

TG1
C98

434397

材料科学与工程丛书

金属学与热处理原理

崔忠圻 刘北兴 编



00434397

哈尔滨工业大学出版社

序

哈尔滨工业大学材料科学与工程学院拥有热处理、铸造、锻压、焊接四个博士点和一个博士后流动站,拥有三个国家重点学科和两个国家重点实验室,有 24 名博士生导师和一批崭露头角的中青年专家。面对市场经济,面对学科、专业结构的调整与经济、科技、社会发展的要求相比仍相对滞后的局面,根据国家教育改革的要求和我校面向 21 世纪教育改革的思路,该院锐意改革,实行了材料加工意义下的宽口径教育,提出了材料加工类人才培养的新模式,把拓宽专业和跟踪科学技术发展趋势结合起来,制定了适应材料加工专业人才培养的教学计划和各门课程的教学大纲,并推出了这套教材和教辅丛书。

这套《材料科学与工程》丛书是具有“总结已有、通向未来”,“面向世界、面向 21 世纪”特色的“优化教材链”,以给培养材料科学与工程人才提供一个捷径为原则,力求简明、深入浅出,既利于教,又利于学。这套丛书包括本科生教材、教辅和研究生学位课教材,且已由 1995 年全国出版局长南京会议确定为“九·五”国家重点图书选题。

《金属学与热处理原理》是这套丛书中的一种。它是材料科学与工程专业的基础课,着重阐述金属及合金的化学成分、组织结构与性能的内在联系以及在各种条件下的变化规律,比较全面系统地介绍金属与合金的晶体结构、金属及合金的相图与结晶、塑性变形与再结晶以及固态金属相变的基本理论。本书结合实例,从组织的角度出发来阐明问题,重点放在与金属材料学科有关的基本现象、基本概念、基本规律和基本方法上,以便为合理地使用金属材料 and 制订热加工工艺规程,为从事金属与合金研究提供理论依据和线索。

根据教学大纲的规定,本教材的讲课时数为 68 学时,实验 12 学时,课堂讨论 4 学时。学习本教材前,学生应学完物理化学和材料力学,并进行过金工实习,初步具有金属材料生产方面的实践知识。

本书共十章,其中第一、二、三、四章由崔忠圻教授编写,其余由刘北兴教授编写,金相照片由张玉兰高级工程师摄制并整理,全书由李仁顺教授主审。

由于编者水平有限,加之时间仓促,书中难免有疏漏及不妥之处,敬请读者批评指正。

哈尔滨工业大学出版社

1998 年 6 月

目 录

第一章 金属与合金的晶体结构	
1.1 金属原子间的结合	(1)
1.2 金属的晶体结构	(4)
1.3 合金相结构	(18)
1.4 金属晶体的缺陷	(26)
第二章 纯金属的结晶	
2.1 金属结晶的现象	(40)
2.2 金属结晶的热力学条件	(42)
2.3 金属结晶的结构条件	(43)
2.4 晶核的形成	(44)
2.5 晶核长大	(52)
第三章 二元合金相图和合金的凝固	
3.1 二元合金相图的建立	(63)
3.2 匀晶相图及固溶体的结晶	(66)
3.3 共晶相图及其合金的结晶	(78)
3.4 包晶相图及其合金的结晶	(87)
3.5 其它类型的二元合金相图	(91)
3.6 二元相图的分析和使用	(94)
3.7 铸锭的组织与缺陷	(97)
第四章 铁碳合金	
4.1 铁碳合金的组元及基本相	(104)
4.2 Fe-Fe ₃ C 相图分析	(107)
4.3 铁碳合金的平衡结晶过程及组织	(110)
4.4 含碳量对铁碳合金平衡组织和性能的影响	(117)
4.5 钢中的杂质元素及钢锭组织	(121)
第五章 三元合金相图	
5.1 三元合金相图的表示方法	(129)
5.2 三元系平衡相的定量法则	(130)
5.3 三元匀晶相图	(132)
5.4 组元在固态下完全不溶的三元共晶相图	(136)
5.5 三元合金相图举例	(142)
第六章 金属的塑性变形和再结晶	
6.1 金属的变形特性	(145)
6.2 单晶体的塑性变形	(147)

6.3	多晶体的塑性变形	(155)
6.4	塑性变形对金属组织与性能的影响	(157)
6.5	冷变形金属的回复与再结晶	(162)
6.6	金属的热加工	(168)
6.7	超塑性	(171)
第七章	钢在加热和冷却时的转变	
7.1	概述	(173)
7.2	钢在加热时的转变	(174)
7.3	钢的过冷奥氏体转变曲线	(182)
7.4	珠光体转变	(188)
7.5	马氏体转变	(193)
7.6	贝氏体转变	(202)
第八章	钢的回火转变及合金时效	
8.1	钢的回火转变	(209)
8.2	合金的时效	(216)
8.3	调幅分解	(221)
第九章	钢的热处理工艺	
9.1	钢的退火和正火	(225)
9.2	钢的淬火	(229)
9.3	钢的淬透性	(236)
9.4	钢的回火	(237)
参考文献	(239)

第一章 金属与合金的晶体结构

金属材料的化学成分不同,其性能也不同。但是对于同一种成分的金属材料,通过不同的加工处理工艺,改变材料内部的组织结构,也可以使其性能发生极大的变化。由此可以看出,除化学成分外,金属的内部结构和组织状态也是决定金属材料性能的重要因素。这就促使人们致力于金属及合金内部组织结构的研究,以寻求改善和发展金属材料的途径。

金属和合金在固态下通常都是晶体。要了解金属及合金的内部结构,首先应了解晶体的结构,其中包括:晶体中原子是如何相互作用并结合起来的;原子的排列方式和分布规律;各种晶体的特点及差异等。

1.1 金属原子间的结合

一、金属原子的结构特点

原子结构理论指出,孤立的自由原子是由带正电的原子核和带负电的核外电子组成的。原子的尺寸很小,在 10^{-8}cm 数量级,原子核的尺寸更小,在 10^{-12}cm 数量级。原子核中又包括质子和中子。自由电子的静止质量为 $9.1 \times 10^{-28}\text{g}$,有效半径为 $4.6 \times 10^{-13}\text{cm}$ 。质子是电子质量的 1 836 倍,其静止质量为 $1.67 \times 10^{-24}\text{g}$,有效半径为 $1.4 \times 10^{-13}\text{cm}$,它带有与电子等量的电荷,但符号相反。中子是电子质量的 1 838 倍,比质子稍重,由于它不带电荷,有时可视为由一个质子与一个电子所组成。

