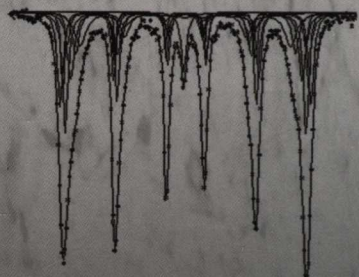
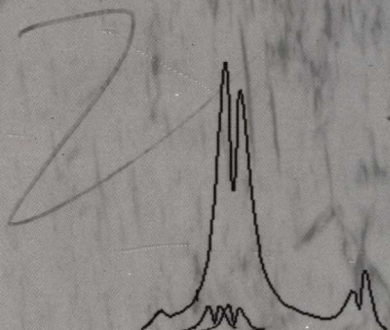
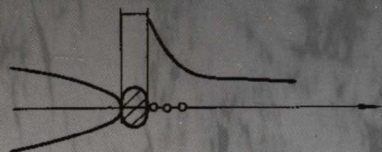


新型钢材料 强韧性与 微结构

张国英 张 辉 曾梅光 著



科学出版社

www.sciencep.com

新型钢材料强韧性与微结构

张国英 张 辉 曾梅光 著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是一本较全面、系统介绍新型钢材材料微结构与强韧性关系不同层次研究成果的著作。书中融有作者及同事们多年来的科研成果与国内外研究成果的最新进展。本书从必不可少的金属学基础理论知识开始,给出了新型无钴高强高韧钢 G50 不同热处理下的显微组织、力学性能及相互关系;介绍了穆斯堡尔谱技术在新型无钴高强高韧钢 G50 和无钴二次硬化钢 G90 研究中的应用;重点描述了电子理论在材料科学中的应用,包括晶界、位错电子结构、固溶强化、第二相粒子强化和细晶粒强化机理研究;最后给出了利用人工神经网络对新型钢材材料的性能预测和优化设计。

本书可作为高等院校、科研单位从事材料尤其是钢铁材料研究的教师、科研人员、研究生等的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

新型钢材材料强韧性与微结构/张国英,张辉,曾梅光著. —北京:科学出版社, 2005

ISBN 7-03-014877-0

I. 新… II. ①张…②张…③曾… III. ①钢-强度②钢-韧性③钢-金属结构 IV. TG142.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 003321 号

责任编辑: 李 锋 田士勇 贾瑞娜/责任校对: 李 真

责任印制: 钱玉芬/封面设计: 王 浩

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

双青印刷厂印刷

科学出版社发行

各地新华书店经销

*

2005 年 3 月第 一 版 开本: B5 (720×1000)

2005 年 3 月第一次印刷 印张: 11

印数: 1—2 000

字数: 209 000

定价: 28.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换〈环伟〉)

前 言

从金属材料钢的发展历史上看,人们追求的目标是提高钢的强度、塑性和韧性,以此来满足各种使用要求。长期以来,高强度钢一直是机械产品关键承力构件的首选材料,但在代表高新技术和新型材料应用先驱的航空、航天、兵器等工业领域中,出现了高强度钢的性能与高比强、高比韧等要求不相协调的局面。因此,设计师们不得不求助于钛合金、复合材料等一些新型材料。这一趋向的结果是高强度钢的用量急剧减少,甚至已经流传“钢铁冶金是夕阳产业”的说法。但理论分析计算得到铁的拉伸强度、晶须的实测强度预示钢具有巨大的发展潜力。此外,与其他先进材料相比,钢的绝对强度、稳定性及半个多世纪积累的使用经验和低廉的价格说明在世界范围的大市场中,钢铁是不可能被取代的,不过其发展有赖于其理论向更高阶段发展。进入 20 世纪 90 年代,美国、日本、韩国和中国等在制定 21 世纪发展计划时,都把钢铁放在突出重要的地位,这说明钢铁材料正在进入新的发展阶段——实现理论有效指导、开发新品种,同时提高钢的强韧性的综合发展阶段。近年来,随着各种先进的测试仪器和精确的测试技术在材料科学上的应用,钢的强韧化理论的进一步完善,以及量子力学和计算机技术结合发展起来的计算材料学的进展,为新一代钢铁材料开辟了一个崭新的发展平台,激励着研究者们投入到新一代钢的研究设计中并使之参与新一轮先进材料的竞争。

