

高等学校教学用书

理论金属学概论

A·H·科垂耳 著

肖纪美 吴兵 陈梦谕 林实 译



中国工业出版社

本书根据A.H.科垂耳著“理論金属学概論”(A.H.Gottrell; Theoretical Structural Metallurgy, 1955)一书譯出,书中扼要地介紹了原子結構、原子鍵、原子排列、自由电子論、能帶理論及其应用。在讲述热力学和电子理論的基础上,討論了相的热稳定性、相結構和相平衡。对于扩散和相变、有序化和脫溶过程、位錯理論及切变过程等都有必要的論述。

本书物理概念清晰,可作为高等学校非金属物理专业的金属物理課程教学用书,也可供金属物理专业及金属物理專門化学生和金属工作者参考。

原书存在着某些唯心主义观点,对已发现之处在譯本中相应的地方已予以指出。采用本书时,教师可根据情况加以补充和批判。

A.H.Gottrell
THEORETICAL STRUCTURAL METALLURGY
(Second Edition)
Edward Arnold (Publishers)LTD.
London
1955

* * *

理 論 金 属 学 概 論

肖紀美 吳 兵 陈夢瀾 林 实 譯

*

冶金工业部工业教育司編輯(北京市大街78号)

中国工业出版社出版(北京修羅園路丙10号)

(北京市书刊出版事业許可証出字第110号)

中国工业出版社第二印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行·各地新华书店經售

*

开本787×1092 $\frac{1}{2}$ ·印張10·字數217,000

1961年8月北京第一版·1962年6月北京第三次印刷

印數4,427—7,336·定价(10-6)1.20元

*

統一書号: K15165·621(冶金-180)

譯 者 序

由于高等工科学学校非金屬物理专业对于“金屬物理”这门課程的要求不同,我們推荐如下的三本教学用书,各专业可根据教学大綱的要求和时数,选择适当的章节使用。

1. 理論金屬学概論 A. H. 科垂耳著

2. 金屬与合金的物理性能 B. Γ. 李夫舍茨著

3. 金屬及合金的力学性能 北京鋼鐵学院張兴鈴等著

A. H. 科垂耳是一位金屬工作者,具有教学經驗,他在“理論金屬学概論”这本教学用书中,深入浅出地叙述了金屬及合金中的一些基本問題。原书的对象是冶金及金屬学系的学生,因此在問題的处理上,以描述的方式为多;而在数学的运算上則力求簡明。但是,应当指出,我們在翻譯过程中发现,作者抹杀了社会主义国家,特别是苏联在这个領域內的成就,并且在某些問題的处理上,具有唯心的观点。此外本书对最近成就介紹得不够,因此,采用本书的教师应根据情况加以补充和批判。

原书分四部份計十五章。第一部份(第一章至第六章)扼要地介紹了原子結構、原子鍵及原子排列的現代概念,着重地討論了自由电子論及能帶理論和它們的应用。第二部份(第七章至第十一章)介紹了統計热力学的概念,在它和电子理論的基础上,討論了相的热稳定性、相結構和相平衡。第三部份(第十二章至第十四章)討論了原子的移动(扩散)及原子的重新排列(相变),較詳細地討論了有序化及脫溶过程。第四部份(第十五章)簡略地介紹了位錯理論及切变过程。全书章节的安排上虽有其独特的系統性,但从內容的銜接来看,仍可按需要选讀。例如,只要具有簡單的原子結構的現代概念,可直接閱讀

第四章至第六章；除开第 9、6 节外，可以跳过第一部份直接閱讀第二部份；具有第七章所叙述的概念后，分开閱讀第二部份及第三部份內的各章是沒有困难的；第四部份与以前各部份的关系甚少，可以直接閱讀。由于內容安排上的这种灵活性，教师可按教学大綱要求及时数进行选择。

