

高等学校教学用书

金属学基础

冶金工业出版社

高等学校教学用书

金属学基础

华东冶金学院 包永千 主编

冶金工业出版社

高等学校教学用书
金 属 学 基 础
华东冶金学院 包永千 主编

★
冶金工业出版社出版

(北京北河沿大街嵩祝院北巷39号)

新华书店北京发行所发行

冶金工业出版社印刷厂印刷

★
787×1092 1/16 印张 26 1/2 字数 636 千字

1986年11月第一版 1986年11月第一次印刷

印数00,001~5,500册

统一书号: 15062·4499 定价3.80元

前 言

本书是根据冶金部1984~1988年教材出版规划,按金属材料与热处理专业金属学课程的教学要求编写而成的。全书共十一章,讲授时间为110学时左右(不包括实验)。

《金属学基础》是金属材料与热处理专业的专业基础课,它研究金属材料的成分、组织结构和性能之间的关系,以及在外界条件作用下它们的变化规律。其任务是要让读者了解金属材料在性能上差异的原因,了解金属材料组织结构的形成规律,从而使初学者获得坚实的金属学基础知识。

本书着重于对金属学基本概念、基本规律和基本知识的阐述。对一些重要公式作了简单的数学处理,目的是加深概念和交待思路。在章节的安排上,注意了本课程的系统性以及前后课程的衔接。在内容的叙述上,力求做到层次分明、重点突出。对难度较大的内容,作了分散处理。在每章末尾,附有复习思考题。

本书初稿经试用后,进行了必要的修改,并于1985年在审稿会上讨论通过。参加审稿的单位有昆明工学院、天津大学冶金分校、广东工学院、武汉钢铁学院、包头钢铁学院、华南工学院和华东冶金学院。北京钢铁学院余永宁同志协助审阅了大部分章节。在成书过程中,还得到很多同志的热情鼓励和帮助,在此一并表示衷心地感谢。

本书第一、二、七、八章由广东工学院靳兰芬同志编写;第三、四、五、六章由华东冶金学院史乃立同志编写;绪论和第九、十、十一章由华东冶金学院包永千同志编写。全书由包永千整理定稿。

由于编者水平所限,书中定会存在缺点、错误和问题,恳请读者批评指正。

编 者

1986.3.

目 录

绪 论	1
0-1 金属材料的源流梗概	1
0-2 金属学及其进展概况	2
0-3 《金属学基础》课程的特点和学习方法	5
1 金属的晶体结构	6
1-1 晶体学基础	6
1-2 金属的晶体结构	21
1-3 金属元素的原子大小	31
1-4 晶体缺陷(点缺陷)	34
2 合金相的结构	43
2-1 固溶体	43
2-2 中间相(金属间化合物)	53
3 金属的凝固(结晶)	70
3-1 液态金属的性质和结构	70
3-2 金属结晶的热力学条件和结晶过程	72
3-3 固态晶核的形成	74
3-4 晶体的长大	79
3-5 结晶速度和晶粒尺寸	85
3-6 铸锭的结晶和组织	92
3-7 特殊凝固举例	96
4 二元相图和二元合金的结晶	99
4-1 相图的基本知识	99
4-2 匀晶系二元相图和固溶体合金的结晶	102
4-3 二元共晶相图和共晶系合金的结晶	113
4-4 二元包晶相图和包晶系合金的结晶	123
4-5 具有其他结晶反应的二元相图	127
4-6 出现化合物的二元相图	129
4-7 一组元具有异晶转变的二元相图	132
4-8 相图的热力学解释	134
4-9 铁碳相图和铁碳合金	139
4-10 合金中的偏析	150
5 三元相图	155
5-1 三元相图的基本知识	155
5-2 三元匀晶系相图	158
5-3 具有三相平衡区的三元相图	161
5-4 固态互不溶解的三元共晶相图	166
5-5 三元相图中的相区接触法则	170
5-6 固态有限互溶具有四相平衡区的三元相图	171

5-7	出现化合物的三元相图	180
5-8	三元相图的实例分析	182
6	金属和合金中的扩散	188
6-1	扩散定律	188
6-2	扩散热力学	194
6-3	扩散机制和扩散激活能	198
6-4	影响扩散系数的因素	202
6-5	相变扩散和反应扩散	208
7	位错	212
7-1	位错的基本知识	213
7-2	位错的应力场和应变能	220
7-3	位错的受力	226
7-4	位错和点缺陷的相互作用	232
7-5	位错的运动	235
7-6	位错的切割	243
7-7	位错的萌生和增殖	247
7-8	位错的塞积	250
7-9	实际晶体中的位错	254
7-10	位错的实验观察	265
8	界面	271
8-1	金属表面	271
8-2	晶界与亚晶界	274
8-3	相界与孪晶界	281
8-4	界面偏聚	285
8-5	界面的运动	289
8-6	界面能与组织形貌的关系	293
9	金属和合金的塑性变形	301
9-1	金属的应力-应变曲线	301
9-2	单晶体的滑移	305
9-3	孪生(机械孪生)	316
9-4	多晶体形变的特点	322
9-5	合金的形变特点	328
9-6	金属形变后的组织结构和性能	334
10	回复、再结晶与热形变	341
10-1	回复	342
10-2	再结晶	347
10-3	再结晶后晶粒的长大	358
10-4	再结晶退火后的组织	365
10-5	热形变	370
11	金属和合金的固态相变	381
11-1	固态金属的相变总论	382
11-2	过饱和固溶体的沉淀析出	402

