

第2章 金属的晶体结构与结晶

2.1 金属的晶体结构

2.2 金属的结晶

知识窗——高分子材料的结构

自测习题



2.1 金属的晶体结构

2.1.1 晶体结构常识

1. 晶格、晶胞和晶格常数

在金属晶体中，原子是按一定的几何规律周期性规则排列的。为了便于研究，人们把金属晶体中的原子近似地设想为刚性小球，这样就可将金属看成是由刚性小球按一定的几何规则紧密堆积而成的晶体，如图2-1所示。

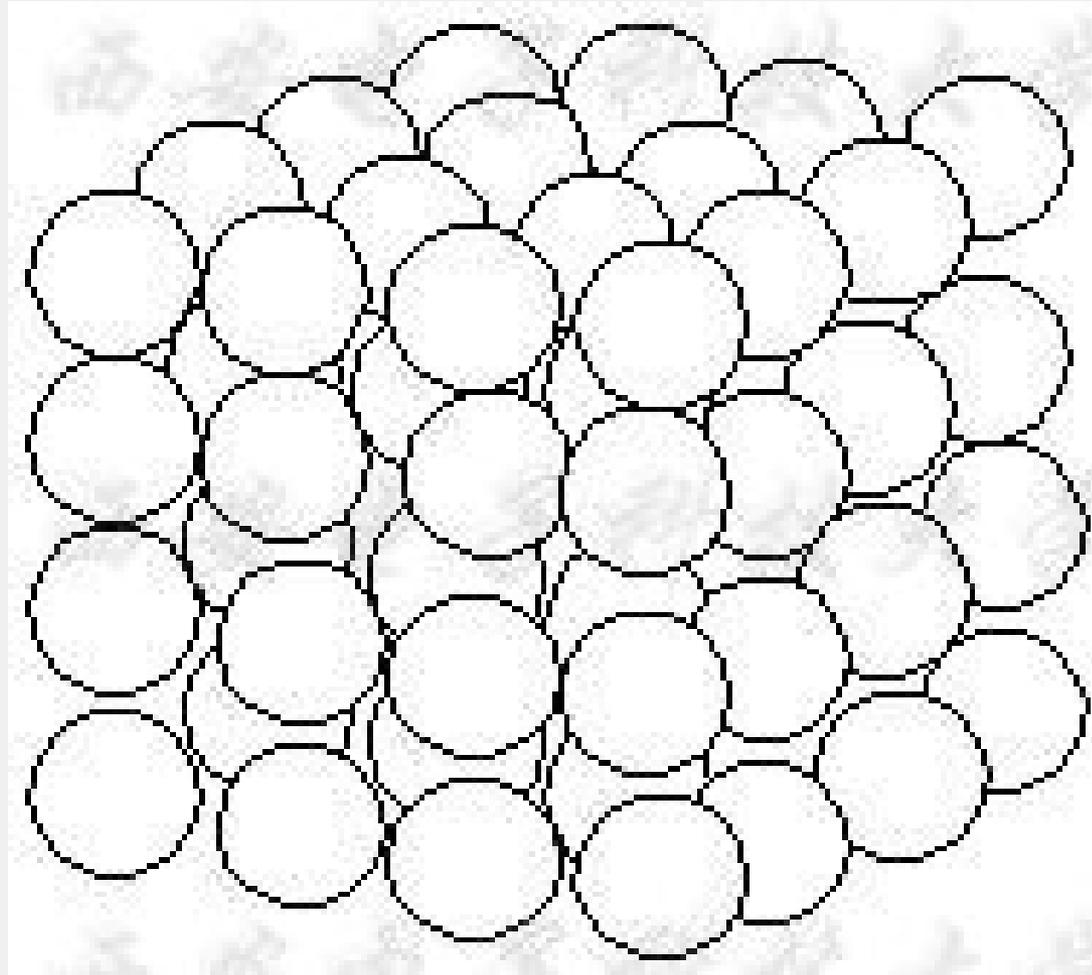


图2-1 晶体中的原子堆积模型

1) 晶格

为了研究晶体中原子的排列规律，假定理想晶体中的原子都是固定不动的刚性球体，并用假想的线条将晶体中各原子中心连接起来，便形成了一个空间格架，这种抽象的、用于描述原子在晶体中排列方式的空间格架称为晶格，如图2-2所示。

