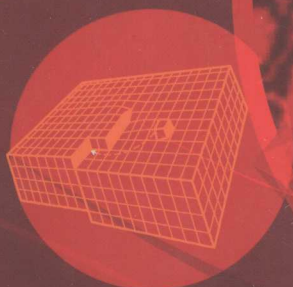


“十二五”普通高等教育本科规划教材

金属学及热处理

王毅坚 索忠源 主编



化学工业出版社

014012849

TG1-43
07

“十二五”普通高等教育本科规划教材

金属学及热处理

王毅坚 索忠源 主编



TG1-43

07



化学工业出版社

· 北京 ·



北航

C1699751

038510310

“金属学及热处理”是高等院校材料类及机械类相关专业的一门专业技术基础课。本书内容分为金属学原理和热处理原理与工艺两部分。书中全面系统地介绍了金属与合金的晶体结构、金属与合金的结晶与相图、扩散、塑性变形与再结晶、金属固态相变基本理论、强韧材料的热处理工艺、设备以及技术方法等知识。本教程具有基础性、实用性、实践性强、知识面广等特点。

本书可作为热加工专业的基础课教材,适用于高等学校材料成型及控制工程、焊接技术与工程、材料科学与工程、材料加工工程、材料专业的学生,也可供非材料专业(如机械制造、工业工程、化学工程)的学生以及工程技术人员参考。

金属学及热处理

王毅 索忠源 主编

图书在版编目(CIP)数据

金属学及热处理/王毅坚,索忠源主编. —北京:化学工业出版社, 2014.2

“十二五”普通高等教育本科规划教材

ISBN 978-7-122-19103-8

I. ①金… II. ①王…②索… III. ①金属学-高等学校-教材②热处理-高等学校-教材 IV. ①TG1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2013) 第 279238 号

责任编辑:程树珍

责任校对:宋 夏

文字编辑:项 澈

装帧设计:张 辉

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)

印 装:三河市延风印装厂

787mm×1092mm 1/16 印张16¼ 字数425千字 2014年2月北京第1版第1次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价:39.00 元

版权所有 违者必究

前 言

“金属学及热处理”是高等院校材料类及机械类相关专业的一门专业技术基础课。本书内容包括金属学原理、热处理原理与工艺两大部分。金属学原理着重阐述金属及合金的化学成分、组织、结构与性能之间的内在联系。热处理原理与工艺部分主要阐述钢在不同工艺条件下的组织转变规律,介绍基本的、成熟的和有用的相变理论。此外,为了拓宽学生的实践能力以及知识面,本教材中有意识地增加了热处理设备以及现代热处理技术。本书重在理论联系实际,有利于读者融会贯通,各部分内容既相对独立又相互联系,便于教师在教学中根据需要选用。根据教学大纲的规定,建议讲授理论部分课时为80~96学时。

本书在编写时注意讲清问题的来龙去脉,指明思路,并进行归纳总结;叙述上力求由浅入深,深度适中,循序渐进,便于教学。具有基础性、实用性、实践性强、知识面广等特点,充分体现了金属学及热处理的发展与现代材料科学、制造技术、信息技术及现代管理科学技术等学科的密切交叉与渗透。在教材编写过程中,一方面力求使教材内容体现基础理论知识的平台作用,使读者通过学习掌握必要的基础知识;另一方面力求充分体现热处理工艺的发展趋势,体现材料处理方法对不同学科交叉与渗透的积极作用,以拓宽读者的知识面,增强创新意识。

本书具有以下特点。

(1) 处理好理论与实践内容的关系。本书以实际应用为目的介绍必要的理论知识,同时尽量做到深入浅出,对工程上实际需求的内容进行较深入的分析,对各种材料处理方法进行比较分析,力求提高学生分析问题和解决问题的能力。

(2) 适应不同院校对教学的需求,满足学生的个性发展与实践能力的要求。本书增加了热处理设备及现代热处理新技术等章节的内容。

(3) 采用最新国家标准,包括名词术语、符号及法定计量单位等。建立新概念,阐述新理论、新工艺、新材料。

本书由王毅坚、索忠源主编,第1~第3章由李廷取编写;第4~第6章由索忠源编写;第7章由王毅坚编写;第8、第9章由姜峰编写;第10章及各章复习思考题由王鑫编写;书中图片及资料由王文革收集。

本书的主要对象是高等学校的材料成型及控制工程、焊接技术与工程、材料加工工程专业的大学生,也可供非材料专业(如机械制造、工业工程、化学工程)的学生以及工程技术人员参考。

