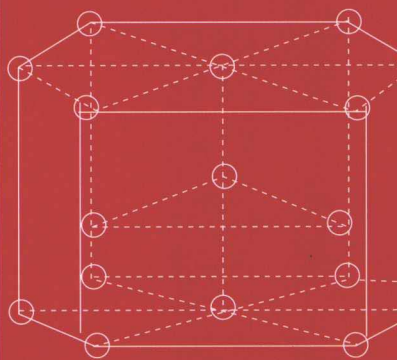
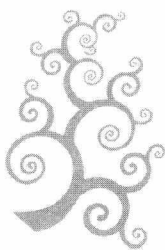


功能材料基础



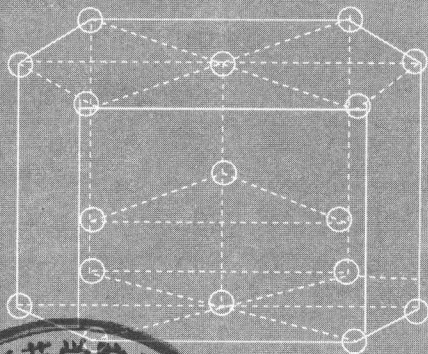
姜左著

中国书籍出版社



姜左著

功能材料基础



中国书籍出版社

图书在版编目(CIP)数据

功能材料基础/姜左著. —北京:中国书籍出版社,2011. 1

ISBN 978-7-5068-2387-6

I. ①功… II. ①姜… III. ①功能材料 IV. ①TB34

中国版本图书馆CIP数据核字(2010)第262086号

责任编辑/王哲

责任印制/孙马飞 张智勇

封面设计/中联华文

出版发行/中国书籍出版社

地址:北京市丰台区三路居路97号(邮编:100073)

电话:(010)52257142(总编室) (010)52257154(发行部)

电子邮箱:chinabp@vip.sina.com

经 销/全国新华书店

印 刷/北京天正元印务有限公司

开 本/710毫米×1000毫米 1/16

印 张/14.5

字 数/261千字

版 次/2011年1月第1版 2011年1月第1次印刷

定 价/30.00元

前 言

材料是人类进步的重要里程碑，历史上的石器时代、青铜器时代、铁器时代都是以材料作为时代的主要标志。材料又一直是技术的进步的主要关键。新型材料、信息技术和生物技术被认为是新技术革命的主要标志。

全书以功能材料为主线。全面系统的研究了各种新型功能材料的基础理论，研究了磁材料、半导体功能材料、超导材料、声功能与光学功能材料、形状记忆合金等功能材料，还介绍了有机导体和金属的生物功能。

鉴于功能材料内容极为广泛，新型功能材料的发展日新月异，内容繁多，难以罗列，不妥之处在所难免，诚望专家和读者赐教。

本书献给苏州市职业大学成立三十周年暨苏州工业专科学校一百周年，本书出版得到了苏州市职业大学出版基金的资助，在此表示感谢。

姜 左
2011 年元月

目 录

CONTENTS

前 言	1
概 述	1
1. 功能材料物理金属学基础	4
1.1 金属晶体	/ 4
1.2 金属的自由电子论	/ 11
1.3 金属晶体中的不完整性	/ 18
1.4 金属的力学性质	/ 26
1.5 金属的物理性能	/ 48
1.6 相变及其动力学	/ 76
1.7 金属与合金中的扩散	/ 89
2. 磁金属材料	96
2.1 磁性的一些概念	/ 96
2.2 磁体的功能与应用	/ 99
2.3 永磁材料	/ 102
2.4 高性能磁芯材料	/ 104
2.5 高密度记录用材料	/ 106
2.6 其他磁性功能材料	/ 109
3. 半导体功能材料	115
3.1 发光材料	/ 115

