

微观组织特征相的 电子结构及疲劳性能

WEIGUAN ZUZH TEZHENGXIANG DE DIANZI JIEGOU JI PILAO XINGNENG

孙跃军 杨绍斌 时海芳 李思南 著



冶金工业出版社
Metallurgical Industry Press

微观组织特征相的 电子结构及疲劳性能

孙跃军 杨绍斌 时海芳 李思南 著



北 京
冶 金 工 业 出 版 社

内 容 简 介

本书共分7章。第1、2章介绍了结构钢微观组织特征相、相界面电子结构及其统计值的计算方法;第3~6章分别介绍了中碳结构钢淬火、淬火+低温回火、淬火+中温回火、淬火+高温回火微观组织特征相及相界面的电子结构与力学性能的理论计算;第7章在前面叙述的基础上,阐述了微观组织特征相及相界面的电子结构参数与疲劳学科基本问题的关系,并通过有关计算对中碳结构钢的疲劳性能进行了预测。

本书可供从事材料科学和疲劳断裂学科的科学工作者、高等院校相关专业的教师及研究生参考。

图书在版编目(CIP)数据

微观组织特征相的电子结构及疲劳性能/孙跃军等著. —北京:
冶金工业出版社, 2013. 6

ISBN 978-7-5024-6316-8

I. ①微… II. ①孙… III. ①结构钢—显微组织(金相学)—
研究 IV. ①TG142. 41

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 132636 号

出 版 人 谭学余

地 址 北京北河沿大街嵩祝院北巷 39 号, 邮编 100009

电 话 (010)64027926 电子信箱 yjcbs@cnmip.com.cn

责任编辑 杨盈园 美术编辑 彭子赫 版式设计 孙跃红

责任校对 李 娜 责任印制 张祺鑫

ISBN 978-7-5024-6316-8

冶金工业出版社出版发行; 各地新华书店经销; 北京慧美印刷有限公司印刷

2013 年 6 月第 1 版, 2013 年 6 月第 1 次印刷

169mm×239mm; 10.25 印张; 201 千字; 144 页

30.00 元

冶金工业出版社投稿电话: (010)64027932 投稿邮箱: tougao@cnmip.com.cn

冶金工业出版社发行部 电话: (010)64044283 传真: (010)64027893

冶金书店 地址: 北京东四西大街 46 号(100010) 电话: (010)65289081(兼传真)

(本书如有印装质量问题, 本社发行部负责退换)

序 言

从化学上来说，单个原子的性质取决于外层的价电子结构；从物理上来说，大量原子凝聚成材料时材料的性质应取决于凝聚态原子的电子结构。柯垂尔早就提出过从原子电子结构层次计算合金性质的思想。然而，从合金电子结构层次计算合金力学性能的报道却始见于本世纪初。从合金的电子结构层次计算合金力学性能的困难来源于两个方面：一是合金电子结构及其参数计算的困难；二是合金电子结构参数与合金力学性能关系的数值运算的困难。

20 世纪 70 年代，国际著名 X 射线晶体学家，已故中国科学院院士余瑞璜教授发表了“固体与分子经验电子理论”，后来余瑞璜院士的助手张瑞林教授又将“固体与分子经验电子理论”的基本思想、原子双态杂化及计算方面的典型应用汇总成专著《固体与分子经验电子理论》。由于这个理论给出的是正空间的信息，物理图像清楚，计算方法简洁，获得广大材料科学工作者的重视。

众所周知，材料电子结构层次的理论计算，广泛采用的是第一性原理。这种计算的核心是构造原子的势函数，解 Schrodinger 方程，通过自洽求解体系的总能量，然后去讨论材料中的各种问题；“固体与分子经验电子理论”的核心是构造原子的双态杂化，解决 Pauling 的键距方程，通过自洽求解晶体原子共价键上的电子分布及原子所处的状态，然后去讨论材料中的各种问题。