在编写过程中参考了许多著作、教材等资料,也得到了吉林化工学院邵泽波教授的大力支持与指导,在此一并表示感谢。

由于编者水平有限,书中难免存在不足之处,敬请读者批评指正。

编者

2013年10月

目 录

第1章 金属学原理	1	2.5.6 晶粒大小及其控制	39
1.1 晶体学基础	1	2.6 金属铸锭的结构与缺陷	41
1.1.1 空间点阵和晶胞	1	2.6.1 铸锭(件)的组织	41
1.1.2 晶向指数和晶面指数	3	2.6.2 铸锭(件)中的缺陷	43
1.1.3 晶带定律和晶面间距	5	复习思考题	46
1.1.4 晶体投影	7	第3章 相图	47
1.2 纯金属的晶体结构	7	3.1 二元合金相图的建立	47
1.2.1 三种典型金属晶体结构及特征	7	3.2 匀晶相图	50
1.2.2 典型晶体结构中的间隙	9	3.3 共晶相图	51
1.3 合金的相结构	11	3.4 包晶相图	53
1.3.1 合金相分类	11	3.5 二元相图的分析使用	55
1.3.2 固溶体分类	12	3.6 三元合金相图	57
1.3.3 影响固溶度的因素	13	3.6.1 三元相图的表示方法及特征线	57
1.3.4 金属化合物	14	3.6.2 三元系相图中的定量法则	58
1.4 金属晶体缺陷	17	3.6.3 三元相图总结	62
1.4.1 点缺陷	18	复习思考题	63
1.4.2 线缺陷	19	第4章 固态金属的扩散	64
1.4.3 面缺陷	22	4.1 扩散机制	64
复习思考题	25	4.1.1 扩散驱动力	64
第2章 纯金属的结晶	26	4.1.2 扩散微观机制	65
2.1 金属结晶的过冷现象	26	4.1.3 固态扩散种类	66
2.2 金属结晶的热力学条件	27	4.2 扩散方程	67
2.3 金属结晶的结构条件	28	4.2.1 扩散第一定律	67
2.4 晶核形成	29	4.2.2 扩散第二定律	68
2.4.1 均匀形核	29	4.3 影响扩散的因素	68
2.4.2 非均匀形核	30	4.3.1 温度的影响	69
2.4.3 影响形核的主要因素	32	4.3.2 晶体结构的影响	69
2.4.4 形核率	32	4.3.3 固溶体类型的影响	70
2.5 晶核长大	34	4.3.4 晶体缺陷的影响	70
2.5.1 固液界面的微观结构	35	4.3.5 化学成分的影响	70
2.5.2 晶体长大机制	36	复习思考题	72
2.5.3 固液界面前沿液体中的温度梯度	38	第5章 铁碳合金	73
2.5.4 晶体生长的界面形状	38	5.1 铁碳合金的组元及基本相	73
2.5.5 晶体生长速率	39	5.1.1 铁碳合金的组元	74
		5.1.2 铁碳合金中的基本相	75

5.2 Fe-Fe ₃ C 相图分析	76	复习思考题	106
5.2.1 相图中的特性点	76	第6章 金属的塑性变形、回复和再结晶	107
5.2.2 相图中的特性线	77	6.1 单晶体的塑性变形	107
5.3 铁碳合金的平衡结晶过程及组织	78	6.1.1 滑移	107
5.3.1 工业纯铁的平衡结晶过程		6.1.2 滑移的位错机制	111
..... ($w_C=0.01\%$)	80	6.1.3 孪生	114
5.3.2 共析钢的平衡结晶过程	80	6.2 多晶体的塑性变形	115
..... ($w_C=0.77\%$)	80	6.2.1 多晶体塑性变形的特点	116
5.3.3 亚共析钢的平衡结晶过程	81	6.2.2 晶粒大小对力学性能的影响	116
..... ($w_C=0.40\%$)	81	6.3 塑性变形对金属组织与性能的影响	117
5.3.4 过共析钢的平衡结晶过程	83	6.3.1 组织结构的变化	117
..... ($w_C=1.20\%$)	83	6.3.2 性能变化	118
5.3.5 共晶合金的平衡结晶过程	84	6.3.3 变形组织	119
..... ($w_C=4.30\%$)	84	6.3.4 残留应力	120
5.3.6 亚共晶白口铸铁的平衡结晶过程 ($w_C=3.0\%$)	84	6.4 冷变形金属的回复与再结晶	121
5.3.7 过共晶白口铸铁的平衡结晶过程 ($w_C=5.0\%$)	85	6.4.1 冷变形金属在加热时的变化	121
5.4 含碳量对铁碳合金平衡组织和性能的影响	87	6.4.2 回复动力学	123
5.4.1 含碳量对铁碳合金平衡组织的影响	87	6.4.3 回复机制	124
5.4.2 含碳量对铁碳合金力学性能的影响	88	6.4.4 回复以后金属性能的变化	125
5.4.3 含碳量对铁碳合金工艺性能的影响	88	6.4.5 再结晶晶核的形成与长大	125
5.5 铁碳相图在材料加工中的应用	89	6.4.6 再结晶温度及其影响因素	127
5.5.1 在钢铁材料选用方面的应用	89	6.4.7 晶粒长大	130
5.5.2 在铸造工艺方面的应用	89	6.5 金属的热加工	134
5.5.3 在热锻、热轧工艺方面的应用	89	6.5.1 动态回复与动态再结晶	134
5.5.4 在热处理工艺方面的应用	90	6.5.2 热加工后的组织与性能	136
5.6 碳钢	90	6.6 超塑性	137
5.6.1 钢铁材料的生产过程	90	6.6.1 超塑性的表示	138
5.6.2 钢锭的组织及缺陷	90	6.6.2 影响超塑性的因素	138
5.6.3 碳钢的分类、牌号及应用	94	6.6.3 超塑性变形后的组织变化	139
5.7 铸铁	99	6.6.4 超塑性变形的机制	139
5.7.1 铸铁组织的形成	99	复习思考题	140
5.7.2 铸铁组织与性能特点	101	第7章 钢的热处理原理	141
5.7.3 铸铁的分类	101	7.1 钢在加热时的组织转变	141
5.7.4 常用铸铁	102	7.1.1 奥氏体的组织结构	141
		7.1.2 奥氏体的形成	142
		7.1.3 奥氏体化	142
		7.1.4 影响奥氏体化的因素	144
		7.1.5 奥氏体晶粒的长大及影响因素	145