譯文中所用的名詞，主要根据物理学名詞及冶金学名詞二书，如无标准譯名詞时，則在譯名后附上原文。

本書第一章至第六章由吳兵譯出，第七章至第十一章由肖紀美譯出，第十二章至第十四章由陈夢謫譯出，第十五章由林实譯出。第七章至第十一章由吳兵校閱，其它各章由肖紀美校閱，在成稿过程中，北京鋼鐵学院張兴鈴、柯俊、褚幼义等同志給予不少帮助。

限于譯者的政治、业务和文学水平，而譯文又倉促成稿，因此譯本是不够滿意的，希望讀者指正。

初 版 序

科学的基本概念，在不停地代替經驗的實驗数据作为建立金屬学的基础；因而金屬及合金的繁多而又显著差異的各种現象，也在逐漸地被概括在共同的領域，得到統一的解釋。在这种过程中，波动力学及統計热力学起了主要的作用。它們提供了处理原子結構及从原子結構推导物质特性的方法，因而完美地适用于金屬及合金問題的研究。

很自然，金屬工作者及学生切望学习这些理論上的进展；但是，他們常常不能专攻理論物理，而理解这些研究結果的論文，費时較多，这就阻碍了他們在这方面的学习。看起来，需要金屬学者为这个領域的学生准备一篇报告，說明如何应用原子力学的概念，来解决金屬及合金的問題；这就鼓舞著者进行本书的写作。

全书都是从理論上来闡明問題的；因此，除开对X射綫衍射进行了簡短的敘述外，其他的實驗方法都沒有討論。处理問題的方法主要是敘述性的，所应用的数学只限于初級的水平。为了不熟悉金屬学或原子物理的讀者的方便，在书中适当的地方，介紹了这两方面的基础知識，但并不求其完整无缺。书中所討論的問題，主要圍繞着金屬的电子理論及金屬与合金的統計热力学。对于所省略的某些問題，例如力学性质及再結晶，也許讀者会感到意外；著者願意請讀者記着，在一般情況下，所省略的正是那些尙无法进行适当理論處理的問題。金屬学仍然面临着許多主要問題，这是一件可喜而又令人不愉快的事。

A·H·科垂耳 伯明翰大学冶金系

(初版—1948年)

再 版 序

除开增加一章外，这一版总的布局与初版一样；但是內部的結構几乎完全不同。促使再版的理由，自然是十年来金屬学各个领域中无可比拟的盛况。因此，不仅已有章节需要重写，也不得不增加由于新发展所带来的新内容，例如位錯理論、晶間界面張力、及鉄素体中炭及氮的金屬学問題。原来希望，少量修改便可完成再版，后来发现，唯有全部重写，才会滿意。促使这样做的其他理由是：一方面，为了使本书篇幅不致过大，將原有叙述加以簡炼；另方面，为了教学目的，原有叙述方法，也乘此机会有少量改变，例如，刪去了原子結構的陈旧軌道理論，因为它不但无助于反而有碍于对近代理論的了解，并較詳細地叙述了能帶理論的物理基础。

自然，本书总的观点及目的与初版完全一样。

A·H·科垂耳

伯明翰大学物理冶金系

1964年6月

目 录

譯者序

初版序

再版序

第一章 原子的結構..... (1)

1.1 金屬学的原子理論基础..... (1)

1.2 原子的核模型..... (3)

1.3 量子力学..... (5)

1.4 波的衍射..... (8)

1.5 原子中的电子..... (10)

1.6 周期表..... (14)

1.7 电子結構和化学性質..... (17)

第二章 原子間的作用力..... (20)

2.1 原子集体..... (20)

2.2 原子間作用力的起源..... (23)

2.3 凝聚态中的共价鍵和金屬鍵..... (28)

2.4 固体和液体..... (30)

第三章 金屬晶体..... (32)

3.1 原子在金屬晶体中的排列..... (32)

3.2 金屬鍵和共价鍵..... (37)

3.3 空間点陣..... (38)

3.4 晶面和晶向指数..... (41)

3.5 点陣常数和原子半徑..... (43)

3.6 晶体的方向性..... (45)

3.7 实际晶体的結構..... (48)

3.8 晶粒間界..... (51)

3.9 金屬晶粒的形状..... (54)

