

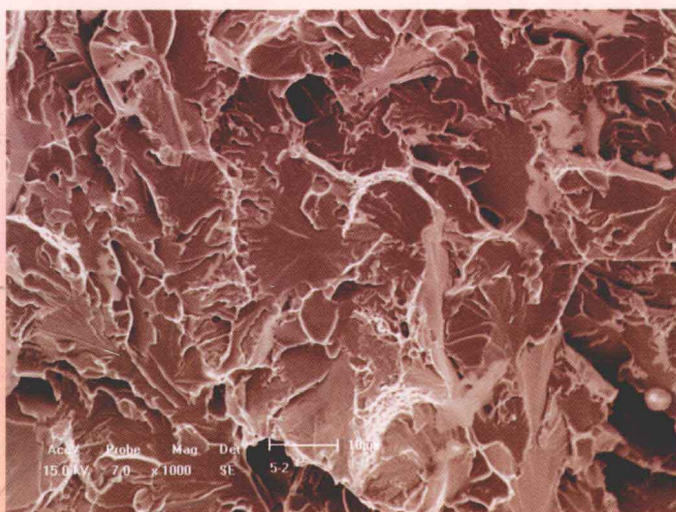


普通高等教育“十二五”规划教材

PUTONG GAODENG JIAOYU "12.5" GUIHUA JIAOCAI

材料结构与力学性质

刘伟东 屈 华 刘秉余 赵荣达 石 萍 编



冶金工业出版社
Metallurgical Industry Press



普通高等教育“十二五”规划教材

材料结构与力学性质

刘伟东 屈 华 刘秉余 赵荣达 石 萍 编

北 京
冶 金 工 业 出 版 社
2012

内 容 提 要

本教材以普通地方高等院校材料专业的学生为授课对象,以通俗易懂为原则介绍了材料微观结构与宏观力学性质的关系。全书共分为6章,第1章介绍了固体材料的原子、电子结构、晶体结构与合金相结构;第2章介绍了晶体中的点缺陷与位错;第3章介绍了材料的表面与界面;第4章介绍了材料的变形、回复与再结晶以及材料的高温变形、黏性和黏弹性变形;第5章介绍了材料常见的强化方法、微观机制和基本理论;第6章介绍了材料断裂的过程和微观机制以及断口分析方法。通过对本教材的学习,学生可以把材料的微观结构与宏观力学性质有机地结合起来,达到基础理论与应用融会贯通的目的,有助于培养学生理论联系实际,分析与解决问题的能力。

本书适用于普通地方高等院校材料类专业师生,也可供相关专业的工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

材料结构与力学性质/刘伟东等编. —北京:冶金工业出版社,2012.8

普通高等教育“十二五”规划教材

ISBN 978-7-5024-5659-7

I. ①材… II. ①刘… III. ①工程材料—结构性能—高等学校—教材 ②材料力学性质—高等学校—教材
IV. ①TB303

中国版本图书馆CIP数据核字(2012)第182800号

出 版 人 曹胜利

地 址 北京北河沿大街嵩祝院北巷39号,邮编100009

电 话 (010)64027926 电子信箱 yjcbs@cnmip.com.cn

责任编辑 李 梅 李 臻 美术编辑 李 新 版式设计 孙跃红

责任校对 卿文春 责任印制 张祺鑫

ISBN 978-7-5024-5659-7

北京百善印刷厂印刷;冶金工业出版社出版发行;各地新华书店经销

2012年8月第1版,2012年8月第1次印刷

787mm×1092mm 1/16;14.5印张;346千字;218页

32.00元

冶金工业出版社投稿电话:(010)64027932 投稿邮箱:tougao@cnmip.com.cn

冶金工业出版社发行部 电话:(010)64044283 传真:(010)64027893

冶金书店 地址:北京东四西大街46号(100010) 电话:(010)65289081(兼传真)

(本书如有印装质量问题,本社发行部负责退换)

前 言

随着我国高等教育改革的迅速发展,不同高等院校根据自己的实际情况在人才培养目标和要求、人才培养模式、课程体系和教学内容、实践教学等方面都有不同的定位。各高等院校的人才培养方向存在差异,一套教材已经很难再供所有高等院校学生使用。一些偏重理论研究的大学倾向选择使用理论性较强的教材,以便为开展高水平科学研究夯实基础,培养更多的研究型人才;而一些偏重应用科学的高等院校则大多选择使用有一定基础理论且注重工程应用的教材,教学效果会更好,有助于培养更多的应用型人才。本教材是针对偏重应用科学的一般普通高等院校的学生而编写的,以材料微观结构与宏观力学性质的关系为主线,注重基础理论的讲授,但不过分强调理论,以通俗易懂为原则。