绪 论

0-1 金属材料的源流梗概

0-1-1 社会发展与金属材料

金属材料是由金属元素为主组成的具有金属特性的材料，它是人类社会发展的物质基础。根据考古学家把人类历史阶段划分为石器时代、铜器时代（4000多年前）和铁器时代（3000多年前）的事实，就可以充分说明在人类历史发展过程中，金属材料起着极为重要的作用。用铜、铁器来制造工具，标志了一种新的生产力的出现，大大促进了生产的发展，具有划时代的伟大意义。

我国是世界上最早发现和使用金属材料的国家之一。由于铜矿石容易还原，而且铜的熔点较低，易于生产，所以早在商朝（公元前16世纪）以前，铜器已开始得到应用。1970年在湖南省宁乡出土的对凤纹提梁卣（音友，古代盛酒器具），就是商代的一件精细的铜制品。周朝是青铜器的极盛时期，当时的冶炼铸造及加工技术都已相当发达，用青铜制造工具、兵器、食具、乐器和车马饰等等已相当广泛。到春秋（公元前7世纪）、战国（公元前2世纪）时代，我国已普遍应用比铜器硬的铁器。当时已解决了铁矿石需要更高温度才能还原的困难。铸铁的生产大大发展，白口铁、展性铸铁和麻口铁相继出现，随后由冶铁发展到炼钢，并开始采用各种热处理方法来改善钢和铸铁的性能。解放后，在全国各地发现了不少冶铁遗址。如河南省辉县的一个战国时代的遗址中，一次就发掘出“铁范”（铸件模型）87件之多，用以制作镰、铧、斧、锄、凿和车具等。可见我国在2000多年前，冶铁技术已经达到了惊人的水平。

从战国、西汉（~25）、盛唐（618~907）直到明朝（1368~1644）的一千六百多年间，我国的钢铁生产水平在世界上一直处于领先地位。与此同时，铜器也由青铜发展到黄铜和白铜，并且以掌握了铜合金的成分与性能之间的关系而闻名于世。其它金属材料也有了相应的发展。

总之，我们的祖先，无论在金属材料早期的启蒙时代，或是在钢铁发展的初期和中期，都曾有过光辉的成就，在世界冶金史上有光荣的一页。只是到了18世纪，特别是19世纪以后，由于腐朽的封建统治和帝国主义的侵略，严重地束缚了我国生产力和科学技术的发展，相应地金属材料的研究和生产也逐渐落在其他国家之后，使高超的冶金技术长期停留在经验阶段。直到解放前，根本谈不上有自己的金属材料系统。

新中国的建立，社会制度的变革，解放了生产力。“四化”建设推动了生产的大发展。金属材料的研究和应用也进入了新的阶段：结合我国资源情况，研制成功了许多性能良好的金属材料（主要是钢铁材料），在金属材料的基础理论、加工工艺和测试技术等方面，积累了许多经验，为进一步发展金属材料打下了良好基础。我国的人造卫星上天和原子弹、氢弹爆炸成功，都反映了我国金属材料工业达到了新的水平。

金属材料随着人类经历了漫长的路。而今，以现代科学技术进步为特征的新时代展现在前面。有人指出：“我们是否注意到，人类正在与百年来作为产业支柱的金属材

地告别”；并预言在“第三次浪潮”之中，新型的高分子聚合物材料必将取代金属材料的统治地位。诚然，在工业发达的国家里，作为金属材料工业代表的钢铁工业已不再是具有魅力的工业部门，增长缓慢而又动荡不定，但是，金属材料毕竟仍然是物质文明中不可缺少的要素。在发展中的国家和地区，虽然可以跳跃式的直接引进新型材料技术，但钢铁工业的发展仍然生机勃勃，正在振兴之中。

0-1-2 金属材料的优良性能

在我们的日常生活中，一些常见的器件，如电灯、电灶、电冰箱、洗衣机、收音机、电视机、卫生管道、采暖系统和空调装置等等，假如没有各种金属材料，要想生产它们不仅非常困难，而且往往是不可能的。至于象工具机、动力机和传输机等等工具和机械，更是离不开金属材料。金属之所以获得如此广泛的应用，是因为金属材料具有下述两方面特性：

① 优越的工艺性能。金属材料除了可以铸造、焊接、切割外，还具有良好的锻轧成型性能和热处理性能。

② 良好的使用性能。最主要的是有较高的强度和塑性，以及相当小的电阻率和黑色金属的磁化性能。

一种金属材料是否有广阔的使用前景？取决于以下三点：

① 制成器件后，是否能满足实际工作条件对它所提出的使用性能要求。

② 该金属材料中的基本组成元素在自然界中的分布是否集中，储量是否丰富。

③ 金属材料的提炼、加工制造等工艺过程是否容易、简便和经济。

工程师们总是要选择那些既能满足使用要求又最为经济的材料，因此在与新型材料的竞争中，恰可成为促进金属材料发展的一种动力。

0-2 金属学及其进展概况

0-2-1 金属学的研究对象、目的和任务

金属学研究各种金属材料的成分、组织结构和性能之间的关系，研究金属材料在温度或机械等外加条件（场强）作用下的内部变化（反应），找出人为地改变金属材料性能的途径。

金属材料，无论是简单金属（含杂质极少的纯金属），还是复杂金属（合金），都是由各种尺寸形状的微细的小集团构成的大集合体。每个小集团是由大量原子构成的，这些原子呈一定规则排列，所以它们都是晶体。由于原子排列的方式和完整性不同，所以晶体的结构也不相同。每个小集团称为晶粒。在同一金属材料中，结构相同的所有晶粒总称为一个相。所以金属的组织结构是指各相中原子的排列、结构以及各相间的组合形态（显微形貌、组织）。所以，金属学是研究各种成分的金属材料中的原子排列和显微组织以及它们对金属材料性能的影响，并着重讨论与晶体不完整性（缺陷）有关的现象。上述影响可以粗略概括于表0-1中。

