

高等学校试用教材

金属学与热处理

（热加工专业用）

上册

河北工学院王健安 主编

机械工业出版社

781
51

高等学校试用教材

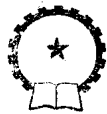
金属学与热处理

(热加工专业用)

上册

河北工学院王健安 主编

Bx63/00



机械工业出版社

A727068

前 言

本书是根据第一机械工业部1978年6月在西安召开的高等工科院校“金属材料及热处理专业教材编审会议”审定的机械类热加工专业用《金属学与热处理》教学大纲编写的。

本书内容主要包括：金属及合金的结构与结晶；金属的塑性变形与再结晶；钢的热处理原理及工艺；常用金属材料等。本书分上、下两册出版，上册为金属学部分，下册为热处理及金属材料部分。本书可作为高等工科院校机械类各热加工专业（焊接、锻压、铸造）的教学用书，也可供有关专业的工程技术人员参考。

本书由河北工学院王健安主编，哈尔滨工业大学吴忍畊、石宏欢、李仁顺、华南工学院阎善仪、东北重机学院崔明勋、河北工学院王万祥参加编写。由东北重机学院崔明勋主审。

目 录

绪 论.....	1
第一章 金属的晶体结构.....	3
§ 1-1 金属.....	3
一、金属的特性.....	3
二、金属原子的结构特点.....	3
三、金属键.....	3
四、金属的结合能.....	4
§ 1-2 金属晶体.....	7
一、晶体的特点.....	7
二、晶体内部的原子排列.....	7
§ 1-3 典型的金属晶体结构.....	8
一、体心立方晶格.....	9
二、面心立方晶格.....	11
三、密排六方晶格.....	12
四、晶向指数和晶面指数.....	14
五、六方晶格的晶向指数和晶面指数.....	16
六、晶体的各向异性.....	17
七、金属的同素异晶转变.....	17
§ 1-4 金属的实际晶体结构.....	18
一、点缺陷.....	18
二、线缺陷.....	19
三、面缺陷.....	22
四、晶格畸变.....	25
§ 1-5 固态金属中的扩散.....	26
一、扩散概述.....	26
二、扩散机理.....	29
三、扩散定律.....	31
四、影响扩散的因素.....	32
第二章 纯金属的结晶.....	37
§ 2-1 金属结晶的现象.....	37
一、过冷现象.....	37
二、形核与长大过程.....	38
§ 2-2 结晶的热力学条件.....	38
§ 2-3 液态金属的结构.....	39
§ 2-4 形核的规律.....	40
一、自发形核(均质形核).....	40
二、非自发形核(异质形核).....	45

§ 2-5 长大的规律.....	49
一、长大的条件.....	49
二、长大的机理.....	50
三、长大的方式.....	51
四、过冷度对晶体长大的影响.....	53
§ 2-6 晶粒大小的控制.....	55
一、晶粒度对金属性能的影响.....	55
二、决定晶粒度的因素.....	56
三、控制晶粒度的方法.....	57
第三章 二元合金的相结构与结晶.....	59
§ 3-1 合金.....	59
§ 3-2 合金的相结构.....	59
一、固溶体.....	60
二、金属化合物.....	64
§ 3-3 二元合金相图的建立.....	66
一、二元合金相图的表示方法.....	66
二、二元合金相图的测定方法.....	67
§ 3-4 相律与杠杆定律.....	68
一、相律.....	68
二、杠杆定律.....	70
§ 3-5 匀晶相图.....	71
一、相图分析.....	71
二、典型合金的平衡结晶及其组织.....	71
三、不平衡结晶及其组织.....	73
四、枝晶偏析.....	74
五、成分过冷与晶体长大.....	75
六、合金的性能与成分的关系.....	77
§ 3-6 共晶相图.....	79
一、相图分析.....	79
二、典型合金的平衡结晶及其组织.....	79
三、不平衡结晶及其组织.....	83
四、比重偏析与区域偏析.....	86
五、合金的性能与成分的关系.....	87
§ 3-7 包晶相图.....	89
一、相图分析.....	89
二、典型合金的平衡结晶及其组织.....	89
三、不平衡结晶及其组织.....	92
四、包晶转变的细化晶粒作用.....	93
§ 3-8 形成金属化合物的相图.....	94
一、形成稳定化合物的相图.....	94
二、形成不稳定化合物的相图.....	96
§ 3-9 具有固态相变的相图.....	97
一、具有同素异晶转变的相图.....	98

二、具有共析转变的相图	99
§ 3-10 铸锭与焊缝的结晶	101
一、铸锭的结晶	101
二、焊缝的结晶	108
三、铸锭组织的控制与改善	109
第四章 铁碳合金状态图	111
§ 4-1 铁碳合金的组元	111
一、纯铁	111
二、渗碳体	112
§ 4-2 Fe-Fe ₃ C 状态图分析	113
§ 4-3 典型铁碳合金的平衡结晶	116
一、含碳 0.01% 的工业纯铁	116
二、共析钢	117
三、亚共析钢	118
四、过共析钢	119
五、共晶白口铁	119
六、亚共晶白口铁	121
七、过共晶白口铁	122
§ 4-4 含碳量对 Fe-C 合金平衡组织和性能的影响	123
一、含碳量对平衡组织的影响	123
二、含碳量对机械性能的影响	124
三、含碳量对工艺性能的影响	125
§ 4-5 铁碳合金状态图的应用	126
一、选材方面的应用	126
二、制定热加工工艺方面的应用	127
§ 4-6 合金元素对铁碳状态图的影响	127
一、对 γ 区的影响	128
二、对共晶点 (C 点) 和共析点 (S 点) 的影响	128
第五章 三元合金状态图	130
§ 5-1 三元状态图的表示方法	130
一、成分三角形	130
二、两种特殊直线	131
§ 5-2 三元系中的直线法则、杠杆定律及重心法则	132
§ 5-3 三元匀晶状态图	133
一、状态图分析	133
二、等温截面	133
三、固溶体结晶过程	134
四、变温截面	135
五、投影图	135
§ 5-4 三元共晶状态图	137
一、状态图分析	137
二、等温截面	138
三、变温截面	139