7.1.6 细化奥氏体晶粒的措施	149	第9章 钢的热处理设备及其发展	217
7.2 钢在冷却时的组织转变	149	9.1 概述	217
7.2.1 概述	149	9.2 热处理电炉的近代发展	218
7.2.2 共析钢过冷奥氏体的等温转变图	150	9.3 各种热处理设备及其发展	222
7.2.3 影响C曲线位置和形状的因素	151	9.3.1 电阻炉	222
7.3 钢的过冷奥氏体转变	154	9.3.2 井式气体渗碳炉	225
7.3.1 珠光体转变	154	9.3.3 热处理浴炉	225
7.3.2 马氏体转变	160	9.3.4 流动粒子炉	227
7.3.3 贝氏体转变	169	9.3.5 真空热处理炉	229
7.4 过冷奥氏体连续冷却转变曲线	176	9.3.6 可控气氛炉	231
7.4.1 过冷奥氏体连续冷却转变图的建立	177	9.3.7 等离子热处理炉	236
7.4.2 过冷奥氏体连续冷却转变曲线分析	177	9.3.8 表面改性热处理设备	238
7.4.3 CCT曲线和C曲线的比较与应用	177	复习思考题	240
7.5 钢的回火转变	178	第10章 钢的热处理新技术	241
7.5.1 淬火钢回火时的组织转变	179	10.1 可控气氛热处理	241
7.5.2 淬火钢在回火时的力学性能变化	183	10.2 真空热处理	242
7.5.3 钢的回火脆性	184	10.2.1 真空热处理的特点	242
复习思考题	185	10.2.2 真空热处理工艺	242
第8章 钢的热处理工艺	186	10.3 钢的强韧化处理	243
8.1 钢的退火与正火	186	10.3.1 奥氏体晶粒超细化处理	244
8.1.1 钢的退火	186	10.3.2 改善钢中第二相分布形态的强韧化淬火	245
8.1.2 钢的正火	190	10.3.3 控制马氏体、贝氏体组织形态的淬火	245
8.1.3 退火和正火的选择	191	10.4 表面热处理新技术	246
8.2 钢的淬火与回火	192	10.4.1 高能量密度表面热处理	247
8.2.1 钢的淬火及目的	193	10.4.2 热喷涂技术	248
8.2.2 钢的淬透性	193	10.4.3 气相沉积技术	250
8.2.3 淬火介质	198	10.4.4 离子注入	251
8.2.4 淬火工艺	199	10.4.5 化学镀	252
8.2.5 钢的回火	203	10.5 计算机在热处理中的应用	253
8.2.6 淬火缺陷及防止	204	10.5.1 计算机在常规热处理中的应用	253
8.3 钢的其他类型热处理	207	10.5.2 计算机在化学热处理中的应用	253
8.3.1 钢的形变热处理	207	10.5.3 计算机模拟技术在热处理中的应用研究	255
8.3.2 钢的表面热处理	208	10.5.4 热处理生产线的微机控制	255
8.3.3 钢的化学热处理	212	复习思考题	257
复习思考题	215	参考文献	258

第 1 章 金属学原理

在实际应用的所有材料当中，一半以上都是金属材料为主。而金属材料是以金属元素为基础，以一定的科学原理为依据，设计并制造出来的具有不同成分及性能的合金材料，这些金属材料是现代工业、现代农业、现代军事装备以及各种高尖端科学仪器中不可缺少的物质基础。

经过长期的科学实践证明，金属材料的性能主要取决于它的成分及显微组织，而微观结构的形成过程及其转变规律都是以晶体学为基础的。晶体学是了解金属的微观构造特征与规律的基础。因此，本章以晶体学基础知识作为指导，主要以金属材料为讲解对象。

1.1 晶体学基础

晶体结构的基本特征是原子（或分子、离子）在三维空间呈周期性重复排列，即存在长程有序。因此，晶体与非晶体物质在性能上的区别主要有两点：①晶体熔化时具有固定的熔点，而非晶体却无固定熔点，存在一个软化温度范围；②晶体有各向异性，而非晶体却为各向同性。为了便于了解晶体中原子（离子、分子或原子团等）在空间的排列规律，以能更好地进行晶体结构分析，下面首先介绍有关晶体学的基础知识。

1.1.1 空间点阵和晶胞

实际晶体中的质点（原子、分子、离子或原子团等）在三维空间可以有无限多种排列形式。为了便于分析研究晶体中质点的排列规律性，可先将实际晶体结构看成完整无缺的理想晶体并简化，将其中每个质点抽象为规则排列于空间的几何点，称为阵点。这些阵点在空间呈周期性规则排列并具有完全相同的周围环境，这种由它们在三维空间规则排列的阵列称为空间点阵，简称点阵。为便于描述空间点阵的图形，可用许多平行的直线将所有阵点连接起来，于是就构成一个三维几何格架，称为空间格子，如图 1-1 所示。

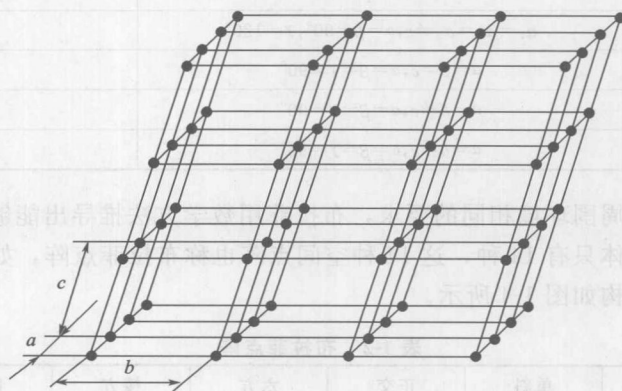


图 1-1 空间点阵

为说明点阵排列的规律和特点，可在点阵中取出一个具有代表性的基本单元（最小平行六面体）作为点阵的组成单元，称为晶胞。将晶胞做三维的重复堆砌就构成了空间点阵。

同一空间点阵可因选取方式不同而得到不同的晶胞，图 1-2 表示出在一个二维点阵中取出的不同晶胞。为此，要求选取晶胞最能反映该点阵的对称性，选取晶胞的原则如下：

- i. 选取的平行六面体应反映出点阵的最高对称性；
- ii. 平行六面体内的棱和角相等的数目应最多；
- iii. 当平行六面体的棱边夹角存在直角时，直角数目应最多；
- iv. 在满足上述条件的情况下，晶胞应具有最小的体积。

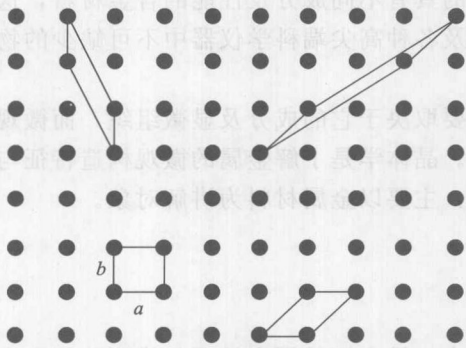


图 1-2 点阵中的晶胞

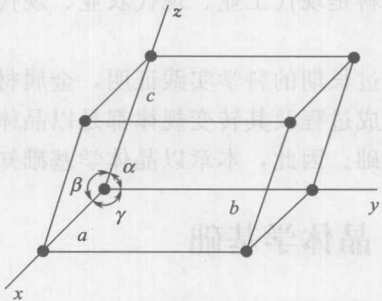


图 1-3 晶胞、晶轴和点阵矢量

为了描述晶胞的形状和大小，通常采用平行六面体中交于一点的三条棱边的边长 a, b, c （称为点阵常数）及棱间夹角 α, β, γ 共 6 个点阵参数来表达，如图 1-3 所示。事实上，采用 3 个点阵矢量 a, b, c 来描述晶胞将更为方便。这 3 个矢量不仅确定了晶胞的形状和大小，并且完全确定了此空间点阵。