3.2 吸光材料	/ 119
3.3 非晶态半导体材料	/ 120
3.4 磁性半导体材料	/ 123
3.5 光记录材料	/ 126
3.6 高亮度电子射线发射材料	/ 129
4. 超导材料	131
4.1 高临界温度超导体	/ 132
4.2 已获实际应用的超导材料	/ 133
4.3 超导材料应用举例	/ 136
4.4 非晶态超导体	/ 137
4.5 非平衡条件下的超电导性	/ 140
5. 声功能与光学功能材料	145
5.1 超声波振子材料	/ 146
5.2 声光材料	/ 150
5.3 激光用金属材料	/ 151
5.4 光导纤维与光学薄膜金属材料	/ 158
6. 其他功能材料	164
6.1 储氢合金	/ 166
6.2 减振合金, 破质材料, 超耐蚀材料	/ 169
7. 新的功能金属材料概述	173
7.1 非过渡金属有机化合物	/ 175
7.2 过渡金属有机化合物	/ 184
7.3 聚合物导体	/ 196
8. 金属的生物功能	212
结束语	221

概述

公元前六千年在西亚出现铜制品，公元前三千年就有添加锡的青铜合金，中国古代遗留下来的一些古镜、古剑和钟鼎之类便是由这种合金制成的。用铁代替青铜是在公元前一千五百年才开始，冶金术从十八世纪到十九世纪纳入了以分子论为基础的近代化学体系。十九世纪确立了电磁学的基础，分子物理学和热力学有了很大的发展。人们发现钢铁在高温下也具有高强度，出现了经它做结构材料的蒸汽机，掀起了现代机械文明的巨浪，发生了人类历史上的第一次产业革命。继热能转变为机械能的蒸汽机的出现，将化学能转变为电能的电池也开始问世。人们发现很多金属是电的良导体，电源激发起磁场、铁、钴、镍及其合金等能在此磁场中磁化，这样人们对一直作为结构材料使用的金属合金不仅注重其力学性能，也开始认识其功能特性。根据电的良导体或磁体的金属合金所具有的功能特性为基础，借助于电磁感应现象，制造出机械动力与电力相互转化的发电机和电动机等；将蒸汽的热能和水的势能转变为电能的方便地输配和利用，使机械文明进一步产生新的飞跃。同时热电子现象的发现，进入二十世纪后，人们利用此现象开发了真空二极管和三极管，出现了发射机和收音机。固体物理和固体电子学的发展，晶体的电、磁、光学功能特性被认识和利用，半导体作为电子仪器的元件，超微粒子磁体作为高密度信息信号的记忆元件和记录元件，两者的结合出现了电子计算机，人类进入以电子学为支柱的信息时代。

现代新技术，例如空间、能源、计算机、激光、等离子体、遥感、海洋等技术领域使二十一世纪文明将达到新的高度，对材料的要求已远远超出了结构材料的范围，即不单是利用材料的强度、硬度等力学性能来满足工程结构上的需要，而且对材料提出了许多特殊的物理性能要求。功能材料就是指具有光、电、声、磁、热等特殊物理性能的材料。人们希望随着金属合金、半导体、电介体和超导体等功能金属材料特性研究的进展，能随之制造出具有各种各样功能材料，并不断发展它们在新技术和工业应用。在功能金属材料中包括半导

体和电介体的部分，这是因为我们从等离子体性质来理解金属的涵义，客观事实也确是如此。

从二十世纪情况来看，支持二十一世纪人类文明的能源必然要被无公害的能源所代替，故人们寄希望于核聚变、氢燃料和太阳能。为了实现受控核聚变，解决人类取之不尽、用之不竭、污染少的能源问题，磁约束核聚变封闭等离子体需要大型超导磁体。以无公害的能源氢作燃料，尚要解决水的低成本分解方法和氢的安全储存及运输问题，就后一问题而言，储氢合金的开发是关键。利用太阳能的方法之一是发展太阳电池，非晶硅薄膜很适合于做太阳电池元件。

