

中等专业学校试用教材

金 属 学

山东省机械工业学校 陆景贤 编

ZHONGDENG
ZHUANYE
XUEXIAO
JIAOCAI



机械工业出版社

前 言

本教材是根据1987年5月原国家机械委教育局制定的中等专业学校热处理专业教学计划（招收初中毕业生，四年制）与《金属学》课程教学大纲编写的。

本教材对金属及合金的晶体结构、固态金属中的扩散及金属的结晶、塑性变形、再结晶、二元及三元相图都作了较为详细的讨论；同时也介绍了有关碳素钢、铸铁、非铁金属材料的基础知识。

本教材由陆景贤编写，由席志刚主审。参加审稿的还有武秀清、韦玉屏、刘玉春等老师。

本教材采用了法定计量单位及最新国家标准，每章后附有复习题。

由于编者水平有限，疏漏及错误在所难免，恳请读者不吝赐教。

编者 1989年5月

目 录

绪论	1	六、其它因素	47
第一章 金属及合金的晶体结构	3	§ 2-4 扩散机制	48
§ 1-1 金属的概述	3	一、间隙扩散	48
一、金属的特性	3	二、空位扩散	48
二、金属原子结构特点	3	三、换位扩散	49
三、金属键	4	四、位错扩散	49
四、原子间的作用力与结合能 (作用能)	5	§ 2-5 扩散应用	50
§ 1-2 金属的晶体结构	5	复习题	50
一、晶体结构的基本知识	5	第三章 金属的结晶	51
二、金属中常见的三种晶体结构	8	§ 3-1 金属结晶的基本规律	51
三、表示晶体结构特征的几个参数	9	一、热分析实验与冷却曲线	51
四、晶面指数与晶向指数	15	二、过冷现象与过冷度	52
§ 1-3 实际晶体结构及其对性能 的影响	20	三、结晶的一般规律	53
一、点缺陷	20	§ 3-2 金属结晶的理论分析	54
二、线缺陷	21	一、结晶的能量条件	54
三、面缺陷	25	二、结晶的结构条件	55
§ 1-4 合金的相结构	27	三、晶核的形成	56
一、固溶体	28	四、晶核的长大	59
二、金属化合物	33	§ 3-3 金属结晶后的晶粒大小	61
复习题	37	一、晶粒大小与其性能的关系	61
第二章 固态金属中的扩散	39	二、影响晶粒大小的因素	62
§ 2-1 扩散概述	39	§ 3-4 铸锭的组织	63
一、扩散现象	39	一、铸锭的组织及其形成	63
二、扩散的本质	39	二、铸锭中三层组织的性能	64
三、固态扩散的条件	39	§ 3-5 金属的同素异构转变	64
四、固态扩散的分类	40	复习题	66
§ 2-2 扩散定律	41	第四章 金属的塑性变形与再结晶	67
一、扩散第一定律	41	§ 4-1 单晶体的塑性变形	67
二、扩散第二定律	42	一、单晶体的弹性变形	67
§ 2-3 影响扩散的因素	44	二、单晶体的塑性变形	68
一、温度	45	§ 4-2 多晶体的塑性变形	76
二、固溶体类型	45	一、晶界的影响	76
三、晶体结构	46	二、晶粒间位向差的影响	77
四、合金元素	46	§ 4-3 合金的塑性变形	78
五、缺陷	47	一、固溶体合金的塑性变形特点	78
		二、两相合金的塑性变形特点	79
		§ 4-4 塑性变形对合金组织和性能	

的影响	80	§ 5-6 其它类型的相图	115
一、对组织结构的影响	80	一、二组元形成化合物的相图	115
二、对机械性能的影响	82	二、具有固态转变的二元相图	117
三、产生内应力	83	§ 5-7 相图规律和使用	117
§ 4-5 回复与再结晶	84	一、二元合金相图遵循的规律	117
一、回复	84	二、复杂二元合金相图的分析方法	118
二、再结晶	84	三、根据相图分析合金热处理的 可能性	120
三、晶粒长大	85	四、根据相图判断合金的性能	121
四、影响再结晶后晶粒大小的因素	85	五、应用相图时应注意的几个问题	121
五、再结晶组织与退火孪晶	87	复习题	122
§ 4-6 金属的热塑性变形	88	第六章 铁碳合金相图	125
一、金属的热加工与冷加工	88	§ 6-1 铁碳合金的组元和相	125
二、热加工对钢组织和性能的影响	88	一、铁碳合金的组元	125
复习题	90	二、铁碳合金中的基本相	127
第五章 二元合金相图	92	§ 6-2 铁碳相图分析	128
§ 5-1 有关合金相图的一般知识	92	§ 6-3 典型合金的结晶过程及其组织	131
一、系	92	一、结晶过程分析	131
二、相图	92	二、按组织分区的铁碳相图	138
三、相律	92	§ 6-4 铁碳相图的应用	138
§ 5-2 二元合金相图的建立	93	一、在钢铁选材方面的应用	138
一、单元相图的表示法	93	二、在制定热加工工艺方面的应用	139
二、二元合金相图的表示法	93	复习题	140
三、二元合金相图的测定方法	95	第七章 碳素钢	141
§ 5-3 匀晶相图	96	§ 7-1 碳及杂质对钢性能的影响	141
一、Cu-Ni合金相图的相区分析	96	一、碳的影响	141
二、合金的平衡结晶	97	二、杂质的影响	141
三、杠杆定律	97	§ 7-2 碳素钢	143
四、合金的不平衡结晶	99	一、普通碳素结构钢	143
五、匀晶型相图的其它形式	100	二、优质碳素结构钢	144
§ 5-4 共晶相图	101	三、碳素工具钢	148
一、相图分析	101	四、易切结构钢	149
二、典型合金的平衡结晶及其组织	103	五、铸钢	150
三、共晶组织和初晶的形态	106	复习题	151
四、不平衡结晶及其组织	109	第八章 三元合金相图	152
五、区域偏析	110	§ 8-1 三元合金的成分表示法	152
六、共晶型相图的其它形式	111	一、用直角坐标表示	152
§ 5-5 包晶相图	111	二、用三角形表示成分	152
一、相图分析	112	§ 8-2 三元系的直线定律	154
二、典型合金的平衡结晶及其组织	112	一、直线定律	154
三、包晶合金的不平衡结晶	113	二、重心定律	155
四、利用包晶转变细化晶粒	114	§ 8-3 三元匀晶相图	155
五、包晶型相图的其它形式	115		