本教材共分为6章。第1章介绍了固体材料的结构,主要包括固体材料的原子与电子结构、金属与合金的晶体结构和相结构;第2、3章介绍了晶体中的缺陷,主要包括点缺陷、位错、材料的表面与界面;第4章介绍了材料的变形、回复与再结晶、材料的高温变形、黏性和黏弹性变形;第5章介绍了材料常见的强化方法、微观机制和基本理论;第6章介绍了材料断裂的基本过程、微观机制和断口形貌以及分析方法。

本教材第1章中与原子及电子结构相关的知识是同类教材中所没有介绍的,此部分内容对于帮助学生理解合金的力学性质的微观本质具有重要意义。在与“晶体缺陷与力学性质”有关的教材中,与晶体结构及合金相结构知识相关的内容讲述得很少,一般直接讲述晶体缺陷,缺少过渡,学生很难适应。决定材料宏观性质的应该是材料的结构及其缺陷两部分,过分强调缺陷的重要性,而忽略晶体结构,会使学生对知识的掌握存在缺陷,甚至会产生歧义。因此,本教材第1章重点介绍了材料的原子与电子结构、金属与合金的晶体结构和相结构,使学生从电子、原子、晶胞、相、组织等层面全面系统掌握材料的结构。本教材第2、

3章为全书的重点,讲述了晶体中各种缺陷及相关基本理论。本教材第4、5、6章在讲述材料的变形、回复与再结晶、材料的强化理论、材料断裂知识时,分层次循序渐进地辅以前3章的理论分析,使理论与材料的宏观力学性质有机地结合在一起,达到融会贯通的目的。

本教材第2、3章由刘伟东教授编写;第1、5章由屈华副教授编写;第6章由刘秉余副教授编写;第4章4.4节~4.8节由赵荣达博士编写;第4章4.1节~4.3节由石萍教授编写。本教材编写过程中得到了辽宁工业大学齐锦刚教授的指导,在此表示诚挚感谢!

在编写本教材时,参考了很多著作和教材,诸如冯端先生等著的《金属物理学》,胡赓祥、蔡珣主编的《材料科学基础》,崔忠圻、覃耀春主编的《金属学与热处理》等,参考文献如有遗漏,敬请原谅,在此向这些作者表示衷心感谢。

由于编者水平有限、时间仓促,不足之处在所难免,恳请读者批评指正。

编 者

2012年5月

目 录

1 固体材料的结构	1
1.1 引言	1
1.2 材料的原子与状态	2
1.2.1 原子结构	2
1.2.2 自由原子的状态	2
1.2.3 固体与分子中原子的状态	5
1.2.4 原子间的结合	5
1.3 金属及合金的晶体结构	6
1.3.1 三种典型的金属晶体结构	7
1.3.2 三种典型金属晶体结构中的原子堆垛方式	9
1.3.3 三种典型金属晶体结构中的间隙	11
1.4 合金相的分类	13
1.4.1 固溶体	14
1.4.2 金属间化合物	19
习题	20
2 晶体中的点缺陷与位错	22
2.1 引言	22
2.1.1 按缺陷的几何形状和涉及的范围分类	22
2.1.2 按缺陷的形成分类	22
2.2 点缺陷	23
2.2.1 点缺陷的几何组态	23
2.2.2 空位的形成能	25
2.2.3 热平衡状态的点缺陷	26
2.2.4 空位的移动	27
2.2.5 晶体中过饱和点缺陷的产生	29
2.2.6 点缺陷对晶体材料性能的影响	29
2.3 位错及其几何性质	30
2.3.1 位错概念的提出和发展	30
2.3.2 刃型位错与螺型位错	36
2.3.3 位错的柏氏矢量	38
2.3.4 混合型位错	40

2.3.5	位错的运动	40
2.3.6	刃型位错的攀移	43
2.3.7	螺型位错的交滑移	44
2.4	位错的弹性性质	44
2.4.1	螺型位错应力场	45
2.4.2	刃型位错应力场	46
2.4.3	位错的应变能与线张力	47
2.4.4	作用在位错上的力	50
2.4.5	位错间的相互作用力	51
2.4.6	位错的塞积	53
2.4.7	位错与表面的相互作用	55
2.4.8	位错与溶质原子的相互作用	57
2.4.9	位错的点阵模型	59
2.5	位错的交割	65
2.5.1	割阶与扭折	65
2.5.2	几种典型位错的交割	65
2.5.3	带割阶的位错的运动	67
2.6	位错的形成与增殖	69
2.6.1	位错的形成	69
2.6.2	位错的增殖	71
2.7	实际晶体中的位错	74
2.7.1	典型晶体结构中的单位位错	75
2.7.2	堆垛层错	75
2.7.3	面心立方结构中的不全位错	77
2.7.4	位错反应与扩展位错	81
2.7.5	面角位错的形成	84
2.7.6	密排六方结构中的位错	85
2.7.7	体心立方结构中的位错	87
	习题	91
3	材料的表面与界面	93
3.1	引言	93
3.2	材料的表面	93
3.3	材料界面的定义与分类	95
3.3.1	晶界	95
3.3.2	相界	96
3.4	晶界几何	98
3.5	小角晶界	99
3.5.1	小角晶界的结构	99