根据 6 个点阵参数间的相互关系，可将全部空间点阵归属于 7 种类型，即 7 个晶系，如表 1-1 所列。

表 1-1 7 个晶系特点列表

晶系	棱边长度和夹角	举例
三斜	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	K_2CrO_7
单斜	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	$CaSO_4 \cdot 2H_2O$
正交	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Ga, Fe_3C
六方	$a_1 = a_2 = a_3 \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Mg, Zn, Ti
棱方	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Sb, As
四方	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Sn, TiO_2
立方	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Fe, Cu, Cr

按照每个阵点的周围环境相同的要求，布拉菲用数学方法推导出能够反映空间点阵全部特征的单位平面六面体只有 14 种，这 14 种空间点阵也称布拉菲点阵，如表 1-2 所列。14 种布拉菲点阵的晶胞结构如图 1-4 所示。

表 1-2 布拉菲点阵

晶系	三斜	单斜	正交	六方	棱方	四方	立方
布拉菲点阵	简单三斜	简单单斜 底心单斜	简单正交 底心正交 体心正交 面心正交	简单六方	简单棱方	简单四方 体心四方	简单立方 体心立方 面心立方

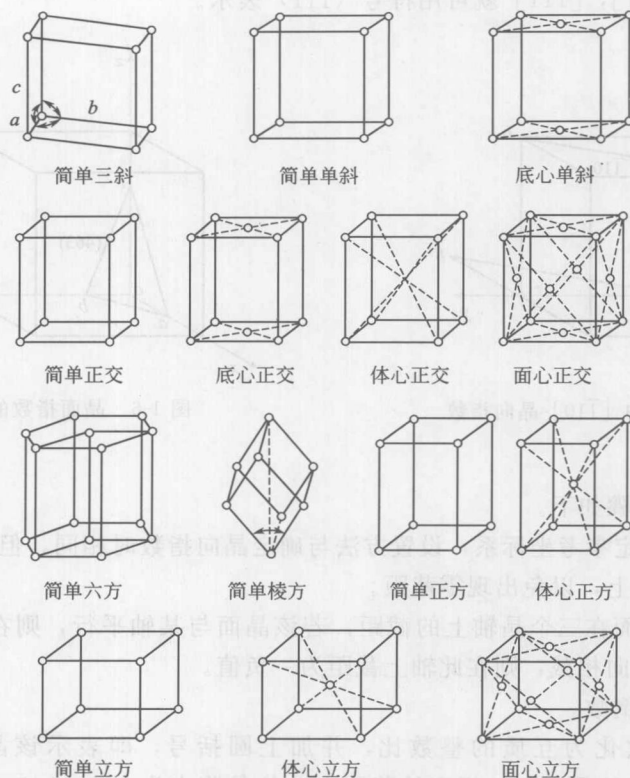


图 1-4 14 种布拉菲点阵的晶胞结构

1.1.2 晶向指数和晶面指数

在材料科学中讨论有关晶体的生长、变形、相变及性能等问题时，常需涉及晶体中原子的位置、原子列的方向（称为晶向）和原子构成的平面（称为晶面）。为了便于确定和区别晶体中不同方位的晶向和晶面，国际上通用密勒（Miller）指数来统一标定晶向指数与晶面指数。

(1) 晶向指数

任意两原子之间连线所指的方向称为晶向，通过三轴坐标的形式表示出来称为晶向指数。从图 1-5 可得知，在三坐标体系中阵点 b' 的位置可由矢量 r_{uvw} 或该阵点的坐标 u, v, w 来确定，即晶向不同的晶向只是 u, v, w 的数值不同而已，故可用简化的 $[uvw]$ 来表示晶向指数。晶向指数的确定步骤如下。

- i. 以晶胞的三个棱边为坐标轴 x, y, z ，以晶胞棱长的长度作为坐标轴的长度单位。
- ii. 过坐标轴原点作一直线，并使其平行于待定晶向。
- iii. 在该直线上选取距原点最近的一个点，求出该点的 3 个坐标值。
- iv. 将这 3 个坐标值化为最小整数 u, v, w ，加以方括号， $[uvw]$ 即为待定晶向的晶向指数。若坐标中某一数值为负，则在相应的指数上加一负号，如 $[\bar{1}10]$ 等。图 1-5 列举了正交晶系的一些重要晶向的晶向指数。

显然，晶向指数表示着所有相互平行、方向一致的晶向。若所指的方向相反，则晶向指数的数字相同，但符号相反。同样，晶体中因对称关系而等同的各组晶向可归并为一个晶向族，用 $\langle uvw \rangle$ 表示。例如，对立方晶系的体对角线 $[111]$ ， $[\bar{1}11]$ ， $[1\bar{1}1]$ ， $[11\bar{1}]$ 和

$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}1\bar{1}]$, $[11\bar{1}]$ 就可用符号 $\langle 111 \rangle$ 表示。