由表0-1可知，通过控制原子排列和显微组织，可以调整金属材料的性能，尤其是机械性能。实践表明，经过铸造、压力加工和热处理等工序，可以改变和控制金属材料中的原子排列和显微组织。因此，通过上述工序，可以改变金属材料的性能。《金属学基础》的任务就是要让读者了解这些工序是怎样和为什么能够改变金属的原子排列和显微组织的，

表 0-1 组织结构对性能的影响

性 能		原子排列的影响	显微组织的影响
机 械	强 度 塑 性	很 强	很 强
物 理	电 阻 率 磁 化 性 导 热 性	微 弱	弱→强
化 学	抗 腐 蚀 催 化 性	微 弱	微弱→中等

使读者对金属学的基本理论和基本知识获得准确的理解和坚实的基础，以便正确合理地生产、研究和金属材料，并能改善金属制品的质量，降低废品率，增加产量，节省成本和防止发生意外事故。所以，学习金属学的基本理论，掌握改变金属材料性能的规律，对于一个工程师来说有着非常重大的意义。

0-2-2 金属学的进展概况

在金属学未产生之前，古代工匠借辨别声响、观察划痕、区分色泽和断口状况以及用化学腐蚀观察蚀面纹理等方法来了解金属材料，逐步地积累起关于金属的感性认识。当时已经能够根据断口的颜色来区别青铜和黄铜的成分、疏松程度等等。

我国对早期金属知识的积累，也有过贡献。如宋代沈括的《梦溪笔谈》、明代宋应星的《天工开物》等著作中，都记载有金属冶炼、铸造、锻造、热处理工艺方面以及成分、性能用途方面的珍贵资料。

金属学起初称为金相学，也称金属组织学。直到20世纪40年代，才更名为金属学。它们的研究对象相同，不同的是：金相学着重研究金属和合金中相和组织的形成变化规律，考察它们与成分、温度的关系；而金属学还要涉及到相中的原子分布以及在组织变化中原子的迁动情况，即在更深的层次上研究金属材料性能改变的本质。

金相学起始于1808年，当时的奥地利人阿洛依斯·德·魏德曼希堆登(Alois de Widmanstätten)抛光和浸蚀了一块陨石(铁镍合金)的表面，用肉眼看到了如图0-1所示的漂亮的几何图形，这就是现在以他的名字命名的魏氏组织。金相分析，亦即对金属组织的研究工作，起初大部分注意力都集中在铁及铁碳合金(即钢和铸铁)方面，以后逐渐地向其它金属合金扩展。

回顾过去，金属学的发展，大致可以分为四个阶段：

(1) 1808~1871年，研究并实现了金相分析的方法。设计制造了金相分析用的专门仪器，积累了大量的实验资料。从1841年开始用光学显微镜来研究金属显微组织，这是金属学发展的第一次飞跃。光学显微镜是人们认识金属材料的重要工具，它打开了化学成分相同的钢，在机械性能方面有极大差异的谜。30年后，《金相学作为独立的科学》一书在英国出版。此时，金相学作为一门学科已初具雏型。

(2) 1871~1903年，收集、分析及总结了大量实验结果，导致了系统的理论研究。凭借热力学的科学概念，将繁多而又显著差异的组织形态，逐渐概括在同一领域中，得到了统一的解释。研究了合金相与其平衡存在条件(成分、温度)的关系，完成了建立铁-



图 0-1 抛光和浸蚀后铁镍陨石表面的魏氏组织

碳相图（平衡图）的工作。合金相图的出现是金属学发展的又一次飞跃。相图揭示了合金内部的相和组织转变的奥秘，为改变合金性能提供了依据，给合金热处理奠定了科学基础。

标志金相学实用开端的《铁、钢和生铁的显微研究》一书，于1898年在俄国问世。不久，在1903年，世界上第一本金属学科的巨著《铁、钢及其它合金》在美国出版。此时，金相学已在冶金院校中作为一门独立的课程进行讲授。

（3）1903~1945年，由研究合金相的平衡状态过渡到从动力学角度研究相的变化（相变）。探索复杂组织的转变过程，讨论它的速度和机理。转变的综合动力学曲线——C曲线就是这一阶段的重要成果，它为钢的热处理提供了又一依据。1913年开始应用X射线衍射法来研究金属的晶体结构，这是金属学发展的第三次飞跃。用X射线衍射技术可以确定金属经过相变或形变（塑性变形）之后的晶体结构特征，使人们在更精细的尺度上了解金属的构造和机械性能差异的本质。