核外的电子被原子核吸引,各电子间相互排斥并靠一种离心力保持着与核的距离,可以比作太阳系,不同的电子在一系列轨道或壳层上绕核转动。内层电子的能量低,最为稳定。最外层的电子能量高,与核结合得弱,这样的电子通常称为价电子。原子中的所有电子都按照量子力学规律运动着。

金属原子的结构特点是,其最外层的电子数很少,一般为一两个,不超过 3 个。由于这些外层电子与原子核的结合力弱,所以很容易脱离原子核的束缚而变成自由电子,此时的原子即变为正离子,因此,常将这些元素称为正电性元素。非金属元素的原子结构与此相反,其外层电子数较多,最多 7 个,最少 4 个,它易于获得电子,此时的原子即变为负离子,因此,非金属元素又称为负电性元素。由此可见,元素的化学特性决定于最外层的电子数,而与内壳层的结构无关,这些最外层的电子即为价电子。过渡族金属元素(如钛、钒、铬、锰、铁、钴、镍等)的原子结构,除具有上述金属原子的特点外,还有一个特点,即在次外层尚未填满电子的情况下,最外层就先填充了电子。因此,过渡族金属的原子不仅容易丢失最外层电子,而且还容易丢失次外层一两个电子,这就出现了过渡族金属化合价可变的现象。当过渡族金属的原子彼此相互结合时,不仅最外层电子参与结合,而且次外层电子也参与结合。因此,过渡族金属的原子间结合力特别强,表现为熔点高、强度高。可

见,价电子决定着金属的主要性能。

二、金属键

由于金属与非金属原子结构不同,因而使原子间的结合产生了很大差别。现以食盐(氯化钠)、金刚石(碳)和铜为例进行分析。当正电性元素钠和负电性元素氯相互接触时,由于电子一失一得,使它们各自变成正离子和负离子,二者靠静电作用结合起来,氯化钠的这种结合方式称为离子键。碳的价电子数是4个,得失电子的机会均等,既可形成正离子,也可形成负离子。事实上,虽然它偶而也能与别的元素形成离子键,但其本身原子之间多以共价键方式结合。所谓共价键,即相邻原子共用它的外部的价电子,形成稳定的电子满壳层。金刚石中的碳原子之间即完全以共价键结合。铜原子之间的结合,既不同于离子键,也不同于共价键。根据近代物理和化学的观点,处于聚集状态的金属原子,全部或大部将它们的价电子贡献出来,为其整个原子集体所公有,称之为电子云或电子气。这些价电子或自由电子,已不再只“围绕”自己的原子核运动,而是与所有的价电子一起在所有原子核周围按量子力学规律运动着。贡献出价电子的原子,则变成正离子,沉浸在电子云中,它们依靠运动于其间的公有化的自由电子的静电作用而结合起来,这种结合方式叫做金属键,它没有饱和性和方向性。图1.1示意地绘出了金属键模型。这种模型认为,在固态金属中,并非所有原子都变为正离子,只是绝大部分处于正离子状态,仍有少部分原子处于中性原子状态。

在金属及合金中,主要是金属键,但有时也不同程度地混有其它键。

根据金属键的本质,可以解释固态金属的一些特性。例如,在外加电场作用下,金属中的自由电子能够沿着电场方向定向运动,形成电流,从而显示出良好的导电性。自由电子的运动和正离子的振动使金属具有良好的导热性。随着温度的升高,正离子或原子本身振动的振幅加大,可阻碍电子的通过,使电阻升高,因而金属具有正的电阻温度系数。由于自由电子很容易吸收可见光的能量,而被激发到较高的能级,当它跳回到原来的能级时,就把吸收的可见光能量重新辐射出来,从而使金属不透明,具有金属光泽。由于金属键没有饱和性和方向性,所以当金属的两部分发生相对位移时,金属的正离子始终被包围在电子云中,从而保持着金属键结合。这样,金属就能经受变形而不断裂,使其具有延展性。

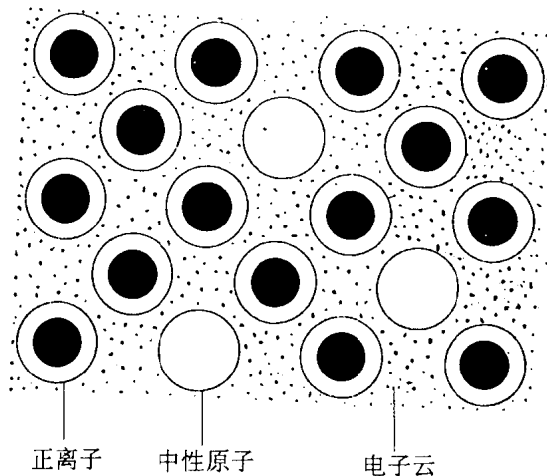


图 1.1 金属键模型

三、结合力与结合能

在固态金属中,众多的原子依靠金属键牢固地结合在一起。但是,处于聚集状态的金属原子,究竟是以什么方式排列着的? 沉浸于电子云中的金属原子(或正离子)为什么像

图 1.1 所示的那样规则排列着,并往往趋于紧密地排列。下面从原子间的结合力和结合能来说明。

为简便起见,首先分析两个原子之间的相互作用情况(即双原子作用模型)。当两个原子相距很远时,它们之间实际上不发生相互作用,但当它们相互逐渐靠近时,其间的作用力就会随之显示出来。分析表明,固态金属中两原子之间相互作用力包括:正离子与周围自由电子间的吸引力,正离子与正离子以及电子与电子之间的排斥力。吸引力力图使两原子靠近,而排斥力力图使两原子分开,它们的大小都随原子间距离的变化而变化,如图 1.2 所示。上图为 A、B 两原子间的吸引力和排斥力曲线,两原子的结合力为吸引力和排斥力的代数。吸引力为一种长程力,排斥力是一种短程力,当两原子间距较大时,吸引力大于排斥力,两原子自动靠近。当两原子靠近,致使其电子层发生重叠时,排斥力便急剧增长,一直到两原子距离为 d_0 时,吸引力与排斥力相等,即原子间结合力为零,好像位于原子间距 d_0 处的原子既不受吸引力,也不受排斥力一样。 d_0 即相当于原子的平衡位置,原子既不会自动靠近,也不会自动离开。任何对平衡位置的偏离,都将会受到一个力的作用,促使其回到平衡位置。例如:当距离小于 d_0 时,排斥力大于吸引力,两原子要相互排斥;当距离大于 d_0 时,吸引力大于排斥力,两原子要相互吸引。如果把 B 原子拉开,远离其平衡位置,则必须施加外力,以克服原子间的吸引力。当把 B 原子拉至 d_c 位置时,外力达到原子结合力曲线上的最大值,超过 d_c 之后,所需的外力就越来越小。可见,原子间的最大结合力不是出现在平衡位置,而是在 d_c 位置上。这个最大结合力与金属的理论抗拉强度相对应。金属不同,则原子的最大结合力值也不同。此外,从图上还可以看出,在 d_0 点附近,结合力与距离的关系接近直线关系。