一、相图分析	155	§ 9-4 可锻铸铁	188
二、等温截面	156	一、可锻铸铁的化学成分、组织和性能	189
三、变温截面	158	二、可锻铸铁的牌号和用途	191
§ 8-4 简单三元共晶相图	159	§ 9-5 特殊性能铸铁	192
一、相图分析	159	一、耐磨铸铁	192
二、等温截面及合金O的结晶过程	160	二、耐热铸铁	193
三、变温截面	162	三、耐蚀铸铁	194
四、综合分析	163	复习题	194
§ 8-5 三元相图实例	165	第十章 非铁金属及其热处理	195
一、锡—铅—铋合金相图	165	§ 10-1 铝及其合金	195
二、铁—碳—硅三元系合金的变温截面	167	一、铝的性能特点	195
复习题	168	二、铝合金的分类	196
第九章 铸铁	170	三、铝合金的热处理原理	196
§ 9-1 铸铁的石墨化	171	四、形变铝合金及其热处理	199
一、铁—石墨相图	171	五、铸造铝合金及其热处理	205
二、石墨化过程	173	§ 10-2 铜及其合金	210
三、影响石墨化的因素	174	一、纯铜	210
§ 9-2 灰口铸铁	176	二、黄铜	210
一、灰口铸铁的化学成分、组织和性能	176	三、青铜	216
二、金相组织的分类和评级	178	§ 10-3 滑动轴承合金	224
三、灰口铸铁的牌号和用途	181	一、滑动轴承的工作条件及要求	224
四、灰口铸铁的孕育处理	182	二、锡基轴承合金	224
§ 9-3 球墨铸铁	183	三、铅基轴承合金	225
一、球墨铸铁的组织 and 性能	183	四、铝基轴承合金	226
二、球墨铸铁的球化处理和孕育处理	185	复习题	227
三、球墨铸铁金相组织的评级	186	化学元素周期表	228
四、球墨铸铁化学成分、牌号和用途	187		

绪 论

一、金属学研究的对象与任务

金属学是研究金属及合金的成分、结构、组织和性能之间的关系及其变化规律的学科。

金属学的任务在于建立合金的成分、结构、组织和性能之间的对应关系；建立组织的形成和变化与处理条件之间的对应关系，以利用这些规律来指导科学研究和生产实践。在这些规律的基础上，通过改变和控制合金的成分，选用各种适当的工艺手段，以便有效地发挥现有金属材料的性能潜力，并进而按照给定性能要求研制新的合金，以满足国民经济各部门对金属材料的要求。

二、金属学发展简史及我国在金属学方面的成就

金属学是由早期的金相学、物理化学以及材料力学等相结合而发展起来的一门独立的学科。人类在研制和应用金属材料的初期，就已开始积累有关金属材料的性能、成分、加工处理和质量检验等方面的知识，并逐步探索其相互间的联系和规律。例如，在质量检验方面，最早人们是通过辨别其声响，观察其表面色泽和断口状况等简单方法来判别其性能和质量的，以后采用腐蚀的方法来观察其表面或断口上所出现的纹理，并逐渐将它和金属材料的制造、加工及热处理等方法联系起来，探索其规律，用以改进生产工艺。这些实验和鉴别金属材料的方法，其中有的至今仍不失为金属学的基本内容之一。到19世纪，又将显微镜应用到金属材料检验和研究上，并结合物理化学分析法逐步揭示了金属材料内部的一些秘密，开始进入了现代金属学的新领域。进入20世纪，特别是30年代后，相继发明和应用了X射线术、电子显微镜等。近年来又发展和应用了场离子显微镜以及电子探针和电子扫描等新技术，使之能将金属材料的原子组态，甚至原子结构及其性能方面的关系不同程度地揭示出来，其中不少已达到定量的程度，因而显著地扩大了有关金属材料方面的研究领域，金属学也因此更趋完善了。

人类使用金属材料制造生产工具及生活用具已有悠久的历史，我国古代人民在生产及使用金属材料方面，创造和积累了许多经验。随着我国考古事业的发展，各地陆续出土的古代文物，显示了我国古代在生产和使用金属材料方面的辉煌成就。

从甘肃齐家文化遗址中发现的多件铜、青铜器物可以证明：远在4000年前，我们的祖先不但认识了铜，且能将天然存在的铜锻打成器具或熔铸成小件器物，还能冶炼紫铜（纯铜）和青铜（铜合金）等。

在河南安阳晚商（距今3000多年）遗址出土的司母戊鼎重量达875kg，是迄今世界上发现的最古老的大型青铜器。

1978年在湖北随县发掘了大约公元前433年的曾侯乙墓，出土了战国青铜编钟65件，总重量2500kg，最大的203kg，最小的仅2.4kg，铸造精巧，音律准确，音色之优美连最严格的现代声学家都为之惊叹。出土的青铜尊、盘纹饰繁美，玲珑剔透，综合地使用了当时的先进技术，是迄今为止传世和出土的青铜器中最复杂和最精致的。这充分证明了我们祖先在该时期铜合金的冶炼和铸造技术已达到很高的水平。商周的青铜器和埃及的金字塔同被誉为古

代社会科技水平的标志。

在春秋时期（公元前8世纪～公元前5世纪）青铜冶铸技术有了高度发展。我们祖先通过实践，认识了青铜成分、性能和用途之间的关系，在《考工记》中总结出了“六齐”规律：“金有六齐^①：六分其金而锡居一，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，谓之大刃之齐；五分其金而锡居二，谓之削杀之齐；金、锡半，谓之鉴燧^②之齐”。这一珍贵记述，与现代相同用途的青铜配比几乎完全一致。是世界上最早的合金配比规律。这充分证明我们祖先对不同成分的合金具有不同的机械性能和用途已有明确的认识。

1418年铸成的永乐大钟高5.84 m，直径3.3 m，重量达42 t，在钟上铸有17部经文，共220千字，可见当时铸造水平已相当高。

在奴隶制崩溃和封建制产生的社会变革时期，铁器登上了历史舞台，作为生产力标志的青铜器开始逐渐被铁器所代替。我国冶铁兴起于春秋末期（距今约2600年）或更早一些，比欧洲早1900多年。在洛阳出土的春秋战国之交（距今约2500年）的铁铲，经金相检验，是迄今发现最早的可锻铸铁，比法国人莱翁缪尔在1722年研制成的可锻铸铁早2200多年。又如河南南阳汉代冶作坊遗址所出土的九件铁农具，有八件是黑心可锻铸铁，其质量与现代同类产品相当，可称技术史上的奇迹。尤其使人惊奇的是，早在西汉晚期（距今约1800年），铸铁中还出现了球状石墨。例如1978年，对河南巩县铁生沟出土的西汉铁铤进行检验，发现基体中石墨球化良好，比英国人莫洛于1947年研制成的球墨铸铁早近2000年。