在电子工业中，除硅、锗外，还有许多化合物半导体，其中许多适于作光电互换元件；随着以 GaAs、GaP 等为基础的、II - VI 族、III - V 族的二元系、三元系、四元系化合物的电子结构和特性研究的进展，关于场致发光二极管，pn 结半导体激光、体效应微波管、能充分发挥光像放大功能的化合物半导体晶体等的开发取得成就；光电子技术的兴起，光通信工作的开展，GaAlAs, GaInAsP 等异质结激光材料的大量应用，光记录材料硫族 (S, Te, Se) 化合物非晶半导体的开发，其他激光技术有关材料的需要。磁体和磁芯材料的稀土金属和过渡金属化合物 SmCo_5 , $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ 的磁性有很大提高，非晶态磁性合金具有高硬度和高弹性以及优良的耐磨性，适于做磁记录用磁头材料；录音、录像和电子计算机用信息的储存等，今后将越来越朝着高密度、高速度方向发展，这种录音磁带的磁性层用的第一磁畴合金微粒需要高矫顽力及高磁通密度；非晶态磁性合金 (CdCo, CdFe 等) 薄膜可作为高密度存储元件用磁泡材料受到重视，将它作为光磁性功能材料或热磁录制功能材料，借助激光照射来存储和调用信息，今后将大力发展。

金属合金或金属化合物所显示的特性除可以作半导体、超导体和磁体之外，还有许多用其他方法难以取代的特异功能，属于这种材料的有：在常温附近热膨胀系数非常小的 invar 合金 (Fe - 36% Ni)；弹性系数几乎不随温度而变化的 elinvar 合金 (Fe - 36% Ni - 12% Cr) 及兼有上两种合金特性的铬基反强磁性 invar 合金 (Cr - 4.3% Fe - 0.5% Mn, Cr - 4% Fe - 0.3% Ir) 等。这些合金的机械强度也相当大且有适宜的可成形性，这些特异性能，对于提高精密机械的精度极其可贵。TiNi、AgCd、Cu - Al - Ni、Cu - Al - Be 等合金在高温下具有像 CsCl 那样的有序晶格结构，而在低温下则发生马氏体相变，但相变产生的体积变化甚小 ($\Delta V/V < 0.5\%$)，生成的马氏体晶体的取向一般是无序的，这类合金具有形状记忆效应。上述形状记忆合金在转变为马氏体状态时，

其固有振动频率很小，不发生金属声，衰减系数大，故可以作为阻尼合金；其他如 Fe - Cr 系合金，在其磁畴壁发生不可逆运动时，随之出现能量损失使振动衰减程度增加，消音合金就是利用这种现象而起阻尼作用的一类合金。

作为精密工业基础是硬度大、强度高、耐超高温或能适应严酷腐蚀环境的材料。硬质合金如有强度高、耐热性能良好的 WC - Co 系烧结合金（例如 TiC - Ni - Mo - TiN）；有陶瓷涂层的硬质合金（在强度高韧性好的 WC - Co 硬质合金表面上用 CVD 等方法涂上耐磨性优良的 TiC, TiN 或 Al_2O_3 等致密薄膜而形成的材料；有硬度接近金刚石而抗氧化能力更好的立方氮化硼（CBN）。TiN 具有同黄金一样的金属光泽及色泽，硬度高、耐腐蚀，于 HCl、 H_2SO_4 或王水中基本上不溶，但由于缺乏延展性，而涂在金属钛板或铁合金板上作为涂层；非晶铁合金如 Fe - 8% Cr - 17% P - 7% C 在 HCl 等环境中的腐蚀速率仅是 18 - 8 不锈钢的百万分之一，完全避免点腐蚀和隙间腐蚀。

在功能金属材料中，金属等离子体特性的作用比金属结构材料更为重要和直接，利用量子金属等离子体理论可以更好地说明现有功能金属材料，还可发现和制造许多新的具有特异功能的功能金属材料。

1. 功能材料物理金属学基础

物理金属学是现代材料科学赖以萌芽的主根，它已有一百多年的历史，它始终与提炼冶金学不可分割地交织在一起并且相互影响。晶体学和矿物学的发展比固态金属科学的发展早，矿物学知识往往能给物理金属学家以基础性的帮助，矿物学家和晶体学家的工作对于金属工作者产生了深远的影响。19 世纪科学、化学、物理、力学等有很大的发展，它们立即在物理金属学家感兴趣的领域内获得了应用。在很多基础科学的领域内，冶金学家做出了许多重要的贡献。冶金学的发展大都起源于金属及合金的新制造方法的迅速发展，在很长的时间内，并没有明显区分提炼冶金学家和物理金属学家。这种区分只是由于知识宝库的迅速增大，专业化成为势在必行的结果。现在科学发展的整体化趋势及科学、技术和生产三位一体熔合，明显的专业化分工将难以适应时代的潮流。理论工作、实验工作及计算工作无法截然分开。