“固体与分子经验电子理论”将原子的外层电子分为共价电子 n_c (成键电子) 和晶格电子 n_l (非键电子), 磁电子 n_m 和哑对电子 n_d (自旋相反下沉于轨道上的电子)。认为晶体中成键两原子共价键上的共用电子对 n_α 与共价键距 $D_{n\alpha}$ 的关系满足 Pauling 的键距方程 $D_{A-B} = R_A + R_B - \lg n$, 在固体与分子经验电子理论中即是方程:

$$D_{n\alpha} = R_u(I) + R_v(I) - \beta \lg n_\alpha$$

式中, R_u 、 R_v 分别为两原子的单键半距 $R(I)$; α 为晶体中两原子形成的共价键的键序; $\alpha = A、B、C\cdots$; β 为一常数。

当 $D_{n\alpha}$ 为实验键距, 且 $R_u(I)$ 和 $R_v(I)$ 为已知时, n_α 便可从理论进行计算。

晶体中两原子共价键上的共用电子对数 n_α 愈多, 共价键结合愈强, 因此晶体的强度应愈高。如果将合金相原子共价键上的共用电子对数 n_α 与合金力学性能的关系转变为数值计算, 那么便可从合金的电子结构参数出发, 结合相变计算合金的力学性能。这正是利用电子结构参数计算非调质钢力学性能和本书利用淬火、回火微观组织电子结构参数计算淬火、回火力学性能及讨论疲劳科学基本问题的切入点。

但情况正如开始所说的那样, 合金电子结构及其参数计算的定态是很困难的。“固体与分子经验电子理论”认为, 固体或分子中的原子, 一般都处在由原子的头态 h (基态或靠近基态的激发态) 和尾态 t (最高价态) 杂化后的某一杂化状态。 h 态和 t 态杂化的阶数 K 或杂化

状态数 σ 由公式 $K = \frac{\tau' l' + m' + n'}{\tau l + m + n} \times \sqrt{\frac{l' + m' + n'}{l + m + n}} \times \frac{l \pm \sqrt{3m} \pm \sqrt{5n}}{l' \pm \sqrt{3m'} \pm \sqrt{5n'}}$ 决

定, 其中 l, m, n 和 l', m', n' 分别表示 h 态和 t 态的 s, p, d 的共价

和晶格电子数。当 s 态是晶格电子时取 $\tau=0$ ，是共价电子时 $\tau=1$ 。对于 $s-p$ 杂化，例如 C 原子， $K=6$ ，即 C 原子有 6 种杂化状态；对于 $s-p-d$ 杂化，例如 Fe， $K=18$ ，即 Fe 原子有 18 种杂化状态。原子的每一种状态 σ 都具有各自的状态参数： $C_{\text{h}\sigma}$ （头态成分）、 $C_{\text{l}\sigma}$ （尾态成分）， $C_{\text{l}\sigma} = \frac{1}{1+k^2}$ ， $C_{\text{h}\sigma} = 1 - C_{\text{l}\sigma}$ ； $n_{\text{c}\sigma}$ （共价电子数）、 $n_{\text{l}\sigma}$ （晶格电子数）、 $n_{\text{c}\sigma} + n_{\text{l}\sigma} = n_{\text{T}\sigma}$ （总价电子数）； $R(I)_{\sigma}$ （单键半距）， m_{σ}^{3d} （磁电子数），如本书中的表 1-2（C 原子的双态杂化表）和表 1-3（Fe 原子的双态杂化表）所示。如果解 Fe-C 合金奥氏体中的 Fe 和 C 原子的键距方程 $D_{(\text{n}\alpha)\sigma}^{\text{C-Fe}} = R_{\text{C}}(I)_{\sigma} + R_{\text{Fe}}(I)_{\sigma} - \beta \lg n_{\alpha}$ ，表 1-2 中 C 原子 6 个杂阶上的 n_{σ}^{C} 和 $R^{\text{C}}(I)$ 和表 1-3 中 Fe 原子 18 个杂阶上的 n_{σ}^{Fe} 和 $R^{\text{Fe}}(I)$ 都需代入上述方程中，于是将有 $6 \times 18 \times 18$ 个原子组态 σ 的解。在 $\sigma = 6 \times 18^2 = 1944$ 个原子组态中，哪些原子组态是 C、 Fe^{c} 、 Fe^{f} 原子可能存在的状态呢？这就是原子状态的确定即定态问题。固体与分子经验电子理论定态时采用的方法是将计算得到的理论键距 $D_{\text{n}\alpha}$ 与用晶格常数计算得到的实验键距 $\overline{D}_{\text{n}\alpha}$ 进行比较，当满足 $\Delta D_{\text{n}\alpha} = |D_{\text{n}\alpha} - \overline{D}_{\text{n}\alpha}| < 0.005\text{nm}$ 时便可认为原子所处的状态是晶体中原子可能存在的状态。尽管这样，定态后原子所处的状态 σ 数仍然很大。如果需要确定晶体中的原子所处的最可几状态，则和第一性原理一样需要用自恰法。固体与分子经验电子理论确定原子的最可几状态时，最有效的方法是采用原子磁矩定态。当理论计算中某一原子组态 σ 上的磁矩 m_{σ}^{3d} 与实验上测得的磁矩相符或相近时，这一组态便可认为是原子最可几的状态。如果没有实验数据可以参考，原子最可几状态的确定将是困难的。