作者有幸置身于新型钢铁材料的研究中并仍致力于新型钢材料强韧性机理的探索。本书包含了作者多年来的研究成果,重点介绍了不同层次——显微组织层次、原子层次、电子层次无钴高强高韧钢的研究。把本书奉献给读者们,其目的是把不同层次对钢材料进行研究的方法介绍给大家,希望大家提出新的思想、见解,以供交流探讨之用,同时也寄希望于大家对作者的工作给予指导帮助。作者希望能够与钢铁研究领域的科学工作者一起共同面对新一代钢的变革局面去创新、进取,直至达到开拓设计出异乎寻常的新钢种,同时大幅度提高钢的各种力学性能的目标。

为便于理解后面钢材研究的介绍,本书第 1 章阐述了必不可少的金属学基础理论。由于材料的力学性能是由其微观组织结构决定的,而改变钢组织结构的有效方法是热处理,故第 2 章在介绍热处理原理的基础上,讲述了新型钢材料 G50 热处理过程的力学性能、显微组织结构及其相互关系。穆斯堡尔效应对靶核原子周围的环境非常敏感,通过穆斯堡尔谱分析可以从原子尺度获得材料结构、相转变、电子结构等微观信息,反映合金宏观性能的物理本质,故第 3 章介绍了新型钢材料 G50、G90 应用穆斯堡尔谱技术的研究结果。材料的结构分显微组织层次、

原子层次和电子层次,但究其本质,材料的各种性质是由其电子结构决定的,所以在第4章重点阐述电子理论在钢材料中的应用,包括钢中各相、晶界、位错及相界的电子结构计算,讨论了钢的各种强化机理,为新型钢的设计提供了新的理论基础。第5章介绍了一种新的合金钢设计方法——人工神经网络法,对新型钢 G50 进行了性能预测和优化设计。

鉴于作者水平有限,书中难免有不当甚至错误之处,欢迎广大读者指正。

作 者

2004 年 10 月于沈阳

目 录

前言

第 1 章 金属学基础	1
1.1 晶体结构学	1
1.1.1 晶体结构的周期性	1
1.1.2 晶体的对称性	2
1.1.3 典型的金属晶体结构	3
1.2 实际金属的晶体结构	6
1.2.1 点缺陷	7
1.2.2 线缺陷	8
1.2.3 面缺陷	9
1.3 合金的相结构	11
1.3.1 固溶体	12
1.3.2 金属化合物	14
1.4 铁碳相图	16
1.4.1 铁的物理性质	16
1.4.2 铁素体与奥氏体	17
1.4.3 渗碳体	17
1.5 钢强韧化的理论基础	18
1.5.1 钢的强度与强化	18
1.5.2 钢的韧性与韧化	25
第 2 章 新型无钴高强高韧钢的力学性能与显微组织	36
2.1 碳钢的热处理	36
2.1.1 钢在加热和冷却时的组织转变	37
2.1.2 钢的淬透性	47
2.1.3 碳钢在回火时的组织转变	48
2.2 新型无钴高强高韧钢 G50 的力学性能	51
2.2.1 热处理对力学性能的影响	51
2.2.2 冷处理对力学性能的影响	57
2.3 新型无钴高强高韧钢 G50 的显微组织	58
2.3.1 G50 钢淬火态的显微组织	58
2.3.2 G50 钢回火态的显微组织	60

第 3 章 新型无钴高强高韧钢微观结构的穆斯堡尔谱研究	62
3.1 穆斯堡尔谱学原理	62
3.1.1 γ 射线的共振吸收	62
3.1.2 原子核及其周围环境	66
3.1.3 穆斯堡尔谱	67
3.1.4 超精细相互作用	73
3.2 穆斯堡尔谱学在新型无钴高强高韧钢中的应用	78
3.2.1 淬火温度对 G50 钢穆斯堡尔谱的影响	78
3.2.2 回火温度对 G50 钢穆斯堡尔谱的影响	81
3.2.3 不同回火时间对 G50 钢穆斯堡尔谱的影响	84
3.3 穆斯堡尔谱学在高 Ni-Co 二次硬化钢中的应用	90
3.3.1 高 Ni-Co 二次硬化马氏体钢的穆斯堡尔谱	91
3.3.2 含 Al 无 Co 二次硬化钢的穆斯堡尔谱	96
第 4 章 实空间递推方法在钢铁材料研究中的应用	100
4.1 Recursion 方法	100
4.1.1 Recursion 方法的数学基础	100
4.1.2 Recursion 方法在钢中的应用(钢系统中哈密顿的建立)	103
4.1.3 体系总结构能及原子轨道间键级积分的计算方法	105
4.2 钢铁材料中各相的电子结构及合金化行为研究	106
4.2.1 高强高韧钢奥氏体相的电子结构与合金化行为	106
4.2.2 高强高韧钢马氏体相的电子结构与合金化行为	113
4.2.3 钢中碳化物的电子结构	121
4.3 钢中小角度晶界区的电子结构	129
4.3.1 小角度晶界原子结构几何模型的建立	130
4.3.2 非金属杂质在钢中小角度晶界区的电子结构及掺杂效应	131
4.3.3 合金元素对掺杂小角度晶界的影响	137
4.3.4 稀土对晶界的净化与强化作用	141
4.4 钢中位错的电子结构与晶粒细化	143
4.4.1 钢铁素体相中 $\frac{1}{2}[111]$ 刃位错与溶质原子的交互作用	143
4.4.2 钢奥氏体相中刃位错电子结构与晶粒细化	146
第 5 章 人工神经网络在钢材料设计中的应用	150
5.1 人工神经网络原理及训练样本的归一化	150
5.1.1 人工神经网络原理	150
5.1.2 训练样本数据的归一化	151

