

高等专科学校试用教材

金属学与热处理

刘世荣 主编

机械工业出版社

GAOZHUANJIAOCAI

高等专科学校试用教材

金属学与热处理

刘世荣 主编



机械工业出版社

责任编辑：黄 循

金属学与热处理

刘世荣 主编

机械工业出版社出版（北京阜成门外百万庄南街一号）

（北京市书刊出版业营业许可证出字第117号）

中国农业机械出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行·新华书店经售

开本 787×1092 1/16·印张 20³/₄·插页 1·字数 518 千字

1985年6月北京第一版·1985年6月北京第一次印刷

印数 00,001-11,200·定价 3.35 元

统一书号：15033·5841

前 言

本书是高等专科学校热加工专业的试用教材。是根据机械工业部教育局初步审定的招收高中毕业生、学制为三年的教学大纲组织编写的。

全书主要内容有：金属及合金的结构与结晶；合金相图；金属的塑性变形和再结晶；钢的热处理；常用金属材料以及实验指导书等。

本书也适用于职工大学、业余大学。中等专业学校也可选用，并可供热加工专业的工程技术人员参考。

本教材的第一、二、三、八章由刘世荣编写；第四、五、六章由周晓明编写；第七章由杨全义编写；第九、十章由胡永发编写；实验指导书由杨智民编写。

全书由刘世荣主编，哈尔滨科学技术大学胡宗逖主审。

由于我们水平有限，经验不多，书中难免有缺点和错误，恳切希望读者批评指正。

编 者

目 录

绪 论	1
第一章 金属的晶体结构	3
§ 1-1 金属	3
§ 1-2 金属的晶体结构	5
§ 1-3 金属的实际晶体结构	18
第二章 纯金属的结晶	24
§ 2-1 金属结晶的现象	24
§ 2-2 液态金属结构	26
§ 2-3 结晶的热力学条件	26
§ 2-4 形核的规律	27
§ 2-5 核长大的规律	34
§ 2-6 晶粒大小的控制	39
第三章 二元合金的相结构与结晶	41
§ 3-1 基本概念	41
§ 3-2 合金的固态相结构	41
§ 3-3 二元合金相图的建立	50
§ 3-4 相律和杠杆定律	53
§ 3-5 匀晶相图	55
§ 3-6 共晶相图	64
§ 3-7 包晶相图	75
§ 3-8 具有金属化合物的相图	79
§ 3-9 具有固态相变的相图	80
§ 3-10 二元合金相图分析法	82
§ 3-11 铸锭和焊缝的结晶	86
第四章 铁碳合金相图	91
§ 4-1 铁碳合金的组元及其相	91
§ 4-2 Fe-Fe ₃ C相图分析	94
§ 4-3 典型合金的结晶过程及其组织	98
§ 4-4 含碳量对铁碳合金平衡组织和性能的影响	106
§ 4-5 铁碳相图的应用	107
第五章 三元合金相图	109
§ 5-1 三元相图的成分表示方法	109
§ 5-2 三元系中的直线法则、杠杆定律及重心法则	111
§ 5-3 三元匀晶相图	113
§ 5-4 三元共晶相图	116
§ 5-5 实际三元合金相图举例	122
第六章 金属的塑性变形与再结晶	126

§ 6-1 金属的塑性变形	126
§ 6-2 变形金属与合金在加热时的变化	140
§ 6-3 金属的热塑性变形 (热变形加工)	145
第七章 钢的热处理	148
§ 7-1 概述	148
§ 7-2 固态金属中原子扩散的基本概念	149
§ 7-3 钢在加热时的转变	151
§ 7-4 钢在冷却时的转变	157
§ 7-5 钢在回火时的转变	177
§ 7-6 钢的退火与正火	182
§ 7-7 钢的淬火与回火	186
§ 7-8 钢的表面热处理	196
§ 7-9 钢的形变热处理	205
§ 7-10 热处理与其它冷热加工工艺的关系	207
第八章 工业用钢	209
§ 8-1 碳钢	209
§ 8-2 合金钢	216
第九章 铸铁	257
§ 9-1 铸铁的石墨化过程	257
§ 9-2 灰口铸铁	259
§ 9-3 球墨铸铁	264
§ 9-4 蠕虫状石墨铸铁	271
§ 9-5 可锻铸铁	272
§ 9-6 特殊性能铸铁	275
第十章 有色金属及其合金	279
§ 10-1 铝及其合金	279
§ 10-2 铜及其合金	290
§ 10-3 滑动轴承合金	300
§ 10-4 钛及其合金	305
实验指导书	308
实验一 结晶过程及铸锭组织观察	308
实验二 热分析	309
实验三 金相显微试样的制备及金相显微镜的使用	311
实验四 铁碳合金平衡组织的显微观察	318
实验五 碳钢的热处理	320
实验六 碳钢不平衡组织的观察	322
实验七 铸铁的显微组织观察	325
录附	327
附录一 热处理工艺的代号及技术条件的表示方法	327
附录二 化学元素周期表	327
参考资料	327

绪 论

金属材料是以金属元素或以金属元素为主而构成的并具有一般金属特性的材料。它广泛应用于人类生活和生产之中,是现代工业和科学技术等方面不可缺少的重要材料。金属材料之所以能够被广泛地应用,是由于它具有优良的使用性能和工艺性能,易于制成性能、形状都能满足使用要求的机械零件、工具和其它制品。