在这个阶段内，还发展了测定金属性能的各种物理方法，并与金相分析结合起来，研究了各种金属合金在性能上的区别和相的变化。1940年《物理化学分析引论》一书在苏联出版。同时，物理学中的一些理论，如相结构理论、相变动力学理论、扩散理论以及晶体的位错理论相继建立，巩固和发展了金属学的理论基础。此时，原先化学色彩很浓的金相学与物理学相互结合渗透，发展成物理冶金学，亦即现在所说的金属学。

（4）1946~现在的四十年间，继续向金属材料因状态不同导致性能差异的谜进击，进一步弄清相变和强化的机理，在更深层次上研究结构与性能的关系。此时毕竟对金属的性能已有相当的了解，在基本原理方面已经有了比较统一的看法，对于一些实验事实，已经可以用原子结构理论、晶体缺陷（空位、位错、堆垛层错等）间的相互作用来解释。特别是从五十年代后期开始，电子显微技术在金属学中大量应用，使人们能观察到金属内部的精细结构，直接证明了位错的实际存在。这标志了金属学发展的又一次飞跃。进入七十年代之后，由于现代科学技术和新兴工业的迅速发展，对金属材料的性能提出了种种严格的要求，迫使人们去深化金属材料的内部微观结构的认识。

目前, 金属学的进展有如下几个特征:

① 已经不能满足于测量和罗列一些宏观性能数据来认识金属了。必须借助量子力学、统计物理、固体物理等理论, 去了解金属的次微观结构 ($10^{-2} \sim 10^{-8}$ cm 尺度) 及其行为, 从而也愈来愈展现出金属和陶瓷、高分子聚合物间的内在联系。

② 正在由描述(解释)性的学科向推理(预见)性的学科发展。如探索电子组态与晶体结构的关系, 尝试合金相的成分设计, 对相图中的平衡相作理论处理, 计算电子的各种相互作用对合金相性质的影响, 定量给出确切的组织参数等等。

③ 实现微小区域 (10^{-4} cm) 的化学成分、显微形貌及微观结构的综合分析, 因此测试仪器也有相互渗透发展成综合性仪器的趋势。

④ 在各种研究方法和工作任务日趋复杂的情况下, 现代金属材料的研究, 已经不是几个人的力量所能完成的了。必须由许多研究人员在共同的目标和计划之下, 进行多学科的通力合作。

0-3 《金属学基础》课程的特点和学习方法

如前所述, 金属学研究金属和合金的性能与化学成分、组织结构之间的相互关系, 此外加工处理过程对组织结构有极其重要的影响。《金属学基础》主要从组织结构来研究金属问题。即围绕金属材料的组织结构, 讨论它在加工处理过程中, 如在凝固过程、形变过程、再结晶过程及固态相变过程中是如何产生、如何变化的。进而阐明影响、控制组织结构的因素, 以便为了满足某种需要, 通过调整这些因素来调整金属材料的性能。

讨论中, 着重于物理概念的阐述, 注意从相图、相结构与转变条件、转变过程这两个方面, 去分析所能获得的组织结构。从中介绍解决实际问题的思路和方法。

《金属学基础》属于工程技术科学。它的体系不象物理学、化学那样严密完整, 因为它有很强的实践性, 只能置研究对象于各种工艺环境下, 去讨论其变化过程的本质, 所以不容易进行高度的抽象和概括。金属学所述的规律, 是在长期的生产实践和科学实验中不断摸索总结出来的。往后的发展, 也将依赖于生产的发展、实验方法和仪器的创新。所以学习金属学, 要重视课程的实践性环节, 不能忘记理论与实践联系。

对金属的组织结构要有一个明晰的概念。只有当测定和说明了金属的组织结构之后, 才可以认为研究工作是科学的。也只有在测出了化学成分和性能数据, 摄出了组织结构的照片, 找出了这些数据 and 图片资料之间的内在联系之后, 才能了解金属材料在特定的处理状态下所发生的变化。所以成分分析、形貌观察和性能测定, 是在施加某种加工处理之后, 研究金属材料的三个重要步骤。

要对组织的形成规律有一个深刻的理解。提倡自己去学习, 自己去研究, 自己去培养分析问题、解决问题的能力。方法是要注意组织结构变化所反映的现象(性能变化、尺寸形状变化等), 寻找这种现象与组织结构间的联系, 注意揭示这些现象的手段和方法, 以及出现这些现象的冶金历史和条件, 思考这些现象的物理实质。还要注意有关学科之间的纵横联系, 运用已学过的课程(物理、化学、物理化学、材料力学等)中有关知识去分析问题。

要十分注意金属材料组织结构的多变性, 它们与成分、性能的依存性以及它们受加工处理过程的约束性, 从而培养自己研究和处理问题的辩证唯物主义的观点。

1 金属的晶体结构

金属材料在国民经济及日常生活中得到广泛应用，其原因在于它具有一系列优良的使用性能和工艺性能，特别是由于它具有优良的机械性能和某些特殊的物理化学性能。长期以来，人们在不断探讨影响这些性能的因素，以及提高这些性能的途径。通过实践使人们认识到尽管影响金属材料性能的因素是十分复杂的，但决定金属材料性能的最本质的内在因素是组成材料的金属元素的原子结构，原子间的相互作用、相互结合，原子在空间的分布、排列规律（晶体结构），以及原子集合体的形貌特征等。为此我们首先讨论金属与合金的晶体结构。

