“-”加在相应指数数字的上方，如(111)或[uvw]。

在立方晶系中，由于原子排列具有高度的对称性，故存在着许多原子排列完全相同但不平行的对称晶面(或晶向)，通常把这些晶面(或晶向)归结为同一晶面(或晶向)族，用大括号表示，即{hkl} (或<uvw>)。在同一晶面(或晶向)族中的各晶面(或晶向)的指数数值相同，但符号和次序不同，如{111}晶面族的各晶面指数为(111)、(111)、(111)和(111)。

六方晶系的晶面指数和晶向指数的确定步骤与立方晶系的相似。

由于不同晶面和晶向上原子排列的方式和密度不同，因而在同一晶体(单晶体)的不同晶面和晶向上的各种性能也会不同，这种现象就称为各向异性。例如 α -Fe 单晶体，由于它在不同晶向上的原子密度不同，则原子结合力便不同，因而其弹性模量 E 也不同，在体对角线方向[111]上， $E = 290\,000$ MPa，而沿立方体一边方向[001]上 $E = 1\,350\,000$ MPa。

1.2.2 实际晶体结构

1. 单晶体与多晶体

结晶方位完全一致的晶体称为“单晶体”，如图 1.7a 所示。在单晶体中，所有晶胞均呈相同的位向，故单晶体具有各向异性。此外，它还有较高的强度、抗蚀性、导电性和其他特性，因此日益受到人们的重视。目前，在半导体元件、磁性材料、高温合金材料等方面，单晶体材料已得到开发和应用。单晶体金属材料是今后金属材料的发展方向之一。

在工业生产中，单晶体的金属材料除专门制作外基本上是不存在的。实际的金属结构都包含着许多小晶体，每个小晶体的晶格是一样的，而各小晶体之间彼此方位不同。如图 1.7b 所示。由于每个小晶体都具有不规则的颗粒状外形，故称为“晶粒”，晶粒与晶粒之间的界面叫做“晶界”。由于晶界是两相邻晶粒不同晶格方位的过渡区，所以在晶界上原子排列总是不规

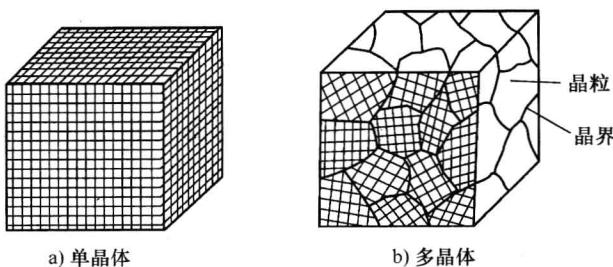


图 1.7 单晶体与多晶体

则的。这种由多晶粒组成的晶体结构称为“多晶体”。在多晶体金属中，一般来说，不显示各向异性。这是因为在多晶体中各个晶粒的位向紊乱，其各向异性显示不出来，结果使多晶体呈现各向同性，这种现象也称“伪无向性”。

多晶体晶粒的大小与金属的制造及处理方法有关，其直径一般在 $1 \sim 0.001\text{ mm}$ 之间。晶粒大小对材料性能影响很大，在常温下，晶粒愈小，材料的强度愈高，塑性、韧性就愈好。

2. 晶体缺陷

除了具有多晶体结构以外，金属的实际结构与理想结构不同之处是存在晶体缺陷。按其几何形状的特点，晶体缺陷可分为以下三类：

(1) 点缺陷

点缺陷是一种在三维空间各个方向上尺寸都很小，尺寸范围约为一个或几个原子间距的缺陷，包括空位、间隙原子、置换原子等。空位是指未被原子所占有的晶格结点，如图 1.8a 所示。置换原子是指占据晶格结点上的异类原子(图 1.8b)。间隙原子是处在晶格间隙中的多余原子(图 1.8c)。