为了能够正确地选用金属材料,合理地确定金属的加工方法,充分发挥金属的潜力,生产出经久耐用的产品,机械工程技术人員必须熟悉金属材料的性能,掌握其变化规律。为此,就需要深入研究金属材料的成分、组织结构和性能之间的关系,掌握金属材料中各种组织结构的形成及其变化规律。而这些问题正是《金属学与热处理》这门学科所要研究的基本内容。

金属材料的性能与成分、组织结构之间有着极其密切的关系。例如钢和铸铁,虽然都是铁和碳的合金,可是一为塑性金属,一为脆性材料,两者性能相差很大。经研究表明,钢和铸铁这种性能的差异,主要是由于含碳量不同,钢和铸铁的内部组织结构也不相同。即金属材料的成分改变时,金属的组织结构也会相应发生变化,其性能亦随之而改变。

金属的组织不仅决定于成分,还和金属的处理条件有关。例如用含碳0.77%的钢制成两个试件,都加热到770℃,然后分别进行缓冷(退火)和急冷(淬火),结果,两者的强度和硬度相差三到四倍,用后者能切削前者。为什么化学成分、加热温度都相同的钢,只是由于冷却速度不同,机械性能会有这样大的差别?这是由于用不同的冷却速度可获得不同的组织与结构的缘故。

由此可见,金属材料的性能,决定于它的内部组织与结构,而组织与结构又决定于它的化学成分或处理条件。只要改变金属材料的成分或处理条件,金属材料的组织与结构就会发生改变,金属的性能亦因之而改变。所以,人们只有掌握了金属的成分、处理条件、组织、结构和性能之间的关系及其变化规律,才能通过改变或控制金属的成分,选用适当的工艺手段,提高或改善金属的性能,创造出所需性能的合金,生产出符合使用要求的各种金属制品,以适应社会生产和生活对金属材料提出越来越高的要求。

人类在生产、使用和发展金属材料的过程中,进行各种测试分析和实验研究,逐步掌握了影响金属性能和质量的因素,特别是揭示出金属材料的组织结构和性能之间的内在联系,建立起金属材料的成分、组织结构和性能之间的密切关系,创建与发展了金属材料科学,为改进金属材料(不断提高合金的性能,充分发挥金属材料的潜力)和研制新型合金奠定基础。

在金属材料科学发展的历史长河中,我国人民自古以来就有着重大的贡献。早在殷周时代,我国青铜冶铸技术已发展到很高的水平。从商周出土的八百七十五公斤的司母戊大鼎、精巧的四羊尊和龙虎尊等文物表明,我国的铸造技术当时已达到了相当高的水平。

春秋时代,我们的祖先,对铜合金已经有了广泛的应用和深入研究,确定出铜锡合金的成分、性能和用途之间的关系。这就是《周礼考工记》上记载的“金有六齐”：“六分其金而锡居一,谓之钟鼎之齐;五分其金而锡居一,谓之斧斤之齐;四分其金而锡居一,谓之戈戟之齐;三分其金而锡居一,谓之大刀之齐;五分其金而锡居二,谓之削杀矢之齐;金锡各

半，谓之鉴燧之齐。”它对六种铜合金—青铜的成分配比、性能和用途方面的论述即使到科学技术高度发展的今天它还是应当遵循的规律。

战国时代，铸铁的生产和应用范围已有显著发展和扩大。所谓白口铁、展性铸铁、麻口铁相继出现。随后又发展到由铸铁而炼钢。并相继开始采用退火、淬火、正火和渗碳等热处理方法，来改善钢和铸铁的性能。

西汉时代，钢和铸铁的冶炼技术已有很大的提高、产量、质量和应用得到空前的提高和扩展。根据近年来我国考古发掘的文物证实，在汉魏时代，我国已经生产出石墨形状符合现代球铁标准的铸铁。这比英国人莫洛于1947年首先公开宣布研制成功的现代球铁早二千年之久。

其后，由于盛唐时代钢铁的大发展、一直到明朝，我国的钢铁生产技术，在世界上一直遥遥领先。

此外，在我国早期科学技术著作中，如先秦时代的《考工记》、宋代沈括的《梦溪笔谈》和明代宋应星的《天工开物》等，都记载了关于金属的冶炼，铸造，焊接和热处理工艺等方面的珍贵资料。五百年前著作的《天工开物》中，有关锉刀制造、翻新和热处理工艺有如下记述：“凡铁锉，纯钢为之，未健之时，钢性亦软，以已健钢渐划成纵斜纹理，划时斜向，则文成方焰，划后烧红，退微冷，入水健。久用乖平，入火退健性，再用渐划。”可见，当时我国已经完全掌握了淬火和退火对性能的影响及其规律，热处理技术已经发展到相当高的水平。

综上所述，可以看出，我国古代人民在金属材料的研究和应用方面，有过辉煌的成就，对人类作出了巨大的贡献。只是在解放前的近百年间，由于腐朽的封建统治和帝国主义的侵略和剥削，才使我国工农业和科学技术处于落后的状态。

解放后，在中国共产党的领导下，经过三十多年的艰苦奋斗，在生产技术和科学研究等方面，都取得了很大的成就。特别是在生产和科研之中，由于应用了现代金属科学的研究成果以及实验研究手段和方法，有力地促进了我国金属材料科学技术的发展。现在不仅建立了适合我国资源的合金钢系统，生产出各种金属材料，而且已广泛应用了如X射线技术、电子显微镜以及电子探针和电子扫描等现代研究手段，对金属晶体结构、精细组织和微区成分进行分析研究，推动了材料科学的发展，显著提高了金属材料的质量。