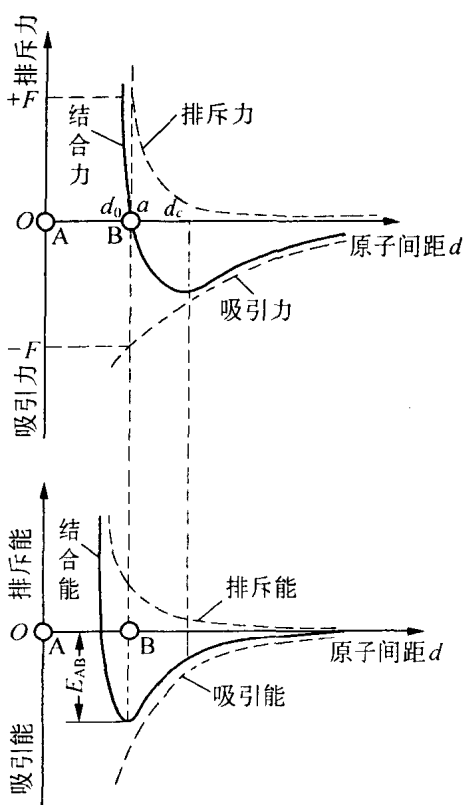


图 1.2 双原子作用模型

图 1.2 的下半部分是吸引能和排斥能与原子间距离的关系曲线,结合能是吸引能与排斥能的代数。当形成原子集团比孤立的自由原子更稳定,即势能更低时,那么,在吸引力的作用下把远处的原子移近所做的功使原子的势能降低,所以吸引能是负值。相反,排斥能是正值。当原子移至平衡距离 d_0 时,其结合能达到最低值,即此时原子的势能最低、最稳定。任何对 d_0 的偏离,都会使原子的势能增加,从而使原子处于不稳定状态,原子就有力图回到低能状态,即恢复到平衡距离的倾向。这里 E_{AB} 称为原子间的结合能或键能。同样,金属不同,则其结合能的大小也不同。

将上述双原子作用模型加以推广,不难理解,当大量金属原子结合成固体时,为使固态金属具有最低的能量,以保持其稳定状态,原子之间也必须保持一定的平衡距离,这便是固态金属中的原子趋于规则排列的重要原因。

如果试图从固态金属中把某个原子从平衡位置拿走,就必须对它做功,以克服周围原子对它的作用力。显然,这个要被拿走的原子周围邻近的原子数越多,原子间的结合能(势能)就越低。能量最低的状态是最稳定的状态,而任何系统都有自发从高能状态向低能状态转化的趋势。因此,常见金属中的原子总是自发地趋于紧密地排列,以保持最稳定的状态。

当原子间以离子键或共价键结合时,原子达不到紧密排列状态,这是由于这些结合方式对原子周围的原子数有一定限制之故。

1.2 金属的晶体结构

从双原子模型已经了解到,金属中原子的排列是有规则的,而不是杂乱无章的。人们将这种原子在三维空间中有规则的周期性重复排列的物质称为晶体。金属一般均为晶体。在晶体中,原子排列的规律不同,则其性能也不同,因而必须研究金属的晶体结构,即原子的实际排列情况。为了方便起见,首先把晶体当作没有缺陷的理想晶体来研究。

一、晶体与非晶体

谈到晶体,人们很容易联想到价格昂贵的钻石和晶莹剔透的各种宝石。这些的确是晶体,并且是天然的晶体。晶体往往都具有规则的几何外形,例如,食盐(NaCl)结晶呈立方体形,明矾 $[\text{KAl}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}]$ 结晶呈八面体形。然而各种金属制品,如门锁、钥匙以及汽车、火车和飞机上的各种金属构件等,虽然不具有规则的几何外形,但经过人们深入细致的研究证明,这些制品确实是晶体。可见,晶体与非晶体的区别不在外表,主要在于内部的原子(或离子、分子)的排列情况,凡是原子(或离子、分子)在三维空间按一定规律呈周期性排列的固体,均是晶体;而非晶体则不呈这种周期性的规则排列,例如,玻璃、棉花、木材等就是非晶体。液态金属的原子排列无周期规则性,不为晶体。当凝固成固体后,原子呈周期性规则排列,则变成晶体,在极快冷却的条件下,一些金属可获得固态非晶体,即将液态的原子排列方式保留至固态中。故非晶体又称为“过冷液体”或“金属玻璃”。

晶体纯物质与非晶体纯物质在性质上的区别主要有两点:①前者熔化时具有固定的熔点,而后者却存在一个软化温度范围,没有明显的熔点;②前者具有各向异性,而后者却为各向同性。

二、晶体结构与空间点阵

晶体结构是指晶体中原子(或离子、分子、原子集团)的具体排列情况,也就是晶体中的这些质点(原子、离子、分子、原子集团)在三维空间有规律的周期性的重复排列方式。组成晶体的物质质点不同,排列的规则不同,或者周期性不同,就可以形成各种各样的晶体结构,即实际存在的晶体结构可以有多种。假定晶体中的物质质点都是固定的刚球,那么晶体即由这些刚球堆垛而成,图 1.3(a)即为这种原子堆垛模型。从图中可以看出,原子在各个方向的排列都是很规则的。这种模型的优点是立体感强,很直观;缺点是很难看清内部原子排列的规律和特点,不便于研究。为了清楚地表明物质质点在空间排列的规律性,常常将构成晶体的实际质点忽略,而将它们抽象为纯粹的几何点,称之为阵点或结点。这些阵点或结点可以是原子或分子的中心,也可以是彼此等同的原子群或分子群