1-1 晶体学基础

1-1-1 晶体与非晶体

自然界的固态物质，根据其结构特征，即原子或分子排列特征，可分为晶体和非晶体两大类。非晶体又称为无定形体。晶体和非晶体具有一些明显不同的特征和性质。

晶体一般都具有规则多面体的对称外形，例如食盐（ NaCl ）结晶成立方体形，明矾 $[\text{KAl}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}]$ 结晶成八面体形。晶体在发生液-固态转变时有固定的熔点和凝固点。在一定压力下，给一种晶体加热到一定温度，晶体开始熔化，如果继续加热，晶体继续不断地熔化直至全部为液态。在晶体未全部熔化之前，温度保持恒定不变，如果这时停止加热并保持温度不变，则出现液、固二相平衡，此时熔化速度等于凝固速度，该温度即为熔点或凝固点。晶体具有各向异性，许多性质是随晶体位向而变的，且显示出晶体对称性的影响。非晶体（如玻璃、松香、沥青）没有一定的几何外形，也没有固定的熔点。例如将固态玻璃加热时，它会慢慢地变软，逐渐成为具有一定粘滞性的流体。它是各向同性的。

上述晶体和非晶体的差异仅是一些表象，并非是它们本质上的区别。最本质的区别在于组成它们的粒子（原子、离子、分子、原子集团）在三维空间的分布状态不同。组成晶体的各种粒子在空间是呈有规律的周期性重复排列，而非晶体内部的粒子排列则是无规律的，或者说不具备长程有序地排列，这一点和液态金属原子排列状态相同，所以非晶体又称“过冷液体”。

晶体和非晶体之间可以相互转化。晶体中的粒子均处于平衡位置上，所以在相同的热力学条件下晶态较之非晶态稳定，非晶态处于热力学的亚稳定状态，因此在一定条件下非晶态可自发转变为晶态。例如光学显微镜的镜头玻璃使用时间久了，受潮后会产生一些擦不掉的“霉斑”，这些“霉斑”实际上就是玻璃局部向晶态转化而成的“小雏晶”，这个过程我们称之为晶化。反之，在一定外界条件下，如果晶态中原子规则排列受到破坏亦可变为非晶态，这个过程称之为玻璃化。

在晶体中，如果某一小区域内原子排列的规律相同，位向一致，则称该小区域为一个晶粒。一块晶体仅由一个晶粒组成者，为单晶体，否则为多晶体。

1-1-2 金属原子、结合力及结合键

金属和合金大多是规则排列的原子聚合体，因此金属的性质一方面取决于原子的本性，另一方面取决于由结合力、结合键决定的原子聚合的方式。

元素的特性取决于其原子的电子结构。按卢瑟福 (Rutherford) 模型，原子是由带正电荷的核及包围它的电子云所构成。按照量子理论，原子中的电子态可以用四个量子数来标记：主量子数 n 、角量子数 l 、磁量子数 m 和自旋量子数 m_s 。根据泡利 (Pauli) 不相容原理，一个由四个量子数确定的能态，只能被一个电子占据。电子首先占有最低能态，最终电子分布使原子的总能量最小。金属自由原子最外层电子数很少，一般只有 1 个至 2 个，很少超过 3 个，而且它的电离势很小。

晶体中原子间的相互作用力有吸引力和排斥力两种。引力是一种长程力，它来源于异性电荷间的库仑力。斥力有两个来源，其一为同性电荷间的库仑力，其二是由于泡利不相容原理引起的。根据泡利不相容原理，当两个原子相互接近时，电子云要产生重叠，部分电子动能增加，而使总能量升高。为了使系统总能量降低，电子应占据更大的空间，从而产生电子间的斥力，这种力是短程力。分析图 1-1 双原子模型，可以清晰了解原子间结合力及结合能。当两个原子相距无限远时，即 $r \rightarrow \infty$ 时，如图 1-1 (b) 所示，原子间的作用力 f 为 0，可以令此时的势能值 E 为参考值，取其为 0。当两个原子逐渐靠近时，吸引力首先变为主要因素，且随 r 的减小，吸引力越来越强。 $r > r_0$ 时，吸引力大于斥力， $f(r) < 0$ ；当两原子的距离接近 r_0 时，斥力成为主要的， $r < r_0$ 时斥力大于吸引力， $f(r) > 0$ 。当 $r = r_0$ 时，吸引力和斥力平衡， $f(r) = 0$ 。相应的能量变化如图 1-1 (a) 所示，对应 $r = r_0$ 处总能量值最低，故 r_0 为两原子间平衡距离。

由于原子结构不同，故当它们相互靠近时产生的吸引排斥作用也不相同，从而形成不同类型化学键。在金属与合金中主要结合键有四类：金属键、共价键、离子键、分子键。

① 金属键：在化学元素周期表中，金属元素约占 4/5，金属中原子大多以金属键相结合。金属原子结构的特点是外层电子较少，当金属原子互相靠近产生相互作用时，各金属原子都易失去最外层电子而成为正离子。这些脱离了每个原子的电子为相互结合的集体原子所共有，成为自由的公有化的电子云（或称电子气）而在整个金属中运动。电子云的分布可看作是球形对称的。这些正离子、自由电子之间产生强烈的静电相互作用，使其结合成一个整体。金属键没有饱和性和方向性，故形成的金属晶体结构大多为具有高对称性的紧密排列。利用金属键可以解释金属的导电性、导热性、金属光泽以及正的电阻温度系数等一系列特性。