现在人们举目可见《物理金属学》、《冶金学》、《理论金属学》、《金属物理》、《金属学》、《金属材料》等类书籍，其内容都是大同小异，侧重面不同而已。我们在这里只是简单地介绍金属的一些基本知识。

1.1 金属晶体

1.1.1 晶体与非晶体概念

自然界中的各种物质直接考虑组成物质的原子模型，能以不同的物理状态将物质分为有序结构和无序结构两大类。晶体为典型的有序结构；而气体相当于稀释态，液体、非晶固体相当于凝聚态，都属于无序结构。

晶体是指其原子（更确切地说是离子）呈规则排列的物体。晶体之所以具有这种规则的原子排列，主要是由于各原子之间的相互吸引力和排斥力相平衡结果。在自然界中包括金属在内的绝大多数固体都是晶体。金属中，原子或离子是自由电子云联结在一起的，因此每一原子都有趋势与它所有的近邻完全一样地被通过它们之间的自由电子所吸引；而共价晶体中每一原子的近邻数目和位置被定向键和电子对的数目所固定。由于金属中没有这个限制，所以能形成高度致密的结构，即像许多同样大小的球堆积成总体积最小的结构。在金属元素中，约有百分之九十以上的金属晶体都属于体心立方晶格，面心立方晶格，密排立方晶格。

体心立方晶格的晶胞（图 1-1）是由八个原子构成的立方体，并在其立方体的体积中心还有一个原子，因其晶格常数（晶胞的各边尺寸） $a = b = c$ ，故通常只用一个常数 a 表示，由其对角线长度 $\sqrt{3}a$ 上所分布的原子数目（共 2 个），可计算出其原子半径的尺寸为 $r = \sqrt{3}/4a$ 。在这种晶胞中，因为每个顶点上的原子是同时属于周围八个晶胞所共有，故实际上每个体心立方晶胞中仅包含有 $1/8 \times 8 + 1 = 2$ 个原子。属于这种晶格的金属有铁（ $<912^\circ\text{C}$ ， $\alpha\text{-Fe}$ ），铬（Cr），钼（Mo）、钨（W）、钒（V）等。

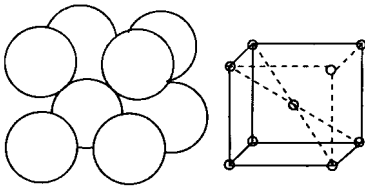


图 1-1 体心立方晶胞

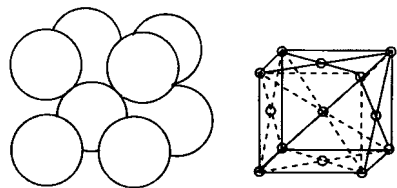


图 1-2 面心立方晶胞

面心立方晶格的晶胞（图 1-2）也是由八个原子构成的立方体，但在立方体的每一面的中心还各有一原子。在这种晶胞中在每个面的对角线上各原子彼此相互接触，故其原子半径尺寸应为 $r = \sqrt{2}/4a$ ，每个面心立方晶胞中有 $1/8 \times 8 + 1/2 \times 6 = 4$ 个原子。属于这类晶格的金属有铝（Al）、铜（Cu）、镍（Ni）、铅（Pb），及 $\gamma\text{-Fe}$ 等。

密排六方晶格的晶胞特性如图 1-3 所示。在六方柱体的 12 个顶角及上下两个六方面的中心各有一个原子，六方柱体的中间还有三个原子。属于这类晶格的金属有铍（Be）、镁（Mg）、锌（Zn）、镉（Cd）等。