四、投影图	140
§ 5-5 固态下有限溶解的三元共晶状态图	142
§ 5-6 实际三元合金状态图举例	144
一、Fe-C-Si 三元系的变温截面	144
二、Al-Cu-Mg 三元系的等温截面	146
第六章 金属与合金的塑性变形及再结晶	148
§ 6-1 金属变形的三个阶段	148
§ 6-2 金属与合金的弹性变形	149
§ 6-3 金属与合金的塑性变形	150
一、单晶体的塑性变形	151
二、多晶体的塑性变形	159
三、合金的塑性变形	160
四、塑性变形对组织和性能的影响	162
§ 6-4 变形金属与合金在加热时的变化	163
一、加热时组织和性能的变化	163
二、再结晶温度	167
三、再结晶后的晶粒度	167
§ 6-5 金属与合金的热加工	168
§ 6-6 断裂	170
一、断裂的一般过程	171
二、脆性断裂	171
三、韧性断裂	171
四、裂纹的形成与扩张	173
五、韧性-脆性的转移	176
六、断裂韧性	177

绪 论

金属材料是现代工业、农业、国防及科学技术的重要物质基础。制造各种机器设备、船舶、车辆、仪器仪表，都需要使用大量的金属材料。

金属材料之所以能获得广泛应用，是由于它不但具有优良的机械性能及物理、化学性能，能满足生产和生活上的各种需要，而且还由于它具有优良的工艺性能，易于采用各种工艺方法制成各种形状的零件及工具。

金属材料的各种性能决定于它的内部组织结构。因此，要想正确地选用金属材料以及顺利地采用不同工艺来制造零件，就必须掌握金属材料的内部组织结构及其变化规律。

《金属学与热处理》是研究金属材料的性能与它的成分及内部组织结构之间的关系、改变金属材料性能的途径以及各种常用金属材料的一门科学。

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，我国古代劳动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，显示出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红铜、青铜器物可以证明：远在四千年前，我们的祖先不但认识了金属铜，可以将天然存在的红铜锻打成器，熔铸成小件器物，而且可以冶炼红铜和青铜等铜合金。随着社会生产的发展，我国的青铜技术逐渐由低级向高级发展，在商周时代（公元前十六世纪～公元前八世纪），我国的青铜冶铸技术已达到了很高的水平。从各地出土的商周文物中，有大量的青铜礼器、生活用具、武器、农具及工具，其中有875千克（kg）的司母戊大鼎，精巧的四羊尊与龙虎尊等，说明当时已达到了相当高超的铸造技巧及艺术造诣。在春秋时期（公元前8世纪～公元前5世纪），劳动人民通过实践，认识了青铜成分、性能和用途之间的关系，总结出了“六齐”规律：“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、锡半，谓之鉴燧之齐。”

（《考工记》）。“六齐”规律是世界上最早的合金工艺总结。

我国劳动人民早在三千三百多年前已经接触了铁，并加以利用。我国最早的人工冶炼的铁器约出现于公元前六世纪，是迄今发现的最早的生铁，而欧洲最早的生铁出现在十三世纪末至十四世纪初，比我国晚一千九百多年。在洛阳出土的春秋战国之交的铁铲，经金相检验，是迄今发现的最早的可锻铸铁。在长期的生产实践中，我国古代劳动人民创造了在较低温度下，使铁矿石在固态下还原成铁的炼铁方法（块炼铁），生铁冶铸技术以及块炼渗碳钢、百炼钢、炒钢、灌钢、铸铁脱碳钢等炼钢技术。

在热处理工艺方面，我国古代人民也有极大的贡献。战国时期我国已经开始采用脱碳退火处理使白口铁铁铸表面的碳含量降低，以减小其脆性；也已经开始利用淬火，以获得马氏体组织，而提高块炼钢钢剑的硬度。到秦汉以后，钢铁热处理技术得到了很大的发展，达到了相当高的水平，淬火工艺到西汉已普遍应用，表面渗碳工艺也已开始采用。各地出土的西汉时代的刀剑，经金相检验，都具有淬火马氏体组织。河北满城出土的西汉佩剑及书刀，中心为低碳钢，表面有明显的高碳层，表明进行过表面渗碳处理。在一些西汉的书籍中，也有

关于热处理技术的叙述,《史记·天官书》中有“水与火合为淬”,《汉书·王褒传》中有“巧冶铸干将之朴,清水淬其锋”等。三国时,蒲元对淬火工艺已经有了较深刻的了解,掌握了不同水质对淬火后钢的质量的影响规律。南北朝时的綦母怀文已经知道使用多种淬火冷却介质,了解淬火冷却速度与淬火后钢的性能的关系,“浴以五牲之溺,淬以五牲之脂”。公元十七世纪时的明代科学家宋应星将我国古代的许多科学技术加以总结整理,在其写成的著作《天工开物》中,有关于热处理技术的详细叙述。在有关锉(锉)的论述中,涉及到了退火、淬火工艺,“凡铁锉,纯钢为之,未健之时,钢性亦软,以已健钢斲划成纵斜文理,……划后烧红,退微冷,入水健。久用乖平,入火退去健性,再用斲划。”在有关制针的论述中,则有退火及固体渗碳工艺,“凡针,先锤铁为细条,……然后慢火炒熬,炒后以土末入松木,火矢、豆豉三物罨盖,下用火蒸,留针二三口插于其外,以试火候,其外针入手捻成粉碎,则其下针火候皆足,然后开封,入水健之。”