② 共价键：亚金属（例如 IV A 族元素 C、Si、Ge 以及 VI A 族的 Se、Te 等）大多以共价键相结合。此类原子一般具有 3 个以上价电子，当其结合时，相邻原子各给出一个电子作为二者共有，原子借共用电子对所产生的力而结合。为了使原子的外层填满 8 个电子以满足

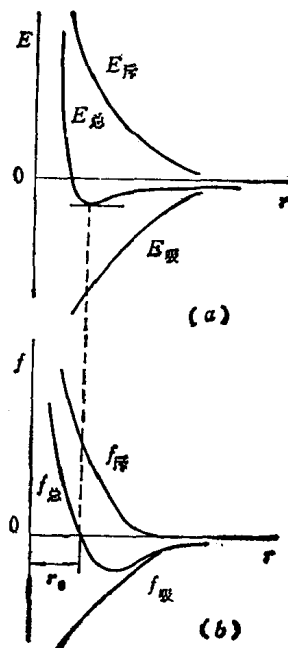


图 1-1 原子间的相互作用
(a) 相互作用能，(b) 相互作用力

原子稳定性的要求,电子必须由 $(8-N)$ 个邻近原子所共有, N 为原子的价电子数,因而共价键结合具有饱和性。金刚石即为共价键结合,碳是ⅣA族元素,故它有 $8-N=4$ 个共价键,每个碳原子具有4个最近邻原子。共价键晶体具有高熔点、高硬度。例如金刚石具有最高的摩氏硬度,且熔点高达3750℃。

③ 离子键:离子键结合即为失掉电子的正离子和得到电子的负离子依靠静电引力而结合在一起。例如Na失掉一个电子成为 Na^+ ,Cl得到一个电子成为 Cl^- , Na^+ 和 Cl^- 由于静电引力相互靠拢,当它们接近到一定距离时,二者的电子云之间以及原子核之间将产生排斥力,当斥力和引力达到平衡时,正负离子处于相对稳定位置上,形成NaCl晶体。在离子键组成的化合物 A_xB_y 中, A 离子周围最近邻的异号离子数与 B 离子周围最近邻的异号离子数之比等于 $y:x$ 。例如在 CaF_2 晶体中,每个钙离子周围有8个氟离子,每个氟离子周围有4个钙离子,其比恰为 $8:4=2:1$ 。离子键是没有方向性的,因离子周围的电子云是以核为中心球对称分布的,它在各个方向上与异性离子的作用力都是相同的。一般离子键结合力也较强,结合能很高,所以离子晶体大多具有高熔点、高硬度、低的热膨胀系数。而且由于不存在自由电子,所以离子晶体是不导电的,但在熔融状态下可以依靠离子的定向运动来导电。

④ 分子键(范德瓦尔斯键):组成晶体的中性原子或中性分子,当它们互相靠近时,出现电子的不均匀分布,从而使正、负电荷的中心发生偏离,形成电偶极子,电偶极子的异极相吸,使原子(分子)结合在一起,称之为分子键或范德瓦尔斯键。这种结合键键能很低,所以分子晶体的熔点很低。在金属与合金中这种键不多。

金属与合金中原子主要是靠金属键结合,它对金属材料的结构和性能起决定性作用,其次是共价键、离子键、分子键,有时也出现综合的结合键,即几种结合键同时存在。例如在钢中常存的渗碳体相 Fe_3C ,其中铁原子之间为纯粹的金属键结合,铁原子和碳原子之间可能存在金属键和离子键。结合键的强度常以结合键能来表示,键能是指原子在构成某一结合键时所放出的能量,或破坏某一化学键使之成为中性原子所需要的能量。不同化学键的键能是不相同的。在图1-2中表示了金属材料中常见的结合键及其组合图解。

1-1-3 晶体结构、晶体点阵、空间点阵

晶体结构是指组成晶体的物质质点(分子、原子、离子、原子集团)依靠一定的结合键结合后,在三维空间做有规律的周期性的重复排列方式。由于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,所以它们可以组成各种各样的晶体结构,即实际存在的晶体结构可以有无限多种。应用X射线衍射分析法,我们可以测定各种晶体的结构,但由于晶体结构种类繁多,不便于对其规律进行全面地系统性研究,故人为地引入一个几何模型,即用科学的抽象建立一个三维空间的几何图形,以此来描述各种晶体结构的规律和特征。下面我们举例分析如何将晶体结构抽象为空间点阵,并说明它们之间的关系。

NaCl是由 Na^+ 和 Cl^- 所组成。人们实际测定出在NaCl晶体中 Na^+ 和 Cl^- 是相间排列的,NaCl晶体结构的平面图形和空间图形分别如图1-3,图1-4所示。所有 Na^+ 的上下、前后、左右均为 Cl^- ;所有 Cl^- 的上下、前后、左右均为 Na^+ 。两个 Na^+ 之间的周期分别为5.628Å和3.978Å,即不同方向上周期不同。两个 Cl^- 之间的周期亦如此。可以发现,每一个 Na^+ 中心点在晶体结构中所处的几何环境和物质环境都是相同的, Cl^- 也同样如此。我们将这些在晶体结构中占有相同几何位置,且具有相同物质环境的点都称其为等同点。除 Na^+ 中