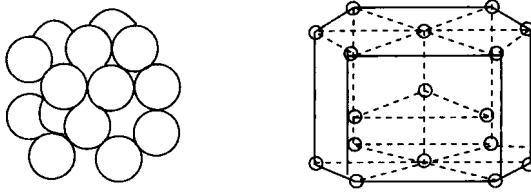


图 1-3 密排六方晶胞

上述简单的晶体结构仅在有一个、两个或可能三个价电子的金属中比较普遍，但也有例外，例如锰和铀等。锰的一种多形体很像体心立方，但每一立方体的角和中心有 29 个原子。金属性较差的元素，如铋、砷和硒，通常具有较复杂的结构，这是因为共价键（电子对结合）在某种程度上代替了金属键（自由电子结合）的结果。

各种晶体物质，由于其原子结构不同，或其晶格形式不同，或其晶格常数不同，所以便出现不同的物理、化学和力学性能。

在液体和非晶态固体中的无序也并不是单纯的“混乱”，而只是破坏了有序系统的某些对称性，形成一种有缺陷的、不完整的有序，“短程有序”是它们的基本特征之一；而在实际的晶体中也不是完全有序的，存在有各种不规则、不完整和缺陷等无序性。非晶态材料是一大类刚性的固体，具有和晶态物质可相比拟的高硬度和高黏滞系数。金属玻璃是其中一大类最受瞩目的非晶态材料，它具有比一般金属高得多的强度，有较高的韧性，一般电阻率很高，还具有优异的抗辐照（中子、 γ 射线等）特性，抗腐蚀性能也很好等。

1.1.2 金属的结晶与非结晶

一般金属制品都要经过熔炼和铸造，都要经过由紊乱无序的液体状态转变成有规则排列的固态晶体的过程，金属进行焊接时，焊缝中也要发生结晶过程。

纯金属的结晶过程是在一定温度下进行的。金属在结晶过程中所释放的热量叫做结晶潜热，由于液体金属放出结晶潜热，补偿冷却过程中散失的热量，可保持温度不变，如图 1-4 出现一水平线段 ab，b 点之后金属全部结晶为固体，ab 线段对应的温度 T_0 称为理论结晶温度。金属发生结构变化的温度叫做临界点。对纯金属来说，开始结晶温度和终止结晶温度是同一临界点。

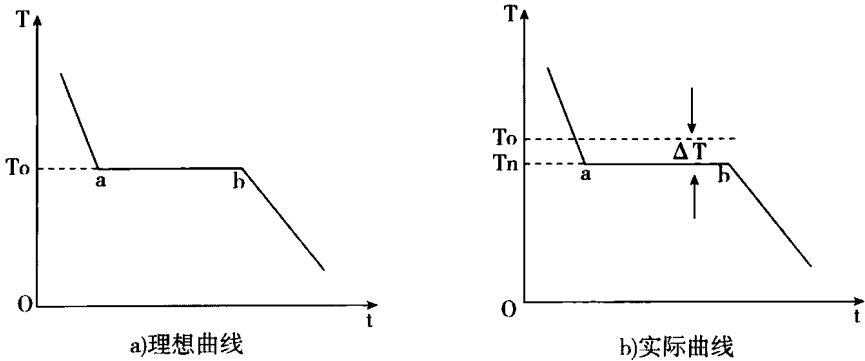


图 1-4 纯金属的冷却曲线

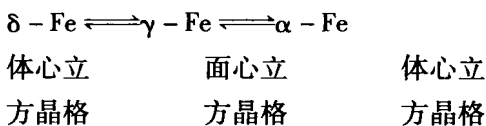
但是在实际生产中，金属结晶不是在温度 T_0 ，而是在温度 T_n ，纯金属的实际结晶温度 T_n 总是低于理论结晶温度 T_0 （熔点）的这种现象叫做过冷， $\Delta T = T_0 - T_n$ 叫过冷度，实验证明，过冷度与冷却速度有关，冷却速度愈大，过冷度就愈大，实际结晶温度就越低。实际上金属总是在过冷的情况下结晶的，过冷是金属结晶的必要条件。

