

1.空间点阵:代表晶体中原子、原子团或分子分布规律(周期性)的几何点的集合.三维空间点阵即在三维空间内表示原子或原子集团排列规律的几何点所构成的阵列.

2.晶体结构:把晶体中原子的集合(或分布)称为晶体结构.

3.复式点阵:有时人们把实际晶体结构也看是一个点阵,但不是单一的布拉维点阵,而是由几个布拉维点阵穿插成的复杂点阵.

4.结构胞:反映点阵对称性的晶胞.即在反映对称性的前提下选取体积最小的晶胞.

5.原胞:只要求晶胞的体积最小,而不一定反映点阵的对称性.

5.晶胞:反映晶格特征的小的平行六面体.

6.晶面:穿过晶体的原子面(平面).晶向:连接晶体中任意原子列的直线方向.

7.晶面族:晶体中,往往存在一些位向不同,但原子排列情况完全相同的晶面,这些在晶体学上等价的晶面构成晶面族.

8.晶向族:原子排列相同,空间位向不同的所有晶向,即在晶体学上等价的晶向.

9.配位数:一个原子最近邻的原子数.

10.晶带:相交于某一晶向直线或平行于此直线的晶面构成晶带.此直线叫晶带轴.

11.主量子数 n 是决定能量的主要参数, $n=1, 2, \dots$.
轨道角量子数 l 决定轨道角动量大小, $l=0, 1, 2, \dots, (n-1)$.
轨道磁量子数 m 决定轨道角动量在外磁方向的投影值, $m=0, +1, +2, \dots, +l$.
自旋磁量子数 m_s 决定了自旋角动量在外磁方向的投影值, $m_s=+1/2$.

12.简并:在没有外场的情形下,能量是与轨道磁量子数无关的,这样, n, l 和 m_s 相同而 m 不同的状态将具有相同的能量,我们把不同状态对应着相同能量的现象称为简并.

13.短周期:包括第 I、II、III 周期,其特点是所有元素的电子态均为 s 或 p 态(称为 sp 元素).

14.长周期:包括第 IV—VII 周期,特点是不仅包含 sp 态,还包含 d 或 f 态元素,即电子填充在 d 或 f 轨道.

15.凡是外层电子填充在 d 轨道的元素都称为过渡族元素.

16.凡是外层电子填充在 $4f$ 轨道上的元素称为镧系元素.

17.凡是外层电子填充在 $5f$ 轨道上的元素称为锕系元素.

18.次一次壳层:是指主量子数 n 和角量子数 l 都相同的壳层,

19.洪特规则 h_{und} :即 n 和 l 都相同的电子力图占据自旋相同的次一次壳层,或者说尽可能保持自旋不成对。(如果两个电子的 m_s 分别为 $+1/2$ 和 $-1/2$,则说他们是自旋成对的)

20.电离能(电离电位):将原子的外层电子击出所需的最小能量.

21.结合键:是指原子结合成分子或固体的方式和结合力的

大小。

21.价带:由价电子的原子能级展宽而成的带。

22.导带:由价电子能级以上的空能级展宽而成的带。

23.禁带:两个分开能带之间的能量间隔 ΔE_g 。

24.费米能级:在外电场作用下最高的被填充能级。

25.晶体的结合能(内聚能):由中性原子结合成晶体所释放的能量或将晶体拆散成中性原子所消耗的能量。

26.8-N 规则:周期表中 IVA、VA、VIA 元素大多为共价结合,每个原子具有 $8-N$ 个近邻的原子,即配位数为 $8-N$, N 为族数。此规则是原子为通过共价键达到八个电子层结构的必然结果

27.压缩系数 β :单位压强引起的相对体积变化。热膨胀系数 α :单位温度变化引起的相对长度变化。

28.合金:由金属和其它一种或多种元素通过化学键合而成的具有金属特性的材料。含量不同(成分不同)的各种合金形成一个合金系列。

29.相(合金相):是合金中结构相同,成分和性能均一,并以界面相分开,是合金组织的基本组成部分。

30.组织:在一定的外界条件下,一定成分的合金可以由若干不同的相组成,这些相的总体称为合金的组织。

31.固溶体:合金的组元之间以不同的比例混合,混合后形成的固相的晶体结构与组成合金的某一组元的相同,这种相就称为固溶体。此组元称为溶剂,另一组元即为溶质。(溶质原子完全溶于固态溶剂中,并能保持溶剂元素的晶格类型所成的合金相)