5.2 神经网络在新型无 Co 高强高韧钢设计中的应用 152

5.2.1 新型无 Co 高强高韧钢 G50 力学性能的预测 152

5.2.2 新型无 Co 高强高韧钢 G50 的优化设计 159

参考文献 161

第1章 金属学基础

在钢的发展历史上,人们长期追求的目标是提高钢的强度、塑性和韧性以满足使用需要。随着科学技术的飞速发展,人们对钢的质量、性能提出了更高的要求。众所周知,材料的力学性能主要取决于其内部组织结构。因此,设计并研制出性能优异的新钢种或对原有钢种性能进行改善有赖于对钢的成分、组织结构与性能关系规律的认识,有赖于对合金强韧化理论及物理本质的深刻理解。鉴于阐述金属学基本原理和材料强韧化机理的专著很多,为了使本书有一定的完整性、可读性,并着重考虑物理、化学专业出身现从事材料科学研究的读者在没有系统学习材料专业基础理论的情况下能够理解本书后面出现的基本概念和基本理论知识,本书第一章对金属学原理和材料强韧化原理的基础知识作扼要介绍。

1.1 晶体结构学^[1]

1.1.1 晶体结构的周期性

晶体中,原子按严格的规则排列,具有周期性和平移对称性,具有长程序。晶体材料可以是单晶体,它们一般具有规则的几何外形和各向异性的物理性质;金属材料也可以是多晶体,它们由许多尺寸超过微米的小单晶体组成。当晶粒尺寸小到几十个埃时,则称为微晶。非晶态材料的结构则表现为原子排列不具有周期性,但基本保留着晶体材料的短程序。另一种既不同于晶体又不同于非晶体,它们具有局域的五重旋转对称性,称为准晶体。

理想晶体可看成由完全相同的基本结构单元在空间作周期性无限排列构成(结构单元可以是单个原子或离子,也可以是原子的集团)。若取结构单元的某一点,如重心为代表点表示其空间位置,则这些呈周期性无限分布的几何点的集合形成的空间点阵,称为布拉菲格子或晶格,这些代表点称为格点。一切格点都是等价的,周围环境都是相同的。布拉菲格子加上结构单元便是晶体结构。由一种晶格构成的点阵称为简单晶格,否则称为复式晶格。晶格是晶体结构周期性的表征之一。

若取某格点为原点,它至其他格点的矢量 $\mathbf{R}_l$ 称为格矢量并可表示为 $\mathbf{R}_l = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3$, 其中 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 为一组基矢, l_1, l_2, l_3 为一组整数。当 l_1, l_2, l_3 取尽一切整数时,便可得到全部格点位置。

为了便于研究点阵排列的规律和特点,可以在点阵中取出一个具有代表性的基本单元。通常是取一个最小的平行六面体作为点阵的组成单元,称为原胞。将

原胞作三维的重复堆砌就构成了空间点阵。可见,原胞也是晶体结构周期性的表征之一。由于平行六面体原胞往往不能直观反映晶格的宏观几何对称性,故结晶学中常取最小重复单元的几倍作为原胞,此时结点不仅在原胞的顶点上,而且也可以在体心或面心上,原胞的边在晶轴方向,边长等于该方向的一个周期。此时的原胞称为结晶学原胞,简称晶胞,晶胞的边长称为晶格常数。按结晶学原胞(晶胞)的定义,所有晶体可能取 14 种不同的晶胞,称为 14 种布拉菲晶胞,相应地有 14 种布拉菲格子。按晶胞 3 个基矢(或对称轴)的长度 a, b, c 的不同以及它们之间夹角的不同,又将 14 种布拉菲格子归纳为 7 大晶系。