我国在金属材料的研究和生产等方面，虽然有了很大的发展，取得了相当大的成就，但在特殊性能金属材料的研制和使用；金属测试分析手段的研究以及新技术和新工艺的研究、推广和应用等方面还满足不了生产和科学技术日益发展的要求，仍需继续努力。

《金属学与热处理》课程主要是讲述纯金属结构、合金相结构、相图、塑性变形与再结晶等基本理论和热处理工艺以及工业用钢、铸铁、有色金属及其合金等内容。目的是使学生获得有关金属材料的基本理论和知识，为正确地选择、合理地使用金属材料，充分发挥金属的潜力打下基础。

《金属学与热处理》是一门偏重于实验的学科。因此，学习过程中，在注意加强理论联系实际的同时，应特别重视实验工作。

《金属学与热处理》的发展，是和其它科学技术的发展密切相关的。特别是物理、化学、材料力学、物理化学、晶体学和金属工艺学等学科的发展，为《金属学与热处理》提供了必要的基础。同时《金属学与热处理》又是铸造、压力加工、焊接等热加工工艺必不可少的技术基础。学习它应以金属及其合金的成分、组织和性能之间的相互关系及其变化规律为线索，把金属学与热处理的基本理论、基本知识和基本方法学到手。

第一章 金属的晶体结构

从绪论中我们已知金属材料的性能决定于其内部的晶体结构和组织状态。为了深入了解金属性能变化的实质,必须首先研究金属的晶体结构。即深入分析金属组织中的原子结构及其结合方式、原子的聚集状态和分布规律以及各种晶体的特点等。实践表明,深入了解金属的点阵结构对于掌握金属的性能,进一步改善与发展金属材料都有重要的意义。

§1-1 金 属

一、金属的特性

在已发现的一百多种元素中,金属元素约占五分之四。常温下除汞为液体外,其余都是晶态固体。

固态金属的特性主要表现为:有金属光泽、可锻、不透明并有良好的导电性和导热性。尤其金属的电阻是随温度的升高而增大,而非金属的电阻是随温度的升高而降低。即金属具有正的电阻温度系数,非金属则具有负的电阻温度系数。金属和非金属的电阻与温度之间的关系如图 1-1 所示。

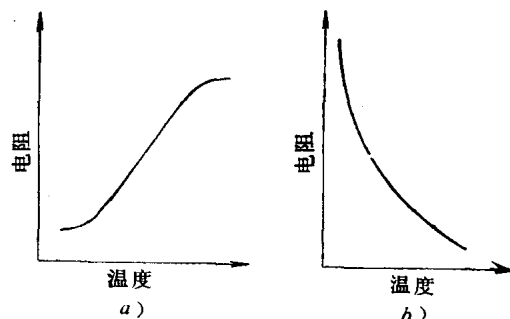


图1-1 金属和非金属的电阻与温度关系的示意图

a) 金属 b) 非金属

研究表明,金属这些特性,是由于金属共有的原子结构特点和原子结合方式所决定的。

二、金属原子的结构特点

根据现代物理学观点,各种元素的原子都是由带正电的原子核和绕核运动的带负电的电子所构成。而且每个电子都位于原子核外一定的“轨道”上,形成不同的电子层。

金属原子结构的特点,是其最外电子层的电子数很少,一般是一个到两个。而且这些最外层电子和原子核的结合力较弱,很容易脱离原子核的束缚变成自由电子,而金属原子丢失外层电子就成为正离子。由于金属原子结构有这样的特点,决定了金属原子在化学反应中的行为和金属原子间的结合方式。

三、金属原子间的结合方式(金属键)

由于金属原子结构有如上所述的特点,当大量金属原子聚合在一起构成金属晶体时,绝大部分金属原子都将失去其价电子而成为正离子,正离子按一定几何形式有规律地排列起来,且分别以一定平衡位置为中心,作三维热振动。而摆脱金属原子核束缚的价电子,为整个金属所共有,在各离子之间自由地运动,形成所谓电子云。但自由电子,在某瞬间也可能和某些正离子结合成为中性原子。因此,实际的固态金属中,不是所有的原子都变成正离子,而是绝大部分处于正离子状态。

金属晶体正是依靠各正离子和自由电子的相互作用(引力和斥力的平衡)使金属原子结

合起来。这种结合方式，称之为金属键。图1-2示意的绘出了金属键结合的模型。

根据金属键，利用经典的自由电子理论，可以解释金属的一些主要特性。

首先，由于金属中存在着大量的自由电子，在外加电场的作用下，这些自由电子能够沿电场方向作定向加速运动，形成电子流，所以金属具有良好的导电性。金属除依靠正离子的振动传递热能外，自由电子的运动也能传递热能，所以金属的导热性比非金属好；其二，金属随温度的升高，作三维热振动的正离子运动加剧振幅增大，使自由电子定向运动的阻力增加，电阻升高，故金属具有正的电阻温度系数；其三，由于金属键没有所谓的方向性（由于金属正离子的周围都充满着自由电子，各个方向上的结合力相同）和饱和性（金属原子相互结合时不受价电子数目的限制），因此当金属在外力作用下沿原子面发生相对位移时，正离子间始终保持金属键的结合。所以，金属虽然发生形变仍不致断裂，显示出良好的塑性；最后，由于自由电子能吸收可见光的能量，使金属具有不透明性。又因吸收了可见光的能量而被激发，到较高能级的电子跳回原来的低能级时，就把吸收的可见光的能量以电磁波的形式重新辐射出来，使之具有金属的光泽。