由此可见，我们祖先无论在金属材料及金属学方面，都有过辉煌的成就，对人类作出了巨大贡献。只是到了18世纪，特别是19～20世纪中，由于腐朽的封建统治，加之帝国主义的侵略和剥削，才使我国科学技术和生产发展受到严重的摧残和束缚，长期停滞不前，使科学技术落在资本主义发达国家的后面。

解放后，我国工农业生产获得了巨大的发展，钢铁和其它金属材料的生产也随之迅速发展起来，并取得了很大的成绩。原子弹、氢弹的爆炸成功；人造地球卫星的发射和回收等成就是极好的证明。随着金属材料及其它学科的发展，金属学无论在理论或实际应用方面，都已取得了巨大成绩。我们坚信金属学和其它科学一样，一定会得到更快的发展，为促进国民经济的发展做出贡献。

三、金属学的有关内容与学习方法

金属学是一门理论性较强的专业理论课，其内容大致可概括为：金属及合金的结构；固态金属及合金的扩散；金属的结晶；合金相图；形变理论及常用金属材料等几部分。

金属学是以物理、化学、金属工艺学、物理化学和材料力学等为基础的一门科学。在学习时，应经常联系上述基础科学的有关部分，以加深理解。同时，金属学又是钢铁热处理、合金钢与热处理工艺学、金相分析基础等热处理专业课的基础。因此，在今后学习专业课时，也要经常联系与本课程有关的内容，作到理论联系实际。

金属学是一门从生产实践中发展起来的又直接为生产服务的科学。学习时，不但要注意学习系统的理论，还要紧密联系实验室试验及生产实践。

① 金指铜，“齐”为“剂”之假借。

② “鉴燧”指铜镜。

第一章 金属及合金的晶体结构

§ 1-1 金属的概述

一、金属的特性

对于金属，大家都很熟悉，象铁、铜、锡、铝等都是金属。将纯金属元素称为“金属”是一种狭义的说法。所有金属元素，约占全部化学元素的 $4/5$ 。金属元素在室温时，除水银（汞）为液态外，其余均为固态。

在不同的学科中，对金属赋予了不同的定义。在化学中，金属是指那些在发生化学反应时能失去最外层电子（价电子）的元素，它着眼于元素的单个原子的性质。在工程技术中，是根据固态金属材料的亿万原子聚合的宏观特性来定义金属的，这是一种广义的“金属”说法，它不仅指金属元素，还指以金属元素为主而形成的金属材料（合金），如钢、铸铁等。则所谓金属是指那些具有金属特性的物质。固态金属特性主要是：不透明；有光泽；有延展性；有良好的导电和导热性，且具有正的电阻温度系数等。所谓正的电阻温度系数，是指金属具有电阻随温度的升高而增大这一特点。而非金属的电阻随温度升高而减小，即具有负的电阻温度系数，如图 1-1 所示。

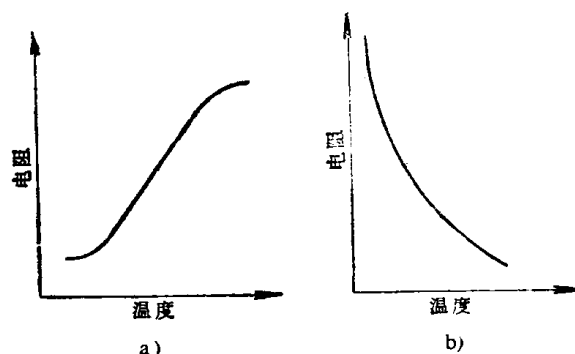


图1-1 金属和非金属的电阻与温度间关系示意图
a) 金属 b) 非金属

金属为什么会具有上述特性呢？这与组成金属的原子结构有关，所谓原子结构是指组成原子的原子核与电子的实际排列情况。

二、金属原子结构特点

所有元素的原子结构，都是由带正电荷的原子核和绕核高速运动的电子所构成的，电子数目等于该元素的原子序数，并按一定规律分布在不同的电子层上。

在各种元素的原子结构中，最外层的电子（价电子）数目决定了该元素的主要物理与化学性能。金属元素原子结构的特点是它们的外层电子数目很少，一般只有 $1 \sim 2$ 个，不超过 3 个，而且这些外层电子与原子核的结合力较弱，很容易摆脱所属原子核的吸引力，成为能绕该金属所有原子核运动的电子，这种电子称为自由电子。外层电子自由化后的金属原子就成为正离子。这些正离子（亦可能还有少数原子）按一定几何形状排列起来，并在固定的位置上作高频率的振动。所有的自由电子在各正离子间自由运动，形成所谓的“电子气”。

有些金属的原子结构，在次外层尚未填满电子的情况下，最外层就先填充了电子，这种元素就是过渡族金属。过渡族金属的原子不仅容易失去最外层电子，而且还容易失去次外层的 $1 \sim 2$ 个电子，这就说明为什么过渡族金属的化合价会出现可变的现象。当过渡族金属中

的某一种金属元素的原子相互结合时, 不仅最外层电子参与结合, 而且次外层电子也参与结合, 因此, 过渡族金属的原子结合力特别强, 在宏观上表现为过渡族金属具有熔点高、硬度大的特点。

三、金属键

金属中的各正离子与自由电子, 依靠静电吸引而结合的方式称为“金属键”。正离子与自由电子间的吸引力如图 1-2 所示。

金属键模型如图 1-3 所示。由于金属原子以金属键方式结合在一起的, 这就使得金属具有了一系列的金属特性。下面利用金属键的特点, 粗浅的对金属特性作如下解释:

金属具有不透明性和金属光泽, 是因为金属中的自由电子能吸收可见光的能量, 激发到较高的能级, 故使金属具不透明性。而被激发的电子, 当它重新跳回到低能级时, 就把它所吸收的可见光的能量以电磁波的形式辐射出来, 所以在宏观上表现为金属光泽。

金属具有良好的延展性。金属在一定外力作用下, 两层相邻的正离子之间发生了相对位移, 位移后的两层正离子之间仍能靠自由电子的吸引力结合在一起, 在宏观上表现为, 金属虽发生了外观形状与尺寸的变化, 但仍不破裂, 即显示出金属具有良好的延展性, 如图 1-4 所示。