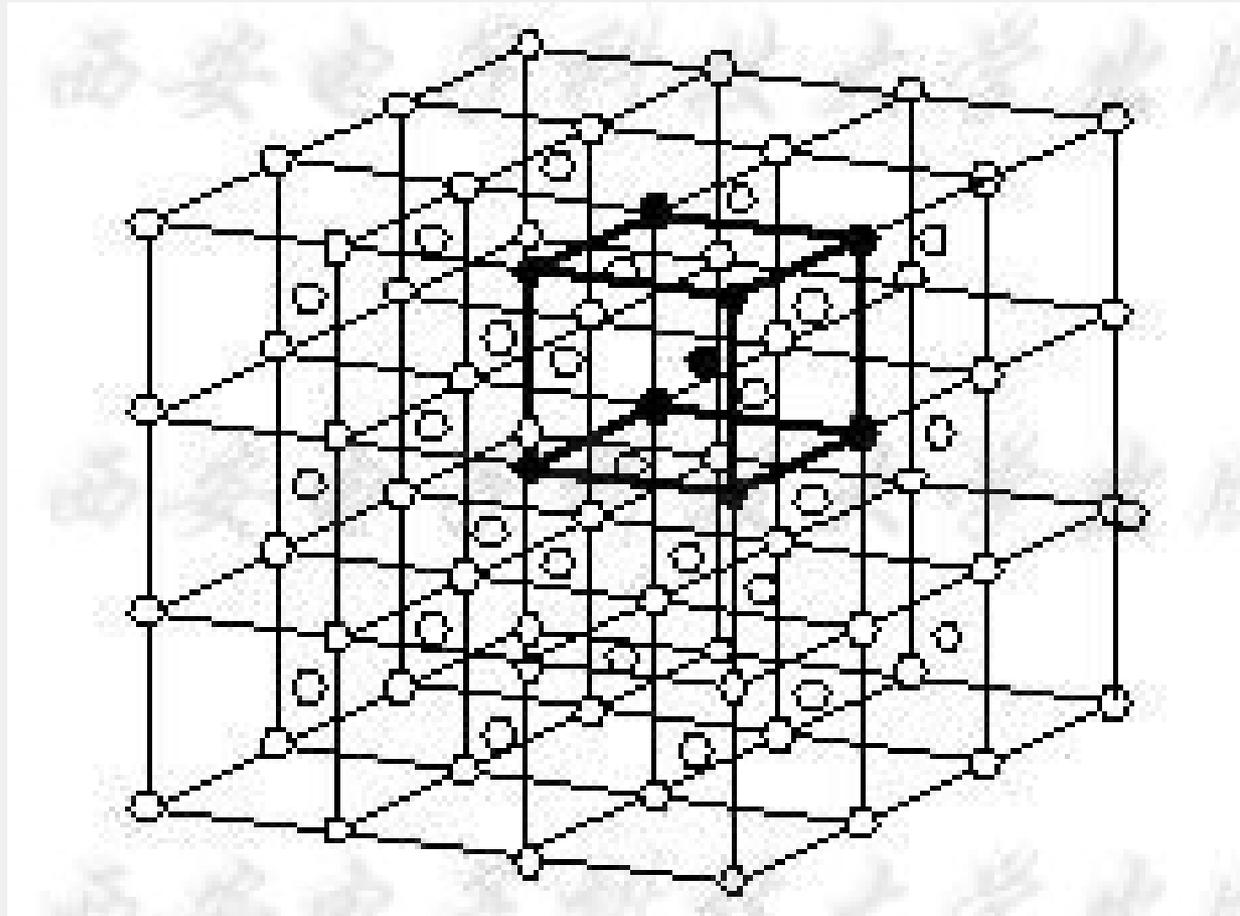


图2-2 晶格的抽象模型

2) 晶胞

晶体中原子的排列具有周期性的特点，因此，通常只从晶格中选取一个能够完全反映晶格特征的、最小的几何单元来分析晶体中原子的排列规律，这个最小的几何单元称为晶胞，如图2-3所示。实际上整个晶格就是由许多大小、形状和位向相同的晶胞在三维空间重复堆积排列而成的。

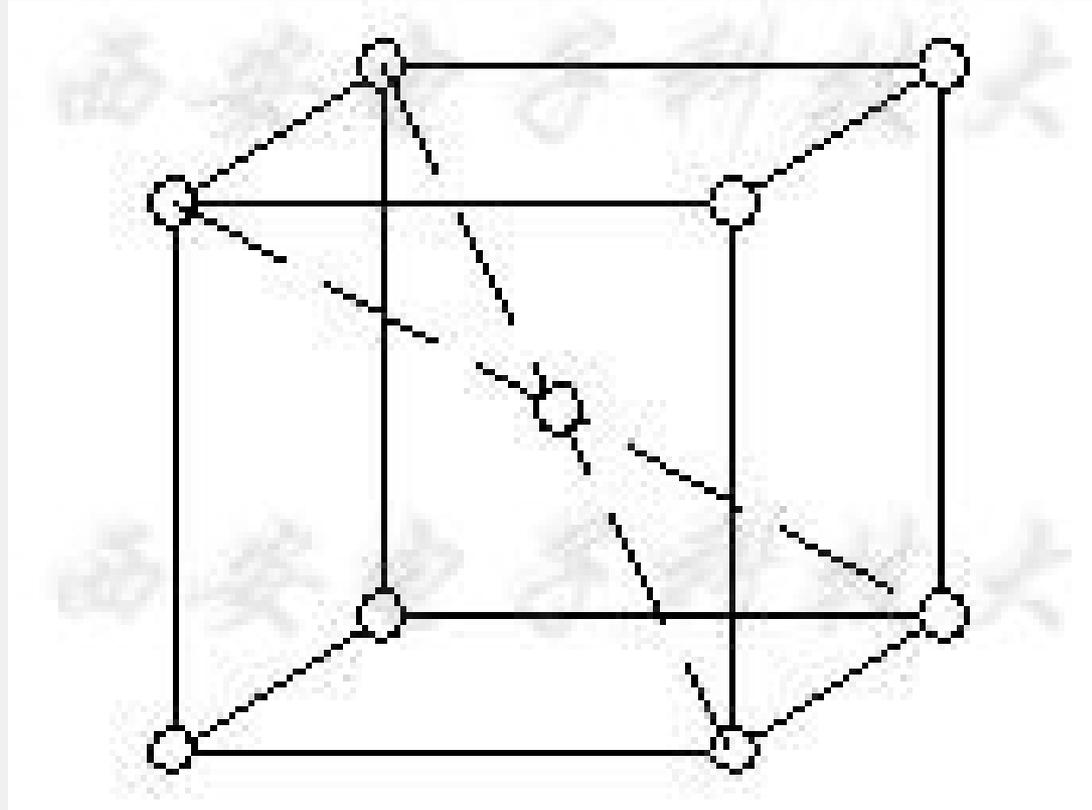


图2-3 晶胞

3) 晶格常数

晶胞的大小和形状常以晶胞的棱边长度 a 、 b 、 c 及棱边夹角 α 、 β 、 γ 来表示，晶胞的棱边长度称为晶格常数，如图2-4所示。当棱边长度 $a=b=c$ ，棱边夹角 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 时，这种晶胞称为简单立方晶胞，由简单立方晶胞组成的晶格称为简单立方晶格。