典型的晶格结构有:①简单立方晶格(sc 格子)——晶胞与原胞一致,是边长为 a 的立方体,配位数为 6,每个晶胞含有一个原子;②体心立方晶格(bcc 格子);③面心立方晶格(fcc 格子);④六角密排晶格(hcp 格子)。②、③、④结构在后面介绍实际金属典型结构时将给出其详细的结构特点。此外还有金刚石结构、NaCl 结构、闪锌矿结构和纤锌矿结构等。

在晶格中,若从一个原子沿晶向到最近原子的位移矢量为 $l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3$,则用 $[l_1, l_2, l_3]$ 标志晶向(l_1, l_2, l_3 为互质的整数,如不是互质的,将其化成互质的),称为晶向指数,如 $[100], [111], [\bar{2}12]$ 等。由于立方体的对称性,亦可用 $\langle 100 \rangle$ 统称 6 个晶轴方向,用 $\langle 110 \rangle$ 统称 12 个等效的面对角线晶向,用 $\langle 111 \rangle$ 统称 8 个等效的体对角线晶向。

在晶格中要描述一个平面的方位,就是在一个坐标系中表示出该平面的法线的方向余弦,或者表示出这平面在三个坐标轴上的截距。在晶格中选取某一格点为原点,原胞的基矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 为坐标系的三个轴,这三个轴不一定相互正交。晶格中的一族晶面不仅平行而且等距。设某一族晶面的面间距为 d ,离原点距离等于 μd 的晶面在三个坐标轴的截距分别为 r, s, t ,则这三个截距的倒数之比等于三个互质的整数 h_1, h_2, h_3 之比。显然,可以用这三个整数表示晶面族的方位,称它们为该族晶面的面指数,记以 $(h_1h_2h_3)$ 。实际工作中,常以结晶学原胞(晶胞)的基矢来表示面指数。在这样的坐标系中,表征晶面取向的互质整数称为晶面族的密勒指数,用 (hkl) 表示。求法仍然是把晶面在坐标轴(基矢)上的截距的倒数的比简约为互质的整数的比。

1.1.2 晶体的对称性

晶体的对称性是对晶体进行几何变换而能保持晶体性质不变。对晶体进行几何变换而能复原的操作称作对称操作。显然,晶体的对称操作越多,对称性越高。和一般的几何图形不同,晶体只有为数不多的对称类型,这是由于晶格周期性的限制。按照空间群理论,晶体的对称类型是由少数基本的对称操作组合而成。如果基本对称操作中不包括平移,则组成 32 种宏观的对称类型,称为点群;如果包括平移,就构成 230 种微观的对称性,称为空间群。

晶体中有下列几种基本对称操作：① n 度旋转对称轴，晶体绕某一固定轴 u 旋转角度 $\theta = \frac{2\pi}{n}$ 以后能自身重合，则称 u 为 n 度（或 n 次）旋转对称轴。由于晶体结构周期性的限制， n 只能取 1, 2, 3, 4, 6，晶体不能有 5 度或 6 度以上的转轴；② n 度旋转-反演轴，晶体绕某一固定 u 轴旋转 $\theta = \frac{2\pi}{n}$ 角度以后，再经过中心反演，晶体能自身重合，则称 u 为 n 度旋转-反演轴，晶体中也不可能有 5 度或 6 度以上的对称轴。③ n 度螺旋轴，一个 n 度螺旋轴 u 表示绕轴转 $\theta = \frac{2\pi}{n}$ 角度后，再沿该轴的方向平移 T/n 的 l 倍，则晶体中原子和相同的原子重合，其中 l 为小于 n 的整数； T 为沿 u 轴方向上的周期矢量。晶体也只能有 1, 2, 3, 4 和 6 度螺旋轴。④ 滑移反映面，一个反映面表示经过该面的镜像操作后，再沿平行于该面的某个方向平移 T/n 的距离（ T 为该方向上的周期矢量， n 为 2 或 4），晶体中的原子和相同的原子重合。