3.5.2 小角晶界能	101
3.6 大角晶界	103
3.6.1 大角晶界近代模型	103
3.6.2 大角晶界现代模型	105
3.6.3 大角晶界能	109
3.6.4 界面能与显微组织的变化	109
3.7 晶界运动	110
3.7.1 小角晶界的移动	110
3.7.2 大角晶界的运动	111
3.8 晶界对材料性能的影响	112
3.8.1 晶界影响材料性能的因素	112
3.8.2 晶界上的原子偏聚	113
3.8.3 晶界在低温形变与断裂中的作用	113
3.8.4 晶界在高温变形中的作用	114
3.8.5 晶界对金属腐蚀的影响	115
3.9 晶界设计	115
习题	116
4 材料的变形、回复与再结晶	117
4.1 引言	117
4.2 金属材料的拉伸曲线	118
4.3 金属材料的弹性变形	120
4.3.1 虎克定律	121
4.3.2 弹性模量的技术意义	121
4.3.3 影响材料弹性模量的因素	122
4.4 固体的滞弹性与内耗	125
4.4.1 滞弹性概述	126
4.4.2 内耗及其唯象处理	126
4.4.3 内耗研究的某些应用实例	130
4.4.4 用葛氏扭摆法测定金属的内耗	135
4.5 晶体的塑性变形	135
4.5.1 单晶体低温塑性变形的的基本方式	136
4.5.2 晶体的屈服	140
4.5.3 应变时效	142
4.5.4 加工硬化	143
4.5.5 晶体低温塑性变形过程中组织和性能的变化	146
4.6 回复、再结晶与晶粒长大	147
4.6.1 回复	147
4.6.2 再结晶	150

4.6.3 晶粒长大	153
4.6.4 二次再结晶与再结晶织构	154
4.6.5 退火孪晶	154
4.7 晶体的高温变形	154
4.7.1 热加工	154
4.7.2 蠕变	157
4.7.3 超塑性	160
4.8 材料的黏性和黏弹性变形	161
4.8.1 黏性变形	161
4.8.2 黏弹性变形	162
习题	164
5 材料的强化	165
5.1 引言	165
5.2 加工硬化	166
5.2.1 加工硬化的定义	166
5.2.2 加工硬化机理	166
5.2.3 加工硬化的意义	167
5.3 细晶强化	168
5.3.1 细晶强化的定义	168
5.3.2 细晶强化理论	168
5.3.3 细晶强化特点及细化晶粒方法	169
5.4 固溶强化	170
5.4.1 固溶强化的定义	170
5.4.2 固溶强化理论	170
5.5 第二相强化	175
5.6 相变强化	177
5.6.1 共析反应强化	177
5.6.2 马氏体相变强化	178
5.7 复合强化	179
5.7.1 复合材料的分类	179
5.7.2 复合强化机理	180
5.8 强化机理的应用举例	182
5.8.1 低合金高强度结构钢	182
5.8.2 铜及其合金的强化	183
5.8.3 超硬铝的强化	183
习题	183

6 材料的断裂	185
6.1 引言	185
6.2 断口分析	185
6.3 断裂的类型	186
6.3.1 韧性断裂与脆性断裂	186
6.3.2 穿晶断裂与沿晶断裂	187
6.3.3 剪切断裂与解理断裂	189
6.3.4 正断断裂与切断断裂	189
6.4 解理断裂	190
6.4.1 解理断裂的断口特征	190
6.4.2 解理断裂的强度理论	193
6.4.3 裂纹的形成和扩展	196
6.5 微孔聚集型断裂	198
6.5.1 微孔聚集型断裂的断口特征	198
6.5.2 断裂机理	199
6.6 韧性-脆性转变温度	201
6.7 疲劳断裂	202
6.7.1 疲劳的基本概念	202
6.7.2 疲劳寿命曲线	204
6.7.3 疲劳断口	204
6.7.4 疲劳破坏机理	206
6.8 应力腐蚀	209
6.8.1 应力腐蚀现象及其产生条件	209
6.8.2 应力腐蚀断裂机理及断口形貌	210
6.8.3 应力腐蚀抗力指标	211
6.8.4 防止应力腐蚀的措施	212
6.9 腐蚀疲劳	213
6.9.1 腐蚀疲劳及特点	213
6.9.2 腐蚀疲劳机制	214
6.10 氢脆	215
6.10.1 氢在金属中的存在形式	215
6.10.2 氢脆类型	215
6.10.3 氢脆机理	216
6.10.4 防止氢脆的措施	216
习题	216
参考文献	218