32.置换固溶体:溶质原子代替部分溶剂原子而形成的固溶体。溶质原子位于溶剂晶格的某些结点位置所形成的固溶体。

33.间隙固溶体:溶质原子不是占据溶剂晶格的正常结点位置,而是填入溶剂原子间的一些间隙中。

34.固溶度:溶质在固溶体中的(溶剂中的)最大含量(极限溶解度)。

35.化合物:由两种或多种组元按一定比例(一定的成分)构成一个新的点阵,它即不是溶剂的点阵,也不是溶质的点阵。

金属间化合物(中间相):合金组元间发生相互作用而形成的一种新相。

36.Darken-Gurry 图:Darken-Gurry 提出了用作图法预计某溶质组元在给定的溶剂组元中的固溶度。(基于 H-R 的第 1, 2 两条规则)

27.Vegard 定律:当两种同晶型的盐(如 $KCl-KBr$)形成连续固溶体时,固溶体的点阵常数与成分成直线总关系。即点阵常数正比于任一组元的浓度。

28 固溶强化:固溶体的强度和硬度往往高于各组元,而塑性较低。

29.有序强化:对于某些具有无序—有序转化的中间固溶体

来说,有序状态的强度高于无序的强度。

30.价化合物:符合原子价规则的化合物,正负离子之通过电子的转移和(或)电子的共用而形成稳定的8电子组态的化合物。按照价电子是否都是键合电子,价化合物又分为正常价化合物和一般价化合物。可以认为:正常价的金属间化合物包括除金属卤化物和氧化物以外的一切离子化合物。

32.电子相:具有一定的电子浓度值而结构相同或密切相关的相。

33.尺寸因素化合物:其晶体结构主要取决于组元原子的半径比的一些金属间化合物。分为密排相(金属与金属形成)和间隙相(金属与非金属形成)

34.几何密排相:由密排原子面按一定次序堆垛而成的结构。

35.拓扑密排相:由密排四面体按一定的次序堆垛而形成的结构。分为 Laves 相、 σ 相和 $\text{Cr}_3\text{Si}(\text{Al}_5)$ 相。

36. Kasper 配位多面体:以给定原子为中心,以其最近邻原子为顶点的多面体。

37.间隙化合物(间隙相):由原子半径大的过渡金属元素和原子半径小的准金属元素 H,B,C,N,Si 等形成的金属间化合物。

1.常见晶体的几何参数(手工补充)

2.常见的晶体结构

(1)体心立方:碱金属,难熔金属(V Cr Mo W Nb), α -Fe 等。

(2)面心立方:贵金属 Al Cu Ni Pb Pd Pt γ -Fe 等。

(3)密排六方: α -Be(c/a 约=1.57), α -Ti α -Zr α -Hf(c/a 约为 1.59), α -Co 及 Mg(c/a =1.62), Zn(c/a =1.86), Cd(c/a =1.89) 等。

3.FCC 晶体(其间隙是对称性的)

(1)八面体间隙:4 个,位于每条棱中心及其体心处,间隙半径和原子半径比为 0.414,间隙半径大小为:0.146a

(2)四面体间隙:8 个,位于体对角线的两端四分之一距离处.间隙半径和原子半径比为 0.225.间隙半径大小:0.06a

4.BCC 晶体(间隙非对称性)

(1)八面体间隙:6 个,位于各个面心及其棱中点处.间隙半径和原子半径比为 0.155,间隙半径为:0.067a

(2)四面体间隙:12 个,每个面有 4 个.间隙半径和原子半径比为:0.291,间隙半径为:0.126a

5.HCP 晶体(和面心立方相同)

(1)八面体间隙:6 个,间隙半径和原子半径比为:0.414

(2)四面体间隙:12 个,间隙半径和原子半径比为:0.225

6.没有外场的情形下各元素原子中核外电子的分布原则:

①能量最低原则,即各电子应占据能量最低的状态。②泡利不相容原理,即在一个原子中,不允许两个电子的 4 个量子数都分别相等,也即由 4 个具体的量子数确定的状态

只能被一个电子占据。或者说每一个状态只能容纳两个自旋相反的电子。③洪特(hund)规则,即在主量子数和角量子数相同的轨道上排布的电子,将尽可能占据磁量子数不同的轨道,且自旋平行。