1.1.3 典型的金属晶体结构

工业上使用的金属虽然有几十种，但除少数金属具有复杂的晶体结构外，大多数金属均具有比较简单的晶体结构。最常见的晶体结构只有三种，即体心立方、面心立方及密排六方。前两种属于立方晶系，后一种属于六方晶系。

1. 体心立方结构

体心立方结构的晶胞如图 1.1。由图可知，体心立方晶胞的八个角上各有一个原子，构成立方体，并在其中心占有一个原子。具有体心立方结构的金属有： α -铁、 β -钛、铬、钨、钼、钒、铌等。把晶体看作是由许多晶胞堆砌而成，每个晶胞角上的原子应共同属于相邻的 8 个晶胞。故只有 $1/8$ 个原子属于这个晶胞，而体心原子则完全属于这个晶胞。所以，每个体心立方晶胞中的原子数是 2 个。晶体中原子排列的紧密程度与晶体结构类型密切相关。为了定量地表示原子排列的紧密程度，通常应用配位数和致密度这两个参数。晶体结构中任一原子的最近邻且等距离的原子数目，叫做该晶体结构的配位数。体心立方晶格可以看成是两个简单立方晶格穿插而成。在每个体心立方晶胞中，无论是体心的原子，还是角上的原子，周围都有 8 个最近邻且等距离的原子，所以体心立方结构的配位数为 8。把金属晶体中的原子看作是直径相等的刚球，原子排列的紧密程度可以用刚球所占空间的体积百分数来表示，称为致密度。如果以一个晶胞计算，致密度 K 就等于晶胞中原子所占体积与晶胞体积之比，即

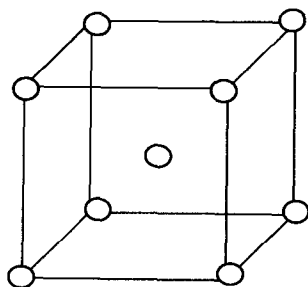


图 1.1 马氏体中 α -Fe 晶胞

$$K = \frac{nv}{V} \quad (1.1)$$

式中: n 是晶胞原子数; v 是一个原子的体积; V 是晶胞的体积。

在体心立方结构中, 体对角线上相邻的原子是彼此接触的, 如图 1.2 所示。晶胞中体对角线 AB 的长度与点阵常数 a 和原子半径的关系为

$$AB = 4r = \sqrt{3}a$$

即

$$a = \frac{4}{\sqrt{3}}r \quad (1.2)$$

图 1.2 体心立方点阵原子半径与晶格常数的关系

每个晶胞只有 2 个原子。因此, 体心立方晶体的致密度为

$$K = \frac{nv}{V} = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}}r\right)^3} = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi \approx 0.68 \quad (1.3)$$

可见, 体心立方结构的金属晶体中, 有 68% 的体积为原子所占据, 其余 32% 为空隙体积。

2. 面心立方结构

面心立方晶胞如图 1.3 所示。面心立方晶胞除了晶胞的 8 个角上各有一个原子外, 在每个立方体面的中心还有一个原子, 故称面心立方结构。

由于每个晶胞角上的原子为相邻的 8 个晶胞所共有, 位于面中心的原子为相邻的两个晶胞所共有, 所以面心立方晶胞中的原子数为 4。

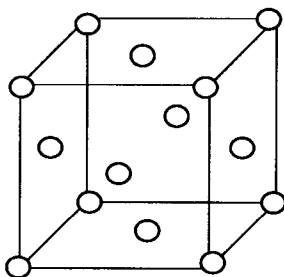


图 1.3 面心立方晶胞

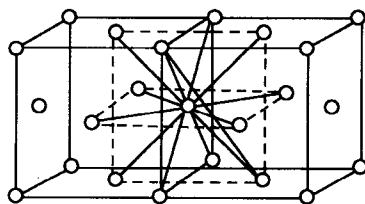


图 1.4 面心立方点阵的最近邻原子

由图 1.4 可看出, 晶胞中每个原子周围都有 12 个最近邻原子, 所以面心立方

晶体的配位数为 12。

沿着晶胞的面对角线方向, 原子互相接触地排列着, 面对角线的长度为 $\sqrt{2}a$, 所以面心立方晶胞中的原子半径 $r = \frac{\sqrt{2}}{4}a$, 故面心立方晶格的致密度为

$$K = \frac{nV}{V} = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{\left(\frac{4}{\sqrt{2}}r\right)^3} = \frac{\sqrt{2}}{6}\pi \approx 0.74 \quad (1.4)$$