金属具有良好的导电性是由于在电场作用下, 金属中的自由电子能沿电场方向运动, 所以表现出良好的导电性。

金属具有良好的导热性是因为金属中热量的传递是依靠正离子的振动和自由电子的运动共同完成的, 而非金属无自由电子传递热量, 故金属要比非金属的导热性好。

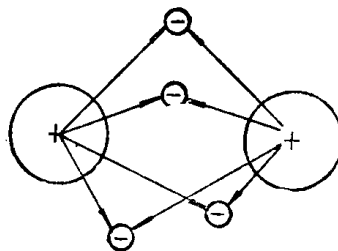
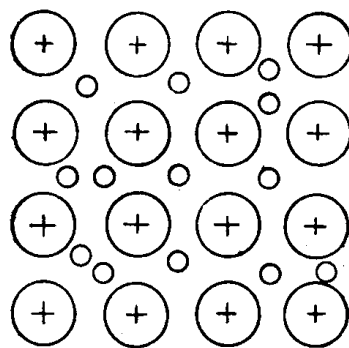


图1-2 正离子与自由电子间的吸引力示意图



○ 自由电子 ⊕ 正离子

图1-3 金属键模型

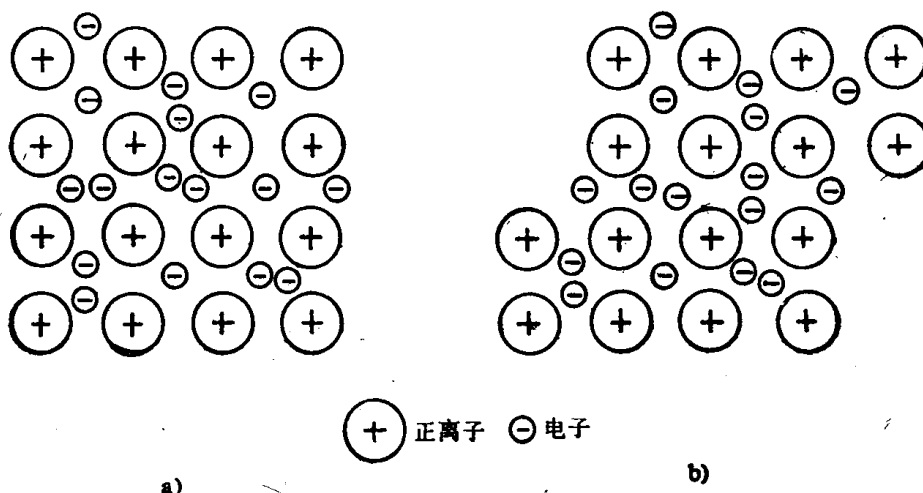


图1-4 金属变形前后的结合

a) 变形前 b) 变形后

在固态金属中，正离子以某一固定位置为中心作热振动，这就阻碍了自由电子的流动，是金属具有电阻的原因。且随着温度的升高，正离子的热运动加剧，进一步阻碍自由电子的流动。从宏观来看，金属的电阻随温度的升高而增大，即金属具有正的电阻温度系数。

四、原子间的作用力与结合能（作用能）

在固态金属中，原子依靠金属键牢固地结合在一起。如果用外力把结合原子拆散成单个原子，所消耗的能量称为激活能，其值等于原子间的结合能。

由亿万个原子组成的固态金属，各个原子间的结合为什么会呈现规则排列？这要从原子间的相互作用和结合能来说明。

为了简便起见，先分析两个原子之间的作用力和结合能，即双原子结合模，如图1-5所示。当两个原子相距很远时，它们实际上不发生相互作用，但当它们逐渐靠近时，它们间的相互作用力便会显示出来。两个原子间的作用力包括：正离子与电子间的吸引力；正离子之间以及电子之间的排斥力。吸引力力图使两原子靠近；排斥力力图使两原子分离。吸引力与排斥力的合力，即为原子间的作用力。原子间的作用力的大小与两原子间的距离（ r ）的关系，如图1-5上图所示。由图可见，当原子间距 $r > r_0$ 时，吸引力大于排斥力，原子相互靠拢，同时伴随着原子结合能的降低。当两原子靠近到 $r = r_0$ 时，吸引力与排斥力相等而达到平衡，原子处于平衡位置。这时，原子处于结合能的最低值，原子处于最稳定状态，如图1-4下图所示。若使原子间距 $r < r_0$ 时，则原子间排斥力急增，远大于吸引力的增加，故排斥力大于吸引力，使原子相互分离，直到两原子间距 $r = r_0$ 时，又处于平衡位置为止。 r_0 称为原子间的平衡距离。因此，一旦两原子间距偏离平衡距离 r_0 时，都将使能量升高，处于不稳定状态，有自发恢复到平衡位置的趋势，以降低能量达最稳定状态。

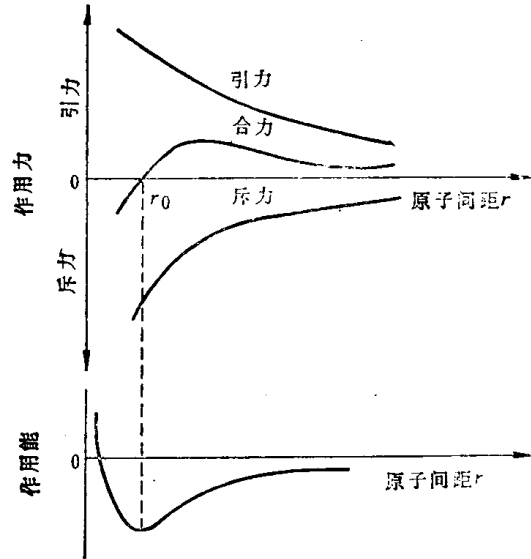


图1-5 双原子模型中作用力和作用能与原子间距离的关系

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时，为使原子都具有最低能量，则原子间必须保持平衡距离 r_0 ，这就是为什么金属原子呈有规则排列的原因。有规则排列的原子，并非静止地处于平衡位置上，而是围绕平衡位置进行着无秩序的热振动。

§ 1-2 金属的晶体结构

一、晶体结构的基本知识

1. 晶体与非晶体 自然界中的一切固态物质，通过X射线衍射分析，按其内部粒子（原子、离子、分子、原子集团）排列情况，可分为两大类：晶体与非晶体。总的来说，凡物质内部粒子呈规则排列的称为晶体，如雪花、食盐、固态金属等都是晶体。凡物质内部粒子呈无规则堆积的，称为非晶体。如普通玻璃、松香、赛璐珞等，均为非晶体。晶体物质具有下

列特点:

(1) 具有规则的外形晶体在一般情况下应具有规则的外形, 如天然金刚石、水晶、食盐等。但有时外形也不一定都是规则的, 这与晶体的形成条件有关。所以不能仅从外形来判断是否是晶体, 而应该从其内部粒子排列来确定。