自 1978 年“固体与分子经验电子理论”问世以来,许多材料科学工作者将“固体与分子经验电子理论”运用于材料科学电子结构层次的理论研究中。在材料成分-加工及相变-组织结构-力学性能的关系等许多方面做了有意义的探讨。由于没有一个公认的电子结构定态标准,用电子结构参数去计算合金的力学性能的研究尚不多见。

21 世纪初,刘志林在“国家自然科学基金项目”的连续资助下,以 α -Fe 的力学性能为基础,用合金相最强共价键上的共用电子数 n_A 及相界面的最小电子密度差 $\Delta\rho$ 计算强化系数和强化权重,尝试了连铸连轧非调质钢力学性能的理论计算。尽管计算结果与生产实测值符合较好,但因合金相中原子最可几组态的确定缺乏理论上的可靠依据,因而计算结果的准确性理应受到质疑。在这种情况下,林成博士在他的“高强高韧钛合金电子结构及力学性能计算”博士论文中,依据“宏观物理量应是微观状态统计值”的思想,采用电子结构参数的统计值,用于钛合金的共析转变的计算及讨论与实际符合较好。于是刘志林、林成又用合金相最强共价键共用电子对数 n_A 的统计值 n'_A , 相界面电子密度差 $\Delta\rho$ 的统计值 $\Delta\rho'$ 代替了可几值 n_A 及 $\Delta\rho$, 用于非调质钢力学性能的理论计算,结果与生产实测及科研实验值符合均较好。从而一定程度上解决了“固体与分子经验电子理论”计算中人为定态混乱的问题,也为电子结构参数与力学性能关系的数值计算提供了一条可行的途径。

应该说,已有的关于合金相及相界面电子结构计算方面的文献及专著,对相及相界面电子结构及其统计值的计算都比较简洁,读者初读起来有些困难,本书第 1、2 章专门介绍了合金相及相界面电子结构

及其统计值的计算方法，且较详细，这将解决读者阅读及入门的困难。本书虽是在上述研究基础上，运用“固体与分子经验电子理论”计算了结构钢淬火及不同温度的回火微观组织的电子结构，但是利用相及相界面电子结构参数的统计值 n'_A 、 $\Delta\rho'$ 及相和相界面上可能存在的原子状态组数 σ_N 和 σ ，计算了淬火、不同温度回火的力学性能，并结合微观组织的电子结构参数讨论了疲劳学科中的基本问题，是一种极具新意的探索！本书给出的淬火、回火钢电子结构及力学性能的计算，将使结构钢电子结构层次的研究更加完整。同时本书又将电子结构层次的研究深入到疲劳与断裂，这更具重要的学科意义。无疑，本书的研究又丰富了计算材料科学的基础内容，也将电子理论在材料科学研究中的应用又向前推进了一步。

1999 年，C. W. Lung 和 N. H. March 在《Mechanical of Metals》一书中曾预言：“未来的 10 年中，在合金电子结构与力学性能的关系研究方面将有新的突破”。显然，本书是继《合金电子结构参数统计值及合金力学性能计算》之后又一部具有重要参考价值的专著，相信它将会在合金电子结构及力学性能关系的研究进展中发挥更积极的作用。我衷心地祝贺这部专著的出版！