由配位数值和致密度值可知, 面心立方晶格要比体心立方晶格更致密些。实际上, 面心立方晶格是原子最紧密的排列方式之一, 而体心立方晶格是原子次紧密的排列方式。

3. 密排六方结构

密排六方晶胞如图 1.5 所示。在这种晶胞中, 上、下底面正六边形各顶角上的原子为相邻的 6 个晶胞所共有, 这两个面中心的原子各为相邻的两个晶胞所共有, 加上晶胞内的三个原子, 所以密排六方晶胞中的原子数是 6 个。

密排六方晶格的点阵常数有两个: 一个是正六边形底面的边长 a , 另一个是上、下底面的距离 (即晶胞高度) c 。 c 与 a 之比, 即 c/a 称为轴比。对于理想的密排六方点阵, 其轴比 $c/a = 1.633$ 。但实测的轴比常常偏离此值。在理想的密排六方情况下, 一个晶胞可看成是由两个简单六方晶胞穿插而成。以晶胞上底面中心原子为例, 它不仅与周围六个角上的原子相接触, 还与其下的三个位于晶胞之内的原子相接触, 又与其上面相邻晶胞内的三个原子相接触, 所以密排六方结构的配位数是 12。

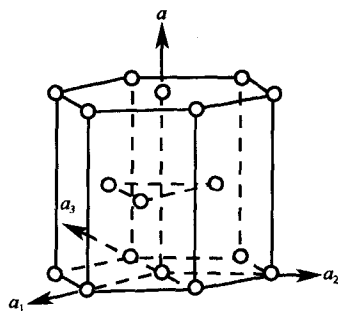


图 1.5 密排六方晶胞

理想密排六方晶格的晶胞体积为 $\frac{3\sqrt{3}}{2} \times 1.633a^3$ 。晶胞底面正六边形的边长与点阵常数 a 及原子半径 r 的关系为 $AB = 2r = a$ 。所以, 密排六方晶格的致密度为

$$K = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{3\sqrt{3}a^2}{2} \times 1.633a} \approx 0.74 \quad (1.5)$$

由式(1.5)可知, 密排六方晶格的致密度和配位数与面心立方晶格完全相同, 这表明此两种晶体结构都是原子排列最紧密的结构。

4. 晶体中原子的堆垛方式

由于面心立方结构和密排六方结构中原子的堆垛方式比较复杂,且两者又有密切的内在联系,如具有相同的配位数和致密度。为了弄清它们为什么具有相同的密集程度,我们需从晶体中原子的堆垛方式来进行分析。

密排六方结构的堆垛方式可以从图 1.6 看出,它是以最密排面(0001)(以后简称为密排面)为基础逐层堆垛而成的。为了获得最紧密的堆垛,第二层密排面(B层)堆在第一层密排面(A层)之上,第三层密排面堆放在与第一层相对应的位置,即在 A 原子面位置,其他层则类推。因此,密排六方结构中,密排面的堆积顺序是 ABABAB...

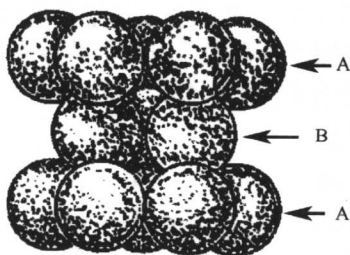


图 1.6 密排六方晶格密排面的堆垛方式

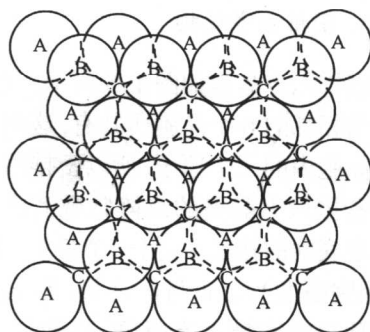


图 1.7 面心立方晶格密排面的堆垛方式

在面心立方晶体中,(111)面是密排面,在该面上原子的排列情况与密排六方晶体的(0001)面完全一致。为了看清楚密排面的堆积顺序,我们用图 1.7 来表示出面心立方晶格的密排面,而面心立方结构是以(111)密排面逐层堆垛而成的。可见,如果第一层密排面即图 1.7 中的 A 原子层,则第二层密排面在 B 处,那么第三层密排面就应在 C 处,第四层密排面才又与 A 层原子面对应,即正好在第一层的正上方,其他类推。因此,面心立方结构中,密排面的堆垛顺序是 ABCABCABC...

