

金属学原理

侯增寿 卢光熙主编

1411

345325

151

金 属 学 原 理

侯增寿 卢光熙 主编



上海科学技术出版社

DW41/01



金属学原理

侯增寿 卢光熙 主编

上海科学技术出版社出版

(上海瑞金二路450号)

新华书店上海发行所发行 上海东方印刷厂印刷

开本 787×1092 1/16 印张 16 字数 371,000

1990年7月第1版 1990年7月第1次印刷

印数：1—4,500

ISBN 7-5323-2014-6/TG·72

定价：5.25元

前　　言

卢光熙、侯增寿主编，陈仁悟、康大韬、王世清、赵子伟、陈康年参加编写的《金属学教程》，于1985年由上海科学技术出版社作为教学用书出版。为了把它纳入金属材料及热处理专业教材编审委员会（后改组为专业教学指导委员会）“七五”教材建设计划，使之能更好地为专业教学服务，曾由侯增寿具名提出样章送审。经编委会武汉会议审议、镇江会议确认，该书根据编委会制订的教学大纲修订、审稿后可作为教材出版。编者在这本书试用两年并广泛征求意见后，按照编委会的要求进行了全面修订。金属材料及热处理专业教学指导委员会认定本书为本专业推荐教材。

由于计划教学时数有限，为了使学生较好地掌握最必要的基础理论和基础知识，我们根据1987年在长沙召开的金属学研讨会与会同志的意见，删去了一部分内容，改正了一些错误和不妥之处；根据由浅入深、难点分散的原则，在编排上作了较大的变动，并把位错理论中较难理解的部分作了深入浅出的处理，放在最后一章。这一章可由任课教师根据具体情况予以取舍。对习题也进行了修订。

全部修订工作由卢光熙、侯增寿完成。浙江大学卢宗津为习题的修订提供资料并提出了有益的建议。考虑到专业教学计划中所列的课程名称，修订本定名为《金属学原理》。

本书由西安交通大学王小同教授及浙江大学毛志远教授主审。在专业教学指导委员会委员毛志远教授主持下，召开由专业教学指导委员会金属学小组成员组成的审稿会，对初稿进行了详细认真的审定。

编者衷心感谢两位主审和审稿会、长沙金属学研讨会全体与会同志以及北京航空航天大学谢希文教授，感谢他们对本书初稿提出了宝贵意见。

我们热诚希望本书能为专业教学提供方便，同时也深知自己的水平和精力有限，错误和不妥之处必然难免，诚恳地希望得到广大同行和读者的指正。

编者

1989年7月

导 论

人类究竟在什么年代进入铜器时期和铁器时期，至今尚无定论。生活在黄河上游的中华民族大约在五千年前开始使用锡青铜则已被考古学家肯定。被认为是记载春秋末年（公元前六世纪）齐国手工艺的古籍《周礼·考工记》，对当时生活用品及兵器制造中使用的青铜的化学成分与其用途间的关系，曾作出明确的总结。公元前七世纪末，我国在世界上已率先掌握了生铁铸造技术，随后又在公元前五世纪发明了通过退火使白口铁局部石墨化以便使之变得柔韧的方法。最先掌握钢的淬火技术的是埃及人，那大概是公元前九世纪的事。中国人掌握这项技术至少可追溯到公元前三世纪。东汉时期，中国锻冶大师们还曾经创造了反复叠打以改善钢材性能的办法。与金属有关的考古发现还可以举出许多。上述这些史料已足以说明，至少一千八百年前，人们已经全面认识到化学成分以及铸造、锻压、热处理等加工过程对金属（包括纯金属和合金）的性能有重大影响。然而，在漫长的岁月里人们对这些事物的内在联系却一无所知。