点缺陷的形成，主要是由于原子在各自平衡位置上做不停的热运动的结果。当某个原子有足够的能量克服周围原子对它的牵制时，便跳到晶界处或晶格间隙处，形成间隙原子，并在原来位置上形成空位。空位和间隙原子的数目随着温度的升高而增加。例如铝在室温时， 1 cm^3 中有 8×10^{10} 个空位，当温度升高到 600°C 时，其空位可剧增至 3×10^{19} 个。此外，其他加工和处理，如塑性加工、离子轰击等，也会增加点缺陷。

由于晶格点缺陷的出现，可促使周围的原子发生靠拢或撑开的现象，如图 1.8 所示，从而造成晶格畸变。晶格畸变可导致材料的强度、硬度和电阻率增加以及其他力学、物理、化学性能的改变。

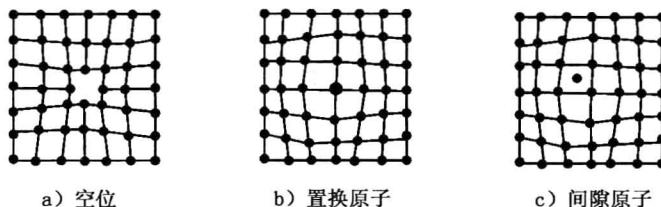


图 1.8 点缺陷

(2) 线缺陷

线缺陷是指三维空间中在两维方向上尺寸较小，在另一维方向上尺寸相对较大的缺陷。属

于这类缺陷主要是各种类型的位错。

位错是晶体中的某处有一列或若干列原子发生了某种有规律的错排现象。位错最基本的形式有刃型位错和螺型位错。刃型位错如图 1.9 所示，在晶体内的半原子面 $EFGH$ 就像刀刃一样，使位于 $ABCD$ 面的上下两部分晶体沿着 EF 线产生了原子错排。 EF 线就是刃型位错线。

位错的出现使位错线周围造成晶格畸变，畸变程度随离位错线的距离增大而逐渐减小直至为零。严重晶格畸变的范围约为几个原子间距。

晶体中的位错密度 ρ ，以单位体积中位错线的总长度来表示，单位是 cm/cm^3 或 cm^{-2} 。在退火的金属中，位错密度一般为 10^5 cm^{-2} 。在大量冷变形或淬火的金属中，位错密度增高，可达 10^{12} cm^{-2} 。随着位错密度的增高，材料的强度将会显著增加(图 1.10)，所以提高位错密度是金属强化的重要途径之一。

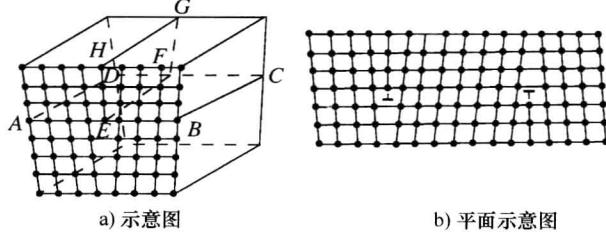


图 1.9 刃型位错

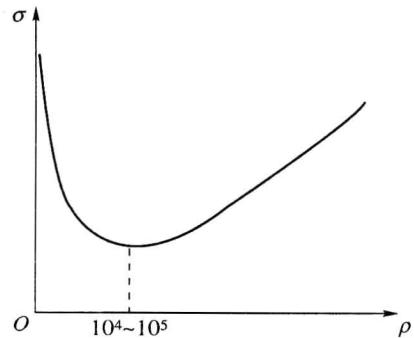


图 1.10 材料强度 σ 与位错密度 ρ 的关系

(3) 面缺陷

面缺陷是指三维空间中在一维方向上尺寸很小，另外二维方向上尺寸很大的缺陷。最常见的面缺陷是金属中的晶界和亚晶界。

晶界是多晶体中晶粒与晶粒之间的过渡区，由于相邻两晶粒的晶格位向不同，致使该过渡区内的原子排列不规整，偏离其平衡位置，产生晶格畸变，如图 1.11 所示。金属多晶体中，晶粒间的位向差大多在 $30^\circ \sim 40^\circ$ ，晶界厚度在几个原子间距到几百个原子间距。