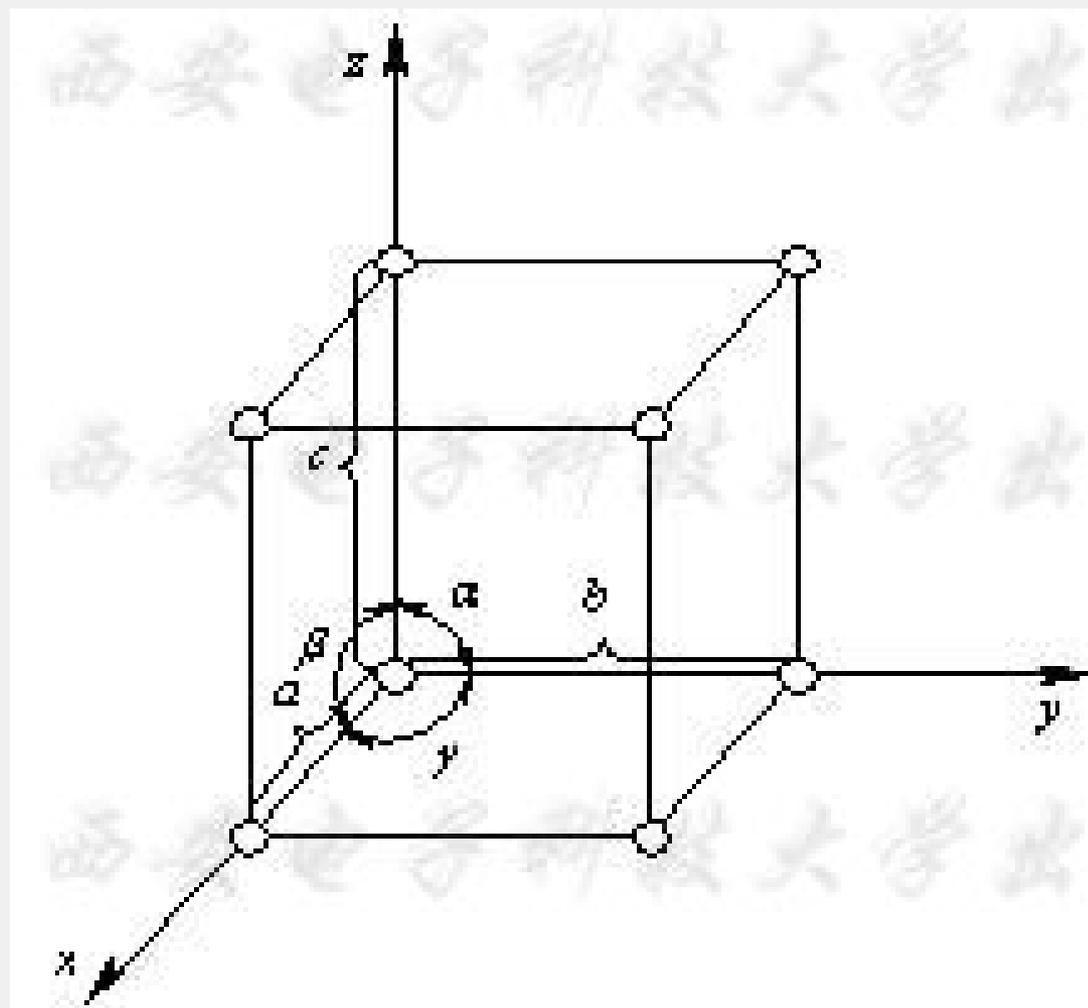


图2-4 晶格常数

4) 晶面、晶向和晶体的各向异性

金属晶体中通过原子中心所构成的不同方位上的原子面称为晶面。通过原子中心所构成的不同方向上的原子列，可以代表晶格空间的一定方向，称为晶向。

由于晶体中不同晶面和晶向上原子排列的紧密程度不同，原子间的结合力大小也就不同，从而在不同的晶面和晶向上会显示出不同的性能，即晶体的各向异性。晶体的这种特性在力学性能、物理性能和化学性能上都能表现出来，并在工业生产中有应用。

2. 常见的晶格类型

由于金属原子之间具有很强的结合力，因此金属晶体中的原子都趋向于紧密排列。但不同的金属具有不同的晶体结构，大多数金属的晶体结构都比较简单，其中常见的有以下三种：

1) 体心立方晶格

体心立方晶格的晶胞是一个立方体。其中， $a=b=c$ ，在立方体的八个角上和立方体的中心各有一个原子，如图2-5所示。每个晶胞中实际含有的原子数为 $1+8\times 1/8=2$ 个。具有体心立方晶格的金属有铬(Cr)、钨(W)、钼(Mo)、钒(V)、 α 铁(α -Fe)等。

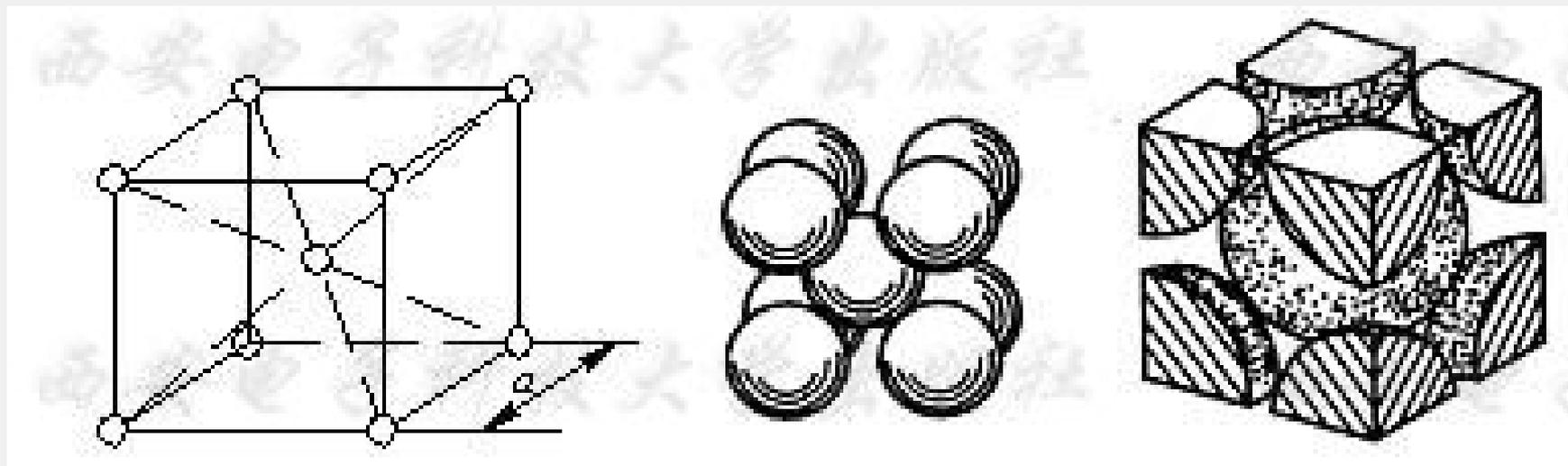


图2-5 体心立方晶格的晶胞

2) 面心立方晶格

面心立方晶格的晶胞也是一个立方体，其中， $a=b=c$ ，在立方体的八个角上和立方体的六个面的中心各有一个原子，如图2-6所示。每个晶胞中实际含有的原子数为 $(1/8) \times 8 + 6 \times (1/2) = 4$ 个。具有面心立方晶格的金属有铝(Al)、铜(Cu)、镍(Ni)、金(Au)、银(Ag)、 γ 铁(γ -Fe)等。

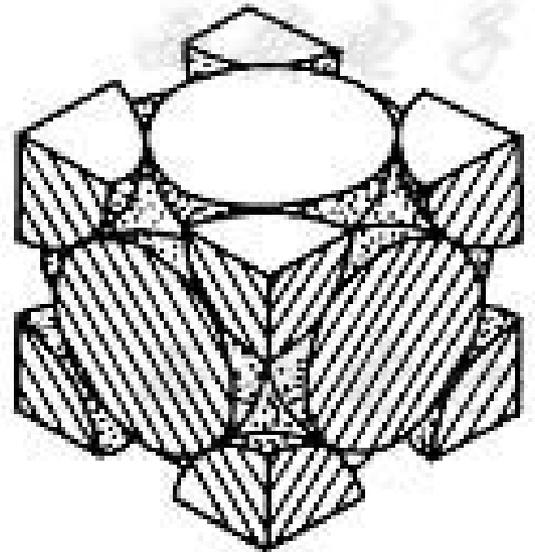
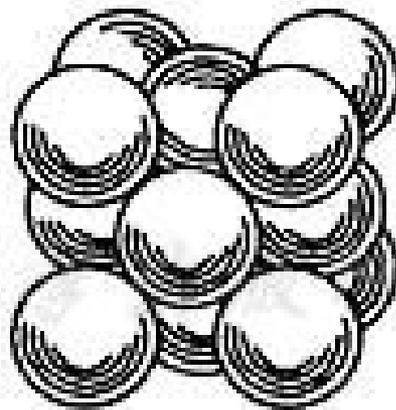
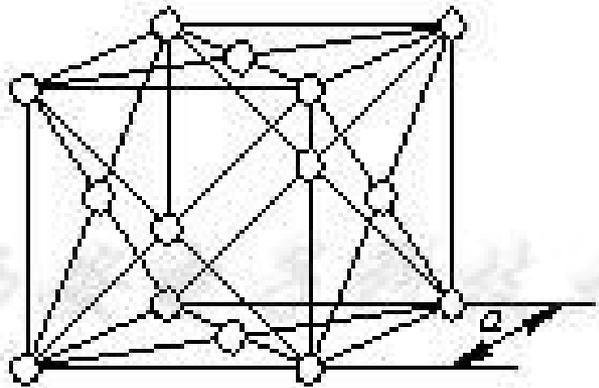