在铸造、锻造、焊接等方面以及铅、锡、锌、金、银、汞等有色金属的冶炼及使用方面,我国古代劳动人民也都有辉煌的成就。但是,在长期的封建统治下,劳动人民在生产实践中积累的宝贵经验没有得到应有的重视,不能及时总结及提高。近百年来,又受到帝国主义的侵略及压迫。因此,解放前我国的材料科学技术受到了极大的抑制,处于十分落后的状态。

在国外,随着十八世纪中期开始的工业革命的进行,生产力有了极大的提高,对于金属材料,在数量及质量上都提出了越来越高的要求,促进了有关金属材料科学的发展。随着光学显微镜开始应用于金属显微组织的检验,金属的性能与显微组织的关系得以确立,使有关金属的知识由世代相传的经验提高为理论,奠定了有关金属的理论基础。许多科学家总结了前人的经验,将热力学理论、物理-化学分析方法等应用于金属材料的研究,通过研究将有关金属的知识提高为理论,逐渐形成了一门独立的科学——金属学。本世纪以来,由于工业技术及其他科学的发展,为有关金属的研究提供了基础理论及试验设备,而工业技术的发展也向金属学提出了更高的要求,随着电子显微镜、X射线衍射、放射性同位素等方法的应用,金属学的理论更日趋完善。近年来,扫描电镜、电子探针等开始应用于金属的研究,又进一步促进了金属学的发展。

解放后,在党和政府的领导下,我国的国民经济结束了长期停滞不前的局面,工农业生产,科学技术都有了迅速的发展。近年来,由于科学技术的进步,世界各国的经济发展也相当迅速。与先进国家相比,我国的国民经济仍有一定的差距。在金属材料科学方面,我们虽然取得了很大的进展,但是在模具、高强、耐热及其他特殊金属材料的研制及使用方面、钢铁热处理及化学热处理相变机理、金属材料的测试手段等方面仍需作进一步的努力。

《金属学与热处理》是机械制造类各热加工专业的基础技术课,其主要目的是使学生获得有关金属材料的基本理论知识,并在正确选用常用金属材料、合理使用金属材料及选用热处理工艺等方面获得初步训练。

《金属学与热处理》是以物理、化学、材料力学、物理化学、金属工艺学等为基础的一门科学。在学习时,应该经常联系上述基础科学的有关部分,以加深理解。同时,《金属学与热处理》又是金属压力加工、铸造、焊接等热加工工艺的基础。因此,除在学习时应尽可能联系有关热加工工艺外,在今后学习有关专业课程时,也应经常与本书的有关部分联系,以求牢固掌握。

《金属学与热处理》是一门从生产实践中发展起来,而又直接为生产服务的科学,是一门密切结合实际的科学。学习时,不但要注意学习系统的理论,而且要注意联系生产实际及实验室试验。

第一章 金属的晶体结构

§ 1-1 金 属

一、金属的特性

对于金属，大家并不生疏，象钢、铁、铜、铝等，都是工农业和国防以及日常生活中大量使用的金属材料。早在三千年以前，我国劳动人民就已经开始生产和使用青铜与生铁。在长期的生产实践中人们发现，固态金属具有许多特性，这些特点成为人们鉴定金属的根据。

固态金属的特性主要表现在：不透明、有光泽、有延展性、有良好的导电性和导热性，并且随着温度的升高，金属的导电性降低，电阻率增大，即金属具有正的电阻温度系数，这是金属独具的一个特点。而一切非金属都与此相反，随着温度升高，非金属的电阻率减小，导电性提高。固态金属的这些特性，是由金属原子的结构特点和金属原子结合的特点所决定的。

在化学元素周期表中，已发现的化学元素共有 105 种，其中有 83 种是金属元素，约占 4/5。在这 83 种金属元素中，有 71 种是存在于自然界中的天然元素，其余 12 种是用人工方法获得的人造元素。随着科学研究的发展，今后还会有新的金属元素被发现出来。

二、金属原子的结构特点

原子是由带正电的原子核与带负电的核外电子组成的。每个电子都在原子核外的一定“轨道”上高速运动着，形成一层层的电子层。

金属原子的结构特点是，最外电子层的电子数很少，一般只有一、二个，而且这些最外层电子与原子核的结合力较弱，很容易脱离原子核的束缚而变成自由电子。因此，金属原子很容易丢失外层电子而变成正离子。

在钢中经常用到的金属元素，除铁之外，还有钛、钒、铬、锰、钴、镍、钨、钼等，这些都是过渡族金属。过渡族金属的原子结构，除了具有上述特点之外，还有一个特点，就是在次外层尚未填满电子的情况下，最外层就先填充了电子。因此，过渡族金属的原子不仅容易丢失最外层电子，而且还容易丢失次外层的一、二个电子，这就出现过渡族金属的化合价可变的现象。当过渡族金属原子互相结合时，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，宏观上就表现为过渡族金属的熔点高，强度大。过渡族金属在金属材料工业中占有极其重要的地位。

三、金属键

在气态金属中，原子之间距离较远，只是偶而发生碰撞，彼此之间并不存在结合键。当金属原子互相靠近达到一定程度而变成液态金属和固态金属时，原子之间就形成了结合键，使原子紧凑而规则地排列在一起。金属原子间的结合键称为金属键。

金属原子越靠近，相互作用越强，靠近到一定程度，相邻原子的最外电子层发生交叠，价电子的运动状态发生变化，原来单个原子中的每一个价电子能级，都分裂成许多个不连续的新能级，形成一个“能带”。这样一来，每个金属原子的价电子层都变成很宽的彼此交叠