1 固体材料的结构

本章提要：材料科学的核心问题是材料的结构和性能的关系，材料结构决定了材料的性能。材料结构可分原子（电子）结构、原子组成的晶体结构和合金相组成的显微结构三个层次。本章介绍了组成固体材料的原子的结构及其状态，金属及合金的晶体结构，合金相及其分类。应重点掌握固体与分子中原子的状态、三种典型的金属晶体结构及其原子堆垛方式和间隙，掌握固溶体的基本特征和力学性能特点及其影响因素，了解金属间化合物的性能特点及其分类。

1.1 引言

材料是人类社会所能接受的、可经济地制造有用器件或物品的物质。材料科学是研究材料的组织结构、性质、生产流程和使用效能，以及它们之间相互关系的科学。材料科学是多学科交叉与结合的与工程技术密不可分的应用科学。材料科学的核心问题是材料的结构和性能的关系，材料科学的研究对象是材料的结构和性能。材料结构可分为三个层次，第一个层次为原子（电子）的结构，即原子中电子围绕原子核运动的情况；第二个层次为原子在空间的排列；第三个层次为材料的显微结构，即显微镜下所观察到的构成材料的各相的组合图像。

材料的种类繁多，可以根据化学组成、状态、作用和使用领域进行分类。以其最基本的结构单元——原子间的主要化学键可分为三类：以金属键结合的金属材料；以离子键和共价键为主要键合方式的无机非金属材料；以共价键为主要键合方式的高分子材料。

材料的性能指的是材料受到外界作用时的行为。材料的性能可分为简单性能和复杂性能两大类。简单性能包括物理性能、化学性能和力学性能，主要包括材料的热导率、吸声性能、折射率、介电常数、磁导率、抗辐射性能、强度、弹性、塑性、韧性、抗氧化性、抗腐蚀能力、抗渗入性等性能。复杂性能是指工艺性、使用性能和简单性能的复合性能，主要包括切削性、耐磨性和高温疲劳强度等。

材料科学的研究任务是对材料的结构和性能进行分析，并研究结构和材料性能的关系，为材料性能的改进和新材料的开发提供指导。材料科学的研究方法分为理论研究方法和实验研究。材料的结构决定了材料的性能。固体材料的性能取决于其微观的化学成分、组织和结构，化学成分不同的材料具有不同的性能，而相同成分的材料经不同处理具有不同的组织、结构时，也将具有不同的性能。而在化学成分、组织和结构中，结构是最关键的因素。

1.2 材料的原子与状态

决定材料性能最根本的因素是组成材料的各元素的原子结构，包括原子间的相互作用、结合方式，原子或分子在空间的排列分布和运动规律以及原子集合体的形貌特征等。

1.2.1 原子结构

原子结构直接影响原子间的结合方式。原子是由质子和中子组成的原子核以及核外的电子所构成的。原子核内有中子和带正电的质子，因此原子核带正电荷。由于静电吸引作用，带负电荷的电子被牢牢地束缚在原子核周围。每个电子和质子所带的电荷相等。因为原子中电子和质子的数目相等，所以从整体来说，原子是电中性的。

原子 = 原子核（正电）+ 电子（负电，若干），就像星系 = 恒星（一个）+ 行星（若干），电子在空间的分布形成了包围着核的若干壳层。

原子的体积很小，直径约为 10^{-10}m （Å 量级）数量级，而其原子核的直径更小，仅为 10^{-15}m 数量级。然而，原子的质量却主要集中在原子核内。因为每个质子和中子的质量大致为 $1.67 \times 10^{-24}\text{g}$ ，而电子的质量约为 $9.11 \times 10^{-28}\text{g}$ ，仅为质子质量的 $1/1836$ 。相对原子质量为元素的平均原子质量与核素 ^{12}C 原子质量的 $1/12$ 之比，单位是 g/mol 。

元素的原子序数等于原子中的电子或质子数，因此，有 26 个电子和 26 个质子的铁原子，其原子序数为 26。原子核内含有不同中子数的相同元素的原子称为同位素，它们有着不同的相对原子质量。这种元素的原子质量是这些同位素质量的平均值，因此相对原子质量可能不是一个整数。