图2-6 面心立方晶格的晶胞

3) 密排六方晶格

密排六方晶格的晶胞是个正六方柱体，它由六个呈长方形的侧面和两个呈正六边形的底面所组成。在密排六方晶胞的12个角上和上、下底面中心各有一个原子，另外在晶胞中间还有三个原子，如图2-7所示。每个晶胞中实际含有的原子数为 $(1/6) \times 12 + 2 \times (1/2) + 3 = 6$ 个。具有密排六方晶格的金属有镁(Mg)、锌(Zn)、镉(Cd)等。

西安电子科技大学出版社

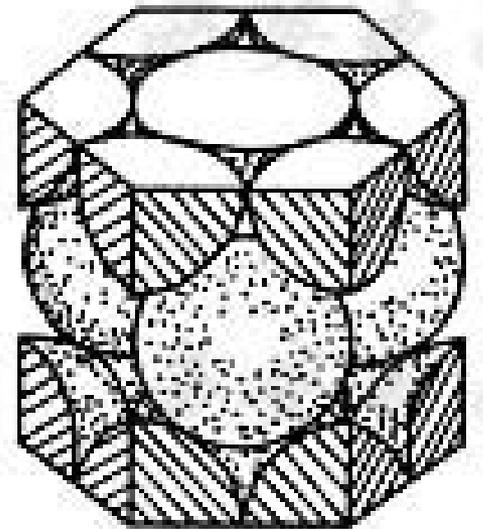
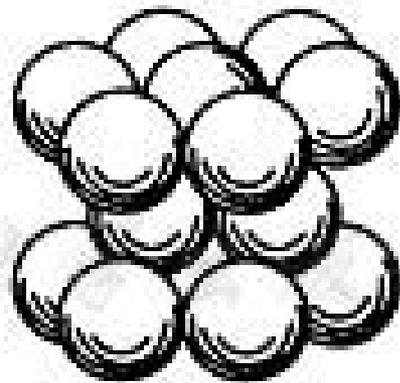
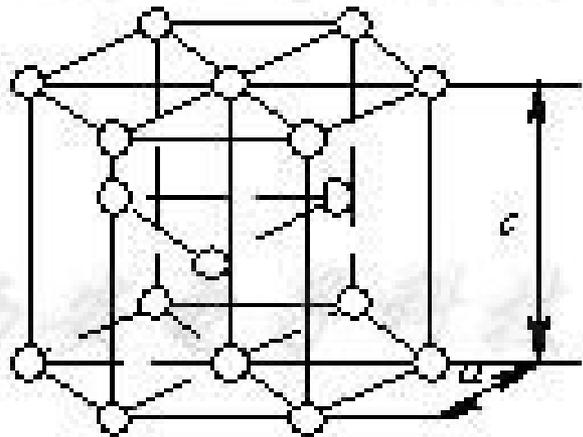


图2-7 密排六方晶格的晶胞

3. 常见晶格的致密度

金属晶体的一个显著特点是其原子趋于最紧密的排列，因而金属晶格中原子排列的紧密程度是反映金属晶体结构特征的一个重要因素。晶体中原子排列的紧密程度常用晶格的致密度表示。晶格的致密度是指晶胞中所含原子的体积与该晶胞的体积之比。

表2-1列出了三种常见金属晶格的特点。可以看出，在三种常见的晶体结构中，原子排列最致密的是面心立方晶格和密排六方晶格，而体心立方晶格要差些。

表2-1 三种常见金属晶格的结构特点

晶格类型	晶胞原子数	原子半径	致密度	常见金属
体心立方晶格	2	$\frac{\sqrt{3}}{4}a$	0.68	铬(Cr)、钨(W)、钼(Mo)、钒(V)、 α 铁(α -Fe)
面心立方晶格	4	$\frac{\sqrt{2}}{4}a$	0.74	铜(Cu)、镍(Ni)、金(Au)、银(Ag)、 γ 铁(γ -Fe)
密排六方晶格	6	$\frac{1}{2}a$	0.74	镁(Mg)、锌(Zn)、镉(Cd)

2.1.2 实际金属的晶体结构

如前所述，晶体具有各向异性是对理想晶体而言的，但是工业上实际应用的金属材料一般不具备各向异性。例如，对体心立方晶格的 α -Fe(纯铁)进行测定，其任何方向上的弹性模量均为200 GPa。原来实际应用的金属材料通常是多晶体材料，这些晶体中存在很多缺陷(原子排列不规则的地方)。

1. 多晶体

多晶体是指整块金属材料包含着许多小晶体，每个小晶体内的晶格位向基本一致，而各小晶体之间彼此方位不同。这种由许多小晶体组成的晶体结构称为多晶体结构，如图2-8所示。多晶体中每个外形不规则的小晶体称为晶粒，晶粒与晶粒间的界面就是晶界。由于晶界是两相邻晶粒之间不同晶格位向的过渡层，因此晶界上原子的排列总是不规则的。