的能带，成为所有价电子的“公共通道”。每个原子的价电子不再只围绕自己的原子核转动，而是在所有原子之间运动，成为“公有化”的自由电子。价电子被公有化以后的金属原子就成为正离子，而自由电子则好象一种气体充满其间，被称为“电子气”。带负电的自由电子与带正电的金属正离子之间产生静电吸引力，使金属原子结合在一起。这就是金属键的本质。

图1-1 示意地绘出金属键的模型。在实际的固态金属中，并非所有的金属原子都变成了正离子，而是绝大部分处于正离子状态，还有小部分仍处于中性原子状态，并且金属原子的这种状态也是在不断地变化的。

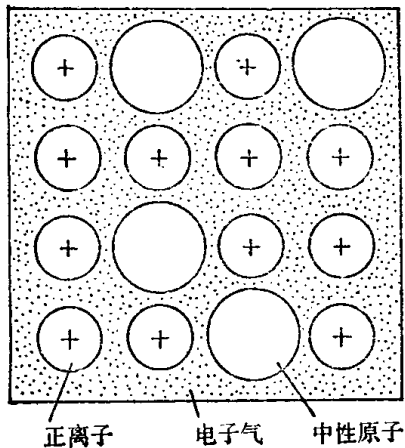


图1-1 金属键的模型

了解了金属键的本质，就可以比较深刻地理解固态金属的一些特性。

在外加电场作用下，固态金属中的自由电子能够沿电场方向加速运动，所以金属具有良好的导电性。加速运动的自由电子与偏离平衡位置的金属正离子发生碰撞，使电子速度降低，这在宏观上就表现为电阻。当金属温度升高时，正离子的热运动加剧，使自由电子与正离子的碰撞几率增大，宏观看来，就是金属的电阻随着温度的升高而增大，即金属具有正的电阻温度系数。

在固态金属中，不仅借正离子的振动可以传递热能而且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。

金属中的自由电子很容易吸收可见光而被激发到较高的能级，当它跳回原来的能级时，就把吸收的可见光能量重新辐射出来，所以金属不透明，有光泽。

在固态金属中，电子气好象是一种流动的万能胶，把所有的正离子都结合在一起。所以，金属键并不十分挑选结合对象，也没有方向性与饱和性。当一块金属的两部分发生相对位移时，金属正离子始终包围在电子气中，因而始终保持着金属键。这样，金属就能经受变形而不断裂，具有延展性。

四、金属的结合能

在固态金属中，原子依靠金属键牢固地结合在一起。如果用外力把这些原子互相拉开，拆散成单个原子，所消耗的能量就相当于金属的结合能。

在固态金属中，每个原子周围都有几个最近邻的原子，只要了解了最近邻原子间的相互作用，便可了解整个金属中原子间的作用情况。下面就来研究最近邻原子间的结合力与结合能。

(一) 原子作用模型

当金属原子互相靠近而形成固态金属时，相邻二原子之间便发生两种相互作用：一种是相互吸引作用，促使原子接近，这种吸引作用来源于金属正离子与周围电子气之间的静电吸引力；另一种是相互排斥作用，促使原子彼此离开，这种排斥作用来源于正离子与正离子之间和电子与电子之间的静电排斥力。特别是当原子过分靠近使得电子层发生重叠时，电子动能增高，使排斥力急剧增大。排斥力是一种短程力，而吸引力是一种长程力。原子间的结合力就是由吸引力与排斥力合成的。同样的，原子间的结合能也是由吸引能与排斥能合成的。

图1-2表示出A原子对B原子的作用力和作用能随原子间距 D 的变化。由图可见,当原子间距较大时,吸引力大于排斥力,原子互相吸引,自动靠近,同时伴随着作用能的降低。原子靠近到一定距离以后,排斥力急剧增长,其增长速度大于吸引力的增长速度。当原子过分靠近时,排斥力大于吸引力,原子便互相排斥,自动离开。同时伴随着作用能的降低。当原子间距为 D_0 时,吸引力与排斥力恰好相等而平衡,原子既不会自动靠近,也不会自动离开,恰好处于平衡位置。这时,原子处于作用能曲线的谷底,势能最低,最稳定。在固态金属中,绝大多数原子都处于这种势能最低的平衡位置,既不受吸引力,也不受排斥力。如果原子偏离平衡位置,不论向哪个方向偏离,立刻会受到一个力的作用,促使它回到平衡位置。然而事实上,原子的热运动永远不会停止,原子不会静止在平衡位置上,而是围绕平衡位置进行着无序的热振动。

如果在外力作用下,使B原子逐渐远离A原子,则A、B原子间的相互吸引力逐渐增大,同时,相互作用能也升高,B原子处于作用能曲线的“半坡”位置,越来越不稳定。当B原子被拉到 D_c 位置时,吸引力达到最大值,这一点对应着作用能曲线的拐点。拉过 D_c 点以后,吸引力越来越小,故拉开B原子所需的力就越来越小,直至为零。可见,原子间的最大结合力不是出现在平衡位置,而是在 D_c 位置上。这个最大结合力就对应着金属的理论抗拉强度,它比实际抗拉强度要大千倍以上。