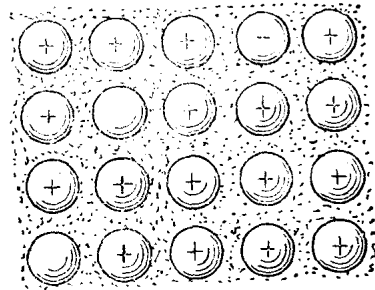


图1-2 金属键示意图

也由于金属键没有方向性和饱和性，因此金属原子结合在一起时，总是趋向于最紧密而规律地排列着。

为了说明金属晶体中原子趋向于简单而紧密的排列，下面根据两原子之间相互作用情况，即双原子作用模型加以分析。

当金属原子相互靠近形成固体金属时，相邻两原子之间便发生相互作用。其相互作用力有正离子和自由电子之间的静电引力；正离子和正离子之间以及电子和电子之间的静电斥力。引力力图使两个原子靠近，斥力却力图使两原子分开。而力的大小都随原子间的距离（ r ）的变化而变化，如图1-3上部曲线所示。图中合力曲线为两原子间引力和斥力的代数和。

分析图1-3可知，当两原子间距 r 等于 r_0 时，引力和斥力相等，合力为零。此时两原子既不开也不靠近，恰好处于平衡位置。这时原子的位能最低也最稳定。如果把这一对原子拉开或压缩，都需要相应地施加拉力或压力，以克服两原子间的引力和斥力而作功，并引起能量（位能或作用能、结合能）的升高；当两原子间距 $r > r_0$ 时，由于引力大于斥力，原子相互吸引自动靠近，同时伴有作用能的降低；当 $r < r_0$ 时，斥力大于引力，则此时合力表现为斥力，两原子便相互排斥自动离开，同时也伴有作用能的降低。因此，只有 $r = r_0$ 时，两原子合力为零位能最低也最稳定，所以称 r_0 为原子

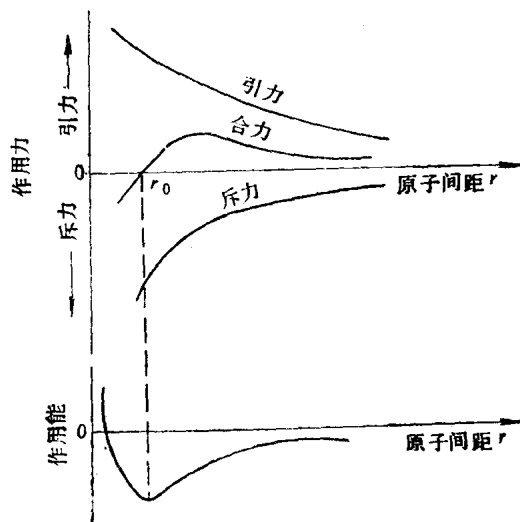


图1-3 双原子作用模型

间的平衡距离。显然对 r_0 的任何偏离,都会破坏二力的平衡使原子的位能增加,原子处于不稳定状态,并立刻会受到一个力的作用,促使它回到平衡位置。

若将上述双原子模型加以推广,不难理解,当大量金属原子结合为晶体时,为使晶体具有最低的能量,处于稳定状态,各原子之间也必须保持一定的平衡距离,这就是金属晶体中的原子趋向于有规则排列的重要原因。

如果试图从金属晶体中把某一个原子从平衡位置取走,就必须对它做功,以克服周围原子对它的作用力。显然这个要被取走的原子周围邻近的原子数越多,所需作的功也越大。可见,某一原子周围等距邻近的原子数越多,原子间的作用能(位能)也越低。由于能量最低的状态是最稳定的状态,任何系统都有自发地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向最紧密的排列,以保持最稳定的状态。

§1-2 金属的晶体结构

上述原子间的结合方式,固然是研究金属晶体结构一个重要方面,但原子在空间的排列方式对纯金属性能的影响也是十分显著的。所以本节就着重研究金属的晶体结构,即晶体内部原子排列规律性及其特征。

一、晶体的基本概念

(一) 晶体

众所周知,自然界中的固态物质,虽然外形各异、种类繁多,但都是由原子或分子堆积而成的。根据内部原子堆积的情况,通常可以分为晶体和非晶体两大类。晶体中的原子或分子,在三维空间是按照一定的几何规律作周期性的重复排列;非晶体中的这些质点,则是杂乱无章的堆积在一起无规律可循。这就是晶体和非晶体的根本区别。

经研究证明,除少数固态物质如玻璃、松香、硬橡胶等外,绝大多数固态无机物都是晶体。尤其是通过X射线实验研究,不仅证明了固态金属及其合金是晶体,而且已经具体的定量的测定了金属及其合金的原子排列方式。

晶体和非晶体由于原子的堆积状况不同,其性能也因之而异。晶体有一定的熔点且性能呈各向异性,而非晶体却与此相反。此外,即使是同一物质,若原子排列方式不同或者说晶体结构不同,它们的性能往往也相差很大,例如金刚石和石墨就是这方面的典型实例。

晶体和非晶体虽有上述根本区别,但在一定条件下是可以互相转化的。例如玻璃经高温长时间加热能变为晶态玻璃;而通常是晶态的金属,如从液态极快速冷却,也可以得到非晶态金属,与晶态金属相比这种非晶态金属有很高的强度和韧性等。