十八世纪后期，炼铁工人格里格农（Grignon）创造了宏观分析方法；十九世纪中叶，索拜（Sorby）创造了金属显微分析方法，并用显微镜拍摄了第一张钢的显微组织照片；十九世纪末，伦琴（Rüntgen）发现了X射线，二十世纪初，劳埃（Laue）和布拉格（Bragg）创立了晶体X射线衍射分析方法。人们从此学会了对金属组织和结构的分析，并逐步认识到化学成分不同的金属以及采用不同工艺加工处理的金属，其组织结构有所不同，同时认识到金属性能与其组织结构之间有一定联系。

金属学课程的主要内容就是金属的化学成分、加工过程与其组织结构和性能之间的关系。为了便于学习，这里初步介绍一些有关组织结构的概念及试验方法。

从金属材料或工件上的适当部位切取试样，用砂轮及粗砂纸磨平其某一特定平面，再用适当的化学试剂对磨面加以浸蚀，便可以用肉眼看到类似图0-1所示的图像。这种图像所显示的就是金属的宏观组织。图0-1中明暗相间的小块是金属中的晶粒。用手转动试样，可使明处变暗、暗处变明。说明这些小块相对于试样宏观表面的倾斜角度及走向不同。这是试剂浸蚀的结果。采用宏观分析方法可全面观察大块金属试样甚至整个金属制品中晶粒的形状、尺寸以及某些冶金缺陷。^{*}

当金属晶粒细小到一定程度或需要观察金属组织中的某些细节时，宏观分析已无法奏效，这时应采用显微分析方法。显微分析使用的试样较小，磨面须用细砂纸磨光并用沾有抛光粉的绒布抛光成镜面。所用化学试剂一般作用比较微弱，浸蚀时间也较短。这样制成的试样叫做金相试样。放大后的金相试样浸蚀面大致如图0-2所示。

用金相显微镜观察金相试样时，将发生图0-3(b)所示的情况。对于纯金属，由于晶粒边界易于浸蚀，这里形成深沟。光线由显微镜的物镜照射到这里，反射光不能进入物镜，使晶界显现为暗色的线。晶粒内部浸蚀后仍为平面，反射光线可进入物镜，成像后发亮。