1.2.2 自由原子的状态

电子在空间的分布形成了包围着核的若干壳层，Na 的原子结构中 K、L、M 量子壳层的电子分布状况见图 1-1。

原子中电子的运动状态可用 4 个量子数来描述，它们分别是：主量子数 n ，轨道角动量量子数 l ，轨道的空间取向磁量子数 m ，电子自旋量子数 s 。

(1) 主量子数 n 。 $n=1$ ，电子在 K 层； $n=2$ ，电子在 L 层； $n=3$ ，电子在 M 层； $n=4$ ，电子在 N 层； $n=5$ ，电子在 O 层； $n=6$ ，电子在 P 层； $n=7$ ，电子在 Q 层。

(2) 轨道角动量量子数 l 。每个壳层有若干个电子轨道，每个轨道对应一定的轨道角动量，用角量子数 l 表示。 $l=0$ ，电子在 s 轨道； $l=1$ ，电子在 p 轨道； $l=2$ ，电子在 d 轨道； $l=3$ ，电子在 f 轨道。

K 层只有 s 轨道，L 层有 s、p 两种轨道，M 层有 s、p、d 三种轨道，N 层有 s、p、d、f 四种轨道，O 层有 s、p、d、f 四种轨道，P 层有 s、p、d、f 四种轨道，Q 层有 s、p 两种轨道。s 轨道的形状为球形，p 轨道的形状为 3 个互相垂直的 8 字形，d 轨道的形状较为

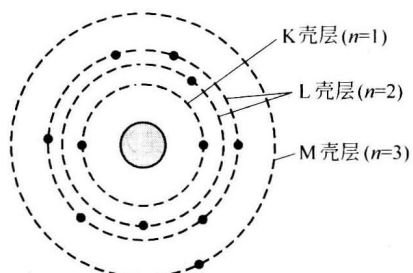


图 1-1 钠原子结构中 K、L、M 量子壳层的电子分布状况

复杂。s、p、d 原子轨道的形状如图 1-2 所示。

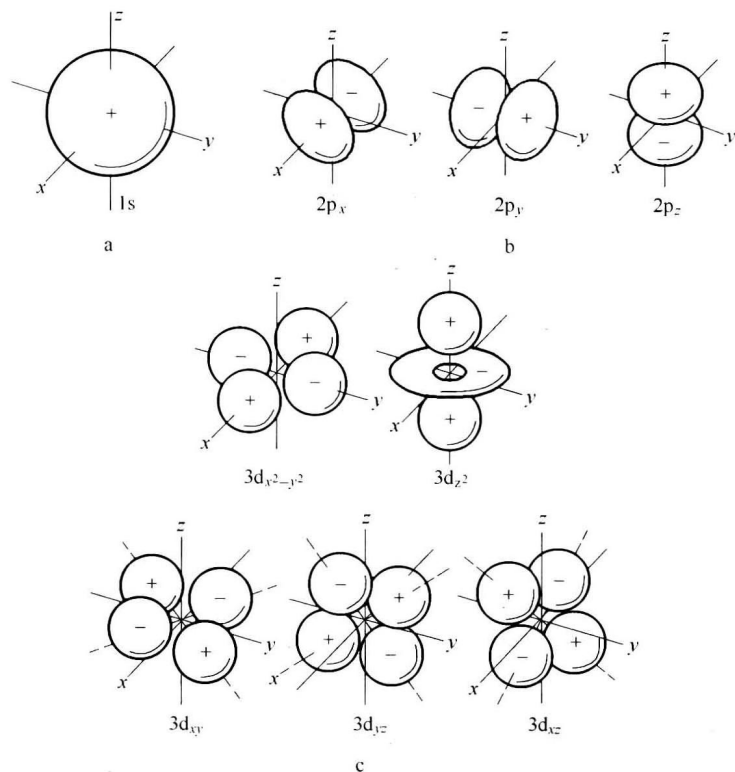


图 1-2 原子轨道三维图形
a—s 轨道；b—p 轨道；c—d 轨道

(3) 轨道的空间取向磁量子数 m 。磁量子数 m 表征轨道的空间取向特征。对于给定的角量子数 l , $m_{\text{值数}} = 2l + 1$ 。对于 N 层的 s、p、d、f 四种轨道, s 轨道 $l = 0$, $m_{\text{值数}} = 2 \times 0 + 1 = 1$, s 轨道是球形, 有 1 种空间取向, $m = 0$; p 轨道 $l = 1$, $m_{\text{值数}} = 2 \times 1 + 1 = 3$, p 轨道是 3 个互相垂直的 8 字形, 有 3 种空间取向, $m = 1, 0, -1$; d 轨道 $l = 2$, $m_{\text{值数}} = 2 \times 2 + 1 = 5$, d 轨道有 5 种空间取向, $m = 2, 1, 0, -1, -2$; f 轨道 $l = 3$, $m_{\text{值数}} = 2 \times 3 + 1 = 7$, f 轨道有 7 种空间取向, $m = 3, 2, 1, 0, -1, -2, -3$ 。