(二) 晶格

为了便于研究原子在三维空间周期重复排列的规律性,可以近似地把晶体中的原子看成是固定不动的刚性小球,在空间有规律地排列而没有缺陷。据此绘出的原子在空间堆积的球体模型如图1-4所示。此图虽然形象、直观易懂,但不易看清其内部原子排列的规律性,通常把原子抽象为几何的点,由这些点(原子)在空间有规则的周期性的排列,就形成了所谓空间点阵。如果把这些点用直线连接起来,就构成一个空间格子,各原子的振动中心就在空间格子的结点上。此用于描述原子在晶体中排列方式的空间格子就称为结晶格子,简称晶格,如图1-5a)所示。

(三) 晶胞

为了说明原子在空间排列的特点, 根据晶体中原子的排列具有周期性, 可以从晶格中取出一个能够完全反映晶格特征的最小几何单元来表示晶格中原子排列的规律性。这个最小单元称之为晶胞, 如图1-5b) 所示。不难看出, 整个晶格实际上是许多大小、形状和位向相同的晶胞, 在三维空间周期重复堆积而成的。

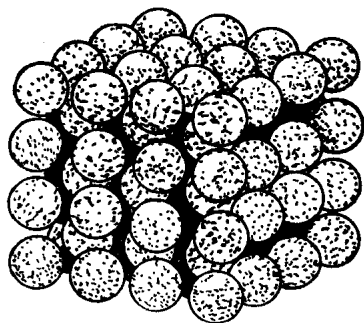


图1-4 晶体原子排列的模型

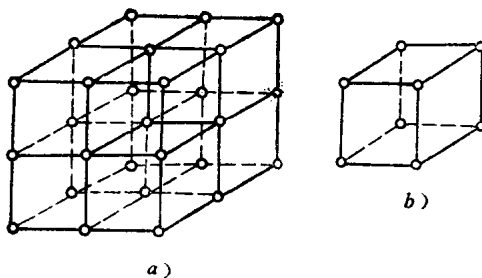


图1-5 晶格和晶胞

a) 晶格 b) 晶胞

(四) 晶格参数

为研究晶体结构, 在结晶学中通常取晶胞角上某一结点作为原点, 沿其三条棱边作三个坐标轴X、Y、Z称为晶轴, 而且规定在坐标原点的前、右、上方为轴的正方向, 反之为负方向。并常以晶胞的棱边长度 a 、 b 、 c 和棱间夹角 α 、 β 、 γ 等六个参数作为晶格参数来表示晶胞的几何形状和大小, 如图1-6所示。其中 a 、 b 、 c 称为晶格常数, 单位为 $\text{\AA}$ ($1\text{\AA} = 10^{-8}\text{cm}$), 而 α 、 β 、 γ 称为晶轴间夹角, 单位是度。

二、典型金属的晶体结构

在已知的八十多种金属元素中, 除少数金属具有复杂的晶体结构外, 大都具有简单的晶体结构, 属于体心立方、面心立方和密排六方晶格类型。而少数金属的其它晶格类型, 可参看附录二。