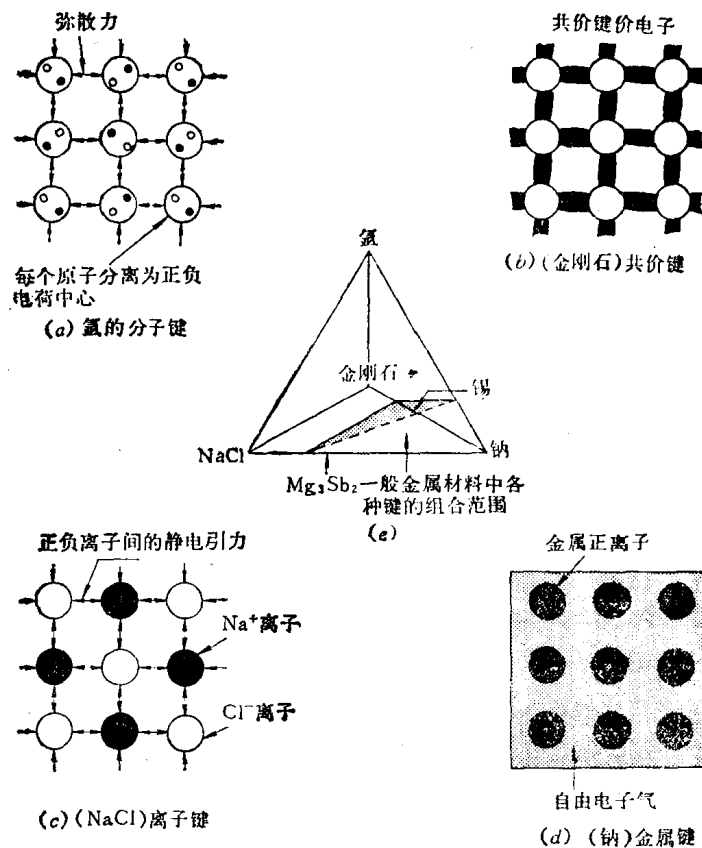


图 1-2 四种主要类型的键和存在于典型金属材料中键的组合图解

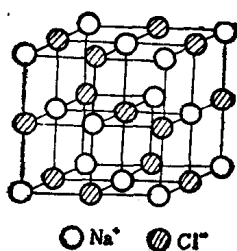


图 1-3 NaCl 结构

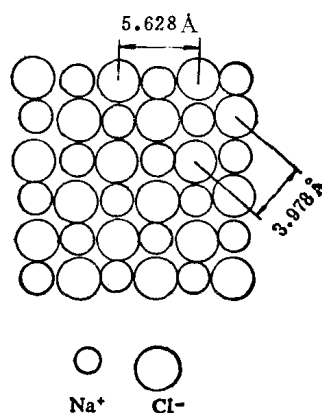


图 1-4 NaCl 结构平面图形

心点和Cl⁻中心点之外，尚存在很多类等同点，例如Na⁺和Cl⁻相接触的 x 点亦是一类等同点。但Na⁺中心点、Cl⁻中心点和 x 点彼此不是等同点。如果将晶体结构中某一类等同点挑选出来，它们有规则地、周期性重复排列所形成的空间几何图形即称为空间点阵。构成空间点阵的每一个点称之为结点或阵点。由此可知，每一个阵点都是具有等同环境的非物质性的单纯几何点，而空间点阵是从晶体结构中抽象出来的非物质性的空间几何图形，它很明确地显示出晶体结构中物质质点排列的周期性和规律性。有时为了方便起见，常人为地将阵点用直线连接起来形成空间格架，称之为晶格，它的实质仍是空间点阵，通常不加以

区别。

我们也可以这样理解空间点阵和晶体结构的关系：如果在空间点阵的每一个阵点处都放上一个“结构单元”，这个“结构单元”可以由各种原子、离子、分子或原子集团所组成，则此时空间点阵就变为晶体结构。由于结构单元可以是各种各样的，所以不同的晶体结构可以属于同一空间点阵，而相似的晶体结构又可以分属于不同的空间点阵。例Cu、NaCl、金刚石为三种不同的晶体结构，但它们均属于同一空间点阵类型——面心立方点阵。其中，组成金刚石结构的虽然都是碳原子，但●和○两类碳原子不属于同种等同点，它们的几何环境不相同，如图1-5所示。反之，如果将●-○看作是一个结构单元，在面心立方点阵的每个结点上放上一个结构单元●-○，则构成金刚石结构。在图1-6中，铬和氯

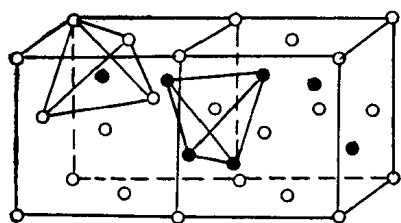


图 1-5 金刚石结构中不等同的两类碳原子

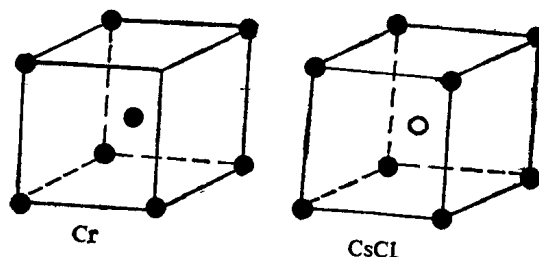


图 1-6 结构相似的不同点阵

化铯的晶体结构相似，但它们属于不同类型的空间点阵，铬为体心立方点阵，而氯化铯属于简单立方点阵。

由此看来，晶体结构和空间点阵是两个完全不同的概念，晶体结构是指具体的物质粒子排列分布，它的种类有无限多；而空间点阵只是一个描述晶体结构规律性的几何图形，它的种类却是有限的。