(4) 电子自旋量子数 s 。电子除了在轨道上绕核运动外, 还被认为有自转运动, 因而引入自旋量子数, $s = 1/2$ 上自旋, $s = -1/2$ 下自旋。

多电子的原子中, 核外电子的排布规律遵循 3 个原则, 即 Pauli 不相容原理、能量最低原理、Hund 规则。具体如下:

(1) Pauli 不相容原理。任何两个电子的运动状态都不能具有 4 个完全相同的量子数, 因此, 在同一个轨道上最多只能容纳 2 个电子, 且它们的自旋方向必须相反。

依此原理可以推算出: 每个壳层内最多可容纳 $2n^2$ 个电子。

(2) 能量最低原理。原子中的电子处于原子核的中心势场中, 核与电子之间存在库仑相互作用 (与距离有关), 离核越近电子的能量越低, 具有较低能量的电子状态比具有较高能量的状态更稳定。

如图 1-3 所示, 在可能的条件下, 电子填充时总是趋向于最稳定的状态, 即能量尽可能低的状态。原子的核外电子能级决定了原子中电子填充的顺序, 如图 1-4 所示。

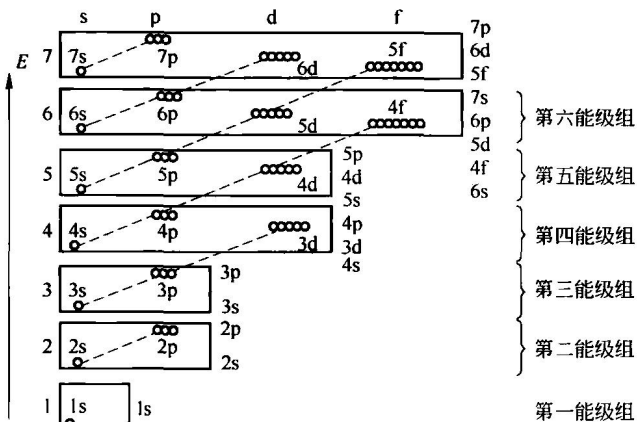


图 1-3 原子核外电子近似能级示意图

(3) Hund 规则。占有相同能量的轨道的电子尽可能保持自旋方向相同, 在自旋方向相同的电子数尽可能多的前提下, 电子尽可能分占不同的轨道。Hund 规则即是最多轨道原则, 决定了原子中的电子数不足以把轨道完全填满时将按什么方式来填充。

原子的状态可以分为定态、基态与激发态。

(1) 定态。原子是一种稳定存在的体系, 即原子体系处于稳定的状态。任何一个原子都具有一系列的定态, 每个定态对应着体系的一个能量确定值。

(2) 基态与激发态。基态对应着所有原子状态中能量值最低的那个原子状态。激发态为除基态以外的所有原子状态。低激发态为能量较低的激发状态, 高激发态为能量较高的激发状态。

(3) 电子组态对原子状态的影响。对于一个给定的原子来说, 它的各种不同的原子状态都起因于其未满壳层中电子排布的变化。因此, 在描述原子状态时, 所给出的原子中电子的组态不需要全部的电子组态, 而只是需要在满壳层以外的那些未满壳层或亚壳层 (s、p、d 轨道) 中的电子组态。