7.原子稳定性结论:①中性原子的电离电位最低。② $(1s)^2$ 是比较稳定的状态。③在其它因素相同的情况下,核电荷数越大的元素,其同级电离电位也越高。④次外层电子对外层电子有屏蔽作用,即减弱核对外层电子的库伦力,从而使后者的电离电位减小。

总之,衡量原子稳定性的电离电位取决于三个因素: $(1s)^2$ 的稳定性、核电荷的大小、屏蔽效应。

8.结合键种类及其特点

①离子键(极性键):正负离子通过静电引力(库仑引力)而结合成。特性:具有方向性、饱和性。

②共价键:相邻原子通过共用电子对结合而成,使各个原子的外电子层都形成稳定的八电子层结构。性质:熔点高、硬度高、质脆,没有方向性、无饱和性。③金属键:由价电子集体(自由电子气)和金属正离子间的静电引力结合而成。④分子键(范德瓦尔斯力):相邻原子的瞬时感应电场的交互作用而使原子间产生了静电引力。⑤氢键:分子是极性共价键结合而成,共用电子对远离氢原子,氢原子除去一个共价电子外就剩下一个没有任何核外电子作屏蔽的原子核,于是这个没有屏蔽的氢原子就对相邻分子中的另一原子外层未共价电子有较强的静电引力。这个引力就是氢键。

9.导体的特点:外电场能改变价电子的速度分布和能量分布,造成电子的定向移动。一种情形是固体中价电子浓度比较低,没有填满价带。另一种导电情形是价带和导带交叠,因而在外电场下,电子能填入导带。

10.绝缘体的特点:价带和导带间存在较大的能隙 ΔE_g ,而价带又被电子填满,因而通常情形下外电场不能改变电子的速度和能量分布。

11.半导体:半导体的能带结构和绝缘体类似,即价带被电子填满,它与导带间有一定的能隙 ΔE_g ,但比较 ΔE_g 小(一般小于 $2eV$)。

12.半导体的三种情形:

(1) ΔE_g 非常小,热激活能就足以使价带中费米能级以上的电子跃迁到导带底部,同时在价带中留下“电子空穴”。于是,在外电场作用下,导带中的电子和价带中的电子空穴都可以向相邻的能级迁移,从而改变电子的速度和能量分布。这样的半导体称为本征半导体。

(2) ΔE_g 比较小,在能隙中存在着由高价杂质元素产生的新能级。热激活足以使电子从杂质能级跃迁到导带底部。于是在外电场作用下,通过导带中的电子的迁移而导电。这样的半导体称为 N 型半导体。

(3) ΔE_g 比较小,在能隙中存在着低价杂质元素产生的

新能级。热激活足以使费米能级以上的电子跃迁到杂质能级，从而在价带中留下电子空穴。于是在外电场作用下，通过价带中的电子空穴的迁移也产生电流。由于电子空穴的行为类似于带正电荷的粒子，故这类半导体称为P型半导体。

13.注意：①As 砷，Sb 锑，Bi 为第VA族元素，具有菱形的层状结构，配位数为3，层内共价结合，层间带有金属键。②VIA元素Se、碲Te菱形晶系，呈螺旋分布的链状结构，配位数为2，链本身共价结合，链与链之间为范德瓦尔斯键。③VIIA族元素I配位数1，分子间结合键是分子键。

14.影响合金相结构的主要因素

①原子半径或离子半径②负电性：表示它在和其它元素形成化合物或固溶体时吸引电子的能力的一个参数。③价电子浓度：合金中每个原子平均的价电子数。④其它因素：如对离子和共价晶体：电荷半径比之和。

15.固溶体三个基本特征

①溶质和溶剂原子占据一个共同的布拉菲点阵，且此点阵类型和溶剂点阵类型相同。②有一定的成分范围，也就是说组元的含量可在一定范围内改变而不会导致固溶体点阵类型的改变。某组元在固溶体中的最大含量例称为该组元在该固溶体中的固溶度。③具有比较明显的金属性质。

16.固溶体分类

(1)根据固溶体在相图中的位置

①端部固溶体，也称为初级固溶体。②中间固溶体，也称为二次固溶体。成分不一定的范围，但并不具有任一组元的结构。二次固溶体又叫中间相。也可以看成是以化合物为基的固溶体。如β黄铜看成是金属间化合物CuZn为基的固溶体。