* 宏观分析还包括对金属制品外观的检查及对断口的分析。

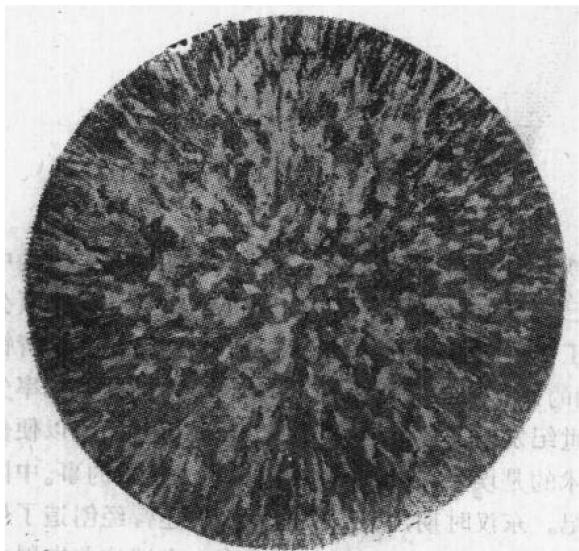


图 0-1 金属的宏观组织

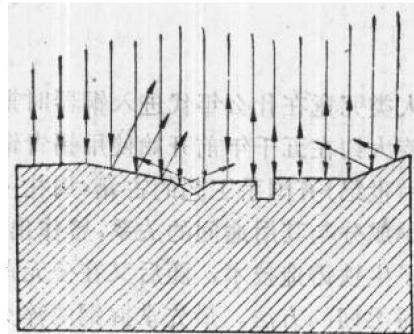
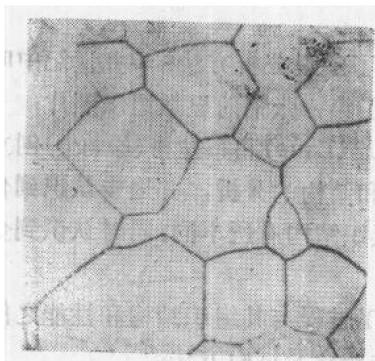
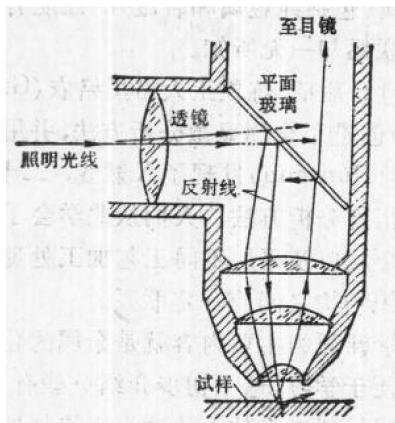


图 0-2 金相试样表面放大图像示意图



(a)



(b)

图 0-3 纯金属的显微组织(a)及其成像原理(b)

于是可以看到图 0-3(a) 所示的形貌。用这种方法观察到的组织叫做金相组织或显微组织。

工业上使用的金属材料主要是合金，即由两种或更多的金属元素或金属元素与非金属元素组成的物质。合金的显微组织一般比较复杂。图 0-4 是一种磷含量为 8.5% 的镍磷合金的显微组织。其中有白色卵形物，有球状小颗粒，剩下的是白色基体。前两者基本上是纯镍，基体是 Ni_3P 。这就是说，前两者化学成分和内部原子排列相同，基体的化学成分和原子排列则与它们不同。金属组织中化学成分不同、原子排列不同的组成物被称为不同的“相”。图 0-4 的显微组织就是由 α 相和 Ni_3P 相所构成。这个例子说明，合金的显微组织中可能含有若干种相(也可能只有一种相)。显微分析可以观察合金中各种相的形状、尺寸及分布，还可以观察某些细致的冶金缺陷。

光学金相显微镜的有效放大倍数有限，一般不超过1500倍。为了更清晰地分辨金属组织，需要使用电子显微镜。此时需将试样制成厚度仅几十nm的薄膜，或将金相试样表面的形貌用特殊方法制取复型，然后在电子显微镜下让电子束透过薄膜或复型而成像。用来观察这类试样的电子显微镜叫做透射电镜。如果让电子束象电视机显像管的电子束那样，有规律地在金相试样(或断口)表面扫描，也可以观察金相组织(或断口)图像。这样的电子显微镜叫做扫描电镜。

结构是指原子排列情况。透射电子显微镜可以反映有关结构的信息，然而进行结构分析时应用更广的仍是X射线衍射分析仪。

当一束平行单色光通过光栅时，会产生衍射条纹。知道了光的波长，就能根据条纹间距算出光栅上刻痕的间距。条件是波长和刻痕间距相当。金属中原子在三维空间有规律地排列，形成一个天然的三维光栅。选用一束可以透入金属的平行单色X射线作为光源，由于其波长与原子间距相当，X射线进入金属后即可产生衍射现象。用照相底片把衍射条纹(或斑点)记录下来(图0-5)，测量各条线间的距离，即可对金属结构作出分析。