未满壳层或亚壳层即是价电子层。

原子 = 原子芯 + 价电子层

例: Fe 原子的电子组态为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$ 。

(4) 与基态相联系电子组态。周期表中所给电子组态是原子基态所对应的电子组态。

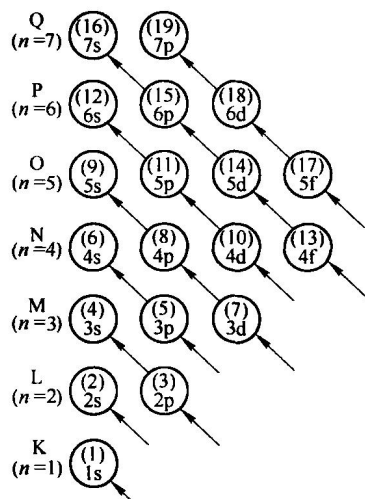


图 1-4 电子填入原子轨道顺序

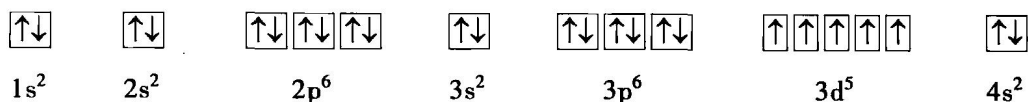
1.2.3 固体与分子中原子的状态

1.2.3.1 价电子层

原子中的电子壳层 = 闭壳层 + 价电子层

闭壳层是指被电子完全填满的内部壳层。价电子层是指未满壳层以外的壳层，包括未满壳层。

周期表给出的 Fe 电子组态为 $3d^6 4s^2$ ，即 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$ ，可表示如下：



3d 有 5 个轨道 6 个电子，怎么填充呢？

当自由原子进入固体与分子中时，原子间的相互作用将引起原子内电子状态的复杂变化，这些变化主要是发生在价电子层中。原子内部的闭壳层中的电子将基本上与原来的自由原子状态保持一致，因此，在讨论原子状态变化时将不予考虑，只考虑价电子层即可。

1.2.3.2 价电子与原子价态

价电子是指处于价电子层中的电子。价的概念来自于化学上一种元素与另一种元素化合时的相对比值。例： H_2O ，H 为 +1 价，则 O 为 -2 价。价的正负性是相对离子化合物中正负离子的价而言的。

原子的价数取决于价电子层中电子的组态，就是原子在正常的基态或某个容易达到的价态（激发态）所具有的电子单占据轨道的数目。

单占据轨道是指被一个电子占据的轨道。从上面的定义可以看出，原子的价是可以变化的。正常价态是指对应原子基态的价电子组态所给出的原子价态，亦可称为自然价态。假如一个原子基态的价电子组态为 $ns^2 np^2$ ，则有两个单占据轨道 $np_x np_y$ ，因此，其自然价态是 2 价。但在实际的固体与分子中，这些元素有可能以 $ns^1 np^3$ 的价电子组态出现，此时有 4 个单占据轨道 $ns np_x np_y np_z$ ，则 4 价是其激发态的价态。

1.2.4 原子间的结合

分子和固体是多粒子体系，在多粒子体系中各粒子（原子、分子或离子）之间存在强烈的相互作用，这种作用就是化学键。相互吸引作用与相互排斥作用达到平衡，构成稳定的分子或固体体系。吸引作用从本质上讲是一种电磁相互作用，随原子间距离的变化而改变。

1.2.4.1 金属键

当金属晶体内组成原子的外层价电子全部或部分离开原来的原子而在整个晶体中运动，即价电子为整个晶体公有时，整个晶体就可看做是许多的正离子浸泡在由公有化电子形成的负电子云的海洋之中。在金属晶体内负电子云和正离子实之间存在库仑相互作用，这种作用就是金属键。

金属键的基本特点是电子的公有化。金属键既无饱和性也无方向性，因而每个原子都

有可能同更多的原子相结合,并趋于形成低能量的密堆结构。当金属受力变形而改变原子之间的相互位置时,金属键不至于被破坏,这就使金属具有良好的延展性,并且由于自由电子的存在,金属一般都具有良好的导电和导热性能。

金属键的本质可以解释固态金属的一些特性:

- (1) 导电性。自由电子沿着电场方向定向运动。
- (2) 导热性。自由电子运动和正离子振动。
- (3) 正电阻温度系数。温度升高,正离子或原子本身运动幅度加大,阻碍电子通过。
- (4) 金属光泽。自由电子易吸收可见光能量而跃迁到较高能级,当它跳回原来的能级时,辐射可见光。
- (5) 延展性。金属键没有方向性和饱和性,当金属的两部分发生相对位移时,金属的正离子始终被包围在电子云中而保持着金属键的结合,金属能经受变形而不发生断裂。

1.2.4.2 离子键

若分子和固体的组成单元不是电中性的原子而是带正电或负电的正、负离子,此时通过正负离子的相互排列,每个离子都与最近邻的异性离子彼此产生库仑吸引作用,这种正负离子间强烈的静电库仑吸引作用就是离子键。大多数盐类(NaCl)、碱类(NaOH)和金属氧化物(Fe_3O_4)主要以离子键的方式结合。

离子键键合的基本特点是以离子而不是以原子为结合单元。一般离子晶体中正负离子静电引力较强,结合牢固,因此其熔点和硬度均较高。另外,在离子晶体中很难产生自由运动的电子,因此它们都是良好的电绝缘体。但当处在高温熔融状态时,正负离子在外电场作用下可以自由运动,即呈现离子导电性。