(2) 有固定的熔点 任何一种晶体物质, 当加热到一定温度, 就要熔化。各种晶体物质, 都有各自的熔点。例如: 铁的熔点为 1538°C ; 铜的熔点为 1084.5°C ; 铝的熔点为 660.4°C 等。

(3) 具有各向异性 在同一种晶体物质中的不同位向(方向)上, 具有不同的性能, 称之为各向异性。

晶体与非晶体的物质, 并非一成不变的, 随着形成条件的不同, 原是晶体物质也可以成为非晶体物质。例如, 有些金属材料, 由液态激冷, 可制成非晶态金属材料。原是非晶体的普通玻璃, 经高温处理后, 能成为晶态玻璃, 即钢化玻璃。

2. 点阵、晶格、晶胞 首先把金属看作是完全规则排列的理想晶体, 则其原子(严格说应是正离子)在空间按一定

的几何规则作周期性排列。为了便于分析, 把金属中原子近似地看作刚性小球, 不再分成正离子与自由电子。这样, 金属晶体可看作是由刚性小球按几何规则的紧密排列, 如图 1-6 a) 所示。这种规则排列形式称为空间点阵, 简称点阵。每个原子位置就是空间点阵中的一个阵点, 通常把原子抽象为几何的点。

为了便于讨论晶体中原子排列情况, 设想把各原子中心用线连结起来, 使之构成一个空间格架, 各原子中心就处在格架的各个结点上。这种用于描述原子在晶体中排列的空间格架, 称为结晶格子, 简称晶格, 如图 1-6 b) 所示。

晶体中原子排列具有周期性的特点, 为便于分析, 通常只从晶格中选取一个能完全反映晶格特征的、最小的几何单元称为晶胞, 用它来分析晶体物质中原子排列的规律, 如图 1-6 b 中粗线部分所示。

晶胞的大小和形状, 常以晶胞的棱边长 a 、 b 、 c 及棱间夹角 α 、 β 、 γ 来表示。如图 1-7 所示。在图中通过晶胞角上某一结点, 沿其三条棱边作三个坐标轴 X 、 Y 、 Z , 称为晶轴。

晶胞的棱边长度, 称为晶格常数。晶胞的棱间夹角又称晶轴间夹角。如图 1-6 所示的是简单立方晶胞, 其三个棱边相等(即 $a = b = c$), 三个晶轴间夹角也相等(即 $\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$)。

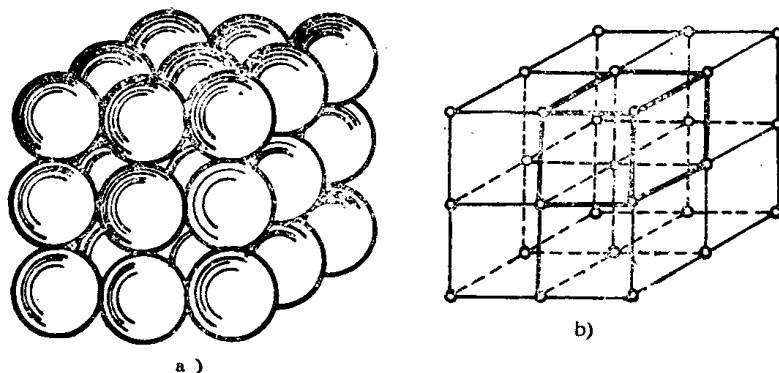


图1-6 空间点阵 a) 和空间格子 b)

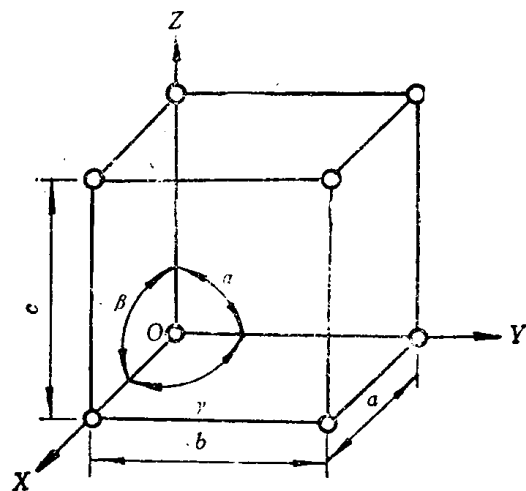


图1-7 晶轴及晶胞的参数

因此，立方晶格只需用一个晶格常数 a 就可表示晶胞的大小和形状。

3. 布拉菲点阵 自然界中，以晶体形式存在的物质极其繁多，晶体类型也各式各样，结构也很复杂。法国晶体学家布拉菲，按照晶晶体各自的主要结构特点，对其予以归纳分类，把所有的具有相同环境的粒子作为一个阵点，这样，所有的空间点阵，归纳起来只有14种，这14种空间点阵称为布拉菲点阵。其晶胞如图 1-8 所示。根据晶胞的棱边长之间的关系和轴间夹角情况，又可将14种空间点阵归纳为7大晶系，如表 1-1 所列。