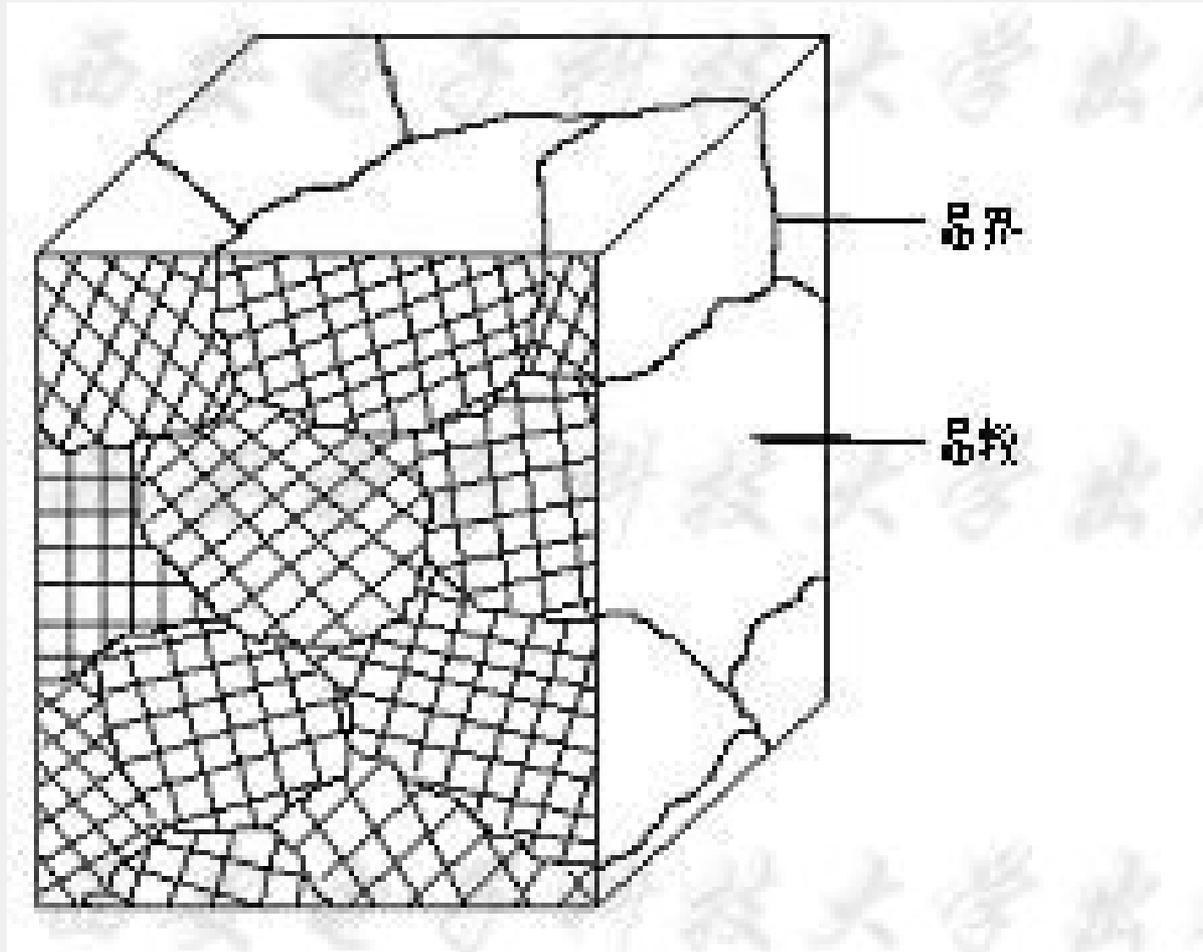


图2-8 多晶体结构示意图

多晶体结构中，一般晶粒尺寸小，如钢铁材料晶粒尺寸一般为 $10^{-3}\sim 10^{-1}$ mm左右，必须通过显微镜放大几十倍乃至几百倍以上才能观察到。在显微镜下不能直接观察到这些小晶体的立体形态，而只能观察到所要研究的金属试样表面所截晶粒的平面图形。通过对所要观察试样表面的细磨和抛光，获得平整而没有磨痕的光洁表面，然后用腐蚀剂对试样表面进行腐蚀。由于晶粒的晶界容易被腐蚀成凹沟，因此在显微镜下呈现出暗色的晶界，而晶粒内部相对比较明亮，如图2-9所示。

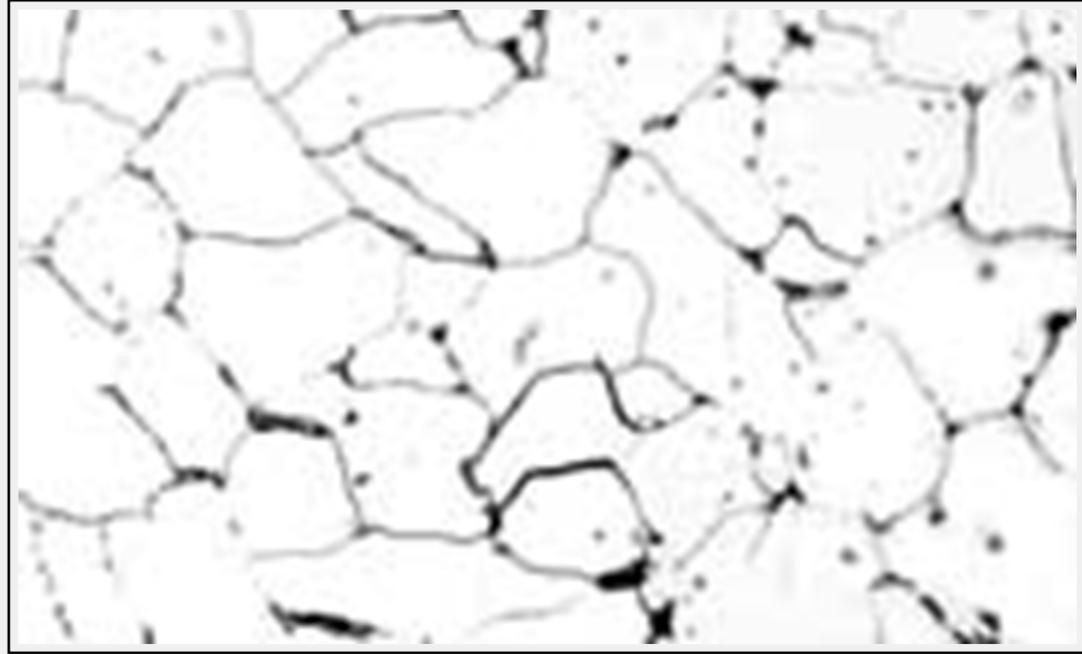


图2-9 纯铁显微组织

2. 晶体的缺陷

1) 点缺陷

点缺陷是指尺寸都很小(原子尺寸范围内)的缺陷。常见的点缺陷有空位、间隙原子、置换原子。空位是指在正常的晶格结点上没有原子，如图2-10(a)所示；间隙原子是指个别晶格空隙之间存在的多余原子，如图2-10(b)所示；置换原子是指晶格结点上的原子被其它元素的原子所取代，如图2-10(c)所示。由于点缺陷的出现，原子间作用力的平衡被破坏了，促使缺陷周围的原子发生靠拢或撑开，即产生了晶格的畸变。这将会引起金属强度、硬度、电阻等的变化。