的中心,各个阵点间的周围环境都相同。这种阵点有规则地周期性重复排列所形成的空

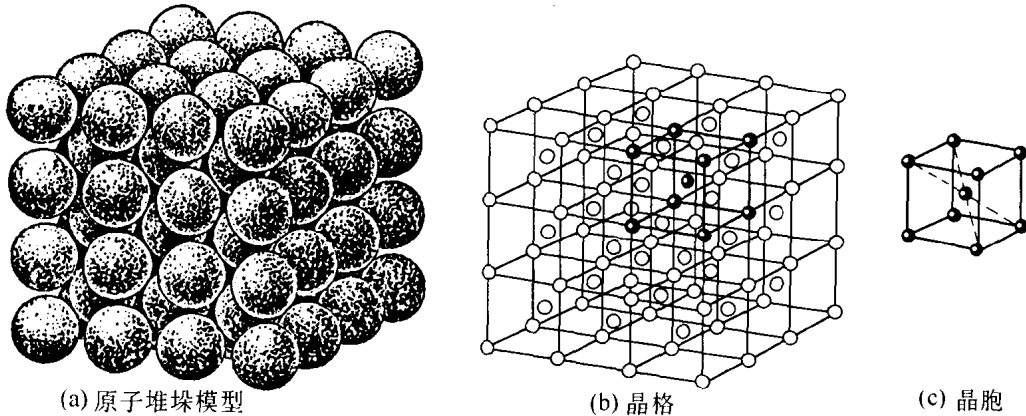


图 1.3 晶体中原子排列示意图

间几何图形即称为空间点阵。为了方便起见,常人为地将阵点用直线连接起来形成空间格子,称之为晶格(见图 1.3(b))。它的实质仍是空间点阵,通常不加以区别。

由于晶格中阵点排列具有周期性的特点,因此,为了简便起见,可以从晶格中选取一个能够完全反映晶格特征的最小几何单元来分析阵点排列的规律性,这个最小的几何单元称为晶胞(见图 1.3(c))。晶胞的大小和形状常以晶胞的棱边长度 a 、 b 、 c 及棱边夹角 α 、 β 、 γ 表示,如图 1.4 所示。图中沿晶胞三条相交于一点的棱边设置了三个坐标轴(或晶轴) x 、 y 、 z 。习惯上,以原点前、右、上方为轴的正方向,反之为负方向。晶胞的棱边长度一般称为晶格常数或点阵常数,在 x 、 y 、 z 轴上分别以 a 、 b 、 c 表示。晶胞的棱间夹角又称为轴间夹角,通常 y - z 轴、 z - x 轴和 x - y 轴的夹角分别用 α 、 β 、 γ 表示。

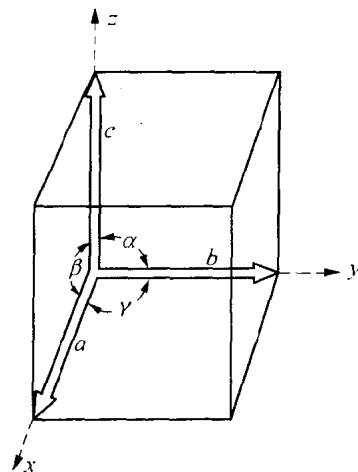


图 1.4 晶胞的晶格常数和轴间夹角表示法

三、三种典型的金属晶体结构

自然界中的晶体有成千上万种,它们的晶体结构各不相同,但若根据晶胞的三个晶格常数和三个轴间夹角的相互关系对所有的晶体进行分析,则发现空间点阵只有 14 种类型,进一步根据晶体的对称程度高低和对称特点,又可将 14 种空间点阵归属 7 个晶系,如表 1.1 所示。由于金属原子趋向于紧密排列,所以在工业上使用的金属元素中,除了少数具有复杂的晶体结构外,绝大多数都具有比较简单的晶体结构,其中最典型、最常见的晶体结构有三种类型,即体心立方结构、面心立方结构和密排六方结构,前两种属于立方晶系,后一种属于六方晶系。

1. 体心立方晶格

体心立方晶格的晶胞模型见图 1.5。晶胞的三个棱边长度相等,三个轴间夹角均为 90° ,构成立方体。除了在晶胞的八个角上各有一个原子外,在立方体的中心还有一个原子。具有体心立方结构的金属有 α -Fe、Cr、V、Nb、Mo、W 等 30 多种。

表 1.1 7个晶系和 14种点阵

晶系和实例	点阵类型			
	简单	底心	体心	面心
三斜晶系 $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ K_2CrO_7				
单斜晶系 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma \neq 90^\circ \neq \beta$ $\beta-S$				
正交晶系 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $\alpha-S, Fe_3C$				
六方晶系 $a_1 = a_2 = a_3 \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ Zn, Cd, Mg				
菱方晶系 $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ As, Sb, Bi				
四方晶系 $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $\beta-Sa, TiO_2$				
立方晶系 $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ Fe, Cr, Ca, Ag				

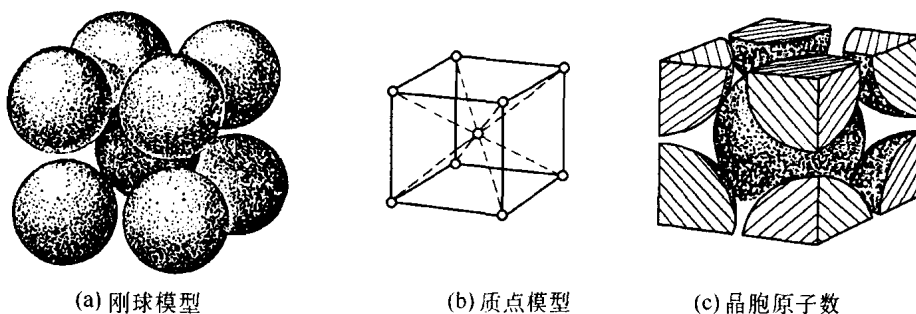


图 1.5 体心立方晶胞

(1) 原子半径。在体心立方晶胞中,原子沿立方体对角线紧密地接触着,如图 1.5(a)所示。设晶胞的点阵常数(或晶格常数)为 a ,则立方体对角线的长度为 $\sqrt{3}a$,等于 4 个原子半径,所以体心立方晶胞中的原子半径 $r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$ 。

(2) 原子数。由于晶格是由大量晶胞堆垛而成,因而晶胞每个角上的原子为与其相邻的 8 个晶胞所共有,故只有 $1/8$ 个原子属于这个晶胞,晶胞中心的原子完全属于这个晶胞,所以体心立方晶胞中的原子数为 $8 \times 1/8 + 1 = 2$,如图 1.5(c)所示。

(3) 配位数和致密度。晶胞中原子排列的紧密程度也是反映晶体结构特征的一个重要因素,通常用两个参数来表征,一个是配位数,另一个是致密度。

① 配位数。所谓配位数是指晶体结构与与任一个原子最近邻、等距离的原子数目。显然,配位数越大,晶体中的原子排列便越紧密。在体心立方晶格中,以立方体中心的原子来看,与其最近邻、等距离的原子数有 8 个,所以体心立方晶格的配位数为 8。