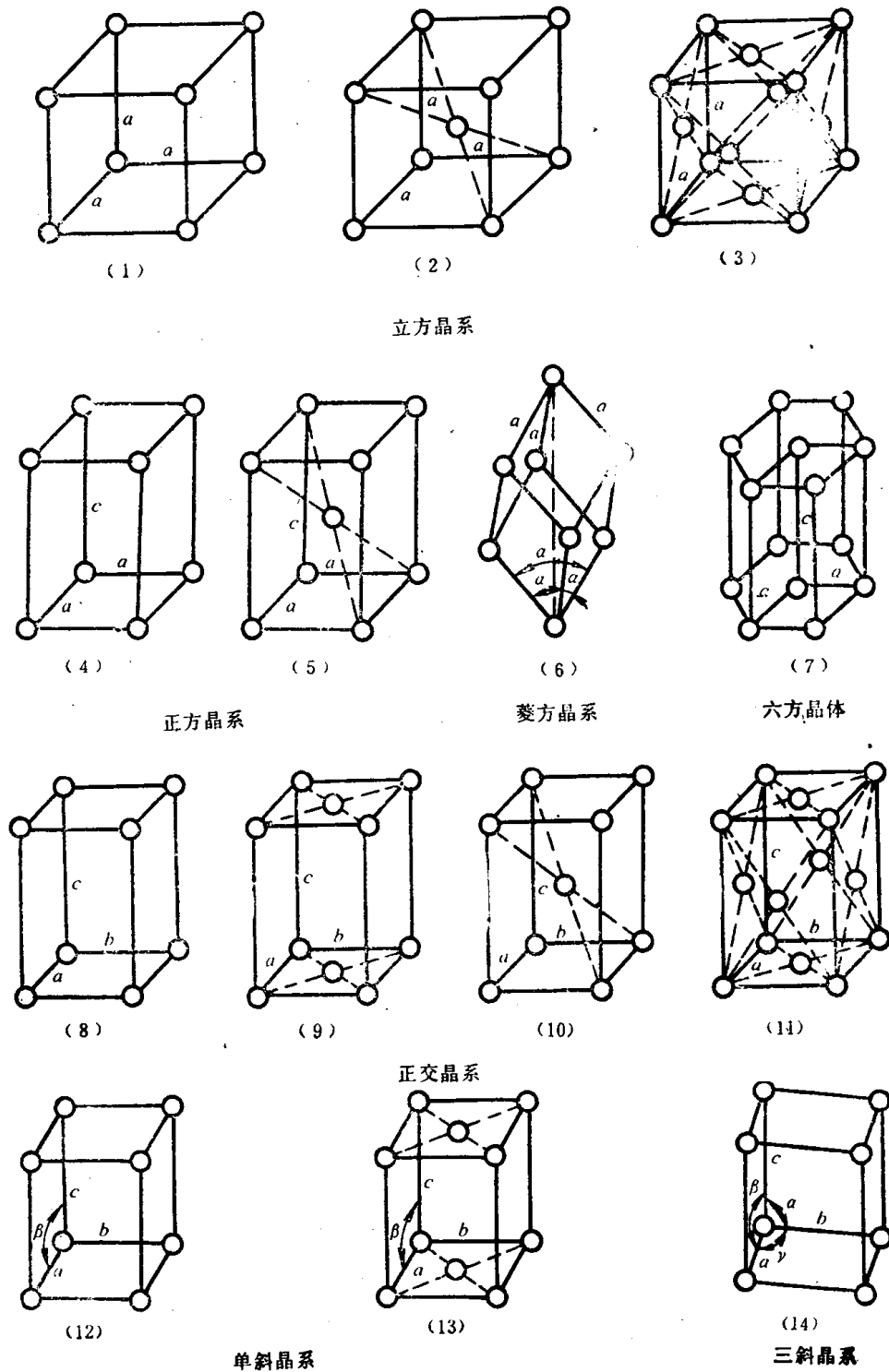


图1-8 14种空间点阵

表1-1 晶系及空间点阵

晶 系	空间点阵	棱边长及夹角关系
立方晶系	简单立方 体心立方 面心立方	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
正方(四角)晶系	简单正方 体心正方	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
菱方(三方)晶系	简单菱方	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
六方(六角)晶系	简单六方	$X_1 = X_2 = X_3 \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$
正交(斜方)晶系	简单正交 底心正交 体心正交 面心正交	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
单斜晶系	简单单斜 底心单斜	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
三斜晶系	简单三斜	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

晶体的空间点阵虽只有14种,但由于每个阵点可以代表原子、离子、分子、原子集团等,而且它们在阵点上的排列组合图案可以有各种形式,所以每种空间点阵可以包括很多晶体结构,如图1-9中a) b) c)三种不同的晶体结构,都属于图中d)那样的一种空间点阵。所谓晶体结构,是指粒子在晶体中的实际排列情况。

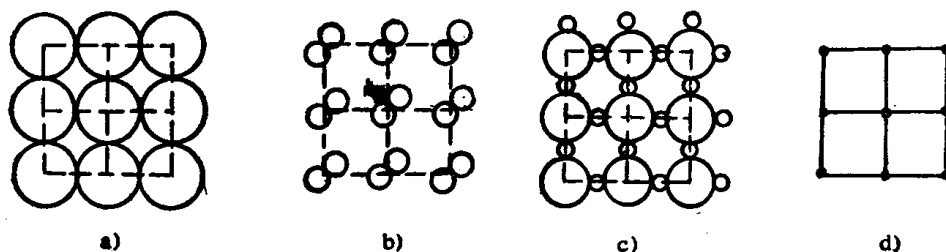


图1-9 三种不同的晶体结构同属于一个点阵

二、金属中常见的三种晶体结构

在金属元素中,由于金属原子间靠金属键结合在一起,而金属键结合没有选择性和方向性,所以金属原子结合时,总是趋于最紧密的排列,就使原子在空间排列的形式大大减少,因而金属中常见的晶体结构只有三种。它们是体心立方晶格、面心立方晶格和密排六方晶格。

1. 体心立方晶胞 体心立方的晶胞如图1-10所示。其晶胞是一个立方体,除晶胞的8个角上各有一个原子外,还在晶胞体中心有一个原子,所以称为体心立方晶胞。其晶格常数 $a = b = c$, 晶轴间夹角 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, 所以通常只需用一个晶格常数 a , 就足以明确的把体心立方晶胞的形状、大小表示清楚。

具有体心立方晶体结构的金属有: α -Fe、 δ -Fe、Cr、Mo、W、V等。

2. 面心立方晶胞 面心立方晶胞如图1-11所示。其晶胞也是一个立方体,除晶胞的8

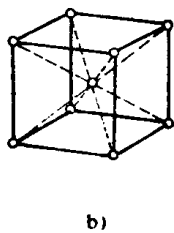
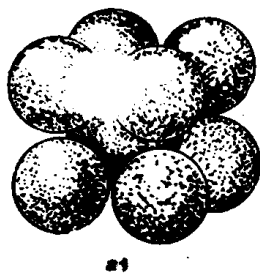


图1-10 体心立方晶胞

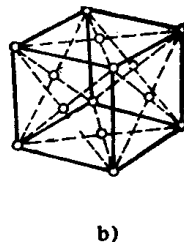
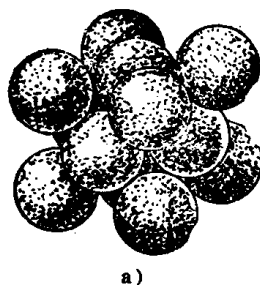


图1-11 面心立方晶胞

个角上各有一个原子外，还在晶胞6个面的中心各有一个原子，所以称为面心立方晶胞。其晶格常数 $a = b = c$ ，晶轴间夹角 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ，所以通常也只用一个晶格常数 a ，足以清楚的表示其形状及大小。

具有面心立方晶体结构的金属有： γ -Fe、Al、Cu、Ni、Au、Ag等。

3. 密排六方晶胞 密排六方晶胞如图1-12所示。它是一个正六棱柱体，除晶胞12个角及上、下底面中心各有一个原子外，还在正六棱柱体中心有3个原子，所以称为密排六方晶胞。其晶格常数有两个，一个是正六边形的边长 a ，另一个是六棱柱体的高 c ，高与底面间晶轴间夹角 $\alpha = \beta = 90^\circ$ ，底面上晶轴间夹角 $\gamma = 120^\circ$ 。所以通常需用 a 、 c 两个晶格常数才能把密排六方晶胞的形状、大小表达清楚。