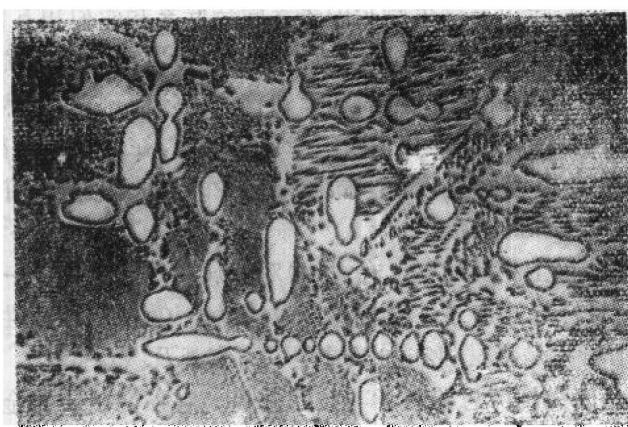


图0-4 Ni-P合金的显微组织 600×

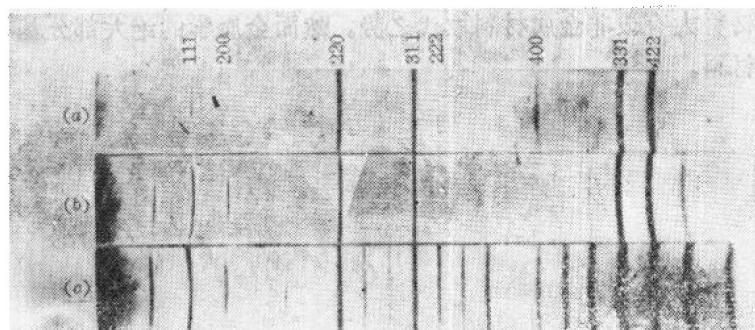


图0-5 Cu-Au合金的X射线衍射图

研究金属组织结构的方法还有很多种，至今仍不断有更新的方法出现。金属学就是以人类使用金属制造器械的经验和技术为实践基础，以金属组织结构和性能分析方法为研究手段，以物理、化学和物理化学为理论基础而建立和发展起来的一门学科。这门学科的建立与矿物学研究也有着不解之缘。矿物地质学家在研究矿物岩石的基础上建立了系统的晶体

学理论，这些理论已被移植到金属的结构分析。对多晶体（由若干晶粒构成的晶体）岩石的研究建立了结晶的基本过程是形核和长大的概念，这个概念同样被作为金属凝固及固态相变研究的基础。有趣的是，被称为“金相学”之父的索拜，竟是一位矿物学家。

大量试验研究工作使学者们积累了大量合金成分、温度与显微组织之间的关系的资料，在物理化学有关溶液及相律等基础理论的指导下，对这些资料综合整理，绘制出了多种合金系统的相图。随后又根据冶金及铸造生产中发现的现象，建立了合金凝固理论。根据锻压生产中发现的现象，建立了金属塑性变形与再结晶理论。结合热处理生产与金属物理的研究成果，建立了金属固态相变理论。二十世纪中叶，金属物理有一个突破性进展，这就是位错理论的建立和位错观察技术的开发。位错理论的引入，大大丰富和深化了金属学，使人们对强化金属的方法有了本质性的认识。

谈到这里，实际上已经具体罗列了金属学课程的基本内容。应该指出，虽然金属物理中一些定量概念不断被引入，金属学中大部分概念仍是定性的。它不象数学、物理、化学那样教给学生一些基本定理，使学生进行演绎、推理和计算。这门课的教学任务是使学生学会对实验结果进行归纳分析，找出各种事物和因素之间的联系和它们相互制约的规律，利用这些规律去解决实际问题。初学者常认为这门课内容庞杂，其实它的系统性极强。初学者常误认为只能靠死记硬背才能掌握课程内容，殊不知首先必须深刻理解，然后才能牢固记忆。金属学的特点是理论密切联系实际。它是一门专业基础课，在学校的全部教学过程中，它具有承上启下的任务。通过学习，学生应该巩固基础课中的有关知识，打好学习各门专业课的基础，还应该学会学习专业课的方法。

1983年，在一次会议上柯劳思(G.Krause)对金属学的定义作了一点修改。他提出的定义可译为“金属学是将材料的加工过程与其行为(Behavior)、组织和性能联系起来的科学与技术”。此处的所谓行为是指材料在加工过程中的宏观及微观变化。这个定义并不十分全面。在这里介绍它是因为柯劳思将科学与技术并提。它强调了研究金属学的目的是开发新的加工技术、完善现有加工技术。