1.2.4.3 共价键

当两个原子相互靠近时,原子中某些电子的波函数(原子轨道)彼此发生重叠。若重叠的两个原子间电子密度增加,则将引起两个原子间强烈的相互吸引作用,这种作用就是共价键。共价键是两个或多个电负性相差不大的原子通过共用电子对而形成的。

共价键键合的基本特点是核外电子云达到最大的重叠,形成共用电子对,有确定的方位,且配位数较小。共价键在亚金属(碳、硅、锡、锗等)、聚合物和无机非金属材料中均占有重要地位。共价晶体中各个键之间都有确定的方位,配位数比较小。共价键的结合极为牢固,故共价晶体具有结构稳定、熔点高、质硬脆等特点。由共价键形成的材料一般是绝缘体,其导电性能差。

共价键、离子键、金属键是对实际分子和固体中原子间相互作用的极端情况的描述,在实际的分子和固体中,大多数情况下原子间的相互作用介于这些极端的相互作用之间。

1.3 金属及合金的晶体结构

固体材料可分为晶体与非晶体,金属材料在通常情况下都是晶体。晶体的特性是相对于非晶体而言的。晶体与非晶体的区别不在于外形,而在于内部原子排列情况。晶体中的原子按一定的规律周期性地重复排列,而非晶体中的原子散乱分布,最多局部会出现一些

短程规则排列。晶体有固定的熔点，不同方向上性能有或大或小的差异，即晶体具有各向异性。但晶体与非晶体在一定条件下是可以相互转化的，例如玻璃经过长时间高温加热可以转化为晶态玻璃，液态金属经极快冷却可转化为非晶态金属。

金属材料的突出特性是具有金属光泽，高的导电性和导热性，较好的机械强度和塑性，正的电阻温度系数等。金属的这些性能并不完全取决于单个原子的结构及原子间的键合，而是与其晶体结构密切相关。原子的排列方式对材料的结构和性能有十分重要的作用。例如，铝的原子排列方式使得铝具有良好的塑性，而铁的原子排列方式使得铁具有很好的强度。

1.3.1 三种典型的金属晶体结构

晶体结构是指晶体中原子（或离子、分子、原子集团）的具体排列情况，也就是晶体中这些质点（原子、离子、分子、原子集团）在三维空间有规律的周期性的重复排列方式。金属及合金的晶体结构比较简单，其中最典型、最常见的金属晶体结构有3种类型：体心立方结构、面心立方结构和密排六方结构。

1.3.1.1 体心立方结构

体心立方结构，简称为 bcc，又称为 A_2 结构，具有体心立方结构的金属有 α -Fe、Cr、V、Nb、Mo、W 等约 30 多种。

体心立方晶格的晶胞模型见图 1-5。晶胞的 3 个棱边长度相等，3 个轴间夹角均为 90° ，构成立方体。除了在晶胞的 8 个角上各有一个原子外，在立方体的中心还有一个原子。

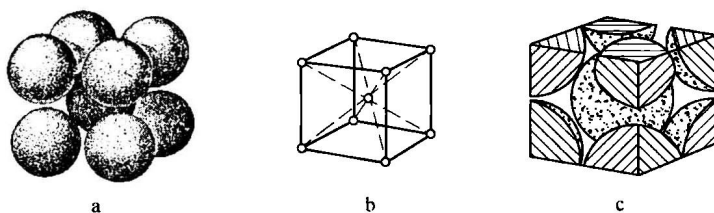


图 1-5 体心立方晶格的晶胞模型
a—刚球模型；b—质点模型；c—晶胞原子数

在体心立方晶胞中，原子沿立方体的体对角线紧密地接触着，如图 1-5a 所示。设晶胞的点阵常数（或晶格常数）为 a ，则立方体的体对角线的长度为 $\sqrt{3}a$ ，等于 4 个原子半径，所以体心立方晶胞中的原子半径 $r = \sqrt{3}a/4$ 。

由于晶格由大量晶胞堆垛而成，因而晶胞每个角上的原子为与其相邻的 8 个晶胞所共有，故只有 $1/8$ 个原子属于这个晶胞，晶胞中心的原子完全属于这个晶胞，所以体心立方晶胞中的原子数为 $8 \times (1/8) + 1 = 2$ ，如图 1-5c 所示。

晶胞中原子排列的紧密程度也是反映晶体结构特征的一个重要因素，通常用两个参数来表征：一个是配位数，另一个是致密度。

配位数是指晶体结构中 与任一原子最近邻、等距离的原子数目。显然，配位数越大，