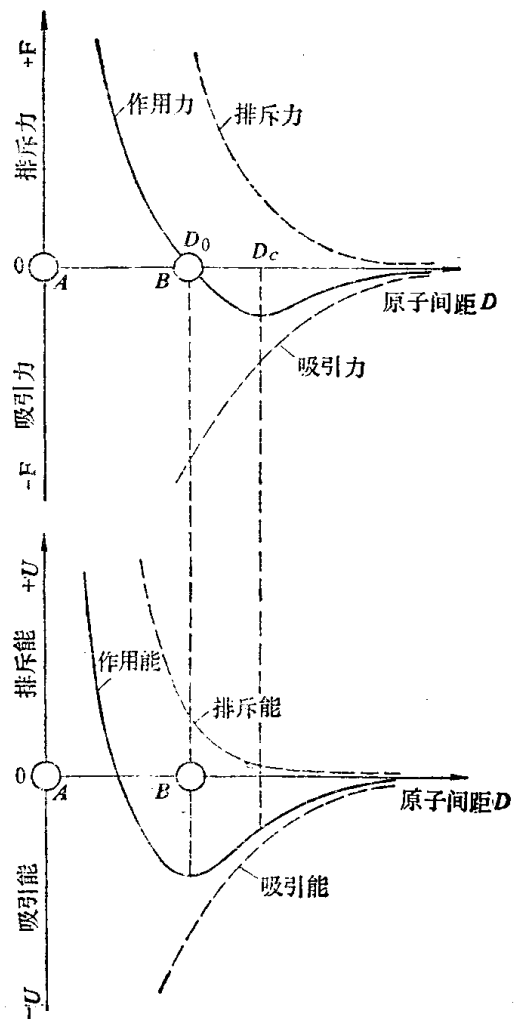


图1-2 双原子作用模型

图1-3是三原子作用模型,分别绘出A原子和C原子对B原子的作用能曲线 U_A 和 U_C ,以及由它们合成的总作用能曲线 U_{A+C} 。由图可见,由于两侧原子的共同作用,使B原子处于一个对称的势能谷中,而且能谷更深了。能谷的深浅反映出原子结合的强弱。能谷越深,则结合能越大,金属键越强,原子结合越牢固。

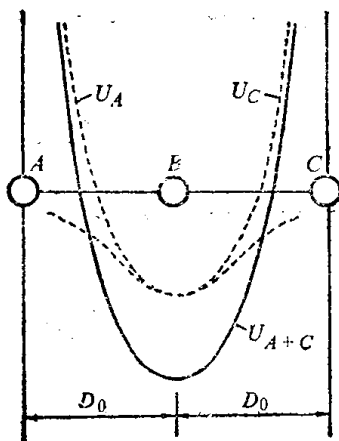


图1-3 三原子作用模型

在固态金属中,每个原子的四面八方都被相邻原子包围着,因此,每个原子都处于周围原子共同形成的势能谷中。相邻势能谷之间都被一个能量升高的“势垒”隔开。原子结合得越强,则能谷越深,势垒越高。在固态金属中,无论向哪方向看,原子结合能都是一峰一谷地周期变化着,被称为周期势场,如图1-4所示。这种周期势场使金属原子也按周期规律排列起来。

(二) 激活能

已经知道,在固态金属中,原子的每个平衡位置都对应着一

个势能谷，在相邻的平衡位置之间都隔着一个势垒。所以，相邻的两个原子不会合并在一处，也很难互相换位。但是，在足够高的温度下，固态金属中的原子是可以改变位置的。这时，原子必须具有足够大的动能，足以克服势垒高度 Q ，才能越过势垒，跳入相邻的势能谷中去，如图 1-5 所示。原子克服势垒所必需的能量称为激活能，它在数值上等于势垒高度 Q 。原子结合得越强固，则势垒越高，激活能越大，原子越不容易跃迁换位。

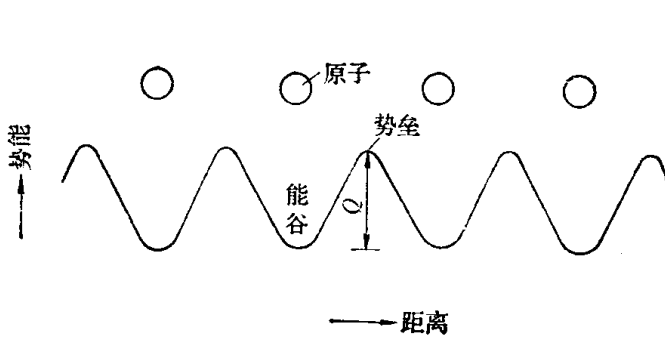


图1-4 固态金属中的周期势场

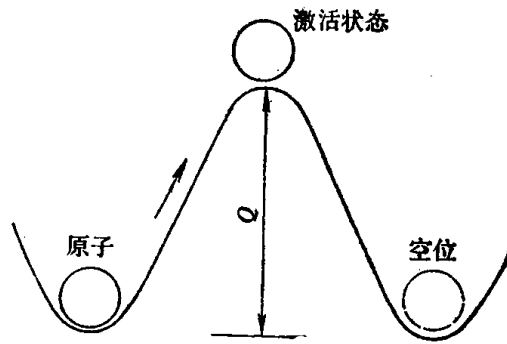


图1-5 原子跃迁示意图

若按原子热运动的平均能量来说，它是不可能越过势垒的，必须给它补充一额外的能量，才能实现一次跃迁。这一额外的能量通常是由于相邻原子的热碰撞而偶然获得的，这就是热激活的过程。被激活的原子在克服势垒跳入新位置时，又把多余的能量通过热碰撞而传给周围的原子。因此，在固态金属中，每一瞬间都有一些原子的能量高于平均能量，也有一些原子的能量低于平均能量。由于原子不断地热碰撞，所以各个原子的能量都在此起彼伏地变化着，总有某些原子处于激活状态。这种微观现象称为能量起伏。