即使是在晶粒内部，原子的排列也并非是完全理想的规则排列，而是存在着许多小尺寸、小位向差(一般几十分到 $1^\circ \sim 2^\circ$)的晶块，这些小晶块称为“亚晶粒”(或称“亚结构”)。两相邻的亚晶粒间的边界称为“亚晶界”，如图 1.12 所示。亚晶界的原子排列也不规则，它实际上由一系列刃型位错所构成，因而也产生晶格畸变，图 1.13 是金镍合金亚晶粒组织图。

在实际晶体结构中，上述晶体缺陷并不是静止不变的，而是随着一定的温度和加工过程等各种条件的改变而不断变动的。它们可以产生、发展、运动，它们之间还可以发生交互作用，能合并和消失。晶体缺陷对金属的许多性能有很大的影响，特别对金属的塑性变形、固态相变以及扩散等过程都起着重要的作用。

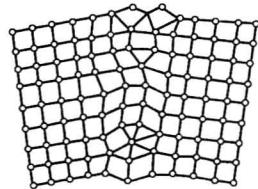


图 1.11 晶界

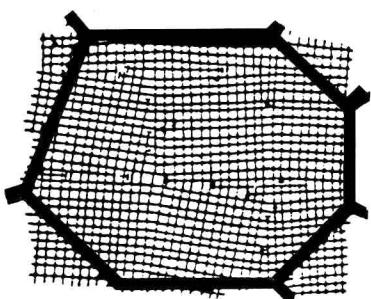


图 1.12 实际金属晶粒内的结构

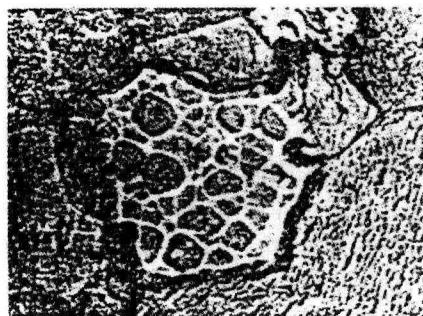


图 1.13 金镍合金的亚晶粒

1.3 非晶态材料中的原子排列

所谓“非晶态”，是相对于晶态而言，是固态物质的另一种结构。非晶态材料是目前材料科学中广泛研究的一个新领域，也是一类发展迅速的重要的新型材料。

1.3.1 短程有序

在前面的章节已论述了晶体中原子是有规则地重复排列，即长程有序性，也就是通常所说的晶体结构的周期性。而在非晶态结构中，原子排列没有这种规则的周期性，原子的排列从总体上是无规则的。但是，近邻原子的排列是有一定规律的，这就是所谓的“短程有序”。例如，非晶硅的每个原子仍为四价共价键，与最近邻原子构成四面体，这是有规律的，而总体原子的排列却没有周期性的规律。一般来说，非晶态结构的短程有序区大小为 $14 \sim 16 \text{ \AA}$ 。另外，从宏观特性看：非晶态金属通常表现为金属性；非晶态半导体基本上保持半导体的性质；绝缘晶体制成非晶态仍然是绝缘体。这也是由于非晶态有与相应的晶态类似的短程有序性而决定的。

由于非晶态结构的长程无序性，因而可以把非晶态材料看作是均匀的、各向同性的结构。

1.3.2 亚稳定性

晶态材料在熔点以下一般是处在热力学自由能最低的稳定平衡态。非晶态则是一种亚稳定，即在某一定条件下为非晶态，当环境条件变化时，例如，所处的温度高于某一值后，可能向晶态转化，而失去非晶态结构。因此，非晶态及其结构处于亚稳定状态。这种亚稳定性直接关系着非晶态材料的使用寿命和应用，所以在实际应用上具有十分重要的意义。

1.4 合金的晶体结构

由两种或两种以上的金属元素，或金属元素和非金属元素组成的具有金属性质的物质，称为合金。组成合金的独立的、最基本的单元称为组元，组元可以是纯元素或是稳定的化合物。由两个组元组成的合金称为二元合金，由三个组元组成的合金是三元合金，由三个以上组元组