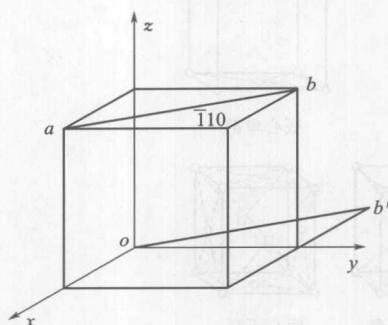


图 1-5 晶胞中 $[\bar{1}10]$ 晶向指数

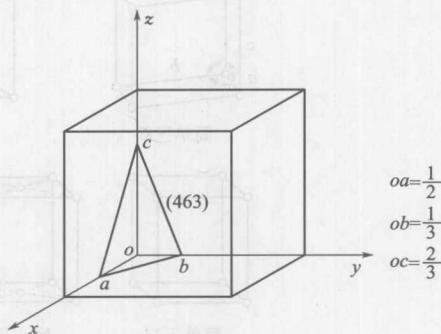


图 1-6 晶面指数的表示方法

(2) 晶面指数

晶面指数标定步骤如下。

i. 在点阵中设定参考坐标系, 设置方法与确定晶向指数时相同, 但不能将坐标原点选在待确定指数的晶面上, 以免出现零截距。

ii. 求得待定晶面在三个晶轴上的截距, 若该晶面与某轴平行, 则在此轴上截距为 ∞ ; 若该晶面与某轴负方向相截, 则在此轴上截距为一负值。

iii. 取各截距的倒数。

iv. 将三个倒数化为互质的整数比, 并加上圆括号, 即表示该晶面的指数, 记为 (hkl) 。图 1-6 待标定的晶面 abc 相应的截距在单位晶胞中为 $1/2$, $1/3$, $2/3$, 其倒数为 2 , 3 , $3/2$, 化为简单整数为 4 , 6 , 3 , 故晶面 abc 的晶面指数为 (463) 。如果所求晶面在晶轴上的截距为负数, 则在相应的指数上方加一负号, 如 $(\bar{1}10)$, $(11\bar{2})$ 等。图 1-6 为正交点阵中一些晶面的面指数。

同样, 晶面指数所代表的不仅是某一晶面, 而是代表着一组相互平行的晶面。另外, 在晶体内凡晶面间距和晶面上原子的分布完全相同, 只是空间位向不同的晶面可以归并为同一晶面族, 以 $\{hkl\}$ 表示, 它代表由对称性相联系的若干组等效晶面的总和。例如, 在立方晶系中:

$$\{110\} = (110) + (101) + (011) + (\bar{1}10) + (\bar{1}01) + (0\bar{1}1) + (\bar{1}\bar{1}0) + (\bar{1}0\bar{1}) + (0\bar{1}\bar{1}) + (1\bar{1}0) + (10\bar{1}) + (01\bar{1})$$

这里前六个晶面与后六个晶面两两相互平行, 共同构成一个十二面体。所以, 晶面族 $\{110\}$ 又称为十二面体的面, 即:

$$\{111\} = (111) + (\bar{1}11) + (1\bar{1}1) + (11\bar{1}) + (\bar{1}\bar{1}\bar{1}) + (1\bar{1}\bar{1}) + (\bar{1}1\bar{1}) + (\bar{1}\bar{1}1)$$

这里前四个晶面和后四个晶面两两平行, 共同构成一个八面体。因此, 晶面族 $\{111\}$ 又称八面体的面。

此外, 在立方晶系中, 具有相同指数的晶向和晶面必定是互相垂直的。例如 $[110]$ 垂直于 (110) , $[111]$ 垂直于 (111) 等。

(3) 六方晶系指数

六方晶系的晶向指数和晶面指数同样可以应用上述方法标定, 这时取 a_1 , a_2 , c 为晶轴, 而 a_1 轴与 a_2 轴的夹角为 120° , c 轴与 a_1 , a_2 轴垂直, 如图 1-7 所示。但按这种方法标定的晶面指数和晶向指数, 不能显示六方晶系的对称性, 同类型的晶面和晶向, 其指数却不

相类同, 往往看不出它们之间的等同关系。例如晶胞的六个柱面是等同的, 但其晶面指数却分别为: (110) , (010) , $(\bar{1}10)$, $(\bar{1}00)$, $(0\bar{1}0)$ 和 $(1\bar{1}0)$ 。为了克服这一缺点, 通常采用另一专用于六方晶系的指数。

根据六方晶系的对称特点, 对六方晶系采用 a_1 , a_2 , a_3 及 c 四个晶轴, a_1 , a_2 , a_3 之间的夹角均为 120° , 这样, 其晶面指数就以 $(hkil)$ 四个指数来表示。根据几何学可知, 三维空间独立的坐标轴最多不超过三个。前三个指数中只有两个是独立的, 它们之间存在关系: $i = -(h+k)$ 。晶面指数的具体标定方法

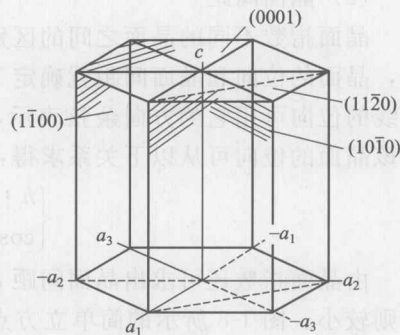


图 1-7 六方晶系中的晶面指数

同前面一样, 在图 1-7 中列举了六方晶系的一些晶面的指数, 采用这种标定方法, 等同的晶面可以从指数上反映出来。例如, 上述六个柱面的指数分别为: $(10\bar{1}0)$, $(0\bar{1}10)$, $(\bar{1}100)$, $(1\bar{1}010)$, $(0\bar{1}10)$ 和 $(1\bar{1}00)$, 这六个晶面可归并为 $\{10\bar{1}0\}$ 晶面族。

采用 4 轴坐标时, 晶向指数的确定原则仍同前述, 晶向指数可用 $(uv tw)$ 来表示。六方晶系按两种晶轴系所得的晶面指数和晶向指数可相互转换, 方法如下: 对晶面指数而言, 从 $(hkil)$ 转换成 (hkl) 只要去掉 i 即可; 反之, 则加上 $i = (h+k)$ 。对晶向指数而言, 则 (UVW) 与 $(uv tw)$ 之间的互换关如下:

$$\begin{aligned} U &= u - t, V = v - t, W = w \\ 3u &= 2U - V, 3v = 2V - U, t = -(u + v), w = W \end{aligned} \quad (1-1)$$