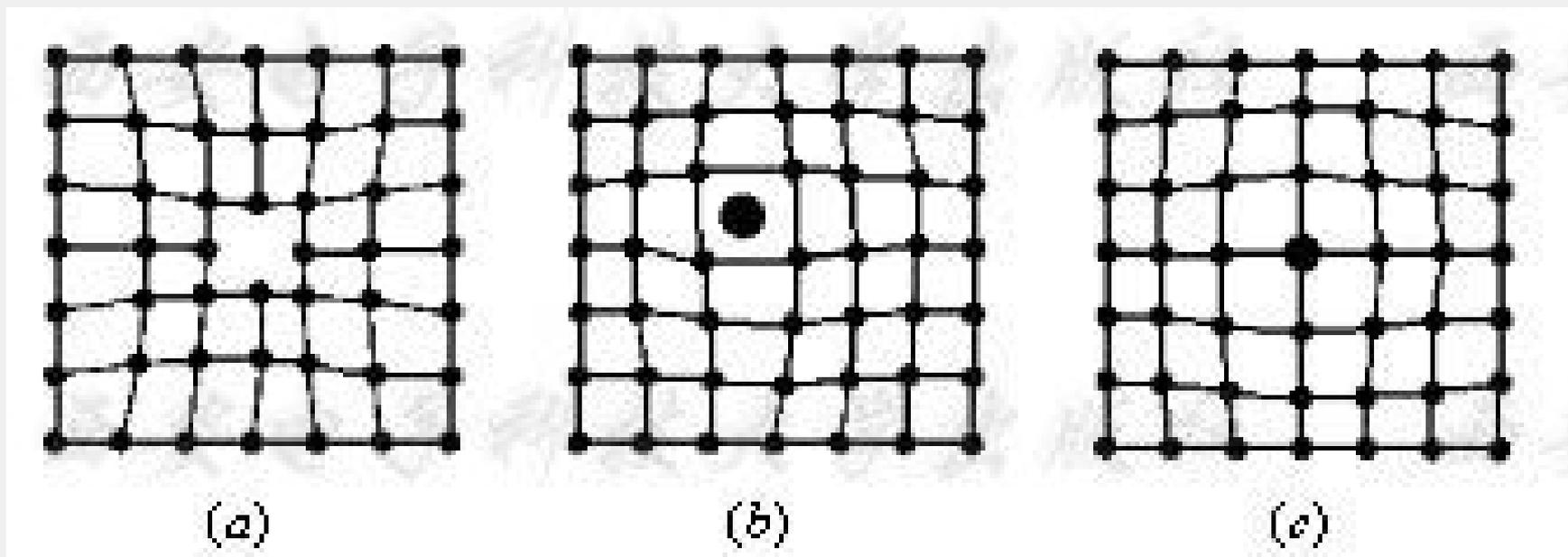


图2-10 点缺陷
(a) 空位；(b) 间隙原子；(c) 置换原子

2) 线缺陷

线缺陷是指晶体内部呈线状分布的缺陷，常见的是各种类型的位错。位错是晶体中有一列或若干列原子发生了有规则的错排现象。刃型位错是比较简单的一种，如图2-11所示。这种缺陷的特点是：在晶体的某一个晶面的上、下两部分的原子面产生错排，就好像沿着某方位的晶面插入的一个多余原子面，但又未插到底，犹如插入刀刃一般，故称为刃型位错，而多余原子面的底边称为刃型位错线。

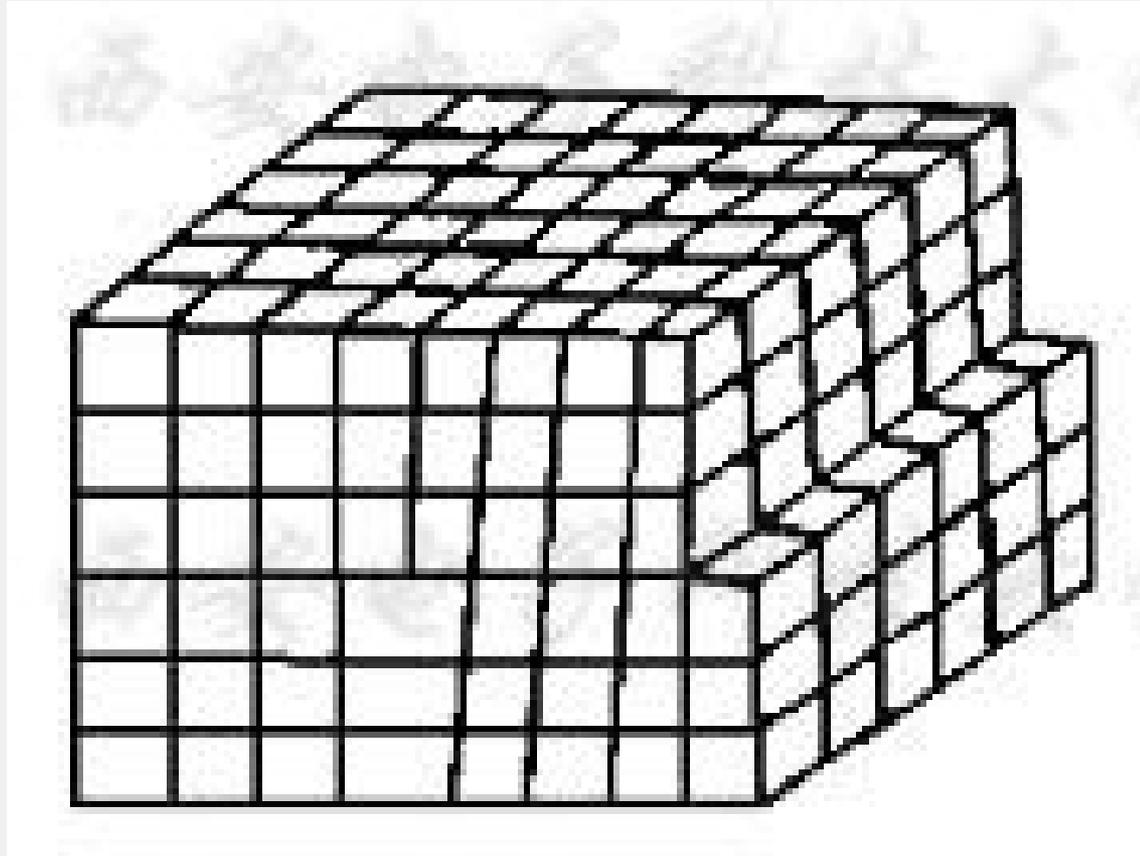


图2-11 刃型位错

位错密度是指晶体中单位体积所包含的位错线的长度，通常用位错密度描述位错数量的多少。晶体中位错的存在，对晶体力学性能将产生很大的影响。若金属为理想晶体或仅含极少量位错时，金属的屈服强度 σ_s 很高；当含有一定量的位错时，强度降低；当进行形变加工时，位错密度增加，屈服强度 σ_s 将会增高。位错密度与强度关系示意图如图2-12所示。目前采用一些特殊方法已能制造出几乎不含位错的小晶须，其强度高达13 400 MPa，而工业退火纯铁抗拉强度低于300 MPa，两者相差40多倍。