第四章 金屬的自由电子理論	(58)
4.1 經典自由电子理論	(59)
4.2 一維的量子自由电子理論	(60)
4.3 三維的量子自由电子理論	(65)
第五章 金屬能帶理論	(71)
5.1 自由电子的行波	(71)
5.2 在周期場中的电子	(74)
5.3 K—空間和布里淵區	(80)
5.4 金屬和絕緣體	(86)
5.5 狀態密度	(90)
5.6 能帶和原子能級	(93)
5.7 过渡族金屬的电子結構	(94)
第六章 电子理論的应用	(97)
6.1 导电性	(97)
6.2 鉄磁性	(103)
6.3 結合力	(111)
6.4 Pauling 理論	(119)
第七章 平衡及达到平衡的速度	(125)
7.1 平衡	(125)
7.2 內能	(125)
7.3 熵的物理本質	(127)
7.4 熵及自由能的热力学定义	(132)
7.5 晶体中的混合熵	(135)
7.6 反应速度	(139)
第八章 金屬的热性	(143)
8.1 晶体的比热	(143)
8.2 自由能变化与溫度的关系: 多形性	(150)
8.3 平衡时的晶格缺陷	(154)
8.4 熔化及液态金屬的結構	(158)

8.5	鉄磁金屬的居里点	(161)
第九章	合金的結構	(164)
9.1	第二原素对于金屬結構的影响	(164)
9.2	固溶体的結構	(165)
9.3	置換型一次固溶体	(167)
9.4	中間相的結構	(170)
9.5	間隙相	(173)
9.6	合金相的能帶理論	(176)
第十章	合金相的自由能	(182)
10.1	固溶体的自由能	(183)
10.2	相的混合物	(187)
10.3	合金的穩定状态	(189)
10.4	相平衡方程; 相律	(193)
10.5	相的界面	(195)
10.6	中間相的自由能	(197)
10.7	固溶度与溫度的关系	(199)
第十一章	平衡图	(206)
11.1	固态的无限溶解	(206)
11.2	固态的有限溶解	(209)
11.3	含有中間相的系統	(214)
11.4	更复杂的平衡图	(218)
11.5	相变过程中合金原素的分布	(219)
第十二章	金屬与合金中的扩散	(227)
12.1	扩散的統計性質和斐克定律	(227)
12.2	扩散系数与溫度的关系	(231)
12.3	扩散系数与成分的关系	(233)
12.4	kirkendall 效应	(236)
12.5	扩散时的原子运动	(237)
12.6	組織敏感的扩散	(240)

第十三章	合金的有序—无序转变	(244)
13.1	有序—无序转变的理论基础	(244)
13.2	长程序的理论	(246)
13.3	达到平衡的速度	(254)
13.4	短程序及反相畴	(255)
第十四章	相变动力学	(260)
14.1	生核和长大过程	(260)
14.2	生核的热力学理论	(261)
14.3	液态的凝固	(262)
14.4	固溶体中相的沉淀	(269)
14.5	共格及非共格生核	(272)
14.6	固态中的不均匀生核	(276)
14.7	固溶体中新相的长大	(278)
第十五章	金属的切变过程	(284)
15.1	切变过程的方式	(284)
15.2	简单切变过程的机构	(286)
15.3	位错的几何特性	(292)
15.4	位错的弹性性质	(298)
15.5	位错运动的障碍物	(307)

第一章 原子的結構

1.1 金屬学的原子理論基础

研究金屬学必須首先了解“金屬”的定义。我們在日常生活中，不难把不同的物体分为金屬的和非金屬的，因为二者之間有着显著的差别。金屬具有非常鮮明的、它所特有的性质，例如：高的导电性和导热性、不透明性、金屬光泽、机械强度和延性。

我們原可以根据这些性质給金屬下定义；但是这样的定义是不恰当的，理由有以下兩点。首先，这个定义不确切。上面所說的各种性质中沒有一种是金屬所独有或是非金屬所独有。如果我們一定要用某种性质給金屬下定义的話，那么电阻温度系数，恐怕是最好的一个，正电阻温度系数是金屬状态最突出的一个特点。尽管如此，根据以下的第二个理由，这样的定义仍然是有缺点的。