1.1.3 晶带定律和晶面间距

(1) 晶带定律

所有平行或相交于同一直线的晶面构成一个晶带, 此直线称为晶带轴。属此晶带的晶面称为晶带面。

晶带轴 $[uvw]$ 与该晶带的晶面 (hkl) 之间存在以下关系: $hu + kv + lw = 0$ 。凡满足此关系的晶面都属于以 (uvw) 为晶带轴的晶带, 故此关系式也称作晶带定律。根据这个基本公式, 若已知有两个不平行的晶面 $(h_1 k_1 l_1)$ 和 $(h_2 k_2 l_2)$, 则其晶带轴 $[uvw]$ 可以通过下公式求得:

$$u : v : w = \begin{vmatrix} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} l_1 & h_1 \\ l_2 & h_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{vmatrix}$$

同样

$$h : k : l = \begin{vmatrix} v_1 & w_1 \\ v_2 & w_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} w_1 & u_1 \\ w_2 & u_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} u_1 & v_1 \\ u_2 & v_2 \end{vmatrix}$$

假如, 已知三个晶轴 $[u_1 v_1 w_1]$, $[u_2 v_2 w_2]$ 和 $[u_3 v_3 w_3]$ 同在一个晶面上, 则有:

$$\begin{vmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{vmatrix} = 0$$

同样, $(h_1 k_1 l_1)$, $(h_2 k_2 l_2)$ 和 $(h_3 k_3 l_3)$ 三个晶面同属一个晶带, 则有:

$$\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{vmatrix} = 0$$

(2) 晶面间距

晶面指数不同的晶面之间的区别主要在于晶面的位向和晶面间距不同。晶面指数一经确定，晶面的位向和晶面间距就确定了。晶面的位向是用晶面法线的位向来表示的。空间任一直线的位向可用它的方向余弦表示，对立方晶系而言，已知某晶面的晶面指数为 h, k, l ，则该晶面的位向可从以下关系求得：

$$\begin{cases} h : k : l = \cos\alpha : \cos\beta : \cos\gamma \\ \cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1 \end{cases} \quad (1-2)$$

由晶面指数还可求出晶面间距 d_{hkl} 。通常，低指数的晶面间距较大，而高指数的晶面间距则较小。图 1-8 所示的简单立方点阵不同晶面的晶面间距的平面图，其中 $\{100\}$ 面的晶面间距最大，而 $\{320\}$ 面的晶面间距最小。此外晶面间距愈大，则该晶面上原子排列愈密集，晶面间距愈小则排列愈稀疏。

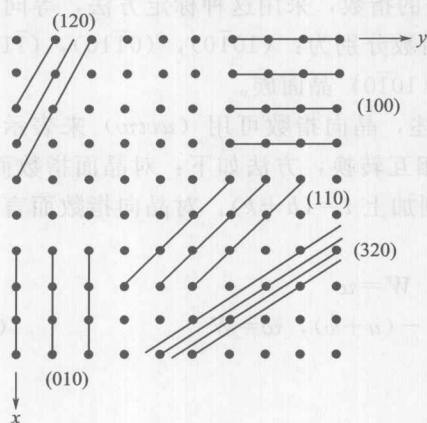


图 1-8 晶面间距

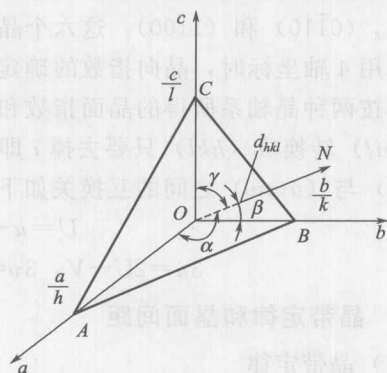


图 1-9 晶面间距公式推导图

晶面间距 d_{hk} 与晶面指数 (hkl) 的关系可根据图 1-9 的几何关系求出。设 ABC 距离原点 O 最近的晶面，其法线 N 与 a, b, c 的夹角为 α, β, γ ，则可以得出：

$$d_{hkl} = \frac{a}{h} \cos\alpha = \frac{b}{k} \cos\beta = \frac{c}{l} \cos\gamma$$

经过变形换算可以推出：

$$d_{hkl}^2 \left[\left(\frac{h}{a} \right)^2 + \left(\frac{k}{b} \right)^2 + \left(\frac{l}{c} \right)^2 \right] = \cos^2\alpha = \cos^2\beta = \cos^2\gamma$$

因此，只要计算出 $\cos^2\alpha = \cos^2\beta = \cos^2\gamma$ 的数值就可以求得晶面间距 d_{hkl} 。正交晶系的晶面间距计算公式如下：

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a} \right)^2 + \left(\frac{k}{b} \right)^2 + \left(\frac{l}{c} \right)^2}} \quad (1-3)$$

对于立方晶系，由于 $a=b=c$ ，公式可简化为：

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (1-4)$$

对于六方晶系，其晶面间距的计算公式为：

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3} \frac{(h^2 + hk + k^2)}{a^2} + \left(\frac{l}{c} \right)^2}} \quad (1-5)$$

1.1.4 晶体投影

在进行晶体结构的分析研究时，往往要确定晶体的取向、晶面或晶向间的夹角等。为了方便，通常通过投影作图将三维立体图形转化到二维平面上去。晶体的投影方法很多种，包括极射投影、吴氏网格和标准投影等，其中以标准投影最为方便，应用也较为广泛，所以本节以标准投影为例。

标准投影是指投影面为低指数的重要晶面或投影中心为低指数的重要晶向的极射投影。前者称为晶面标准投影，后者称为晶向标准投影。因此， (hkl) 标准投影的投影面就是 (hkl) ，或者说投影中心是 (hkl) 面的法线， $[uvw]$ 标准投影的投影中心就是 $[uvw]$ 方向。

图 1-10 是立方晶体的 (001) 标准投影。可将此图想象为一个立体的球， x 轴 (100) 轴向下， y 轴 (010) 轴向右， z 轴 (001) 轴指向读者。