刘恩林
2013.5

目 录

引言	1
1 微观组织特征相电子结构参数计算基础	5
1.1 微观组织特征相的电子结构参数	5
1.2 微观组织特征相共价键络、共价键距、等同键数的确定	6
1.2.1 $D_{(n\alpha)}^{u-v}$ 、 $D_{n\alpha}^{u-v}$ 的确定	6
1.2.2 I_α 的计算	7
1.2.3 奥氏体晶胞的共价键络、实验键距及等同键数 I_α	7
1.3 微观组织共价键上电子分布 n_α 的计算公式	8
1.4 利用 BLD 法求解共价键上的共价电子分布 n_α	8
1.4.1 利用 BLD 法推导 $r_{\alpha'}$	8
1.4.2 建立 n_A 方程, 求解 $n_{\alpha'}$	10
1.4.3 奥氏体晶胞各条共价键上的共用电子对数计算	10
1.5 微观组织特征相原子状态组数 σ 的计算	11
1.5.1 EET 的原子状态参数	11
1.5.2 EET 的原子杂化状态	12
1.5.3 利用 BLD 法计算奥氏体晶胞中的原子状态数 σ_N	14
1.6 微观组织特征相的类型	16
1.7 微观组织特征相电子结构参数 n_α 的统计值 n'_α 的计算	16
1.8 小结	17
2 微观组织相界面电子结构参数计算基础	19
2.1 微观组织相界面	19
2.1.1 奥氏体化微观组织中的相界面 $\gamma - \text{Fe}_{(111)}/\text{A} - \text{Fe} - \text{C}_{(111)}$	19
2.1.2 淬火微观组织中的相界面	20
2.1.3 低温回火微观组织中的相界面	21
2.1.4 中温回火微观组织中的相界面	21
2.1.5 高温回火微观组织中的相界面	21
2.2 微观组织相界面的电子结构参数	22

2.2.1	微观组织相平面的电子密度 ρ	22
2.2.2	相界面的电子密度差 $\Delta\rho$	22
2.2.3	相界面上的原子组态数 $\sigma_{(hkl)/(uvw)}$	23
2.3	含 C 晶胞相平面电子密度 $\rho_{(hkl)}$ 的计算	23
2.3.1	$\sum n_{\alpha}^{(110)} I_{\alpha}^{(110)}$ 的计算	23
2.3.2	$S_{(110)}$ 的计算	26
2.3.3	$\rho_{(110)}^{\alpha-\text{Fe}-\text{C}}$ 的计算	26
2.3.4	晶面电子密度 $\rho_{(hkl)}$ 的多值性	27
2.4	α -Fe 晶胞相平面电子密度的计算	28
2.4.1	α -Fe 晶胞的电子结构	29
2.4.2	α -Fe 晶胞 (110) 面的电子密度	30
2.5	马氏体晶胞 (110) 面的电子密度	30
2.6	微观组织相界面电子密度差 $\Delta\rho$ 和 σ 的计算	31
2.7	微观组织相界面电子密度差统计值 $\Delta\rho'$ 的计算	32
2.8	小结	32
3	淬火微观组织特征相的电子结构及力学性能理论计算	34
3.1	计算力学性能的电子结构参数	34
3.2	淬火微观组织中的特征相	35
3.2.1	奥氏体化微观组织中的特征相	35
3.2.2	淬火微观组织中的特征相	35
3.3	淬火微观组织中的相界面	35
3.4	特征相 α' -Fe-C 晶胞 n'_A 的计算	36
3.5	α' -Fe-C-M、 α' -Fe-M、 α' -Fe 晶胞 n'_A 值的计算	39
3.6	$\Delta\rho'$ 的计算	41
3.6.1	α' -Fe _{(110)'/} α' -Fe-M ₍₁₁₀₎ 界面的 $\Delta\rho'$ 值	41
3.6.2	α' -Fe _{(110)'/} α' -Fe-C-(M) ₍₁₁₀₎ 相界面的 $\Delta\rho'$ 值	43
3.7	马氏体转变的强化机制	45
3.7.1	固溶强化及强化系数	45
3.7.2	界面强化及强化系数	46
3.8	马氏体转变的强化权重 W	46
3.9	淬火马氏体强度的计算	48
3.9.1	淬火马氏体固溶强化强度增量的计算	48
3.9.2	淬火马氏体界面强化强度增量的计算	48
3.9.3	淬火马氏体的强度计算	49