在研究金属材料时，还常常应用晶体点阵的概念。当把空间点阵的结点不再当作单纯的几何点，而作为物质质点的中心位置，此时它仍然是一个规则排列的点阵，但其意义发生了变化，从单纯的几何图形变成了具有物质性的点的阵列，称其为晶体点阵。晶体点阵是晶体结构的一种理想形式，它忽略了原子的热振动和晶体缺陷，突出了构成晶体的物质质点的对称性和周期性。

1-1-4 布拉菲点阵、晶胞、晶系

由于空间点阵中每一个阵点都具有相同的环境，在这样一个限定条件下，法国晶体学家布拉菲曾在1848年证明，空间点阵只有14种类型，故称为14种布拉菲点阵。

空间点阵是一个三维空间的无限图形，为了研究方便，可以在空间点阵中取一个具有代表性的基本小单元，这个基本小单元通常是一个平行六面体，整个点阵可以看作是由这样一个平行六面体在空间堆砌而成，我们称此平行六面体为单胞。当要研究某一类型的空间点阵时，只需选取其中一个单胞来研究即可。在同一空间点阵中，可以选取多种不同形状和大小的平行六面体作为单胞，如图1-7所示。为了统一起见，规定了选取单胞要满足以下几点原则：

- ① 要能充分反映整个空间点阵的对称性。
- ② 在满足①的基础上，单胞要具有尽可能多的直角。
- ③ 在满足①②的基础上，所选取单胞的体积要最小。

根据以上原则, 所选出的14种布拉菲点阵的单胞可以分为两大类。一类为简单单胞, 即只在平行六面体的8个顶点上有结点, 而每个顶点处的结点又分属于8个相邻单胞, 故一个简单单胞只含有一个结点。另一类为复合单胞 (或称复杂单胞), 除在平行六面体顶点位置含有结点之外, 尚在体心、面心、底心等位置上存在结点, 整个单胞含有一个以上的结点。每个单胞所含有的结点数可用下式计算:

$$N = N_i + \frac{N_f}{2} + \frac{N_r}{8} \quad (1-1)$$

其中 N_i 、 N_f 、 N_r 分别表示位于单胞内部 (体心)、面心、顶点上的结点数。14种布拉菲点阵中包括7个简单单胞, 7个复合单胞。

根据单胞所反映出的对称性, 可以选定合适的坐标系, 一般以单胞中某一顶点为坐标原点, 相交于原点的三个棱边为 X 、 Y 、 Z 三个坐标轴, 定 X 、 Y 轴之间夹角为 γ , Y 、 Z 之间夹角为 α , Z 、 X 之间夹角为 β , 如图1-8所示。单胞的三个棱边长度 a 、 b 、 c 和它们

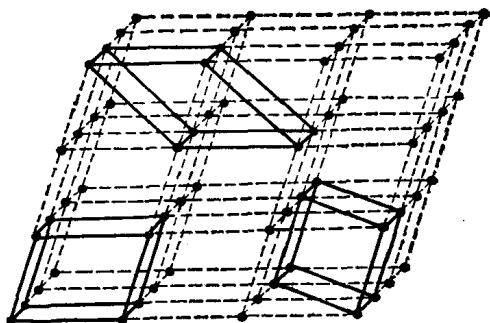


图 1-7 空间点阵及晶胞的不同取法

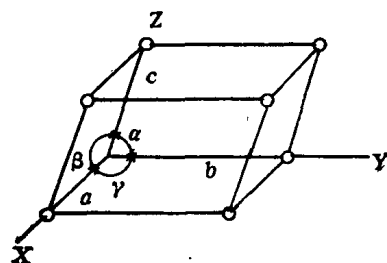


图 1-8 单胞及晶格常数

之间夹角 α 、 β 、 γ 称为点阵参数或晶格参数。六个点阵参数, 或者说三个点阵矢量 a 、 b 、 c 描述了单胞的形状和大小, 且确定了借这些矢量的平移而形成的整个点阵。也就是说空间点阵中的任何一个阵点都可以借矢量 a 、 b 、 c 由位于坐标原点的阵点进行重复平移而产生。每种点阵所含的平移矢量为:

简单点阵: a 、 b 、 c ;

底心点阵: a 、 b 、 c 、 $\frac{1}{2}(a+c)$;

体心点阵: a 、 b 、 c 、 $\frac{1}{2}(a+b+c)$;

面心点阵: a 、 b 、 c 、 $\frac{1}{2}(a+b)$ 、 $\frac{1}{2}(b+c)$ 、 $\frac{1}{2}(c+a)$

所以布拉菲点阵也称为平移点阵。

晶体根据其对称程度的高低和对称特点可以分为七大晶系, 所有晶体均可归纳在这七个晶系中, 而晶体的七大晶系是和14种布拉菲点阵相对应的, 如图1-9和表1-1所示。所有空间点阵类型均包括在这14种之中, 不存在这14种布拉菲点阵外的其他任何形式的空间点阵。例如在图1-9中未列出底心四方点阵, 从图1-10可以看出, 底心正方点阵可以用简单正方点阵来表示, 面心正方可以用体心正方来表示。

如果在单胞的结点位置上放置一个结构单元, 则此平行六面体就成为晶体结构中的一