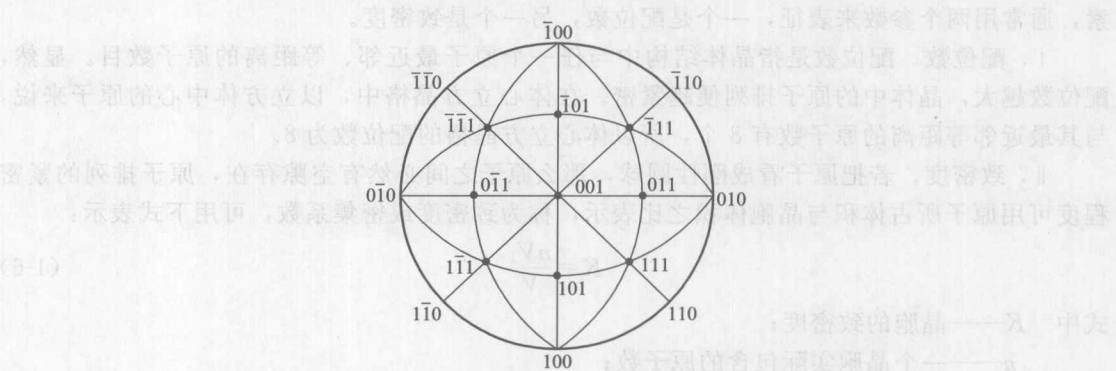


图 1-10 立方晶体 (001) 标准投影图

1.2 纯金属的晶体结构

金属晶体中原子在空间规则排列的方式称为金属的晶体结构。金属原子间的结合键为金属键，由于金属键的无方向性和不饱和性，使金属原子（离子）趋于高度对称的、紧密的和简单的排列。在自然界中，除了少数金属例外，绝大多数金属具有面心立方（ fcc ）、体心立方（ bcc ）和密排六方（ hcp ）三种典型的晶体结构。本节将重点讨论和分析这三种典型晶体结构中原子排列方式及其主要特征。

1.2.1 三种典型金属晶体结构及特征

(1) 体心立方

如图 1-11 所示，其晶胞是一个立方体，晶格常数 $a=b=c$ ，晶轴间夹角 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ ，

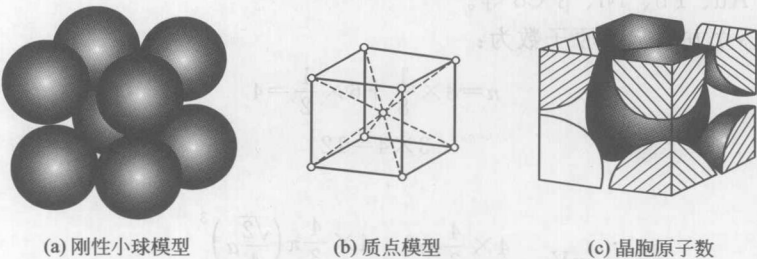


图 1-11 体心立方晶体的晶胞

所以通常只用一个晶格常数 a 表示。具有体心立方晶体结构的金属有 Cr、Nb、 α -Fe、W、Mo、V、 β -Ti 等。

① 原子半径 在体心立方晶胞中，原子沿立方体对角线紧密地接触着，如图 1-11 所示，点阵常数为 a ，则立方体对角线的长度为 $\sqrt{3}a$ ，等于 4 个原子的半径，所以体心立方晶胞中原子半径 $r = \frac{\sqrt{3}a}{4}$ 。

② 原子数 由于晶格是由大量晶胞堆垛而成，因而晶胞每个角上的原子是与其相邻的八个晶胞所共有，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 $n = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$ 。

③ 配位数和致密度 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。

i. 配位数。配位数是指晶体结构中中与任一原子最近邻、等距离的原子数目。显然，配位数越大，晶体中的原子排列便越紧密。在体心立方晶格中，以立方体中心的原子来说，与其最近邻等距离的原子数有 8 个，所以体心立方晶格的配位数为 8。

ii. 致密度。若把原子看成刚性圆球，那么原子之间必然有空隙存在，原子排列的紧密程度可用原子所占体积与晶胞体积之比表示，称为致密度或密集系数，可用下式表示：

$$K = \frac{nV_1}{V} \quad (1-6)$$

式中 K ——晶胞的致密度；

n ——一个晶胞实际包含的原子数；

V_1 ——一个原子的体积；

V ——晶胞的体积。

体心立方晶格的晶胞中包含有 2 个原子，晶胞的棱边长度为 a ，原子半径为 $r = \frac{\sqrt{3}a}{4}$ ，其致密度为：

$$K = \frac{nV_1}{V} = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^3}{a^3} \approx 0.68 \quad (1-7)$$

计算结果表明，在体心立方晶格中，有 68% 的体积为原子所占据，其余 32% 为间隙体积。

(2) 面心立方

面心立方晶体的晶胞如图 1-12 所示，也是一个立方体，晶格常数 $a=b=c$ ，晶轴间夹角 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ ，所以也只用一个晶格常数 a 表示。具有面心立方晶体结构的金属有 γ -Fe、Al、Cu、Ag、Au、Pb、Ni、 β -Co 等。

同样，面心立方晶胞的原子数为：

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

$$3 \times 4 = 12$$

配位数为

致密度为

$$K = \frac{nV_1}{V} = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sqrt{2}}{4}a\right)^3}{a^3} \approx 0.74 \quad (1-8)$$

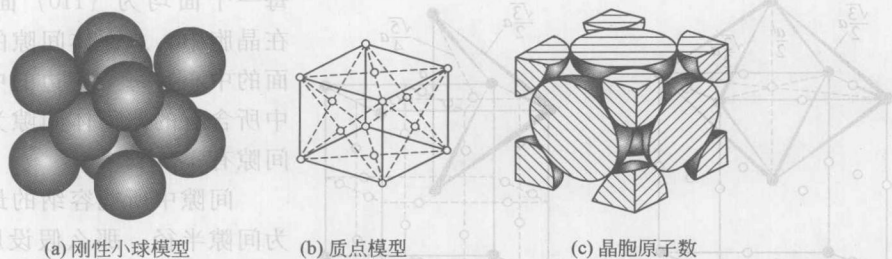


图 1-12 面心立方晶体的晶胞

所以，在面心立方晶格中，有 74% 的体积为原子所占据，其余 26% 为间隙体积。

(3) 密排六方

密排六方晶体的晶胞如图 1-13 所示。它是由六个呈长方形的侧面和两个呈正六边形的底面所组成的一个六方柱体。因此，需要用两个晶格常数表示，一个是正六边形的边长 a ，另一个是柱体的高 c 。具有密排六方晶体结构的金属有 Mg、Zn、Be、Cd、 α -Ti、 α -Co 等。