3.10 淬火马氏体伸长率的计算	49
3.10.1 无碳马氏体的伸长率	49
3.10.2 淬火马氏体固溶强化伸长率的降低量	50
3.10.3 淬火马氏体界面强化伸长率的降低量	50
3.10.4 淬火马氏体伸长率的计算	51
3.11 淬火马氏体冲击功的计算	51
3.11.1 固溶强化产生的冲击功降低量 ΔA_K	51
3.11.2 界面强化产生的冲击功降低量	51
3.11.3 原子状态组数 σ_N 引起的冲击功改变	52
3.11.4 淬火马氏体冲击功的计算	53
3.12 45 钢淬火马氏体力学性能	53
4 低温回火组织特征相的电子结构及力学性能的理论计算	54
4.1 ε -Fe ₃ C 相电子结构的计算	54
4.1.1 ε -Fe ₃ C 最强共价键共价电子对数 n_A 及原子状态 组数 σ_N 的计算	54
4.1.2 ε -Fe ₃ C 最强共价键电子对数统计值 n'_A 的计算	58
4.2 α -Fe-C ₍₁₁₀₎ / ε -Fe ₃ C ₍₀₀₀₁₎ 相界面电子密度差 $\Delta\rho$ 及 统计值 $\Delta\rho'$ 的计算	58
4.2.1 ε -Fe ₃ C 晶胞 (0001) 晶面电子密度 $\rho_{(0001)}^{\varepsilon-\text{Fe}_3\text{C}}$ 的计算	58
4.2.2 α -Fe-C 晶胞 (110) 晶面的电子密度 $\rho_{(110)}^{\alpha-\text{Fe}-\text{C}}$ 的计算	58
4.2.3 α -Fe-C ₍₁₁₀₎ / ε -Fe ₃ C ₍₀₀₀₁₎ 界面电子密度差 $\Delta\rho$ 的计算	60
4.2.4 α -Fe-C ₍₁₁₀₎ / ε -Fe ₃ C ₍₀₀₀₁₎ 界面原子状态组数 σ 的计算	61
4.2.5 α -Fe-C ₍₁₁₀₎ / ε -Fe ₃ C ₍₀₀₀₁₎ 界面电子密度差统 计值 $\Delta\rho'$ 的计算	61
4.3 含有合金元素 M 时统计值 n'_A 、 $\Delta\rho'$ 的计算	61
4.4 ε -Fe ₃ C、 ε -(FeM) ₃ C 相及相界面电子结构参数的统计值	61
4.5 马氏体最强键键能 E_A 的计算	62
4.5.1 $\bar{B}$ 值的计算	63
4.5.2 $\bar{F}$ 值的计算	63
4.5.3 E_A 的计算	65
4.5.4 含合金元素 M 的 E_A 计算	66
4.5.5 淬火马氏体含 C 晶胞 α -Fe-C、 α -Fe-C-M 和 ε -Fe ₃ C、 ε -(FeM) ₃ C 结构单元 E'_A 的计算	66
4.6 淬火马氏体低温回火时的相变及强化机制的电子理论分析	66