(一) 体心立方晶格

体心立方晶格的晶胞如图1-7所示。它的形状是一个立方体, 其晶格参数为 $a=b=c$,

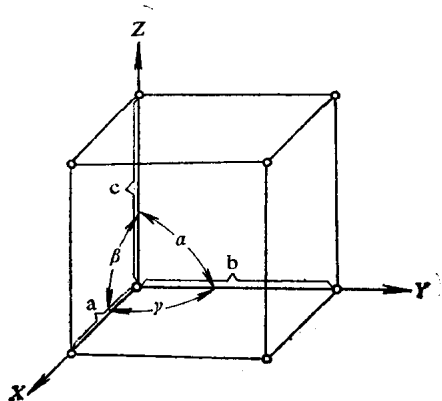


图1-6 晶格参数表示法

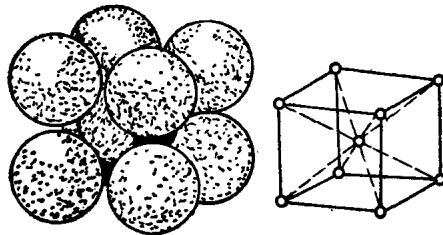


图1-7 体心立方晶胞

$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 。所以晶格常数只用一个常数 a 表示即可。

由图可见，在晶胞中原子位于立方体的八个顶角和立方体的中心。

具有体心立方晶格的金属有 α -Fe、Cr、W、Mo、V、Nb等。

(二) 面心立方晶格

面心立方晶格的晶胞如图1-8所示，它的形状也是一个立方体。晶格常数也用常数 a 表示即可。由图可见，在晶胞中原子位于立方体的八个顶角和六个面的中心。

具有面心立方晶格的金属有 γ -Fe、Al、Cu、Ni、Au、Ag、Pb等。

(三) 密排六方晶格

密排六方晶格的晶胞如图1-9所示，它的形状是一个六方体。

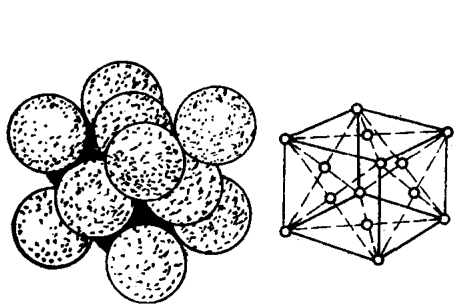


图1-8 面心立方晶胞

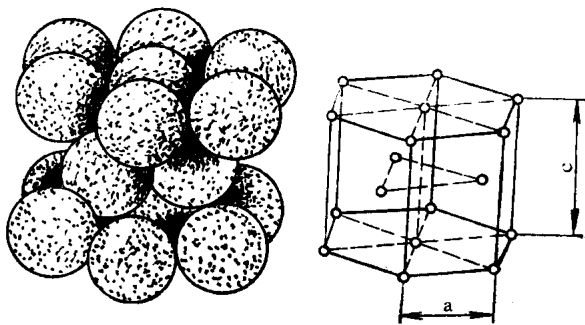


图1-9 密排六方晶胞

晶格常数用六方柱体底面的边长 a 和上下底面间的距离，即六方柱体的高度 c 来表示。

由图可见，在晶胞中原子除了位于六方柱体的十二个顶角和上下两个底面中心外，六方柱体中还有三个原子。

分析表明，只有当轴比 $c/a=\sqrt{8/3}\approx 1.633$ 时，上、下底面的原子间距与其上、下层原子间距相等，才是理想的密排六方晶格。

具有密排六方晶格的金属有Mg、Zn、Cd、Be等。

(四) 典型金属晶体结构的几何参数

晶胞的特征，除用晶格常数和晶轴间夹角之外，还可用晶胞的原子数、原子半径、配位数和致密度等参数来反映。

1. 晶胞的原子数

(1) 体心立方晶格由于晶格是由许多晶胞重复堆积而成的，因此体心立方晶胞八个顶角上的原子都同时属于其相邻的八个晶胞所共有，每个晶胞实际只占有 $1/8$ 个原子，如图1-10a)所示。但立方体中心的原子却为每个晶胞所独有。所以每个晶胞的原子数为：

$$1/8 \times 8 + 1 = 2 \text{ 个}$$

(2) 面心立方晶格和体心立方晶格一样，其晶胞顶角上的原子都同时属于相邻的八个晶胞所共有，但六个面心的原子是同时属于与该面相邻的两个晶胞所共有，如图1-10b)所示。因此，面心立方晶格中，一个晶胞的原子数为：

$$1/8 \times 8 + 1/2 \times 6 = 4 \text{ 个}$$

(3) 密排六方晶格密排六方晶胞中十二个角上的原子，同时属于六个相邻的晶胞所共

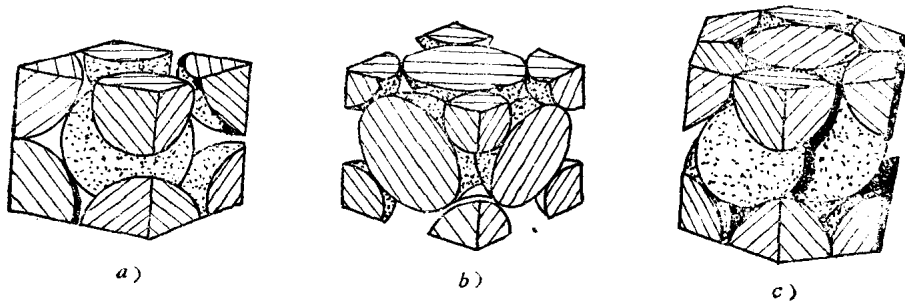


图1-10 三种典型晶胞中原子数计算示意图

a) 体心立方晶胞 b) 面心立方晶胞 c) 密排立方晶胞

有，上下底面中心的原子则同时属于相邻的两个晶胞所共有，只有六方柱体中的三个原子为晶胞所独有，如图1-10c)所示。因此，在密排六方晶格中每个晶胞的原子数为：

$$1/6 \times 12 + 1/2 \times 2 + 3 = 6 \text{ 个}$$

2. 配位数 为定性的评定晶体中原子排列的紧密程度，常用配位数这个概念。所谓配位数就是指晶格中，与任一原子最近邻的等距离的原子数目。显然配位数愈大，晶体中原子排列愈紧密，反之则排列愈疏松。

(1) 体心立方晶格如以立方体中心原子为参照原子来分析，可知其周围和它最邻近的等距离的原子，就是各顶角上的原子，共有八个。此外，其它原子都不与其最近邻，所以体心立方晶格的配位数为8，如图1-11a)所示。