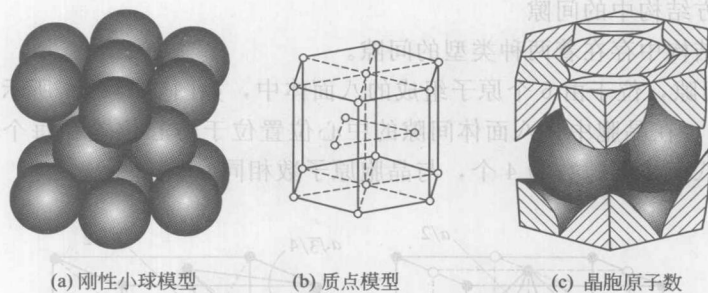


图 1-13 密排六方晶体的晶胞

密排六方晶胞原子数为：

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

配位数为

$$3 \times 2 + 6 = 12$$

致密度为

$$K = \frac{nV_1}{V} = \frac{6 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{\frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 \sqrt{\frac{8}{3}} a} = \frac{6 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2}\right)^3}{3\sqrt{2} a^3} = \frac{\sqrt{2}}{6} \pi \approx 0.74 \quad (1-9)$$

密排六方晶体的配位数和致密度均与面心立方晶格相同，这说明两者晶胞中的原子有相同的紧密排列程度。

1.2.2 典型晶体结构中的间隙

从晶体致密度的分析可以看出体心立方和面心立方结构中分别存在着 32% 和 26% 的间隙体积。在不同结构中，间隙的类型、大小、位置、数量是不同的。这些间隙的存在对于合金相的形成、相变及原子的扩散等具有非常重要的作用。

(1) 体心立方结构中的间隙

在体心立方结构中同样存在着两种类型的间隙，即八面体间隙和四面体间隙。构成八面体的

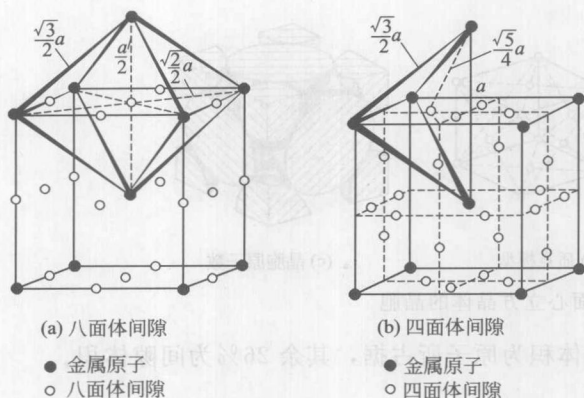


图 1-14 体心立方点阵中的间隙

每一个面均为 $\{110\}$ 面 [图 1-14(a)], 在晶胞中, 八面体间隙的中心位于每个面的中心和每个棱边的中点, 每个晶胞中所含有的八面体间隙为 6 个, 四面体间隙有 12 个。

间隙中所能容纳的最大刚球半径称为间隙半径, 那么假设原子半径为 r_A , 间隙半径为 r_B , 则两种类型的间隙原子与原子半径有如下关系。

$$\text{八面体间隙: } r_B = 0.155r_A$$

$$\text{四面体间隙: } r_B = 0.291r_A$$

由此可见, 在体心立方晶胞中, 四面体间隙半径比八面体间隙半径大, 因此在体心立方间隙中四面体可能容纳小尺寸异类原子的概率更高。

(2) 面心立方结构中的间隙

在面心立方结构中存在着两种类型的间隙。

i. 八面体间隙, 位于由 6 个原子组成的八面体中, 如图 1-15(a) 所示。八面体的每个面均为 $\{111\}$ 面。在晶胞中, 八面体间隙的中心位置位于体心位置和每个棱边的中点。每个晶胞所含有的八面体间隙数为 4 个, 与晶胞原子数相同。

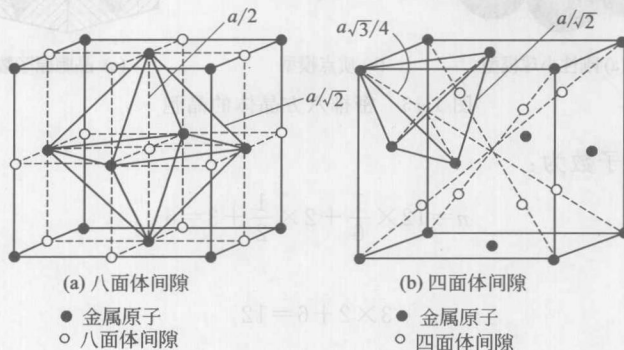


图 1-15 面心立方点阵中的间隙

ii. 四面体间隙, 位于由 4 个原子组成的四面体中间, 如图 1-15(b) 所示。在晶胞中, 四面体由 1 个顶角原子和 3 个相邻的面心原子组成, 每个面均为 $\{111\}$ 。在每个晶胞中有 8 个四面体间隙。

那么假设原子半径为 r_A , 间隙半径为 r_B , 则两种类型的间隙原子与原子半径有如下关系。

$$\text{八面体间隙} \quad r_B = 0.414r_A$$

$$\text{四面体间隙} \quad r_B = 0.225r_A$$

显然, 在面心立方结构中, 虽然四面体间隙数量比八面体间隙多, 但八面体间隙要大于四面体间隙。因此, 当原子半径比较小的非金属原子 (如碳、氮等) 进入面心立方金属中时, 常常位于八面体间隙中, 与体心立方结构的间隙相比, 面心立方间隙可以容纳更多的异类原子, 也就是间隙固溶度略高一些。