4.6.1	相变分析	66
4.6.2	强化机制分析	67
4.7	回火马氏体的强化系数及强化权重	67
4.7.1	回火马氏体的强化系数	67
4.7.2	回火马氏体的强化权重	67
4.8	回火马氏体的力学性能计算	68
4.8.1	回火马氏体强度的计算	68
4.8.2	回火马氏体伸长率的计算	69
4.8.3	回火马氏体冲击功的计算	70
4.9	45 钢低温回火的力学性能	70
5	马氏体中温回火产物的电子结构及力学性能的理论计算	72
5.1	屈氏体的电子结构参数	72
5.2	$\theta - \text{Fe}_3\text{C}$ 相的共价键络、等同键数及键距方程	72
5.3	$\theta - \text{Fe}_3\text{C}$ 最强共价键共价电子数统计值 n'_A 及原子状态组数 σ_N 的计算	74
5.4	合金 $\theta - \text{Fe}_3\text{C}$ 相 n'_A 及 σ_N 的计算	75
5.5	$\theta - \text{Fe}_3\text{C}/\alpha$ 相界面电子结构参数的计算	79
5.5.1	屈氏体中 α 相 ($\bar{1}12$) 晶面电子密度 $\rho_{(\bar{1}12)}$ 的计算	79
5.5.2	屈氏体中 $\theta - \text{Fe}_3\text{C}$ 、 $\theta - (\text{FeM})_3\text{C}(001)$ 晶面电子密度的计算	81
5.5.3	$\alpha_{(\bar{1}12)}/\theta - \text{Fe}_3\text{C}_{(001)}$ 界面电子密度差统计值 $\Delta\rho'$ 及原子状态组数 σ 的计算	82
5.5.4	屈氏体相及相界面的电子结构参数	83
5.6	马氏体中温回火时的相变	84
5.7	屈氏体强化机制的电子理论分析	85
5.7.1	固溶强化	85
5.7.2	界面强化	85
5.8	屈氏体的强化权重	85
5.8.1	C、Mn 的强化权重	86
5.8.2	Si、Ni 的强化权重	87
5.8.3	Cr 的强化权重	88
5.9	中温回火强度计算	89
5.9.1	含 C、Mn 结构单元中温回火时强度变化量的计算	89
5.9.2	含 Si、Ni 结构单元强度变化量的计算	90
5.9.3	$\alpha - \text{Fe} - \text{M}$ 结构单元强度变化量的计算	91

5.9.4	含 Cr 结构单元强度的变化量	91
5.9.5	中温回火转变产物强度的计算	91
5.10	中温回火转变伸长率的计算	92
5.10.1	含 C、Mn 结构单元伸长率的计算	92
5.10.2	含 Si、Ni 结构单元伸长率的计算	93
5.10.3	α -Fe-M 结构单元伸长率的改变量	93
5.10.4	含 Cr 结构单元的伸长率	94
5.10.5	中温回火产物伸长率的计算	95
5.11	中温回火转变冲击功的计算	95
5.11.1	含 C、Mn 结构单元冲击功的计算	95
5.11.2	含 Si、Ni 结构单元冲击功的计算	96
5.11.3	α -Fe-M 结构单元冲击功的计算	96
5.11.4	σ_N 对 α -Fe-M 结构单元冲击功的影响	97
5.11.5	含 Cr 结构单元冲击功的计算	97
5.11.6	中温回火产物冲击功的计算	98
5.12	45 钢中温回火产物的力学性能	98
6	马氏体高温回火产物的电子结构及力学性能的理论计算	99
6.1	高温回火相变及权重的计算	99
6.1.1	含 C、Mn 结构单元的相变及权重计算	99
6.1.2	含 Si、Ni 结构单元的相变及权重计算	100
6.1.3	含 Cr 结构单元的相变及权重	103
6.2	高温回火的强化机制	104
6.3	高温回火强度计算	105
6.3.1	含 C、Mn 结构单元强度的计算	105
6.3.2	含 Si、Ni 结构单元强度的计算	106
6.3.3	含 Cr 结构单元强度改变量的计算	107
6.3.4	α -Fe-M 结构单元强度的计算	108
6.3.5	高温回火产物强度计算	108
6.4	高温回火伸长率的计算	109
6.4.1	含 C、Mn 结构单元伸长率的计算	109
6.4.2	含 Si、Ni 结构单元伸长率的计算	110
6.4.3	含 Cr 结构单元伸长率的计算	111
6.4.4	α -Fe-M 结构单元伸长率的计算	112
6.4.5	高温回火伸长率的计算	113