根据性质給金屬下定义之所以不恰当，最重要的一个理由，就是这样的定义并不解决问题，它並沒有告訴我們金屬究竟是什么。解釋金屬状态不能从金屬表現出来的各种性质出发，而要从决定这些性质的內在原因出发。决定金屬各种性质的內在原因在于原子构成金屬的方式，而这种或那种方式又最終决定于原子本身的結構。原子是保留元素特性的最小单位，因此各种元素的差别正是从这里发源的。

“金屬”一詞在不同的学科中有兩種不同的含意。在化学中，金屬是指在化学反应中有某些独特之点的一类元素：形成强碱性的氧化物和氢氧化物，并与酸化合成鹽。在这里，

我們注意的是单个原子的性质，因为化学反应都是通过单个原子和单个分子間的結合和分离而进行的。要給金屬下个化学上的定义，就必须从元素的原子結構中找出决定元素化学行为的且为金屬所共有的特点。关于这一点将在本章中涉及到。

在金屬学中，金屬一詞是对宏观物体而言的，例如：銅綫或銅錠。这里涉及到的是原子的巨大集体，这巨大的集体处于一种特殊的，即所謂金屬的状态。正是在这种状态下，才出现了前节所說一些物理性质和力学性质。这些性质是集体的性质，只有当大量原子成为一个集体时才能有这些性质，而单个的孤立原子是没有的。灰錫和白錫的原子是一样的，但集合的形式有兩種，金屬性质也就大不相同。金屬的这个金屬学意义也适用于合金，合金实际上就是由兩種或兩種以上元素所构成的、具有上述集体性质的原子集体。

由此看来，金屬状态所具有的性质并不直接决定于单个原子的結構，金屬的化学定义和金屬学定义相差很远，因此金屬一詞只好作兩種意义的理解。不过应当指出，决定化学反应中金屬行为的原子結構特点，也正是原子之所以能构成金屬状态的集体的原因。

要給金屬下个金屬学定义，就必须：1)建立一个金屬状态的理論，这个理論要能解釋为什么固体金屬具有独特的結構和性质；2)从单个原子的結構出发，来解釋形成固体金屬这种結構的原因。在理論物理中这是一个辣手的问题，其中有些问题直到今天还有爭論。金屬的电子理論对固体的电子結構作了細致的分析；在本书第四、第五和第六章中，将对这个理論加以討論。有許多金屬学的问题往往更宜于采用一个比較简单的模型来解决。这个模型就是把金屬原子看成是

一些簡單的球體，它們之間相互吸引並從而結合在一起。這個模型是上述細緻描述的一個近似，第三章中將討論這個模型。本書的以後各章中遇到有關晶體結構，熱學性質，熔化，凝固，合金化，塑性形變等許多問題時，將採用這個模型。只有當遇到的問題象第六章和第九章那樣是與電子理論有關時，我們才用比較深入的方法來處理。

1.2 原子的核模型

在本章和下一章的兩章中，將闡明對建立金屬理論所必需的某些原子理論的基礎知識。這方面的敘述必須簡明扼要，它只起引導的作用。如要進一步钻研這些問題，應當去查閱第二章後面所附的文獻。

現代原子理論起源於盧瑟福的原子模型。他提出的這個模型是用來解釋 α -質點轟击物質的實驗結果的。根據這個模型，原子是由一個原子核和一個或許多個距離它約 10^{-8} 厘米的電子所組成。原子核是由質子和中子所組成的一個小集合體，它的尺度約為 10^{-12} 厘米。

電子、質子和中子都是所謂的基本粒子。每個電子的性質與其它電子是完全等同的；質子和中子也是這樣。一個電子的質量為 9.1×10^{-28} 克，一個質子或一個中子的質量大約是這個數字的1840倍。基本粒子是非常微小的，它的半徑在 10^{-12} 厘米以下，因此我們完全可以把它看成是一個數學點。比粒子本身大小更為重要的（特別對電子來說）：是它們之間存在強大作用力的距離範圍。質子恒具有正電荷，其值為 $e = 4.8 \times 10^{-10}$ 厘米克秒制靜電系單位；電子具有大小與此相等、符號與此相反的電荷。中子是電性中和的。