② 致密度。若把原子看成刚性圆球,那么原子之间必然有空隙存在,原子排列的紧密程度可用晶胞中原子所占体积与晶胞体积之比表示,称为致密度或密集系数,可用下式表示

$$K = \frac{nV_1}{V}$$

式中: K 为晶体的致密度; n 为一个晶胞实际包含的原子数; V_1 为一个原子的体积; V 为晶胞的体积。

体心立方晶格的晶胞中包含有 2 个原子,晶胞的棱边长度(晶格常数)为 a ,原子半径为 $r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$,其致密度为

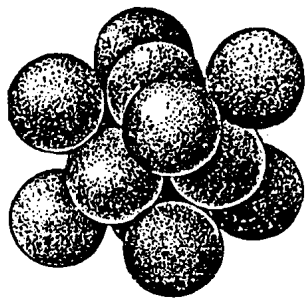
$$K = \frac{nV_1}{V} = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^3}{a^3} \approx 0.68$$

此值表明,在体心立方晶格中,有 68% 的体积为原子所占据,其余 32% 为间隙体积。

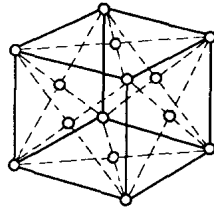
2. 面心立方晶格

面心立方晶格的晶胞如图 1.6 所示。在晶胞的 8 个角上各有 1 个原子,构成立方体,在立方体 6 个面的中心各有 1 个原子。 γ -Fe、Cu、Ni、Al、Ag 等约 20 种金属具有这种晶体结构。

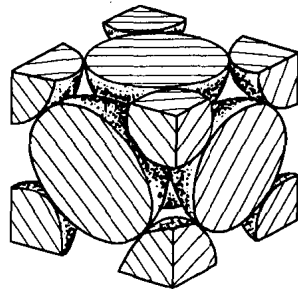
由图 1.6(c)可以看出,每个角上的原子为 8 个晶胞所共有,每个晶胞实际占有该原子的 $1/8$,而位于 6 个面中心的原子同时为相邻的两个晶胞所共有,每个晶胞只分到面心原



(a) 刚球模型



(b) 质点模型



(c) 晶胞原子数

图 1.6 面心立方晶胞

子的 $1/2$, 因此面心立方晶胞中的原子数为 $\frac{1}{8} \times 8 + \frac{1}{2} \times 6 = 4$ 。

在面心立方晶胞中, 只有沿着晶胞 6 个面的对角线方向的原子才是互相接触的, 面对角线的长度为 $\sqrt{2}a$, 它与 4 个原子半径的长度相等, 所以面心立方晶胞的原子半径 $r = \frac{\sqrt{2}}{4}a$ 。

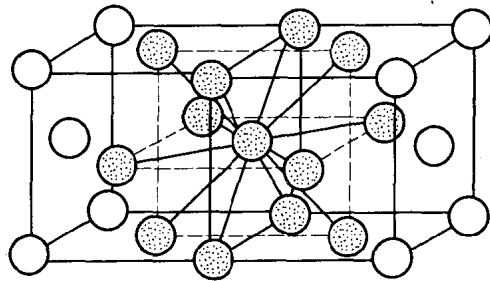


图 1.7 面心立方晶格的配位数

从图 1.7 可以看出, 以面中心那个原子为例, 与之最近邻的是它周围顶角上的 4 个原子, 这 5 个原子构成了一个平面, 这样的平面共有 3 个, 3 个面彼此相互垂直, 结构形式相同, 所以与该原子最近邻、

等距离的原子共有 $4 \times 3 = 12$ 个, 因此面心立方晶格的配位数为 12。

由于面心立方晶胞中的原子数和原子半径是已知的, 因此可以计算出它的致密度

$$K = \frac{nV_1}{V} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2}}{4}a\right)^3}{a^3} \approx 0.74$$

此值表明, 在面心立方晶格中, 有 74% 的体积为原子所占据, 其余 26% 为间隙体积。

3. 密排六方晶格

密排六方晶格的晶胞如图 1.8 所示。在晶胞的 12 个角上各有 1 个原子, 构成六方柱体, 上底面和下底面的中心各有 1 个原子, 晶胞内还有 3 个原子。具有密排六方晶格的金属有 Zn、Mg、Be、 α -Ti、 α -Co、Cd 等。

晶胞中的原子数可参照图 1.8(c) 计算如下: 六方柱每个角上的原子均属 6 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 3 个原子, 故晶胞中的原子数为: $1/6 \times 12 + 1/2 \times 2 + 3 = 6$ 。

密排六方晶格的晶格常数有两个: 一是正六边形的边长 a ; 另一个是上、下两底面之间的距离 c 。 c 与 a 之比 c/a 称为轴比。在典型的密排六方晶格中, 原子刚球十分紧密地堆垛排列, 如晶胞上底面中心的原子, 它不仅与周围 6 个角上的原子相接触, 而且与其下面的 3 个位于晶胞之内的原子以及与其上相邻晶胞内的 3 个原子相接触(见图 1.9), 故配位数为 12, 此时的轴比 $c/a = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1.633$ 。但是, 实际的密排六方晶格金属, 其轴比或大

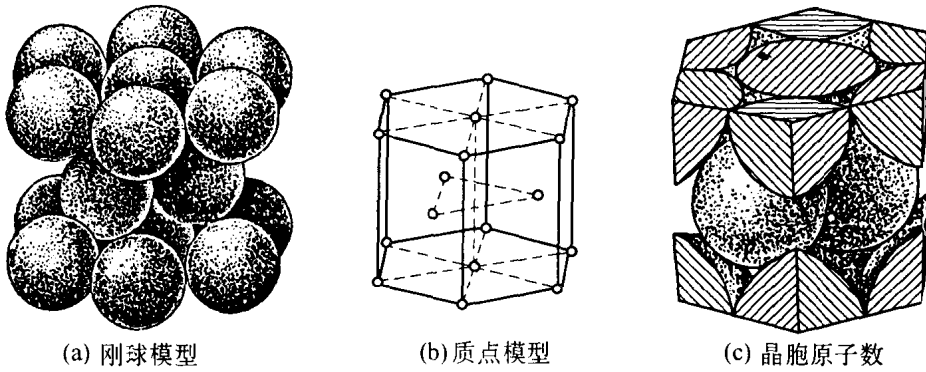


图 1.8 密排六方晶胞

或小地偏离这一数值,大约在 1.57 ~ 1.64 之间波动。

对于典型的密排六方晶格金属,其原子半径为 $a/2$,致密度为

$$K = \frac{nV_1}{V} = \frac{6 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{\frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 \sqrt{\frac{8}{3}} a} = \frac{6 \times \frac{4}{3} \pi (\frac{a}{2})^3}{3\sqrt{2} a^3} = \frac{\sqrt{2}}{6} \pi \approx 0.74$$