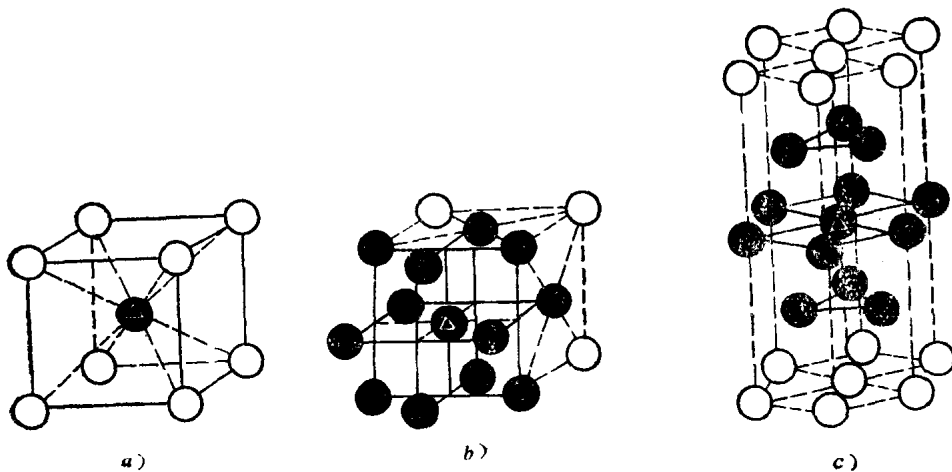


图1-11 常见三种晶格配位数示意图

a) 体心立方晶格 b) 面心立方晶格 c) 密排六方晶格

(2) 面心立方晶格如以立方体中任意一个面心原子为参照原子来分析，可知与其最近邻等距离的原子，应是该原子所在的立方体平面的四个顶角原子，但通过这个平面参照原子

中心的共有三个互相垂直的平面，其原子排列相同，所以与该原子最近邻等距离的原子数共有十二个。即面心立方晶格的配位数为12，如图1-11b)所示。

(3) 密排六方晶格如以底面中心原子为参照原子来分析，则与其最近邻等距离的原子，就是其周围六个顶角的原子，加上底面上下各有三个原子。因此，密排六方晶格的配位数也是12，如图1-11c)所示。若 $c/a \approx 1.633$ 时，在底面中原子间距离与底面上下的各原子间距离不相同，这时有六个为最近邻原子，六个为次近邻原子，则密排六方晶格的配位数常以(6+6)表示之。

3. 原子半径 晶体中的原子半径是一个很重要的参数。以后将会看到，它对探讨合金相结构的有关问题很有用处。

如果将晶体中的原子近似看作具有一定大小的刚性球，则原子半径可以认为是互相接触的两个原子中心距离之半，即最近原子间距之半。据此就不难根据晶格常数的数据推算出原子半径。

(1) 体心立方晶格，体心立方晶胞中只有体对角线上的原子是相互接触的，因此原子半径 r 和晶格常数 a 的关系可根据图1-12a)所示的几何关系求出：

$$4r = AB = \sqrt{a^2 + a^2 + a^2}$$

$$r = \frac{\sqrt{3a^2}}{4} = \frac{\sqrt{3}}{4} a$$

(2) 面心立方晶格，在面心立方晶格中，只有面对角线上的原子是相互接触的，因此其原子半径 r 与晶格常数 a 的关系，可根据图1-12b)所示的几何关系求出：

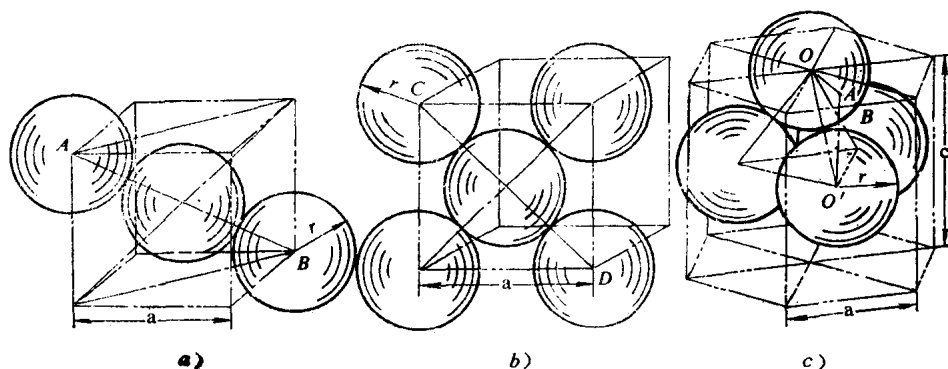


图1-12 常见三种晶格中原子半径计算示意图

a) 体心立方晶格 b) 面心立方晶格 c) 密排立方晶格

$$4r = CD = \sqrt{a^2 + a^2}$$

$$r = \frac{\sqrt{2a^2}}{4} = \frac{\sqrt{2}}{4} a$$

(3) 密排六方晶格，在密排六方晶胞中，若底面上原子间距为 a ，则底面原子和上下邻近原子之间距离 r 与晶格常数 a 、 c 的关系，可根据图1-12c)所示的几何关系求出：

$$2r = OO' = \sqrt{OA^2 + O'A^2}$$

$$\because OA = \frac{2}{3} \quad OB = \frac{2}{3} a \sin 60^\circ = \frac{\sqrt{3}}{3} a$$

$$O'A = \frac{c}{2}$$

$$\therefore r = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}}$$

在理想的情况下，轴比 $c/a \approx 1.633$ 时， $r = a/2$ ，即底面上原子之间的距离和上下层原子间距相等。无论从哪一间距计算原子半径都为 $a/2$ 。

4. 致密度 如上所述，配位数虽然是表征原子排列紧密程度的参数，但它只能定性的评定晶体结构的紧密程度，如果对晶体结构的紧密程度进行定量比较时，则要引用晶体结构的致密度这一参数。

致密度是指晶胞中原子所占有的总体积和晶胞体积之比。可用如下公式表示：

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

式中 K ——晶体结构的致密度；

n ——一个晶胞实际包含的原子数；

U ——一个原子（被看成是刚性球）的体积，其值为 $\frac{4}{3}\pi r^3$ （ r 为该原子半径）；

V ——一个晶胞的体积。

(1) 体心立方晶格 因为 $n=2$ ， $r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$ ， $V=a^3$ 。所以体心立方晶格的致密度 $K_{\text{体}}$ 应为：

$$K_{\text{体}} = \frac{nU}{V} = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi = 0.68$$

这表明，体心立方晶胞中原子所占的体积为68%，而其余32%则为晶胞内的间隙体积。在体心立方晶格中有两种间隙，如图1-13所示。图(a)是扁八面体间隙，位于每个晶胞六面体的中心位置和每个棱的二分之一处，八面体间隙的最小半径 $r_0 = 0.067a$ ；图(b)为四面体间隙，位于两个体心原子和两个顶角原子所组成的四面体中心，四面体间隙半径 $r_0 = 0.126a$ 。