氫的原子核是一個質子；但所有其它元素的原子核都含

有一个以上的质子和中子，并且质子和中子的数目大体上相同。原子核內的粒子由一种所謂核力結合在一起。关于核力的本质現在还不清楚。但有一点是已經知道的，就是另一种基本粒子——介子，在这里起了很重要的作用。同一元素的原子核都有同样数目的质子（ Z ），这个数目叫做該元素的原子序数。每种元素都有它自己的原子序数，并且由此决定了元素的化学特性。所有元素可以按照原子序数遞增的順序排列起来（表1）：由氫（1）、氦（2）开始，按原子序数逐一排列下去，直到鈾（92）、鐳（93）、釷（94）、錒（95）、錒（96）、鐳（97）、錒（98）等等。也可能有质子数目相同（即 Z 相同）而中子数目不同的原子核，这就是所謂的同位素。同位素是原子序数相同而原子量不同的同一种元素。

一个孤立原子通常是电性中和的。原子核的电荷是 $+Ze$ ，一个电子的电荷为 $-e$ ，因此一个电性中和的原子应有 Z 个电子。不过，原子有可能失去电子，也有可能得到額外的电子，这个过程叫做电离。原子失去电子以后就成为带正电的，这样的原子叫做正离子。相反，如果原子附加了額外的电子，則它成为負离子。

經典力学理論不能对原子中的电子运动作出滿意的描述。至少有兩個实验事实是經典力学所无法解釋的：（1）原子的稳定性；（2）原子光譜綫的不連續性。按照經典力学的結論，原子不应当是稳定的，因为运动着的电子因不断地发射电磁輻射而失去动能，最后应当循螺旋綫落到原子核上。然而实际上，原子由于受到某种限制，它的綫度不能縮小到 10^{-8} 厘米以下。关于光譜綫的解釋，經典力学也遇到了不可克服的困难。因为根据經典力学，电子可以有一系列連續的运动状态（其中每一运动状态都有一定的能量，部分是

动能,部分是位能)。如果电子改变自己的运动状态,則它将发射或吸收电磁辐射的量子(即可見光或x-綫的光子)。如果两个运动状态的能量差別为 ΔE , 辐射的頻率为 ν , 則 $\Delta E = h\nu$ (h —普朗克常数, 等于 6.626×10^{-27} 尔格·秒)。因此, 如果运动状态是一个連續的系列, 則 ΔE 的值也是連續的, 那么在原子光譜上应当观察到連續的 ν 值。然而实际上, 我們都只在某些特定的 ν 值处得到了不連續的光譜綫。这又說明了电子的运动是受某种“非經典力学”的約束, 只有某些运动状态是允許的。这些允許的运动状态叫做定态, 因为它們不随時間而变化(玻尔的原子理論)。

1.3 量子力学

通过de Broglie、Schrödinger、Heisenberg、Dirac、Dern等人的工作建立了一个新的力学体系, 这就是量子力学或者叫波动力学(按照我們应用这力学的形式而得此名)。量子力学是普通力学的进一步发展, 它适用于一切物体的运动, 不論这是电子, 质子, 分子, 或是大的抬球。經典力学是量子力学的一个簡單近似, 它只适用于如抬球之类的宏观物体的运动。在微观世界中, 例如电子在原子中的运动, 經典力学就給出了錯誤的結果。无数次的实验已經証明, 量子力学应用于一切現象所得到的結果, 与实际观察到的相符合, 只有原子核内部的一些現象可能是例外。量子力学应用于宏观現象时, 結果与經典力学一致。

量子力学往往被认为是一門难理解的科学。这里面有一部分是数学上的原因, 我們这里不准备去談它。恐怕最主要的一个困难还是由于經典力学所給予我們的錯誤概念实在是太根深蒂固了。比如說, 當我們一想到一个抬球的运动时,