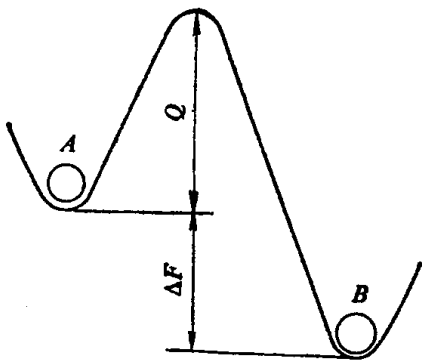


图1-6 不对称的势能曲线

在有些情况下，相邻两个平衡位置的势能谷深度不同，如图 1-6 所示。这时，原子由 A 跳入 B 所需要的激活能是 Q ，当它落入势能谷 B 时，不仅放出多余能量 Q ，还要放出自由能 ΔF 。反过来，原子也能由 B 向 A 跃迁，这时需要的激活能变为 $Q + \Delta F$ 。由于两边面临的势垒高度不同，因此两个方向跃迁的难易也大不同，显然，原子由 A 向 B 跃迁要比反向跃迁容易得多。

原子跃迁的难易和快慢可以用跃迁几率来表示。理论研究表明，在温度 T (K) 时，任何一个原子的跃迁几率 p 都服从下述规律：

$$p = p_0 e^{-\frac{Q}{KT}} \quad (1-1)$$

式中 p_0 是常数， Q 是激活能 (J/mol)， K 是波尔茨曼常数， $K = 1.38 \times 10^{-23} \text{J/K}$ 。⊖

对于一摩尔原子来说，跃迁几率则为：

$$p = p_0 e^{-\frac{Q}{RT}} \quad (1-2)$$

式中 R 是气体常数， $R = 8.31 \text{J/mol} \cdot \text{K}$ 。

⊖ 本节中的激活能值均已换算成国际单位 J/mol (焦耳/摩尔原子)，切勿与旧单位卡/克原子相混淆。两种单位的换算是：1卡/克原子 = 4.1868焦耳/摩尔原子，或 1焦耳/摩尔原子 = 0.239卡/克原子。

由公式可见，激活能越小，温度越高，则比值 Q/RT 越小， p 值越大，即原子跃迁几率越大。反之则跃迁几率越小。

§ 1-2 金属晶体

一、晶体的特点

对于晶体，大家也并不生疏。人们吃的食盐、冬天河里冻的冰，都是晶体。一般的固态金属及合金也都是晶体。

是否任何固态物质都是晶体呢？不是。象玻璃、松香之类就不是晶体。目前有一些特殊成分的合金，由液态激冷也可制成非晶质金属。

晶体与非晶体的区别不在外形，而在内部的原子排列。在晶体中，原子按一定规律排列得很整齐。而在非晶体中，原子则是散乱分布着，至多有些局部的短程规则排列。

由于晶体与非晶体中原子排列不同，因此性能也不同。晶体具有一定的熔点，非晶体则没有。在熔点以上，晶体变成液体，处于非结晶状态。在熔点以下，液体又变成晶体，处于结晶状态。熔点就是物质的结晶状态与非结晶状态互相转变的临界温度。固态非晶体则是液体在冷却时没有来得及变成晶体就凝固了，所以它实质上是一种过冷的液体。

晶体的性能在不同方向上具有不同的数值，即各向异性，而非晶体则是各向同性的。再有，许多晶体的天然外形呈现出规则的几何形状，保持一定的晶面角，具有一定的对称性，而非晶体则没有这些特点。

总之，晶体的最大特点就是内部原子按一定规律整齐地排列着。本章研究金属的晶体结构，就是研究金属晶体内部原子排列的规律性。

二、晶体内部的原子排列

实际使用的工业纯铁、纯铝、纯铜等等都是多晶体，是由无数个晶粒组成的。利用X射线结构分析和场离子显微镜研究发现，在金属多晶体中，每个晶粒内部的原子排列都是大体上整齐一致的，但是，不同晶粒中原子排列的位向并不相同，因此在晶粒交界处，两边原子的排列不能恰好衔接一致，因而出现一个原子排列不太规则的过渡区，这就是晶粒界面。由于晶界的存在，破坏了整块晶体的完整性，使原子的规则排列只存在于每个晶粒内部，如图1-7所示。

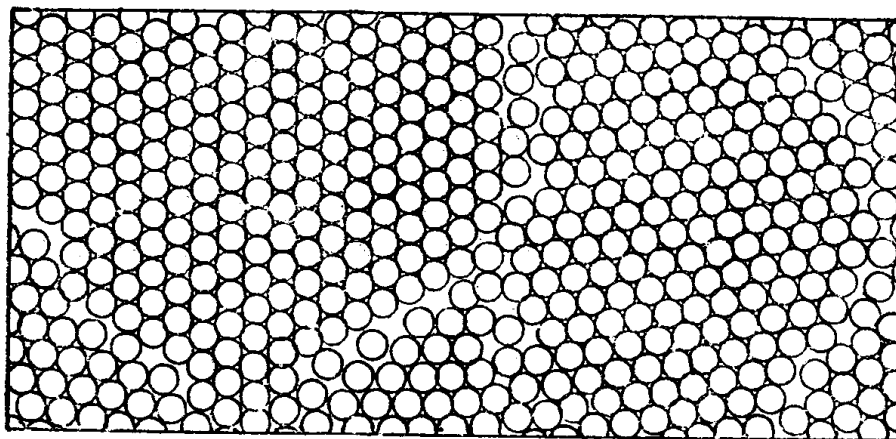
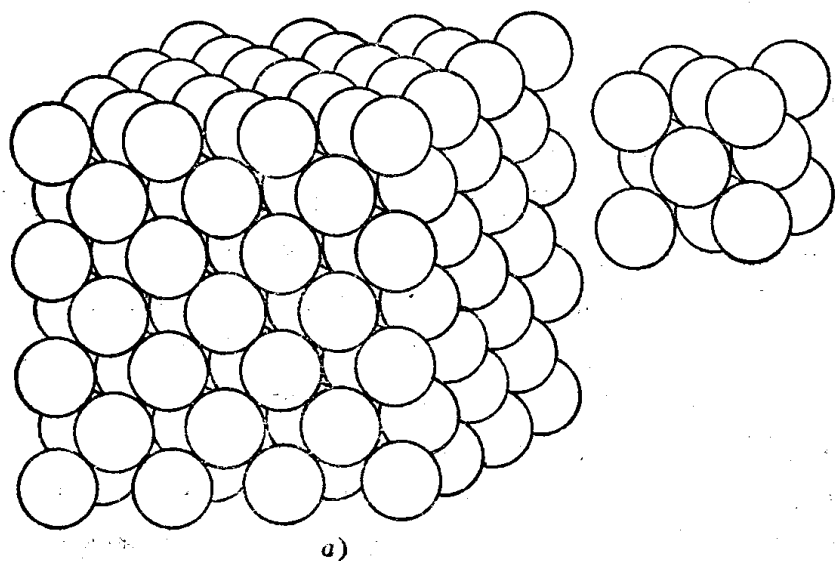