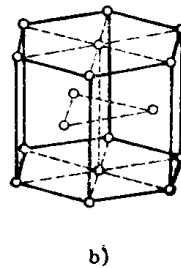
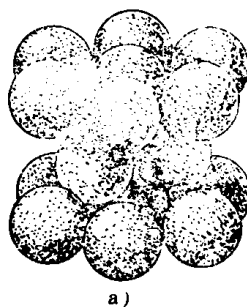


图1-12 密排六方晶胞

具有密排六方晶体结构的金属有：Mg、Zn、Be、Cd等。

密排六方晶体结构、因其体内3个原子所处环境与其它原子不同，所以不能单独作一阵点，它们只能分别与底面上的另一个原子组成一个阵点，所以密排六方晶体结构属于简单六方点阵。如图1-13所示。

金属中除上述常见的三种晶体结构外，还有少数金属具有其它类型的晶体结构，见附表。

三、表示晶体结构特征的几个参数

晶胞是反映晶体结构特征的最小几何单元。而不同的晶胞特征，除晶格常数和晶轴间夹角外，还必须由以下几方面的参数来反映。

1. 晶胞占有的原子数

(1) 体心立方结构 由于晶体是由许多晶胞规则堆积而成的，因此，体心立方晶胞8个角上的每个原子，它们分别属于其相邻的8个晶胞所共有，所以，每个晶胞实际上只占有 $1/8$ 个原子。但在立方体中心那个原子，为该晶胞所独有，如图1-14a)所示。故体心立方晶胞占有的原子数应为：

$$8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2 \text{ 个}$$

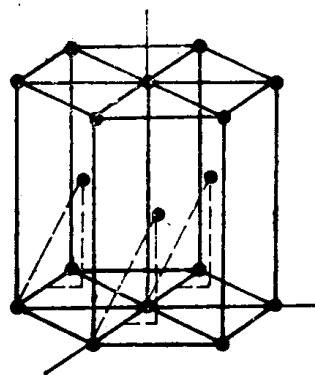


图1-13 密排六方
属于简单六方点阵

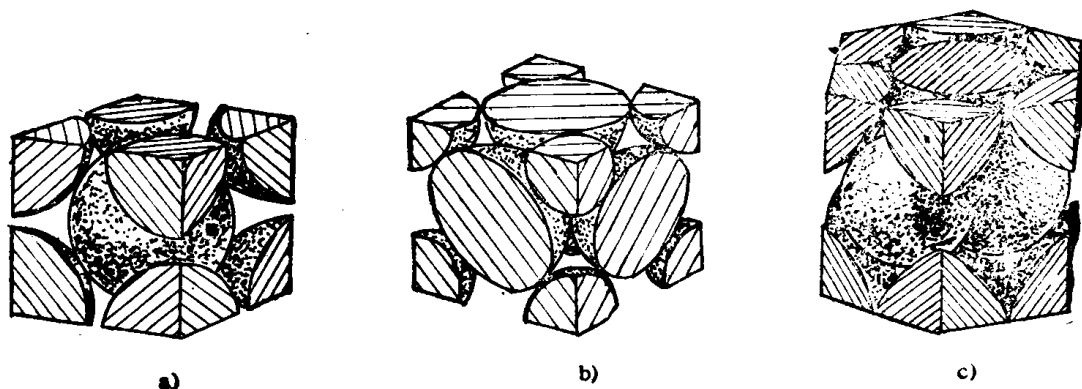


图1-14 常见的三种晶胞占有原子数

a) 体心立方晶胞 b) 面心立方晶胞 c) 密排六方晶胞

(2) 面心立方结构 面心立方晶胞 8 个角上的每个原子也为 8 个相邻晶胞所共有，每个晶胞只占有 $1/8$ 个原子，而 6 个面心中的每个原子，为相邻 2 个晶胞所共有，如图 1-14 b) 所示。因此，面心立方晶胞占有的原子数应为：

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

(3) 密排六方结构 密排六方晶胞 12 个角上的每个原子，为 6 个相邻晶胞所共有，两个底面中心的原子为两个晶胞共有，而柱体中间的 3 个原子，为该晶胞所独有，如图 1-14 c) 所示。所以，密排六方晶胞占有原子数应为：

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

2. 原子半径 如果将晶体结构中的金属原子，近似地看成一个具有一定大小的刚性圆球，那末，原子半径可以定义为两个相互接触的原子中心距离的一半。

(1) 体心立方结构 在体心立方晶胞中，只有在体对角线上的原子是相互接触的，因此，原子半径 r 与晶格常数 a 的关系，可由图 1-15 a) 所示的几何关系求出：

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

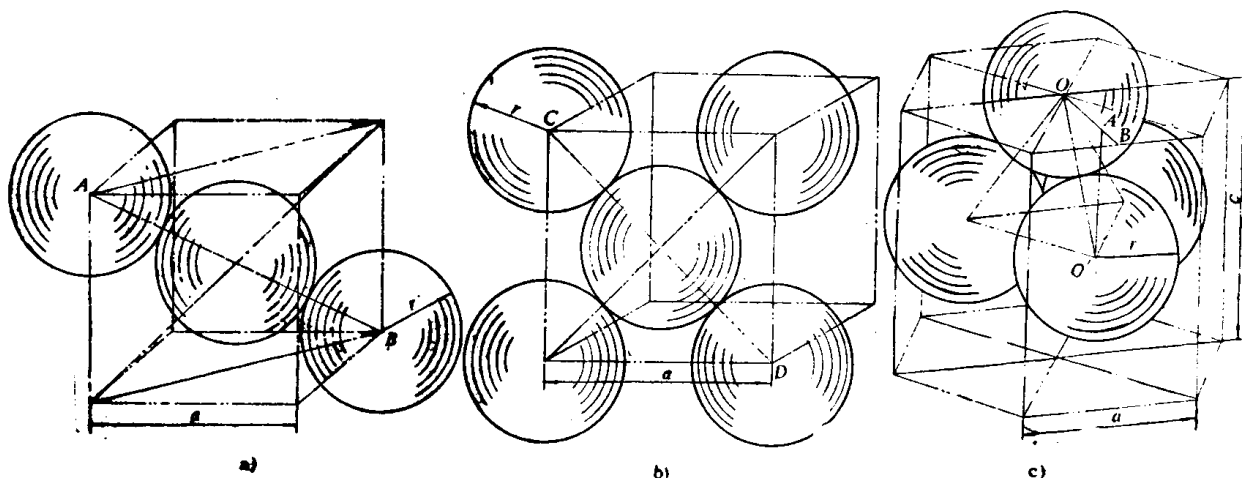


图1-15 晶胞中原子半径与晶格常数的关系

a) 体心立方结构 b) 面心立方结构 c) 密排六方结构

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

例如：室温时 α -Fe 的晶格常数 $a = 2.866 \times 10^{-10} \text{ m} = 2.866 \text{ \AA}$ 。故其原子半径 $r = \frac{\sqrt{3}}{4} \times 2.866 \times 10^{-10} \text{ m} = 1.23 \times 10^{-10} \text{ m} = 1.23(\text{ \AA})$ 。