密排六方晶格的配位数和致密度均与面心立方晶格相同,此说明这两种晶格晶胞中原子的紧密排列程度相同。

4. 晶体中的原子堆垛方式和间隙

(1) 晶体中的原子堆垛方式。对各类晶体的配位数和致密度进行分析计算的结果表明,配位数以 12 为最大,致密度以 0.74 为最高。因此,面心立方晶格和密排六方晶格均属于最紧密排列的晶格。为什么两者的晶体结构不同而却会有相同的密排程序呢? 为了回答这一问题,需要了解晶体中的原子堆垛方式。

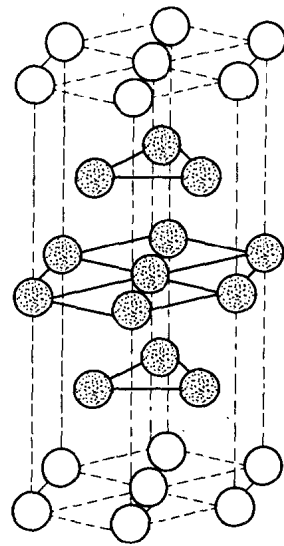


图 1.9 密排六方晶格的配位数

现仍采用晶体的刚球模型,图 1.10(a)为在一个平面上原子最紧密排列的情况,原子之间彼此紧密接触。这个原子最紧密排列的平面(密排面),对于密排六方晶格而言是其底面,对于面心立方晶格而言,则为垂直于立方体空间对角线的对角面。可以把密排面的原子中心连结成六边形网络,该六边形网络又可分为六个等边三角形,而这六个三角形的中心又与原子的六个空隙中心相重合(见图 1.10(b))。从图 1.10(c)可以看出,这六个空隙可分为 B、C 两组,每组分别构成一个等边三角形。为了获得最紧密排列,第二层密排

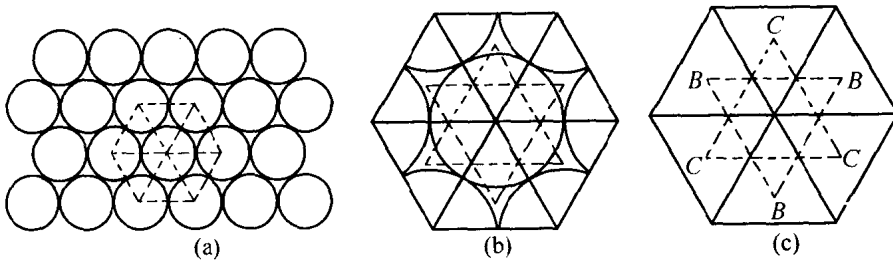


图 1.10 最密排面上原子排列示意图

面(B层)的每个原子应当正好坐落在下面一层(A层)密排面的B组空隙(或C组)上,如图1.11所示。关键是第三层密排面,它有两种堆垛方式:第一种是第三层密排面的每个原子中心正好对应第一层(A层)密排面的原子中心,第四层密排面又与第二层重复,以下依次类推。因此,密排面的堆垛顺序是ABABAB...,按照这种堆垛方式,即构成密排六方晶格,如图1.12所示。第二种堆垛方式是第三层密排面(C层)的每个原子中不与第一层密排面的原子中心重复,而是位于既是第二层原子空隙中心,又是第一层原子的空隙中心处。之后,第四层的原子中心与第一层的原子中心重复,第五层又与第二层重复,照此类推,它的堆垛方式为ABCABCABC...,这就构成了面心立方晶格,如图1.13所示。由此可见,两种晶格的堆垛方式虽然不同,但其致密程度却是完全相同的。

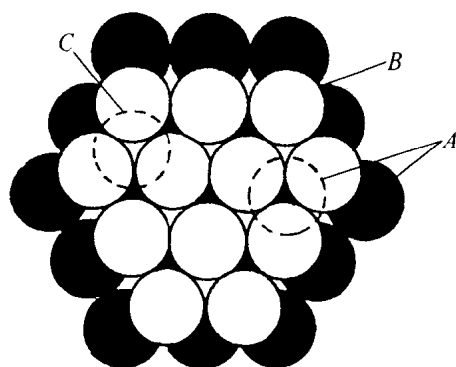


图 1.11 面心立方晶格和密排六方晶格的原子堆垛方式

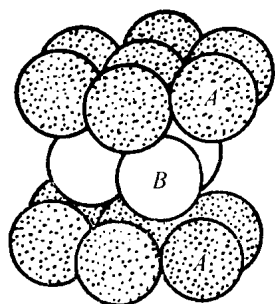


图 1.12 密排六方晶格密排面的堆垛方式

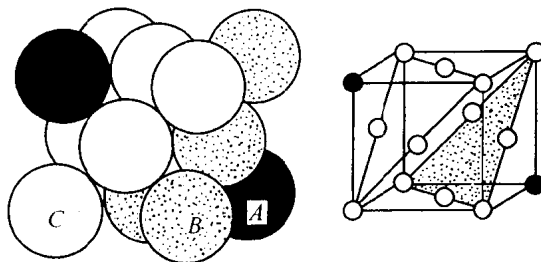


图 1.13 面心立方晶格密排面的堆垛方式

在体心立方晶胞中,除位于体心的原子与位于顶角的8个原子相切外,8个顶角上的原子彼此间并不相互接触。显然,原子排列较为紧密的面相当于连结晶胞立方体的两个斜对角线所组成的面,若将该面取出并向四周扩展,则可画出如图1.14(a)所示的形式。由图可以看出,这层原子面的空隙是由4个原子构成的,而密排六方晶格和面心立方晶格密排面的空隙是由3个原子构成的,显然,前者的空隙比后者大。原子排列的紧密程度较差,通常称其为次密排面。为了获得较为紧密的排列,第二层次密排面(B层)应坐落在第一层(A层)的空隙中心上,第三层的原子位于第二层的原子空隙处,并与第一层的原子中心相重复,依此类推。因而它的堆垛方式为ABABAB...,由此构成体心立方晶格,如图1.14(b)所示。