金属结晶的两个基本过程是晶核的形成和晶核的成长，即液态金属结晶时，首先在液体中形成一些极微小的晶体，然后再以它们为核心不断地向液体中长大。这种作为结晶核心的微小晶体叫做晶核。单位时间内单位体积液体中晶核生成的数量叫做形核率。单位时间内晶核生长的线长度叫做长大线速度。由晶核长成的形状不规则的小晶体叫做晶粒，晶粒和晶粒之间的交界叫做晶粒间界（简称晶界）。

影响晶核的形成率和成长率的最重要因素是结晶时的过冷度和液体中的不熔杂质。只有过冷才能满足自由能 $F_{液} > F_{固}$ 的条件 ($F = U - TS$)，结晶才有推动力，在自然界中，所有自发过程总是使系统的能量降低，热力学第二定律表明，在等温等压的条件下一切自发过程都是朝着使系统自由能降低的方向进行；还有液体中原子迁移能力或扩散系数 (D) 也是晶核形成和成长的必需条件。液体中有未溶杂质存在时，金属可沿着这些现成的固体质点表面产生晶核，减小它暴露于液体中的表面积，使表面能降低，其作用远大于加速冷却增大过冷度的影响，故同时具备与一定过冷度相适应的结构起伏（涨落）和能量起伏（涨落）是必需的；结构涨落指液态金属中规则排列的原子集团时聚时散的现象，结晶的实质是通过涨落使具有近程有序（低级有序）的液体转变为具有远程有序（高级有序）结晶的固体。在一定条件下液态金属中近程有序排列的原子集团有可能成为结晶的核心。在液态金属中时聚时散的近程有

序原子集团，是形成晶核的胚芽，叫做晶胚。液体金属结晶时，晶核往往优先依附于难熔杂质的细小质点的表面而形成，这种形核方式叫做异质形核。异质形核的规律与均质形核的规律相同，它也需要过冷才能形核；在一定的过冷度下，也有一定的临界晶核尺寸；过冷度越大，晶核的临界半径越小，形核率也越高。所不同的只是异质形核是依附于杂质表面，而且与均质形核相比较，其所需的表面能较小，所以形核功也较小。在实际生产中金属的结晶主要依靠异质形核。

晶核长大的实质是原子由液体转移到固体。晶核长大的方式与金属固—液界面处的结构有关。生长可以是由界面处的原子过程控制，可以是扩散控制，还可以是层状混合物的生长（胞状沉淀）。根据对界面结构的研究，证明典型金属的固—液界面如以原子大小的微观尺度来衡量是粗糙的，或者说是非光滑的，在这样界面中原子正常位置约有一半是空的，因而液体中的金属原子很易连续而无序地添加到界面上，使固—液界面均匀地推向前进。晶核长大的速度与过冷度成比例，这是金属长大的主要方式。若固—液面用原子大小的微观尺寸衡量是光滑的，由于各种原因可能形成螺旋形台阶或凸缘，此时晶体的长大速度和过冷度的平方成比例。随着固体和液体中温度分布情况的不同，在长大过程中晶体的形状也不相同，如果控制结晶条件，使热量能同时通过固体和液体散失，可以得到负温度梯度，在晶柱上会生出新的分支，得到树枝状晶体，简称枝晶。不含杂质的纯金属只有在温度呈负的温度梯度分布时，才有可能得到树枝晶。但是实际上纯金属中总会存在一些杂质，工业上的高纯铝的纯度也仅为 99.996%，杂质元素会改变结晶前沿的过冷情况，促进树枝晶的发展，故实际生产中金属的结晶多是以树枝状方式长大的。金属的树枝状结晶影响金属材料的力学性能和工艺性能，例如铸造时发达的树枝晶使金属结晶后枝间空隙处容易形成显微缩孔，降低铸锭或铸件的致密性等。有一些金属，如铁、钴、钛、锡等在结晶之后继续冷却时，还会发生结构的变化，从一种晶格转变为另一种晶格（即原子排列方式发生了改变），这种转变叫做同素异构转变。例如纯铁的同素异构转变曲线如图 1-5 所示。其转变过程可概括为