最后应该指出，现今正处于塑料、陶瓷、复合材料与金属材料竞相发展的时代，在若干领域内，金属材料大有被非金属材料取代之势。然而金属学的绝大部分基本概念则可应用于一些非金属材料。

目 录

导论	1
第一章 纯金属的晶体结构	1
第一节 晶体学基础	1
一、晶体中原子间的结合	1
二、空间点阵	3
三、晶胞、晶系与布拉菲点阵	4
四、晶向指数和晶面指数	6
第二节 典型金属的晶体结构	9
一、三种典型金属晶体中的原子排列方式	10
二、三种典型金属结构中点阵常数与原子半径的关系	11
三、晶胞中的原子数	12
四、晶体中原子排列的致密度	12
五、典型金属晶体中原子间的间隙	13
六、多型性	14
七、亚金属与镧系金属的晶体结构	14
八、关于原子半径的概念	15
九、单晶体的各向异性与多晶体的伪各向同性	16
第三节 点缺陷	16
一、空位和间隙原子的形成	16
二、点缺陷的平衡浓度	17
三、点缺陷的运动	19
第四节 位错	19
一、电镜下的位错	19
二、位错模型	19
三、柏氏矢量	22
四、位错密度	25
第五节 界面	25
一、界面类型与结构	25
二、界面能	30
三、界面上的张力平衡与晶粒形状	30
四、堆垛层错	31
第二章 纯金属的凝固	35
第一节 纯金属凝固的基本过程	35
一、过冷现象	35
二、纯金属凝固的基本过程	36

第二节 液态金属	36
一、液态金属的某些性质	36
二、液态金属的结构	37
第三节 金属凝固的热力学条件	37
第四节 形核	38
一、均匀形核	38
二、非均匀形核	40
第五节 长大	43
一、长大的热力学条件	43
二、液-固界面的微观结构	43
三、晶核长大机制	44
第六节 金属凝固动力学及晶粒尺寸	45
一、金属凝固动力学	45
二、金属凝固后的晶粒尺寸	47
第三章 合金相的晶体结构	50
第一节 固溶体	50
一、置换固溶体	51
二、间隙固溶体	53
三、有序固溶体及固溶体的微观不均匀性	54
第三节 中间相	55
一、正常价化合物	55
二、电子化合物	56
三、受原子尺寸因素控制的中间相	58
第四章 二元合金相图	61
第一节 有关相图的基本知识	61
一、相律	61
二、合金成分表示方法	61
三、二元合金相图的建立	62
四、使用二元合金相图的基本方法	62
第二节 匀晶相图	63
一、相图分析	63
二、匀晶转变	63
三、匀晶系合金的不平衡凝固	65
四、具有极大点或极小点的匀晶相图	66
第三节 共晶相图	67
一、相图分析	67
二、共晶系合金的平衡凝固	67
三、共晶组织和初晶的形貌	71
四、共晶系合金的不平衡凝固	74
第四节 包晶相图	75
一、相图分析	75

二、典型合金的平衡凝固	76
三、不平衡条件下的包晶转变	77
第五节 其他类型的二元合金相图.....	77
一、其他类型的恒温转变	77
二、组元间形成中间相的相图	79
第六节 二元相图热力学初步.....	80
一、二元溶体的自由焓-成分曲线.....	80
二、公切线法则	80
三、自由焓曲线与二元合金相图	82
四、二元合金相图的一些几何规律	82
第七节 根据相图判断合金的性能.....	84
第五章 铁碳系.....	90
第一节 纯铁.....	90
一、纯铁的多型性	90
二、 α 铁和 γ 铁的结构	91
三、纯铁的性能与应用	91
第二节 碳与铁碳合金中的相.....	91
一、碳	91
二、碳在铁中的固溶体	91
三、渗碳体*.....	92
四、铁碳合金相图	93
第三节 铁-渗碳体相图	95
一、包晶转变线	95
二、共析转变线	96
三、共晶转变线	98
四、按组织分区的铁-渗碳体相图.....	99
第四节 铁-石墨相图	99
第五节 铁-碳合金的成分、组织与性能间的关系	102
一、含碳低于 2.11% 并按亚稳系统转变的合金	102
二、含碳 2.11~6.69% 并按亚稳系统转变的合金	103
三、按稳定系统转变的合金.....	104
第六节 钢中的杂质	104
一、硅和锰	104
二、硫	105
三、磷	105
四、氮	107
五、氢	108
六、氧	108
第六章 固态金属中的扩散	111
第一节 常扩散系数下的恒温扩散	111
一、扩散第一方程.....	111