6.5 高温回火冲击功的计算	113
6.5.1 含 C、Mn 结构单元冲击功的计算	113
6.5.2 含 Si、Ni 结构单元冲击功的计算	114
6.5.3 含 Cr 结构单元冲击功的计算	115
6.5.4 α -Fe-M 结构单元冲击功的计算	115
6.5.5 σ_N 值对 α -Fe-M 单元冲击功的影响	116
6.5.6 高温回火产物冲击功的计算	116
6.6 45 钢高温回火后的力学性能	117
7 微观组织特征相的电子结构与疲劳性能	118
7.1 表征疲劳性能的电子结构参数	118
7.1.1 特征相的电子结构参数	118
7.1.2 特征相界面的电子结构参数	118
7.2 特征相 $n_A^{\max}$ 和 $n_A^{\min}$ 的计算	119
7.3 特征相界面 $\Delta\rho_{\max}$ 和 $\Delta\rho_{\min}$ 的计算	120
7.4 疲劳曲线上第二类中断的电子理论分析	122
7.4.1 第二类中断	122
7.4.2 低碳钢微观组织特征相的电子结构参数与第二类中断的关系 ..	123
7.5 微观组织的电子结构对疲劳裂纹形成及扩展的影响	124
7.5.1 n'_A 和 $\Delta\rho'$ 与微观组织疲劳裂纹形成的关系	124
7.5.2 $n_A^{\max}$ 和 $n_A^{\min}$ 值与微观组织特征相疲劳裂纹萌生和扩展的关系	125
7.5.3 $\Delta\rho_{\min}$ 和 $\Delta\rho_{\max}$ 与微观组织特征相界面疲劳裂纹萌生和扩展的关系 ..	126
7.6 特征相及相界面的电子结构参数与疲劳裂纹扩展不同阶段的关系 ..	126
7.6.1 $\lg da/dN - \lg \Delta K$ 曲线	126
7.6.2 A 区的特征与特征相电子结构的关系	127
7.6.3 B 区的特征与特征相界面电子结构的关系	128
7.6.4 C 区的特征与特征相界面电子结构关系	130
7.7 不扩展裂纹与特征相及相界面电子结构的关系	131
7.7.1 软钢中的不扩展裂纹	131
7.7.2 不扩展裂纹对应的特征相和相界面及其电子结构	132
7.7.3 特征相及相界面的电子结构对不扩展裂纹的影响	132
7.8 微观组织的电子结构对疲劳裂纹扩展阈值 ΔK_{th} 的影响	133
7.9 淬火回火微观组织的电子结构及其疲劳性能预测	135
7.9.1 淬火、不同温度回火微观组织的电子结构	135
7.9.2 淬火、不同温度回火微观组织的疲劳性能预测	137

7.9.3 预测结果印证	138
7.10 45 钢调质微观组织疲劳性能理论预测	139
7.10.1 45 钢调质微观组织的电子结构	139
7.10.2 45 钢调质微观组织特征强度的计算	139
7.10.3 45 钢调质微观组织疲劳性能预测	140
7.10.4 预测结果印证	140
参考文献	142

引 言

合金的疲劳断裂与化学成分、组织结构、晶体缺陷密切相关。合金热处理是调整组织结构，改善缺陷的重要工艺方法。为使合金具有优异的抗疲劳性能，应该对合金进行适当的热处理。过去的研究已经发现，不同微观组织的钢在疲劳载荷作用下显示出不同的抗疲劳能力和不同的疲劳寿命，基于微观组织基础上的模型化方法已用于疲劳载荷下合金行为的定量描述中。随着计算机的广泛使用，依据合金真实的热处理组织变化计算合金的力学性能从而定量地揭示合金的疲劳断裂机制将成为可能。图 1 给出了一种基于微观组织变化计算材料力学性能的程序流。

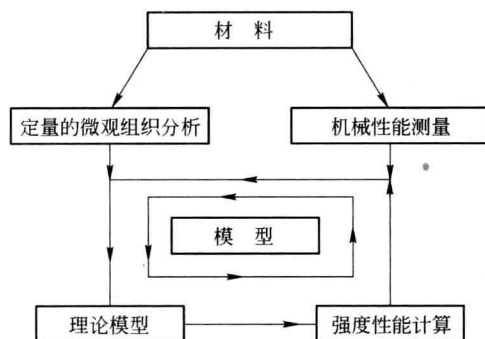


图 1 基于微观组织模拟化计算材料力学性能的程序流

图 1 中概略地表示出材料强度性能模型化的基本程序。实验输入数据取自材料定量的微观组织特征相和综合力学性能的测量。这个程序的核心是当把实验数据输入到理论计算模型后，计算的结果必须能够与实验测量的强度性能相吻合，其准确性必须经得起检验并在模型化过程中能不断地提高。