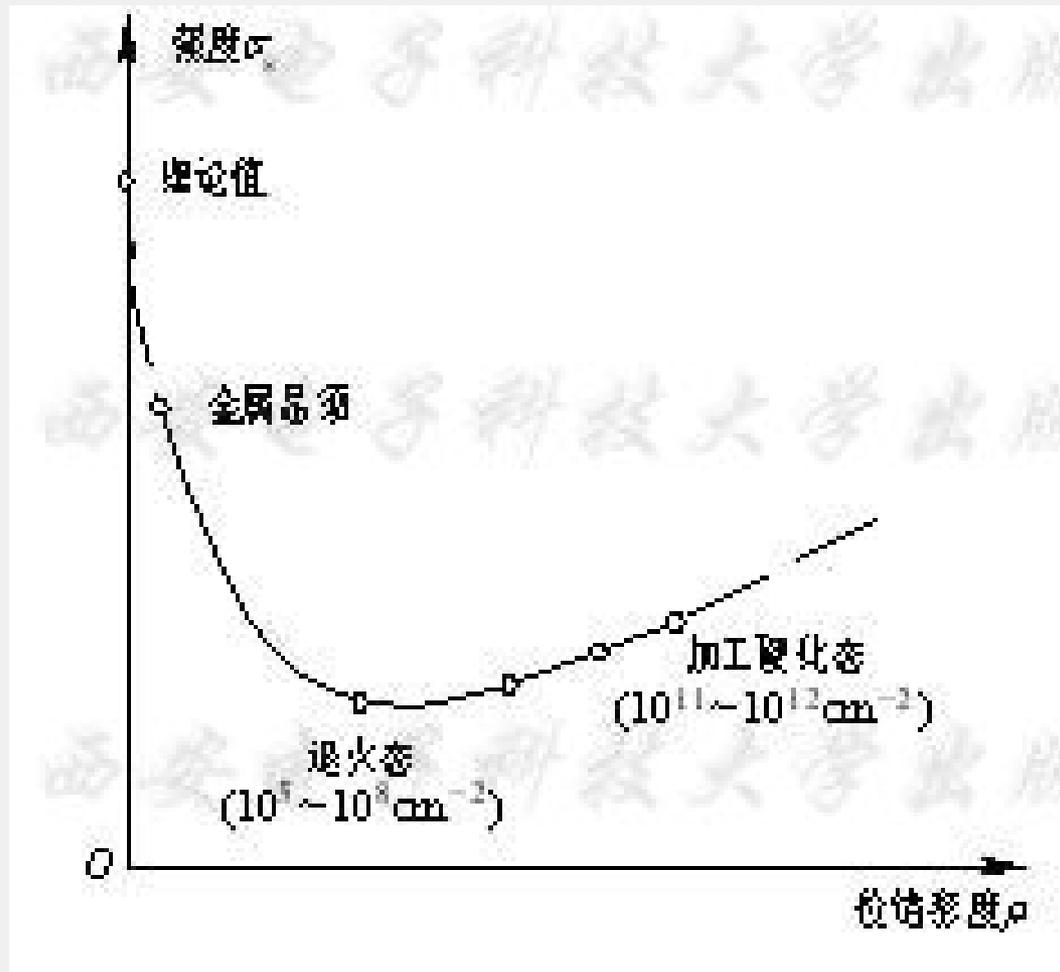


图2-12 位错密度与强度关系示意图

3) 面缺陷

面缺陷是指金属的晶界和亚晶界。实际金属材料一般为多晶体材料，其相邻两晶粒之间的位向差多数为 $30^\circ \sim 40^\circ$ 的大角度。晶界处原子的排列必须从一种晶粒的位向过渡到另一种晶粒的位向，因此晶界成为两晶粒之间原子无规则排列的过渡层，如图2-13(a)所示。在实际金属晶体中的晶粒内部，存在有许多小晶块，它们之间的位向差很小，只有几分、几秒，一般小于 $1^\circ \sim 2^\circ$ ，它们相互镶嵌成一颗晶粒。在这些小晶块的内部原子排列的位向是一致的，这些小晶块称为亚晶粒(或亚结构，或镶嵌块)，相邻亚晶粒之间的界面称为亚晶界，如图2-13(b)、(c)所示。

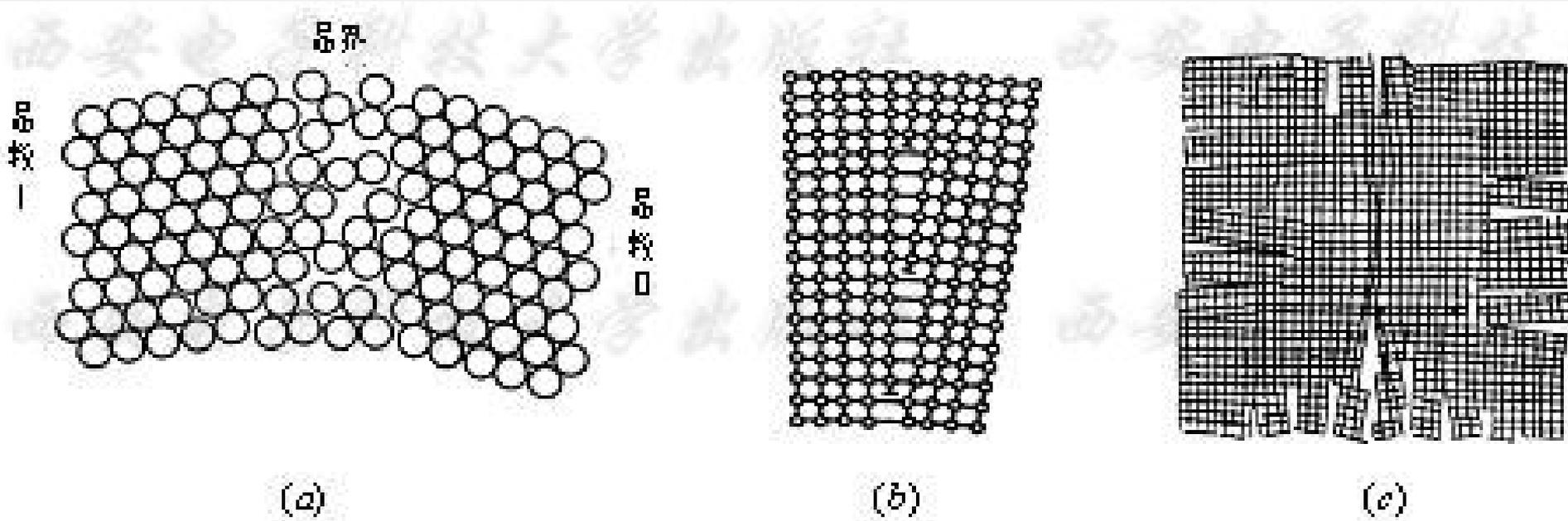


图2-13 晶界与亚晶界示意图

晶界具有许多不同于晶粒内部的特性，它的存在会对金属的性能产生重要的影响。晶界的存在提高了金属的强度，晶界越多(即晶粒越细)，金属材料的强度、硬度越高；晶界处的熔点较低；晶界处往往优先形成新相，晶界容易被腐蚀。亚晶界对金属性能的影响与晶界相似，如亚晶界越多，即亚晶越细，将使金属的屈服强度增大。

综上所述，实际金属晶体一般不是单晶体，而是多晶体材料，且存在许多晶体缺陷，其结构特征见表2-2。

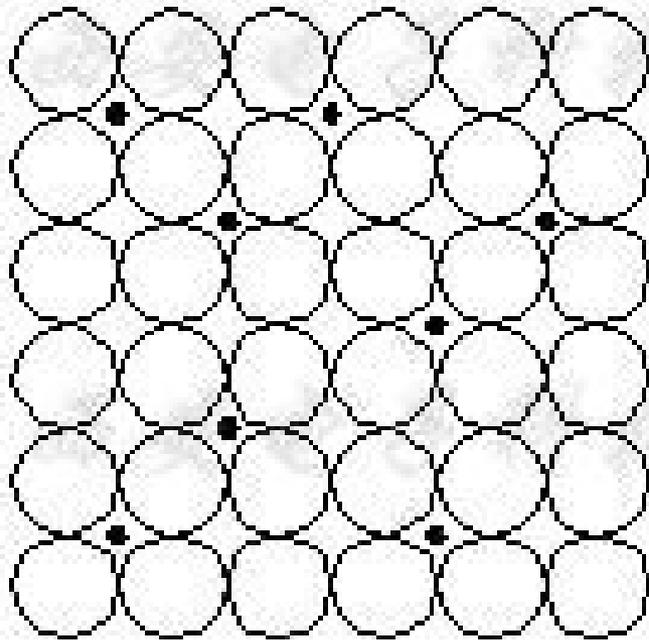
表2-2 实际金属晶体结构特征

晶体缺陷的类别	主要形式	对材料性能的影响
点缺陷	空位、间隙原子、置换原子	金属扩散的主要方式、固溶强化
线缺陷	刃型位错、螺型位错	加工硬化、固溶强化
面缺陷	晶界、亚晶界	易腐蚀、易扩散、熔点低、强度高、细晶强化