(2) 晶体中的间隙。不管原子以哪种方式进行堆垛,在原子刚球之间必然存在间隙,这些间隙对金属的性能以及形成合金后的晶体结构等都有重要影响。

体心立方晶格有两种间隙:一种是八面体间隙;另一种是四面体间隙。如图1.15所示。

由图可见,八面体间隙是由6个原子所围成,4个角上的原子至间隙中心的距离较远,为 $\frac{\sqrt{2}}{2}a$,上下顶点的原子中心至间隙中心的距离较近,为 $\frac{1}{2}a$ 。间隙的棱边长度不全相

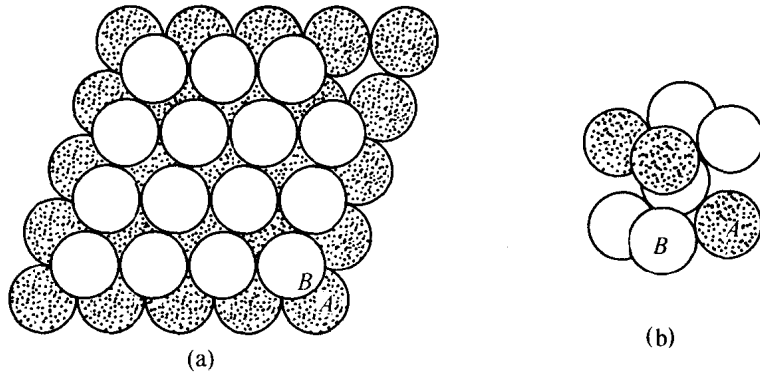


图 1.14 体心立方晶格原子的堆垛方式

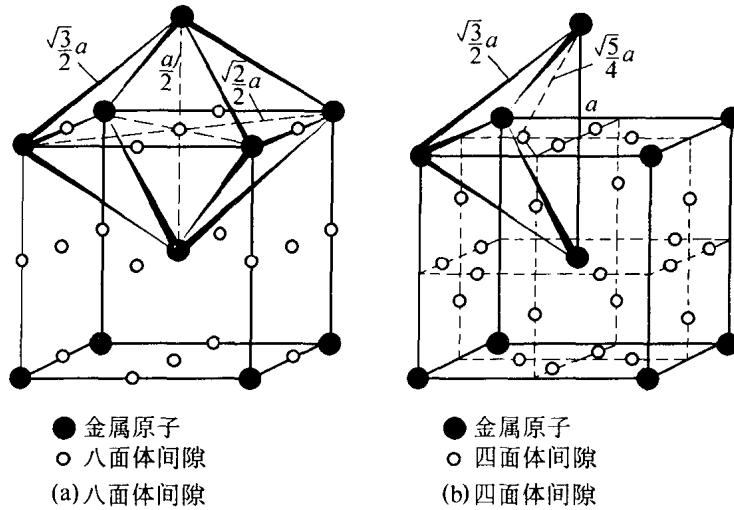


图 1.15 体心立方晶格的间隙

等,是一个不对称的扁八面体间隙,间隙半径为顶点原子至间隙中心的距离减去原子半径: $\frac{1}{2}a - \frac{\sqrt{3}}{4}a = \frac{2-\sqrt{3}}{4}a \approx 0.067a$ 。间隙中心位于立方体各面的中心和棱边的中点处。

四面体间隙由 4 个原子所围成,棱边的长度不全相等,也是不对称间隙。原子中心至间隙中心的距离皆为 $\frac{\sqrt{5}}{4}a$,因此间隙半径为 $\frac{\sqrt{5}}{4}a - \frac{\sqrt{3}}{4}a \approx 0.126a$ 。显然,四面体间隙比八面体间隙大得多。立方体的每个面上均有 4 个四面体间隙位置。

面心立方晶格也存在两种间隙,即八面体间隙和四面体间隙。由于各个棱边长度相等,各个原子中心至间隙中心的距离也相等,所以它们属于正八面体间隙和正四面体间隙。图 1.16 中标出了两种不同的间隙在晶胞中的位置。

八面体间隙的原子至间隙中心的距离为 $\frac{1}{2}a$,原子半径为 $\frac{1}{2}a - \frac{\sqrt{2}}{4}a = \frac{2-\sqrt{2}}{4}a \approx 0.146a$ 。四面体间隙的原子至间隙中心的距离为 $\frac{\sqrt{3}}{4}a$,所以间隙半径为 $\frac{\sqrt{3}}{4}a - \frac{\sqrt{2}}{4}a = \frac{\sqrt{3}-\sqrt{2}}{4}a \approx 0.06a$ 。可见,在面心立方晶格中,八面体间隙比四面体间隙大得多。