显然,密排六方结构和面心立方结构的这种堆垛的差别,并不影响原子排列的紧密程度。

1.2 实际金属的晶体结构

1.1 节所讲的晶体结构都是理想的情况,在实际晶体中,原子的排列不可能那样规则和完整,而是多少存在着偏离理想结构的区域,即出现了不完整性。实际晶

体中原子排列的不完整性,通常称为晶体缺陷。晶体缺陷有多种,按其几何形态,可以分为三大类:

(1) 点缺陷:其特点是在 X, Y, Z 三个方向上的尺寸都很小(相当于原子的尺寸)。如空位,间隙原子等。

(2) 线缺陷:其特点是在两个方向上尺寸都很小,另一方向上的尺寸相对很大。如各种类型的位错就属于线缺陷。

(3) 面缺陷:其特点是一个方向上的尺寸很小,另外两个方向上的尺寸很大。如晶界、相界、孪晶界等。

应该指出,虽然金属晶体中存在各种缺陷,但从整体上看一般金属晶体的结构仍然保持着规律性,可以认为是接近完整的。晶体缺陷对金属的许多性能有很大的影响,特别是对塑性、强度以及金属中的原子扩散等有着决定性的作用。

1.2.1 点缺陷

通常把点缺陷分为四种,就是空位、同类原子的间隙原子、异类原子的间隙和置换原子。

在晶体中,位于点阵结点上的原子并不是静止的,而是以平衡位置为中心不断地进行热振动。在一定温度时,原子热振动的平均能量是一定的。但是,各个原子的能量并不完全相等,而且经常发生变化,此起彼伏。在任何瞬间,总有一些原子的能量大到足以克服周围原子对它的束缚,就可以脱离其平衡位置而迁移到别处。结果就在原位置上出现了空结点,称为空位。由于空位的出现,使其周围的原子都偏离平衡位置,发生晶格畸变,这种畸变在三个方向上都很小,所以空位是一种点缺陷。

同类原子的间隙原子,就是处在晶格间隙中的原子。前已述及,晶体结构中的间隙是很小的,一个原子硬挤进去,必然会使周围原子偏离平衡位置,造成晶格畸变,所以也是一种点缺陷。

异类间隙原子大都是原子半径很小的原子,如钢中的碳、氮、氢、硼,尽管原子半径很小,但仍比间隙位置大,因此也要造成晶格畸变。这种间隙原子在每一温度下也有一个极限浓度,称它为固态溶解度。

许多异类原子,如果占据在原来基本原子的平衡位置上,称为置换原子。由于置换原子的半径总是比基本原子大些或者小些,因此也使周围原子偏离平衡位置,造成晶格畸变,这种置换原子在每一温度下也有一个极限浓度。一般它的极限浓度,要比间隙原子的极限浓度大得多。

点缺陷对金属的性能有一定的影响。例如,点缺陷能引起电阻的增加,体积膨胀,密度减小。另外,过饱和点缺陷(如淬火空位,辐射缺陷)还可提高金属的屈服强度。

1.2.2 线缺陷

晶体中的线缺陷就是各种类型的位错。位错是一种极重要的晶体缺陷,它对金属的塑性变形、强度和断裂起着决定性的作用。另外,位错对金属的扩散、相变等过程也有较大的影响。虽然位错有多种类型,但是其中最简单也是最基本的有两种,一种是刃型位错,一种是螺型位错。

1. 刃型位错

图 1.8 是简单立方结构的晶体中存在刃型位错时的原子模型示意图。由图可知,晶体的两半部分已经发生局部滑移,左边是未滑移区,右边是已滑移区,原子向左移动了一个原子间距。在已滑移区和未滑移区之间,出现了一个多余的半原子面,犹如用刀刃切入晶体,终止在内部。沿着半原子面的“刃边”,即多余半原子面与滑移面之交线处,晶格发生很大畸变,这就是一条刃型位错。在多余半原子面一边,原子间距缩小,受到挤压变形;在另一边,原子间距增大,受到膨胀变形;位错两侧的晶面稍有倾斜,形成剪切变形。畸变在位错中心处最大,随着距离的增大逐渐减小。一般将晶格畸变的中心线称为刃位错线。