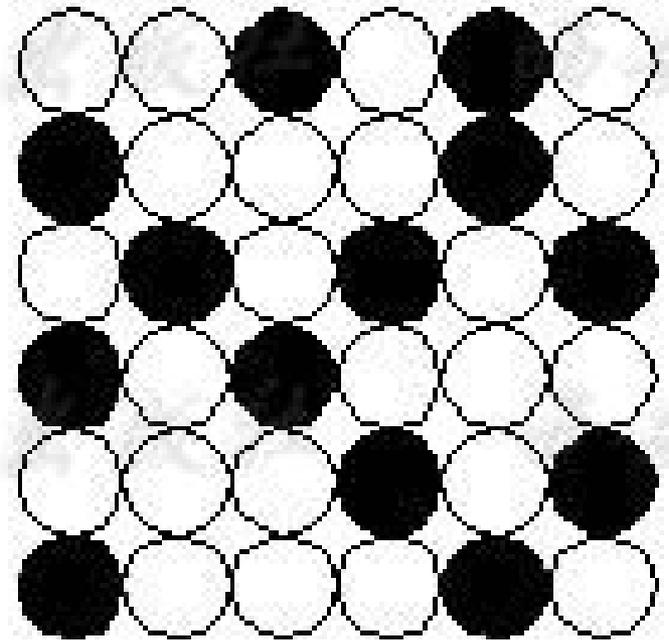
2.1.3 合金的相结构

1. 固溶体

(1) 间隙固溶体。溶质原子处于溶剂晶格间隙中的固溶体称为间隙固溶体，如图2-14(a)所示。实验证明：当溶质元素与溶剂元素的原子半径之比小于0.59时才能形成间隙固溶体，因此形成间隙固溶体的溶质元素都是一些原子半径小的非金属元素，如H、C、O、N等。非金属元素的原子半径小，形成间隙固溶体的例子很多。如碳钢中碳原子溶入 α -Fe晶格的间隙中形成称为铁素体的间隙固溶体，碳原子溶入 γ -Fe晶格间隙中形成称为奥氏体的间隙固溶体。溶质原子溶入溶剂的数量越多，溶剂的晶格畸变就越大，当溶质超过一定数量时，溶剂的晶格就会变得不稳定，于是溶质原子就不能继续溶解。所以间隙固溶体永远是有限固溶体。



(a)



(b)

图2-14 固溶体的类型
(a) 间隙固溶体；(b) 置换固溶体

(2) 置换固溶体。溶剂晶格中的某些原子位置被溶质原子取代而形成的固溶体称为置换固溶体，如图2-14(b)所示。形成置换固溶体时，溶质原子在溶剂中的溶解度主要取决于两者在元素周期表中的位置、晶格类型和原子半径的大小。一般说来，溶质与溶剂原子在周期表中位置越靠近，晶格类型相同，原子半径差越小，其溶解度越大，甚至可以以任何比例互溶形成无限固溶体。例如，铜和镍都是面心立方晶格，铜的原子半径为 $2.55 \times 10^{-10} \text{ m}$ ，镍的原子半径为 $2.49 \times 10^{-10} \text{ m}$ ，两者是处在同一周期并且相邻的两个元素，所以可以形成无限固溶体。由于溶质原子与溶剂原子的直径不可能完全相同，因此，形成置换固溶体时也会造成固溶体中的晶格常数的变化和晶格畸变，如图2-15所示。

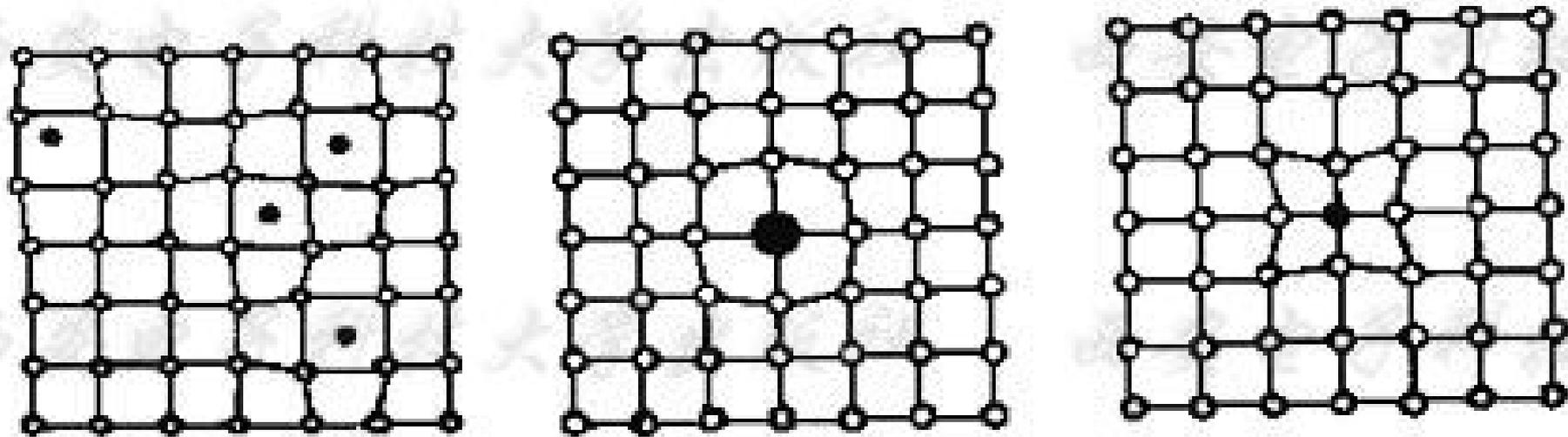


图2-15 形成固溶体时的晶格畸变

由于溶质原子的溶入，固溶体的晶格发生畸变，结果使金属材料的强度、硬度升高。这种通过溶入溶质元素形成固溶体，使金属材料的变形抗力增大、强度、硬度升高的现象称为固溶强化，它是金属材料强化的重要途径之一。实践证明，适当掌握固溶体中的溶质含量，可以在显著提高金属材料的强度、硬度的同时，仍能保持良好的塑性和韧性。例如，向铜中加入19%的镍，可使纯铜的抗拉强度由220 MPa提高到380 MPa，硬度由44HBS提高到70HBS，而伸长率仍然保持在50%左右。所以对力学性能要求较高的结构材料，几乎都以固溶体作为最基本的组成相。

2. 金属化合物

合金中溶质含量超过溶剂的溶解度时将出现新相，这个新相可能是一种晶格类型和性能完全不同于任意合金组元的化合物，例如碳钢中的 Fe_3C (渗碳体)。金属化合物一般具有复杂的晶体结构。金属化合物的特点是熔点高、硬度高和脆性大。因此，当合金中出现金属化合物时，通常能提高合金的强度、硬度和耐磨性，但也会降低塑性和韧性。金属化合物是各类合金钢、硬质合金及许多非铁合金的重要组成部分。

多数工业合金均为固溶体和少量化合物构成的混合物，通过调整固溶体的溶解度和其中的化合物的形态、数量、大小及分布，可使合金的力学性能在一个相当大的范围内变动，从而满足不同的性能要求。

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/376035041134010134>