纯铁的同素异构转变是钢铁能够进行热处理的根据，也是钢铁材料多样性能和用途广泛的主要原因。

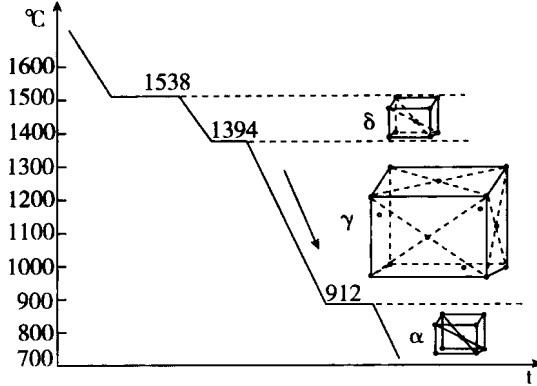


图 1-5 铁的同素异晶转变

金属玻璃现在得到重要应用，非晶态固体的一个基本特征是其构成的原子（或分子）在很大程度上混乱排列，体系的自由能比对应的晶态要高，因而是一种亚稳态，故制备非晶态材料必须形成原子（或分子）的混乱排列状态，并将这种热力学上的亚稳态在一定的温度范围内保存下来使其向非晶态转变。按照 F. Seitz 观点，固体分为金属、离子晶体、共价键晶体、半导体和分子晶体五类，现在前四类都已能用人工方法得到其对应的非晶态材料。制备非晶态的方法很多，如液相急冷和从稀释态凝聚（包括蒸发、离子溅射、辉光放电、电解沉积等），现又发展了离子轰击、强激光辐照和高温爆炸压缩等新技术。金属玻璃的制备方法主要归纳为原子沉积法和液体急冷法两大类。获得玻璃态一般原则是：必须使熔体的冷却速度大于临界冷却速度；必须将金属玻璃冷到或低于它的再结晶温度，严格而言，必须冷到或低于它的玻璃转变温度。众所周知，液体冷却到某一特定温度时（与冷却速度有关）将会发生结晶，在其结晶过程中，体系的自由能降低，并伴随有热量的放出，如果冷却速度很快，以致结晶过程受阻而难于发生，于是能形成非晶态。前面讲述结晶过程取决于成核和晶体生长，所以阻止成核就不会结晶；如果已经成核，但若晶体生长率很慢，也难以结晶而较易形成玻璃态。在液体急冷技术中，冷却速度对液体金属形成金属玻璃起决定性的作用。液体急冷凝固过程中的热流行为很复杂，亚稳液态金属在急剧冷却过程中，与温度有指数关系的黏度随温度的急剧下降而急剧上升。以 T_m 表示热力学熔点温度， T_g 为玻璃态转变温度，则 T_g/T_m 对金属玻璃的形成动力学具有很大影响，在 T_g 温度以上，亚稳态金属的粘度较小，原子的弛豫时间 (τ) 一般小于秒的数量级。黏度与温度关系有： $\eta(T) = \eta_0 \exp(\Delta u^*/TSc)$ ，其中 η_0 是常数， Δu^* 是原子集体运动的势垒， Sc 是组态

嫡。在 T_g 附近 Sc 很小，黏度达到 10^{13} p (泊)，弛豫时间是秒的数量级。当温度升高，黏度降低时， $\eta(T)$ 与温度依赖关系越大，晶化的趋向越大，所有的金属玻璃在达到稳定之前都出现晶化。加热速率对晶化温度 (T_c) 的影响比对 T_g 的影响更大， $T_c - T_g$ 随加热速率增加而增加。可逆流变阻力的增加制止原子的扩散运动，使原子之间的相对流动和原子集团的进一步成核与长大都受到阻碍，金属玻璃有“冻结了”的亚稳液态金属的结构。

1.1.3 合金的结构

虽然纯金属在工业上获得了一定的应用，但由于其性能的局限，远不能满足工业生产的需要。由一种金属元素与一种或数种其他元素熔合在一起所形成的一种具有金属特性的新物质叫做合金。组成合金最简单、最基本、能独立存在的物质称为组元。在一般情况下，组元就是元素，如黄铜中的铜与锌；但在所研究范围内既不分解又不发生任何化学反应的稳定化合物，也可看成为组元，如铁碳合金中的 Fe_3C 就可看作一个组元。所谓二元合金就是由两个组元所组成的合金。如在纯金属的固体中加入其他物质的原子，这些异类原子将调节其位置及晶体结构，使能达到热力学平衡，即自由能达到最低值。根据合金内各组元之间结晶时相互作用不同：它们之间作用与同类原子间作用相同；或相互吸引；或相互排斥。可将合金结构分为固溶体、金属化合物和机械混合物。