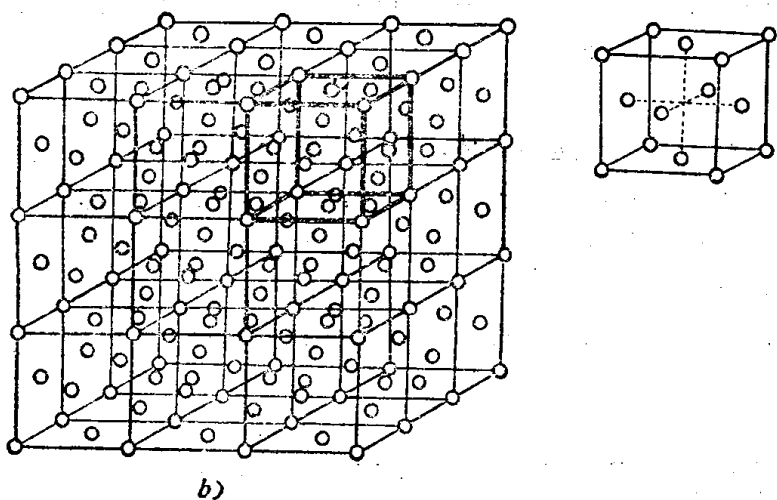
图1-7 多晶体中原子排列示意图

为了研究原子排列的规律，可以近似地把晶粒内部看作理想晶体。所谓理想晶体，其特点是原子排列绝对整齐，一点儿缺陷都没有。当然，理想晶体在现实中是不存在的。但是，在研究原子排列的规律时，这样的简化模型还是很必要的。

图1-8a)绘出原子在空间堆积的球体模型。可以看出，原子在各方向的排列都是很规则的。这种球体模型的优点是立体感强，很直观。缺点是许多球体密密麻麻地堆积在一起，很难看清内部的排列规律和特点，不便于研究。为了清楚表明原子在空间排列的规律，有必要



将原子抽象化，把每个原子看成一个点，这个点代表原子的振动中心。这样，原子在空间堆积的球体模型就变成一个规则排列的空间点阵（见图1-8b），把这些点用直线连接起来，就形成一个空间格子，称为晶格。显然，点阵和晶格都是晶体原子规则排列的抽象化。



晶格中的每个点称为结点。结点代表原子在晶体中的平衡位置。在晶格中，结点的分布具有周期性的规律，因此，每个结点都具有完全相同的周围邻点。这是晶格的一个重要特点。

由于晶格具有周期性特点，因此，可以从晶格中取出一个有代表性的结构单元来研究，这样的结构单元称为晶胞。可以认为，整个晶格就是由晶胞

图1-8 晶体原子排列的球体模型，晶格和晶胞

在空间重复堆积而成的。晶胞中原子排列的规律能够完全代表整个晶格的原子排列规律，因此可以说，晶胞就是构成晶格的细胞。利用晶胞来反映晶体原子排列的规律性，就比用一大堆晶格更为简单明了。今后研究各种金属的晶体结构时，一般都是取出它的晶胞来研究的。

§ 1-3 典型的金属晶体结构

在已知的八十余种金属元素中，除少数十几种金属具有复杂的晶体结构以外，大多数金

属都具有比较简单的晶体结构。其中，最典型、最常见的金属晶体结构有三种，就是体心立方晶格，面心立方晶格和密排六方晶格。

为什么大多数金属都具有这三种比较简单的晶格呢？这是金属键的特点所决定的。金属键没有方向性和饱和性，也不十分挑选结合对象，所以金属原子结合在一起时，总是趋于结合得最紧凑、最密集。这种最紧密的排列方式就构成了面心立方晶格和密排六方晶格，而次紧密的排列方式就构成了体心立方晶格。

一、体心立方晶格

体心立方晶胞如图 1-9 所示。在晶胞的八个角上各有一个原子，构成立方体。在立方体中心还有一个原子，所以叫作体心立方晶胞。

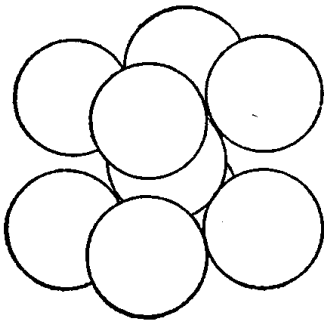


图1-9 体心立方晶胞

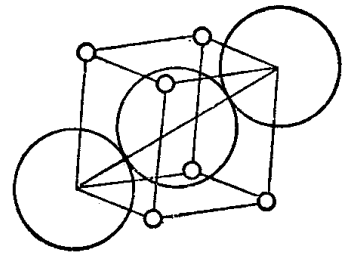
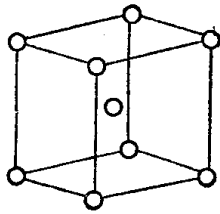