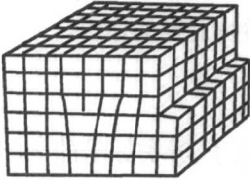


图 1.8 刃型位错的原子模型

2. 螺型位错

由图 1.9 可知,晶体两半部分已发生局部滑移,后边是未滑移区,前边是已滑移区,原子相对地向下移动了一个原子间距。在已滑移区和未滑移区之间,有一个很窄的过渡区。在过渡区中,原子都偏离了平衡位置,使原子面畸变成一串螺旋面,这就是螺型位错。在这螺旋面的轴心处即晶格畸变最大处为螺型位错线。在原子面上每绕位错线一周就推进了一个晶面间距。螺型位错线也不是一个原子列,而是一个螺旋状的晶格畸变“管道”。螺型位错周围的弹性应力场呈轴对称分布。

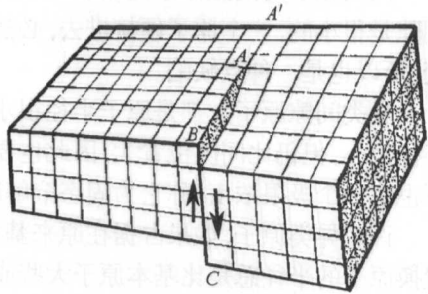


图 1.9 螺型位错示意图^[2]

3. 实际晶体中的位错

前面我们介绍位错的一般性质时,都是结合简单立方点阵讨论的,而常见的金

属却非简单立方晶体,一般具有面心立方、体心立方和密排六方的晶体结构。

1) 全位错

在简单立方点阵中的位错,它的柏氏矢量 $\mathbf{b}$ 总是等于点阵矢量。所谓点阵矢量就是点阵中连接任意两结点的矢量。在实际晶体结构中,位错的柏氏矢量除了等于点阵矢量外,还可能小于或大于点阵矢量。柏氏矢量为单位点阵矢量或其倍数的,称为全位错。柏氏矢量小于点阵矢量或不等于点阵矢量整数倍的,称为不全位错。

从理论上讲,柏氏矢量可以是任意的点阵矢量,但是,晶体中实际存在的位错的柏氏矢量却只限于少量最短的点阵矢量。从能量方面这是很好理解的,因为位错的能量正比于柏氏矢量的平方,柏氏矢量越小,位错引起的应变能就越小。能量高的位错是不稳定的,往往会通过位错反应分解为能量较低的位错组态。

对于面心立方点阵,最短的点阵矢量为原点到 $[1/2, 1/2, 0]a$ 点,可用 $a/2 \langle 110 \rangle$ 表示,其长度为 $b = \frac{\sqrt{2}a}{2}$ (a 为点阵常数);次短的点阵矢量为 $a \langle 100 \rangle$, 长度 $b = a$ 。从能量来看,柏氏矢量为 $a/2 \langle 110 \rangle$ 时,位错只有 $a \langle 100 \rangle$ 能量的一半。所以在面心立方晶体中全位错是 $a/2 \langle 110 \rangle$ 。

对于体心立方点阵,最短的点阵矢量是 $a/2 \langle 111 \rangle$, 其长度为 $\sqrt{3}a/2$, 次短的点阵矢量是 $a \langle 100 \rangle$, 长度为 a 。因而体心立方晶体中的全位错的柏氏矢量为 $a/2 \langle 111 \rangle$ 。

2) 堆垛层错

在讨论金属的晶体结构时已经提及,若密排面的次序是按 ABCABC... 排列形成的就是面心立方结构;若按 ABAB... 排列的则是密排六方结构。在密排结构中,有时会破坏正常的堆垛次序而出现错乱,这种相对正常堆垛次序的差异,称为堆垛层错。例如,面心立方结构中,正常堆垛次序是 ABCABC..., 如出现 ABCBCABC... 或 ABCBABC..., 就出现了堆垛层错。前者为抽出型,后者为插入型。

3) 不全位错

如果堆垛层错不是发生在晶体的整个原子面上,而只是发生在部分晶体中,于是,在晶体中就出现了有堆垛层错的部分与没有堆垛层错的完整晶体部分。这二者交界的地方就是位错。但是这种情况的位错,其柏氏矢量 $\mathbf{b}$ 不等于点阵矢量,所以是不全位错。

1.2.3 面缺陷

在金属系统中,经常出现的重要界面有三种:其一是固体与气体或液体相接触的界面,即外表面;其二是结构相同而取向不同的晶体之间的界面,如晶粒边界、一个晶粒内部或单晶体存在的亚晶界等;其三是结构不同的晶体之间的界面,即相界。在合金中,相界连接的两个晶体除结构和取向不同外,一般两个晶体的化学成