凡溶质原子完全溶解于固态（金属）溶剂中所形成的合金相，称为固溶体。固溶体的成分可在一定范围内变化而仍有溶剂金属相同的晶体结构类型，但点阵常数有变化。均匀固溶体的显微组织与纯金属相似，为单相组织，其中的原子键合基本上是金属键。由于溶质原子在溶剂晶格中分布的方式不同，固溶体分为两种类型：置换固溶体和间隙固溶体。置换固溶体指溶质原子取代了一部分溶剂原子而占据着溶剂晶格中的某些结点位置时所形成的固溶体，除了少数原子半径很小的非金属外，绝大多数（金属）元素之间均能形成置换固溶体，其特点是：由于溶质原子与溶剂原子大小有差别，溶质原子的融入势必造成点阵的畸变；溶质原子在溶剂结构中结点上的分布是随机的，统计均匀的，即呈无序分布，置换固溶体中固溶度的大小取决于晶体结构类型、原子尺寸、化学亲和力（负电性）、电子浓度等因素，溶解度还与温度有关。间隙固溶体指溶质的原子很小，能够占据在溶剂点阵中点阵间隙的固溶体，某些原子半径小于 1Å 的非金属元素，如 H (0.46Å)、O (0.60Å)、N (0.70Å)、C

(0.77Å) 和 B (0.97Å) 等溶入过渡族金属中占有间隙位置形成间隙固溶体, 间隙固溶体中, 由于溶质原子的融入, 晶格畸变较大, 点阵常数增大, 故一般固溶度均很小。

合金各组成元素之间相互作用而生成的一种新的, 不同于任一组成元素的、具有金属特性的新物质叫做金属化合物。金属化合物的晶格结构一般较复杂, 其性能特点是熔点高、硬度高、脆性大。例如铁碳合金的组成元素铁的强度 $HB = 80$, 石墨的 $HB = 3$, 而形成的金属化合物 Fe_3C 时的硬度可达 $HB = 800$ 。

机械混合物指各组元在固态时都保持其原来晶格, 只是机械地混合在一起的合金。机械混合物既可是纯金属、固溶体或金属化合物各自的化合物, 也可以是它们之间的混合物, 其性能介于组成机械混合物的各组元之间。工业上常用的许多合金的组织中, 均包含有不同比例的机械混合物, 根据成分的不同, 它们的组织可能是全由机械混合物组成; 也可能是由机械混合物和固溶体或由机械混合物和金属化合物所组成, 如青铜、硅铝明、钢和生铁等。

1.2 金属的自由电子论

金属中的自由电子具有分立的能级, 即电子可能具有的能量是不连续的。电子受到激发时 (热激发或电场激发) 电子只能从一个能级跃迁到另一能级, 而不能具有介于两个相邻能级之间的能量值。同时, 按照泡里不相容原理, 每一个能级上最多可能被两个具有相反自旋的电子占据; 根据能量最小原理, 电子总是处于能量最低的状态, 故在绝对零度下, 电子从最低能级依次填充到各个能级上去。

金属电子理论的目的, 在于用原子理论解释金属和合金的结构和性质。它的发展经历了三个重要的阶段: Drude—Lorentz 的自由电子理论 (1900 年) 假设金属有自由电子, 这些自由电子服从经典力学运动规律; Sommerfeld 的量子自由电子理论 (1928 年) 认为自由电子服从量子规律; Bloch 在 1928 年提出的能带理论考虑到电子是在点阵周期场中运动。大量事实表明, 对于简单金属和半导体, 能带理论能给出半定量或者定量的结果。

虽然现在这个理论的应用很广泛, 但所处理的主要问题, 仍然是结构不敏