那么以下的这个假设就立刻非常自然地出现，这假设就是说，在任何给定时刻，抛球都有一个完全确定的位置和动量。这个假设对我们来说实在是太自然了，甚至我们不再承认它是假设，而立即无条件地把牛顿的运动定律运用到这个物体上。然而这个假设是不正确的。严格的分析证明，同时确定位置和动量，从原则上说是不可能的。这二者之一我们可以测量到任何的准确程度；但与此同时，另一个量的测量准确程度就要相应降低。这就是所谓的海森堡测不准原理^①。这个原理适用于一切粒子。对于质量比原子重得多的粒子，没有必要应用这个原理；但对于电子，则测不准原理起了非常重要的作用。测不准原理的数学表达式可以采用不同的运动变数。如果运动变数为位置 x 和动量 p ，则最小测不准量 Δx 和 Δp 具有以下的关系： $\Delta x \Delta p = h/2\pi$ ，式中 h 为普朗克常数。如果测量的是能量 E 和时间 t ，则相应的关系式为 $\Delta E \Delta t = h/2\pi$ 。测不准原理的后一表达式对说明电子在同一态中可以永恒运动的这一事实，是非常重要的，因为此时 Δt 很大，所以 ΔE 就能够非常小，这也就是说，在定态中的电子具有确定的能量值。

我们既然不能同时确定电子在原子中运动的动量和位置，那么要想建立一个描述电子运动的力学，看来好象是不可能的事了。然而实际并不是这样。我们完全能够得出一系列完整准确的运动规律，并且用这些规律来预测实验可能得到的每一种性质；只是这些规律不是建立在电子位置、动量等等的准确数值上，而是建立在这些数值可能出现在某一范

^① 关于海森堡测不准原理，某些资产阶级学者曾作唯心主义解释，读者应予注意，关于这方面的讨论可参考 Н.Н. 布洛欣采夫著“量子力学原理”人民出版社52—72。——译者

圓內的几率上。這兩個觀點的不同可由圖1看出。假定我們要標出一個沿AB綫運動的电子的位置，电子運動速度是在某一已知的有限範圍內。為此，我們可以畫出如圖中所示的几率曲綫，並且規定：几率等於1表示电子確定在該位置；几率等於零表示电子確定不在該位置；0與1之間的數值表示电子在該位置的大小不等的可能性。圖中上面的一條曲綫是經典力學的結果，它準確地確定电子的位置。下面一條曲綫是波動力學的結果，這曲綫表明电子在經典力學所指出的位置被找到的几率最大，但是也有可能在另外的地方被找到。這就是說，如果能夠对电子的位置作多次測量的話，那麼測量結果应当落在這條几率分布曲綫上。与此類似的實驗是確實可以做到的（見1.4節），這實驗就是使电子束通過一個固定的裝置並在螢光屏上觀察各個电子出現的位置。

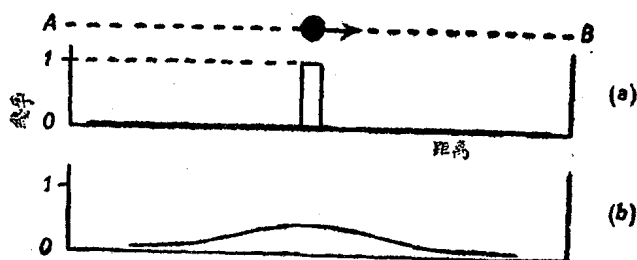


圖1. 电子按經典力學(a)和按量子力學(b)運動的位置

根據這種几率曲綫，我們可以計算出电子在原子中或在其它場合下可以觀測的性質，但是波動力學並不直接与几率曲綫联系，它所計算的是所謂波函數（用符号 ψ 表示）。 ψ 的值在不同的地方是不一样的。对圖1所示的情況來說， $\psi^2 dx$ 是在 x 与 $x+dx$ 兩點之間找到一個电子的几率（这里的 ψ 应取在 x 点的值）；也就是說， x 点处的 ψ^2 可以看作是在 x 点的平均