基于这种思想，本书以含 0.45% C 的碳素钢为例，从理论上计算了淬火及不同温度下回火的力学性能及不同显微组织对疲劳断裂性能的影响。计算中输入的是微观组织（淬火马氏体、回火马氏体、屈氏体、索氏体）的特征相及其电子结构参数。力学性能的测量值选用了 0.45% C 钢的淬火、回火曲线及疲劳曲线中的实验值。程序的核心部分为微观组织特征相电子结构参数统计值及其强化系数、强化权重与力学性能的数值计算公式。0.45% C 钢淬火后不同温度回火的

力学性能计算值见表 1。0.45% C 钢淬火不同温度回火后的力学性能曲线如图 2 所示。表 1 的计算取自热处理相变充分完成的状态，相变温度对应回火温度范围的中间值，即低温回火温度为 220℃，中温回火温度为 400℃，高温回火温度为 600℃。

表 1 0.45% C 钢淬火、回火力学性能的理论计算

热处理工艺	微观组织特征相	σ_b /MPa	δ /%	A_K /J
淬火（不回火）	淬火马氏体	1525.52048	3.18661	19.49812
淬火 + 低温回火（220℃）	回火马氏体	1607.56861	6.04589	31.88835
淬火 + 中温回火（400℃）	屈氏体	1171.74647	16.16156	86.42615
淬火 + 高温回火（600℃）	索氏体	686.01160	29.91154	175.76330

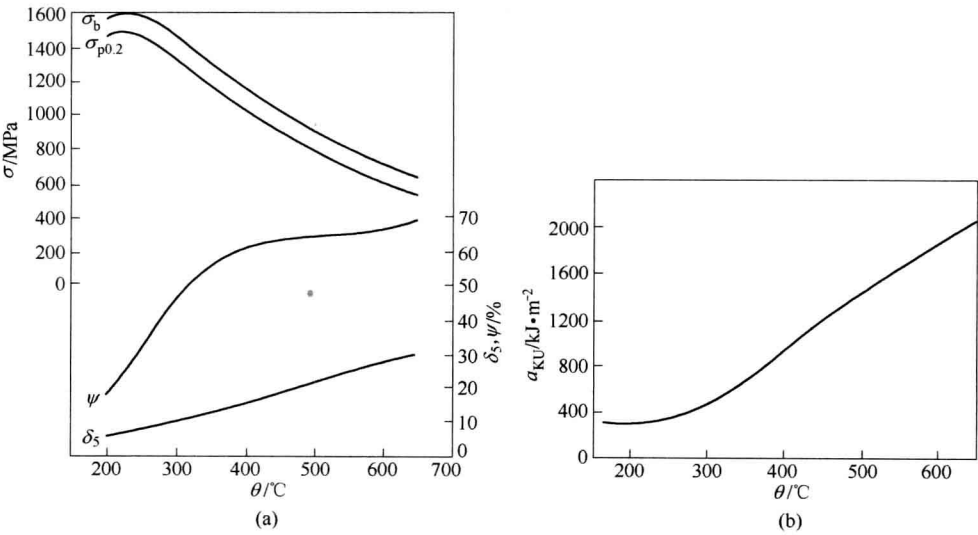


图 2 0.45% C 钢淬火、回火性能曲线（850℃ 淬火）

(a) 回火温度对拉伸性能的影响；(b) 回火温度对冲击韧性的影响

比较表 1 与图 2 可见理论计算的力学性能与回火温度曲线上的实验值符合较好。回火温度下力学性能的计算是在表 1 中淬火马氏体力学性能的基础上进行的，因此回火温度下力学性能计算值的准确性也反映了淬火马氏体力学性能计算的可靠性（图 2 中淬火马氏体力学性能无实验值）。

计算得到的 0.45% C 钢淬火和低温、中、高温回火时微观组织特征相电子结构参数的统计值见表 2。

马氏体为 C 在 α -Fe 中的固溶体 α -Fe-C，由于钢中的含 C 量有限，不可能所有的 α -Fe 晶胞中都有 C 原子，因此，淬火后除形成 α -Fe-C 固溶体（马