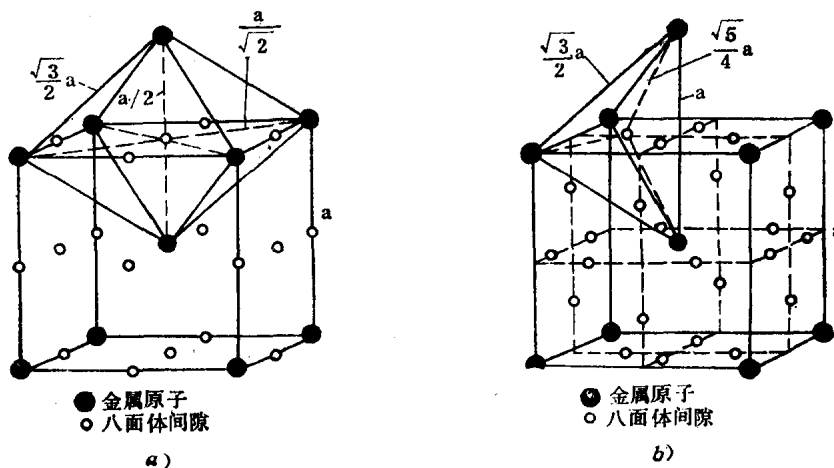


图1-13 体心立方晶格的间隙
a) 八面体间隙 b) 四面体间隙

(2) 面心立方晶格 因为 $n=4$, $r=\frac{\sqrt{2}}{4}a$, $V=a^3$ 。所以面心立方晶格的致密度 $K_{\text{面}}$ 应为:

$$K_{\text{面}} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2}}{4} a \right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{2}}{6} \pi = 0.74$$

即晶胞中原子所占的体积为74%, 而其余26%则为晶胞的间隙体积。在面心立方晶胞中也有两种间隙, 如图1-14所示。图a)为八面体间隙, 间隙的中心位于晶胞的体心位置和晶胞每个棱边的二分之一处, 它是由周围六个原子围成的八面体中心, 故称为八面体间隙。八面体间隙半径 $r_0=0.146a$; 图b)为四面体间隙, 它是由一个顶角原子和相邻的三个面心原子所组成的四面体。四面体间隙半径 $r_0=0.08a$ 。

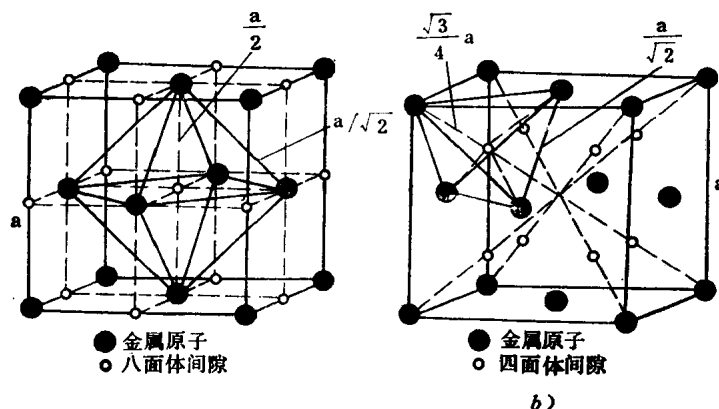


图1-14 面心立方晶格的间隙

a) 八面体间隙 b) 四面体间隙

在八面体间隙和四面体间隙处, 常常可以容纳某些半径比较小的杂质原子或溶质原子,

根据以上分析, 可以看出, 体心立方晶格的总间隙体积虽然大于面心立方晶格, 但每个间隙体积比较小, 而且四面体间隙尺寸大于八面体间隙尺寸。面心立方晶格与此相反, 即四面体间隙尺寸小于八面体间隙尺寸。因此, 在体心立方晶格的间隙中所能容纳的杂质原子或溶质原子往往比面心立方晶格要少。

(3) 密排六方晶格

同理可以算出理想密排六方晶格的致密度 $K_{\text{六}}$ 为0.74。

密排六方晶格中也有两种间隙: 一为八面体间隙, 间隙半径 $r_0=0.207a$; 一为四面体间隙, 其半径 $r_0=0.112a$ 。如图1-15所示。

应当指出, 晶体结构中间隙的数量、位置和每个间隙的大小, 对于了解金属的性能、合金相结构、扩散和

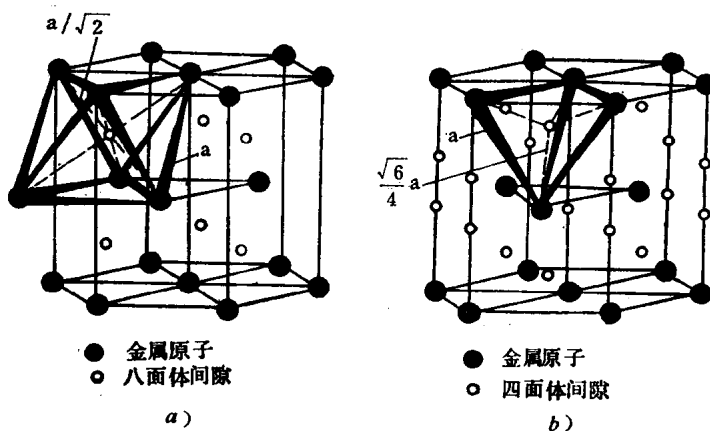


图1-15 密排六方晶格的间隙位置

a) 八面体间隙 b) 四面体间隙