密排六方晶格的八面体间隙和四面体间隙的形状与面心立方晶格的完全相似,当原

子半径相等时,间隙大小完全相等,只是间隙中心在晶胞中的位置不同,如图 1.17 所示。

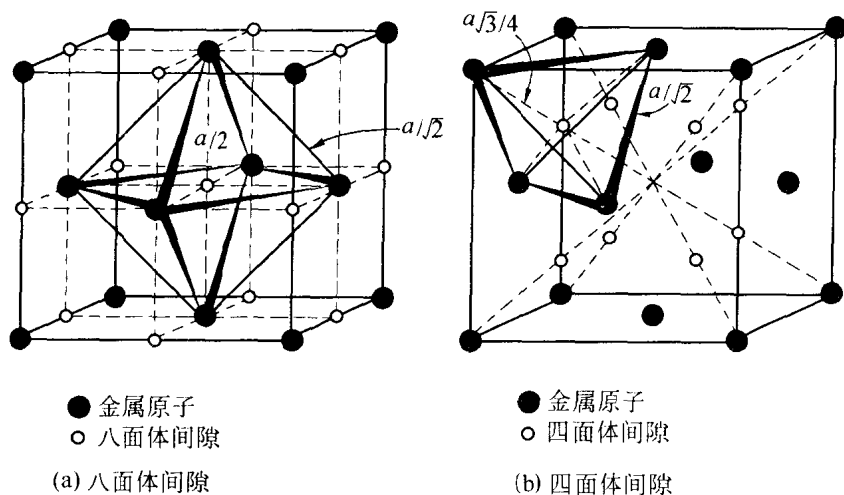


图 1.16 面心立方晶格的间隙

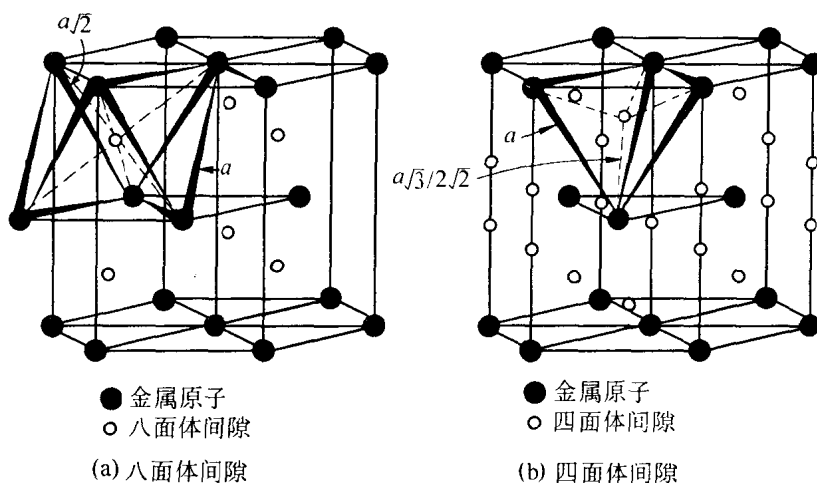


图 1.17 密排六方晶格的间隙位置

四、晶向指数的晶面指数

在晶体中,由一系列原子所组成的平面称为晶面,任意两个原子之间连线所指的方向称为晶向。为了便于研究和表述不同晶面和晶向的原子排列情况及其在空间的位向,需要有一种统一的表示方法,这就是晶面指数和晶向指数。

1. 晶向指数

晶向指数的确定步骤如下:

- ① 以晶胞的三个棱边为坐标轴 x 、 y 、 z ,以棱边长度(即晶格常数)作为坐标轴的长度单位;
- ② 从坐标原点引一有向直线平行于待定晶向;
- ③ 在所引有向直线上任取一点(为了分析方便,可取距原点最近的那个原子),求出该点在 x 、 y 、 z 上的坐标值;
- ④ 将三个坐标值按比例化为最小简单整数,依次写入方括号 $[]$ 中,即得所求的晶向

指数。

通常以 $[u, v, w]$ 表示晶向指数的普遍形式,若晶向指向坐标的负方向时,则坐标值中出现负值,这时在晶向指数的这一数字之上冠以负号。

现以图 1.18 AB 方向的晶向为例说明。通过坐标原点引一平行于待定晶向 AB 的直线 OB' , B' 点的坐标值为 $(-1, 1, 0)$,故其晶向指数为 $[\bar{1}10]$ 。

应当指出,从晶向指数的确定步骤可以看出,晶向指数所表示的不仅仅是一条直线的位向,而是一族平行线的位向,即所有相互平行的晶向,都具有相同的晶向指数。

立方晶胞中一些常用的晶向指数示于图 1.19 中,现加以扼要说明。如 x 轴方向,其晶向指数可用 A 点表示, A 点坐标为 $(1, 0, 0)$,所以 x 轴的晶向指数为 $[100]$ 。同理, y 轴的晶向指数为 $[010]$, z 轴的晶向指数为 $[001]$ 。 D 点的坐标为 $(1, 1, 0)$,所以 OD 方向的晶向指数为 $[110]$ 。 F 点的坐标为 $(1, 1, 1)$,所以 OF 方向的晶向指数为 $[111]$ 。 H 点的坐标为 $(1, \frac{1}{2}, 0)$,所以 OH 方向的晶向指数为 $[210]$ 。

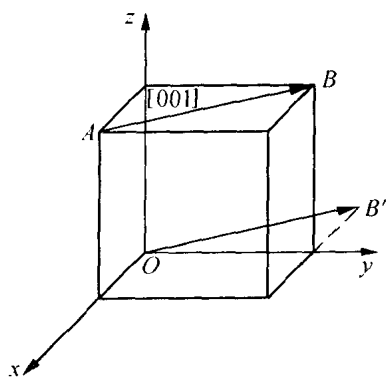


图 1.18 确定晶向指数的示意图

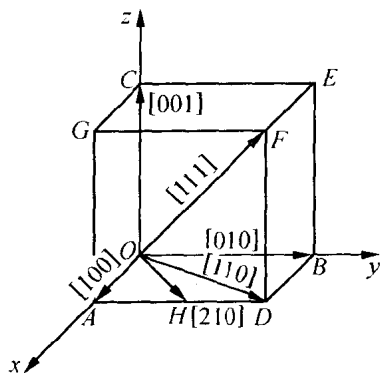


图 1.19 立方晶系中一些常用的晶向指数

同一直线有相反的两个方向,其晶向指数的数字和顺序完全相同,只是符号相反,它相当于用 -1 乘晶向指数中的三个数字,如 $[123]$ 与 $[\bar{1}\bar{2}\bar{3}]$ 方向相反, $[1\bar{2}0]$ 与 $[\bar{1}20]$ 方向相反等等。

原子排列相同但空间位向不同的所有晶向称为晶向族。在立方晶系中, $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 以及方向与之相反的 $[\bar{1}00]$ 、 $[0\bar{1}0]$ 、 $[00\bar{1}]$ 共六个晶向上的原子排列完全相同,只是空间位向不同,属于同一晶向族,用 $\langle 100 \rangle$ 表示。同样 $\langle 110 \rangle$ 晶向族包括 $[110]$ 、 $[101]$ 、 $[011]$ 、 $[\bar{1}10]$ 、 $[\bar{1}01]$ 、 $[0\bar{1}1]$ 以及方向与之相反的晶向 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 、 $[\bar{1}0\bar{1}]$ 、 $[0\bar{1}\bar{1}]$ 、 $[1\bar{1}0]$ 、 $[10\bar{1}]$ 、 $[01\bar{1}]$ 共 12 个晶向。 $\langle 111 \rangle$ 晶向族包括 $[111]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 、 $[1\bar{1}\bar{1}]$ 、 $[11\bar{1}]$ 以及 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 、 $[1\bar{1}\bar{1}]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 、 $[\bar{1}11]$ 8 个晶向。

应当指出,只有对于立方结构的晶体,改变晶向指数的顺序,所表示的晶向上的原子排列情况才完全相同,这种方法对于其它结构的晶体则不一定适用。

2. 晶面指数

晶面指数的确定步骤如下:

① 以晶胞的三条相互垂直的棱边为参考坐标轴 x, y, z , 坐标原点 O 应位于待定晶面之外, 以免出现零截距;

② 以棱边长度(即晶格常数)为度量单位, 求出待定晶面在各轴上的截距;

③ 取各截距的倒数, 并化为最小简单整数, 放在圆括号内, 即为所求的晶面指数。