二、扩散第二方程	111
三、扩散第二方程的应用	112
第二节 扩散的原子理论	115
一、原子跳动与扩散	115
二、扩散机制	116
第三节 达肯方程与扩散的热力学分析	119
一、柯肯达尔效应与达肯方程	119
二、扩散过程的热力学分析	120
第四节 反应扩散	121
第五节 影响扩散的因素	122
一、温度的影响	122
二、晶体结构的影响	123
三、第三元素的影响	123
四、界面扩散	123
五、电场作用下的扩散	124
六、热场作用下的扩散	125
第七章 合金凝固及铸件组织	127
第一节 合金在铸型中凝固时溶质的重新分布	127
一、合金凝固过程中固液两相的平衡成分	127
二、液固界面的局部平衡	128
三、液相完全混合时的溶质分布	128
四、液相完全不混合时的溶质分布	129
五、液相部分混合时的溶质分布	130
六、区域熔炼	131
第二节 成分过冷	132
一、温度梯度	132
二、成分过冷	132
三、成分过冷对液固界面形貌的影响	134
四、界面形貌对溶质分布的影响	134
五、共晶合金液固界面形貌	134
六、亚共晶合金铸件成分分布	135
第三节 金属铸锭的宏观组织	135
一、铸锭三区及其形成机制	135
二、影响铸锭组织的因素	136
三、铸锭(件)中的宏观组织缺陷	138
四、控制铸造金属组织的特殊措施	139
第八章 三元合金相图	143
第一节 总论	143
一、三元合金相图的主要特点	143
二、三元合金相图的成分表示方法——成分三角形	143
三、成分三角形中的特殊点和线	145

四、三元系中平衡转变的类型	145
五、共线法则及杠杆定律	145
六、重心定律	147
七、三元合金相图的平面化	148
八、自由焓-成分曲面及公切面法则	148
第二节 匀晶相图	150
一、立体模型	150
二、垂直截面	151
三、水平截面(等温截面)	152
四、连接线的方向	153
五、等温线投影图	154
六、析出次生相的两相平衡	154
第三节 共晶相图——三相平衡及四相平衡	155
一、立体模型	155
二、垂直截面	157
三、水平截面	157
四、投影图	158
第四节 三元合金相图中的四相平衡平面	160
一、立体模型中的四相平衡平面	160
二、投影图上的四相平衡平面	162
三、垂直面上的四相平衡区	163
第五节 形成稳定化合物的三元系	163
一、只有一个二元系形成稳定化合物	164
二、两(或三)个二元系形成稳定化合物	164
三、形成稳定的三元化合物	164
四、分割部分的总数	165
第六节 实际三元相图举例	165
一、Fe-C-Cr三元系垂直截面	165
二、Fe-C-Cr三元系水平截面	166
三、Al-Cu-Mg三元系液相面投影图	167
四、Fe-C-P三元系的投影图	168
第九章 金属的塑性变形	172
第一节 金属的弹性变形	173
一、弹性变形的实质	173
二、弹性变形的主要特点及弹性模量	173
第二节 单晶体金属的塑性变形	174
一、滑移	175
二、孪生	180
三、其他塑性变形方式	182
四、单晶体的应力-应变曲线	182
第三节 晶体滑移的位错机制	183