图1-10 原子沿空间对角线的排列

晶胞的棱边长度称为晶格常数。立方晶胞的各棱边长度全相等，以 a 来表示，用 \AA 作单位， $1 \text{\AA} = 10^{-8} \text{cm}$ 。

由图 1-10 可见，在体心立方晶胞的空间对角线方向，原子互相接触地排列着，相邻原子的中心距恰好等于原子直径。空间对角线的长度是 $\sqrt{3}a$ ，等于 4 个原子半径，所以，体心立方晶胞中的原子半径 $r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$ 。

晶胞中原子排列的紧密程度，可以用两个参数来反映：一个是配位数，一个是致密度。

在晶体中，每个原子周围都有完全相同的近邻原子。配位数就是每个原子周围的最近邻原子数。显然，配位数越大，则原子排列得越紧密。

体心立方晶格可以看成是由两个简单立方晶格穿插排列而成，如图 1-11 所示。在个体心立方晶胞中，无论是体心的原子，还是角上的原子，周围都有 8 个最近邻原子，所以配位数是 8。

由于原子是球体，所以，即使是一个挨一个地最紧密排列着，原子之间仍有空隙，而不可能把空间完全填满。原子排列得越紧密，填满的程度就越大。致密度就是晶胞中原子所占体积与晶胞体积之比。

个体心立方晶胞含有几个原子呢？由图 1-12 可见，每个角上的原子属于 8 个晶胞共有，故只有 $\frac{1}{8}$ 原子属于这个晶胞。而体心原子完全属于这个晶胞。所以，个体心立方晶胞中的原子数是 $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$ 。

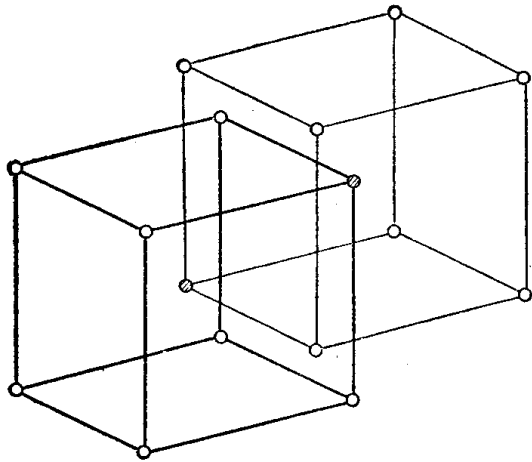


图 1-11

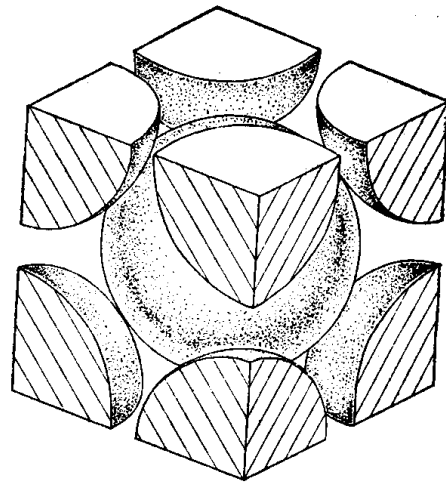


图1-12 体心立方晶胞

已知原子半径 $r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$, 所以每个原子的体积为 $\frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^3 = \frac{\sqrt{3}}{16}\pi a^3$ 。

体心立方晶胞的致密度 = $\frac{2 \text{ 个原子体积}}{\text{晶胞体积}} = \frac{2 \times \frac{\sqrt{3}}{16}\pi a^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi \approx 0.68$ 。

体心立方晶格中有两种间隙位置, 一种是八面体间隙, 另一种是四面体间隙, 如图1-13

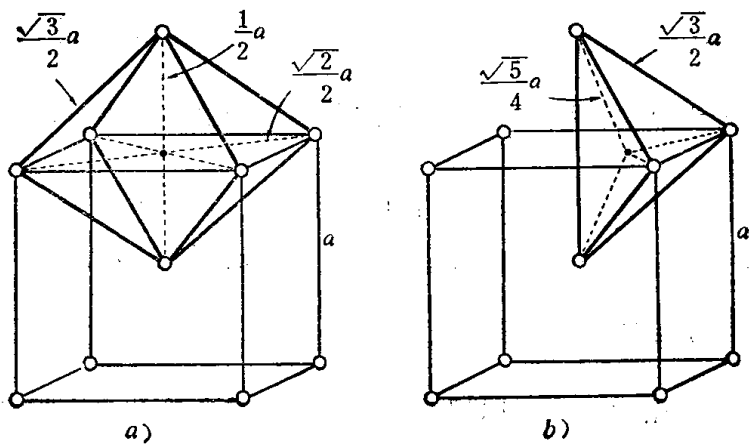


图1-13 体心立方晶格中的间隙位置

a) 八面体间隙 b) 四面体间隙

所示。由图可见, 八面体间隙是由6个原子围成的, 四角上的原子中心到间隙中心的距离较远, 为 $\frac{\sqrt{2}}{2}a$; 上下顶点的原子中心到间隙中心的距离较近, 为 $\frac{1}{2}a$ 。因此这是个扁八面体

间隙。间隙的最小半径为 $\frac{1}{2}a - \frac{\sqrt{3}}{4}a = \frac{2 - \sqrt{3}}{4}a \approx 0.067a$ 。这种扁八面体间隙位置分布在各面的中心和各棱的中点处, 它们在晶体学上是空间等效的。

四面体间隙是由4个原子围成的。原子中心到间隙中心的距离皆为 $\frac{\sqrt{5}}{4}a$, 减去原子半径 $\frac{\sqrt{3}}{4}a$, 就是间隙的半径: $\frac{\sqrt{5} - \sqrt{3}}{4}a \approx 0.126a$ 。可见, 在体心立方晶格中, 四面体间