(2) 面心立方结构 在面心立方晶胞中，只有沿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，可由图 1-15 b) 所示的几何关系求出：

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

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

例如：在 912°C 时的 γ -Fe 的晶格常数 $a = 3.646 \times 10^{-10} \text{ m} = 3.646 \text{ \AA}$ ，故其原子半径 $r = \frac{\sqrt{2}}{4} \times 3.646 \times 10^{-10} \text{ m} = 1.288 \times 10^{-10} \text{ m} = 1.288(\text{ \AA})$ 。

(3) 密排六方结构 在密排六方晶胞中，底面中心的原子与同一层上的 6 个原子相接触，同时还和上一晶胞及下一晶胞体中的 3 个原子相接触，因此，其原子半径 r 与晶格常数 a 的关系，可由图 1-15 c) 所示的几何关系求出：

$$2r = a$$

$$r = \frac{a}{2}$$

3. 原子排列的紧密程度 晶体中原子排列的紧密程度，也是区别不同晶体结构的重要特征。通常用配位数和致密度来表示晶体中，原子排列的紧密程度。

(1) 配位数 晶体结构中的任一原子，与其近邻的、等距离的原子数目，称为配位数。显然，配位数愈大，晶体中原子排列愈紧密。反之，则原子排列愈松散。

体心立方结构：若取体心立方晶胞中心的原子来分析，与其近邻的、等距离的原子数目为 8 个角上的原子，即体心立方结构的配位数为 8。如图 1-16 a) 所示。若在晶体结构中任取一个原子，其配位数不变仍为 8。

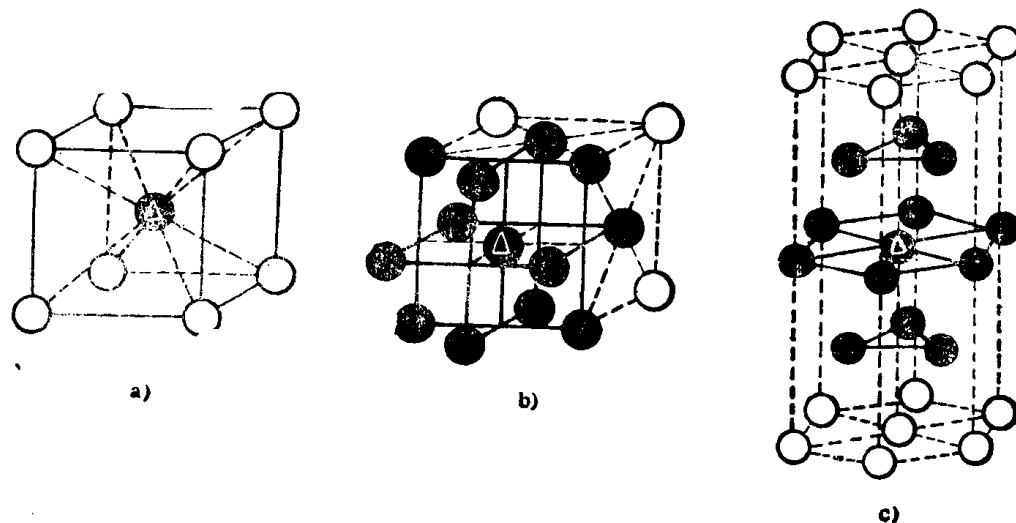


图1-16 三种晶体结构的配位数示意图

a) 体心立方结构 b) 面心立方结构 c) 密排六方结构

面心立方结构：若取面心立方晶胞中任一个面中心的原子来分析，与其近邻的、等距离的原子数，为在该面上 4 个角上的原子及垂直该面组成空间象限二个面上各有 4 个原子，所以其配位数为 12，如图 1-16 b) 所示。

密排六方结构：若取某晶胞一底面中心的一个原子来分析，与其近邻的、等距离的原子数为同一底面上的 6 个角上的原子，以及该底面上、下两晶胞体中的各 3 个原子，所以其配位数为 12，如图 1-16 c) 所示。

(2) 致密度 配位数只能定性地判断晶体结构中原子排列的紧密程度。而致密度可对晶体结构的紧密程度作定量的计算。

致密度是指单位晶胞中原子占有的体积与晶胞体积之比。可写成下列式子：

$$\text{致密度} = \frac{\text{晶胞中原子占有体积}}{\text{晶胞体积}}$$

即：

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

式中 K ——致密度；

n ——晶胞实际占有原子数；

v ——单个原子的体积；

V ——晶胞的体积。

根据前述，根据晶胞实际占有原子数、原子半径、晶胞的晶格常数，应用上述公式就可以定量的计算出三种晶体结构的致密度如下：

体心立方结构： $n = 2$ ， $r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$ ， $v = \frac{4}{3}\pi r^3$ ， $V = a^3$ ，故体心立方结构的致密度

$K_{\text{体}}$ 应为：

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

面心立方结构： $n = 4$ ， $r = \frac{\sqrt{2}}{4}a$ ， $v = \frac{4}{3}\pi r^3$ ， $V = a^3$ ，故面心立方结构的致密度

$K_{\text{面}}$ 应为：

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

密排六方结构： $n = 6$ ， $r = \frac{1}{2}a$ ， $v = \frac{4}{3}\pi r^3$ ， $V = 3a^2 \sin 60^\circ \times c$ ，故密排六方结构

的致密度 $K_{\text{六}}$ 应为：

$$K_{\text{六}} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 \times 6}{3a^2 \sin 60^\circ \times c} = \frac{\frac{4}{3}\pi \left(\frac{1}{2}a\right)^3 \times 6}{a^2 \sin 60^\circ \times c} = \frac{\sqrt{2}}{6}\pi = 0.74$$

从上述计算出的致密度数值表明：在体心立方结构中，有 68% 的体积被原子所占据，其余 32% 的体积则为空隙；在面心立方和密排六方结构中，均有 74% 的体积被原子所占据，