一、位错滑动与晶体滑移.....	183
二、弗兰克-瑞德位错增殖机制——U型平面源	185
三、交滑移的位错机制.....	185
四、刃型位错的攀移.....	186
第四节 多晶体的塑性变形	187
一、多晶体塑性变形的主要特点.....	187
二、多晶体的应力-应变曲线	188
第五节 合金的塑性变形	188
一、固溶体的塑性变形.....	188
二、复相合金的塑性变形.....	189
第六节 塑性变形对金属组织与性能的影响	189
一、显微组织的变化.....	190
二、形变织构.....	191
三、塑性变形对金属力学性能的影响.....	192
四、残余应力.....	194
五、塑性变形对金属的物理、化学性能的影响	195
第十章 回复、再结晶与金属热加工.....	197
第一节 冷变形金属在加热时的组织、性能变化.....	197
一、回复与再结晶.....	197
二、回复与再结晶的驱动力.....	198
三、回复与再结晶时金属性能的变化.....	198
第二节 回复	199
一、回复过程中内应力的消除.....	199
二、回复阶段组织与结构的变化.....	199
三、回复的动力学.....	200
第三节 再结晶	200
一、再结晶动力学.....	200
二、再结晶形核.....	201
三、影响再结晶过程的主要因素和再结晶后的晶粒尺寸.....	203
第四节 晶粒长大	205
一、晶界的迁移.....	205
二、晶粒正常长大.....	206
三、异常晶粒长大(二次再结晶).....	207
第五节 再结晶组织	208
一、再结晶图.....	208
二、退火孪晶.....	208
三、再结晶组织.....	209
第六节 动态回复与动态再结晶	210
一、动态回复.....	211
二、动态再结晶.....	212
第七节 金属材料的热压力加工	213

一、热加工的温度范围.....	214
二、流线.....	214
三、带状组织.....	215
第八节 超塑性加工	216
一、超塑性.....	216
二、实现超塑性的条件.....	216
三、超塑形变时的组织变化.....	217
四、超塑性加工.....	217
第十一章 金属强化的位错机制	221
第一节 位错的弹性行为	221
一、位错的应力场.....	221
二、位错的应变能.....	223
三、位错的线张力.....	224
四、作用在位错上的力.....	224
五、位错间的交互作用力.....	225
第二节 面心立方晶体中的位错	227
一、全位错与不全位错.....	227
二、面心立方晶体中的全位错与不全位错.....	228
三、位错反应与扩展位错.....	229
第三节 金属强化的位错机制	231
一、加工硬化.....	231
二、固溶强化.....	234
三、分散强化.....	234

第一章 纯金属的晶体结构

导论中曾经指出,对金属组织、结构的分析和研究是金属学中的核心问题。

纯金属和合金在固态下通常都是晶体。要了解金属材料内部的组织结构,首先必须了解晶体中原子的相互作用和结合方式、有关晶体学的一些基础知识、典型金属理想晶体的结构以及实际晶体中的各种晶体缺陷。

第一节 晶体学基础

一、晶体中原子间的结合

目前已经知道,晶体中原子间的结合(也叫作键合)方式主要有四种:(1)分子结合,又叫作范德瓦耳斯(Van der Waals)结合;(2)离子结合;(3)共价结合;(4)金属结合。

(一) 范德瓦耳斯结合

这种结合往往产生于原来具有稳定的电子结构的原子及分子之间,例如具有满壳层结构的惰气性体元素,或已形成共价结合的分子等等。它们结合成晶体时,每个原子或分子基本上保持着原来的电子结构。

这种结合的实质是一种瞬时电偶极矩的感应作用,可以用图1-1说明。从图中可以看出在瞬时状态为(a)时两个原子间存在静电引力,(b)状态时则相互排斥。如出现瞬时状态(a)的几率大于(b),两原子间相互吸引作用将占优势,这时两个原子间将产生一定的引力,即范德瓦耳斯吸引作用力。显然这种作用力是很小的。研究结果表明:

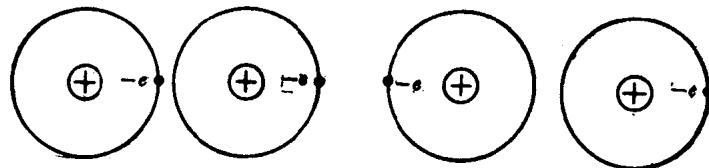


图1-1 分子晶体中瞬时电偶极矩的产生

$$\text{范德瓦耳斯作用力} = -\frac{C}{r^6} \quad (1-1)$$

式中 C 为一常数, r 为两原子间距离。由上式可以看出,当 r 增大时,引力迅速减小。

(二) 离子结合

靠这种形式结合的晶体称为离子晶体或极性晶体。最典型的离子晶体是由周期表中IA族的碱金属(如Li、Na、K、Rb、Cs)和VIIA族的卤族元素(如F、Cl、Br、I)组成的化合物。

这种结合的实质是金属原子将自己最外层的价电子给予非金属原子，使自己成为带正电的正离子；而非金属原子得到价电子后使自己成为带负电的负离子，这样，正负离子依靠它们之间的静电引力结合在一起。这种结合的基本特点是以离子而不是以原子为结合单元。

离子晶体要求正负离子相间排列，这在晶体结构上有明显的反映。具有这种结合的晶体，其硬度较高，塑性较差，性质较脆。

(三) 共价结合

共价结合是靠相邻的两个原子各贡献一个电子形成的。这两个电子的自旋取向应相反，这样便可在两个原子核间形成较强的引力。

碳、硅、锗等 IVA 族元素都是共价晶体，它们的原子排列规律相同。共价晶体也具有较高的硬度和较低的塑性。

(四) 金属结合

金属结合的基本特点是电子的“共有化”。当金属原子结合成晶体时，价电子不再被束缚在各个原子上，而是在整个晶体内运动，形成电子气。它们遍及整个晶体，如图 1-2 所示，那些失去价电子、“浸”在电子气中带正电的粒子叫做原子实（也叫做正离子实），依靠电子气和正离子实之间的库仑作用，金属原子便结合在一起，成为晶体。

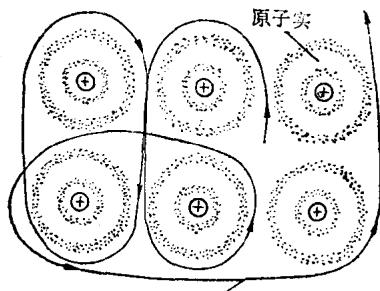


图 1-2 金属结合示意图

一步缩小。此外，当原子实相互接近到它们周围的电子云相互重叠时，也将产生强烈的排斥作用。由以上两种原因产生的斥力与电子气和正离子实之间的引力达到平衡时，晶体中的原子间距也就达到了平衡距离。

金属中正的电阻温度系数、导电性、导热性、塑性和金属光泽都是和共有化电子可以在整个晶体中运动相联系的。

金属结合与前三种结合相比，有一重要特点，即金属结合对原子在晶体中排列的具体形式无特殊要求。这样，由于原子排列得越紧凑，体系的能量越低，晶体也就越稳定，所以金属晶体中的原子排列都比较紧密。

(五) 结合能

原子能够结合为晶体的根本原因，是原子结合起来后，体系的能量可以降低，即在分散的原子结合成晶体的过程中，会有一定的能量 E 释放出来。这个能量叫作结合能。

晶体中的原子之间可以相互吸引，也可以相互排斥。吸引作用在远距离时是主要的，而排斥作用在近距离时是主要的。吸引作用的起因是异性电荷之间的库仑引力；排斥作用的起因则是同性电荷间的库仑力和原子实周围电子气相互重叠引起的排斥。

设以 f_a 代表引力， f_r 代表斥力， R 代表原子间距离，则

$$f_a = -\frac{a}{R^m} \quad (1-2)$$