(2)根据溶质原子中点阵中的位置

①置换式固溶体，其溶质原子位于溶剂原子点阵的结点上，置换了部分溶剂原子。②间隙式固溶体，溶质原子位于溶剂原子间隙中。

(3)根据固溶度

①有限固溶体，溶质在固溶体的浓度有一定的限度②无限固溶体，溶质能以任意比例溶入溶剂，无限固溶体只能是置换固溶体。

(4)根据各组元分布的规律性

①无序固溶体，各组元原子的分布是随机的②有序固溶体，各组元原子分别占据各自的布拉菲点阵一分点阵，整个固溶体就是由各组元的分点阵组成的复杂点阵—又叫超点阵或超结构。(溶质原子按适当比例并按一定顺序和一定方向，围绕着溶剂原子分布)

17.Hume-Rothery 规则（置换式固溶体固溶度）

(1)如果形成合金的元素的原子半径之差超过14%—15%，则固溶度极为有限。(15%规则)(2)如果合金组元的负电性

相差很大，固溶度就较小。(负电价效应)(3)两个给定元素的相互的固溶度是与它们各自的原子价有关的，且高价元素在低价元素中的固溶度大于低价元素在高价元素中的固溶度。(相对价效应)(4)如果用价电子浓度表示合金的成分，那么II B—V B族元素在I B族溶剂元素中的固溶度都相同——约为 $e/a=1.36$ ，而与具体的元素种类无关。(5)两组元形成无限固溶体的必要条件是它们具有相同的晶体结构。

注：1、2两条是普遍规则，而且是否定的规则。相对价效应仅当低价组元为Cu,Ag,Au等I B金属时才成立。

18.(金属学解释)影响置换固溶体固溶度的因素

原子尺寸、负电性、电子浓度和晶体结构。

①原子尺寸因素

组元间原子半径越相近，即 Δr 越小，则固溶体的固溶度就越大， Δr 越大时，则固溶体的固溶度越小。有利于大量固溶的原子尺寸是 Δr 不超过14%—15%，即溶质和溶剂原子的半径比 $r_{\text{溶质}}/r_{\text{溶剂}}$ 在0.85—1.15之间。铁基固溶体只有 Δr 小于8%晶体结构相同，才有可能形成无限固溶体；铜基，只有 Δr 小于10%—11%时，才有可能形成无限固溶体。(原因：原子半径相差越大，晶格畸变能越高，晶格不稳定，溶质原子越多，畸变能也越高，直达到不能维持，即达到了固溶度极限。)

②负电性因素

溶质原子与溶剂原子的负电性相差很大，即两者间化学亲和力很大，它们往往形成比较稳定的金属化合物，即使形成固溶体，其固溶度也较小。

③电子浓度因素

溶质在溶剂中的溶解度受电子浓度的控制，固溶体电子浓度有一个极限值，超过此极限值，固溶体就不稳定。

④晶体结构因素

溶质与溶剂的晶体结构类型是相同是它们能形成无限固溶体的必要条件。

19.间隙固溶体影响因素

只有当溶质与溶剂的原子半径比值为 $r_{\text{溶质}}/r_{\text{溶剂}} < 0.59$ 时，才有可能形成间隙固溶体。

间隙固溶体的固溶度与溶质原子的大小有关，也与溶剂的晶格类型有关。

20. 间隙固溶体只能是有限固溶体的原因

溶剂晶格中间隙位置是有一定限度的。

21.间隙固溶体和置换固溶体强化效果比较

间隙式溶质原子的强化效果一般要比置换式溶质原子列显著。这是因为间隙式溶质原子往往择优分布位错线上，形成间隙原子“气团”，将位错牢牢地钉扎住，从而造成强化。相反置换原子往往均匀分布在点阵内，虽然由于溶质和溶剂原子尺寸不同，造成点阵畸变，从而增加位错运动的阻力，但这种阻力比间隙原子气团的钉扎力小的多，因

而强化效果也小。

22. Pauling 规则 (离子化合物结构)

①在正离子周围形成一负离子配位多面体,正负离子之间的距离取决于离子半径之和,而配位数则取决于正负离子半径之比。②形成一个离子键时正离子给出的价电子数应等于负离子得到的价电子数,因此有 $Z_+/CN_+ = Z_-/CN_-$ 。③在一个配位结构中,当配位多面体共用棱,特别是共用面时,其稳定性会降低,而且正离子的电价越高、配位数越低,则上述效应越显著。④在含有一种以上的正离子的晶体中,电价大、配位数小的正离子周围的负离子配位多面体力图共顶连接。⑤晶体中配位多面体的类型力图最少。第4、5规则是由第3规则引出。

23. 典型离子化合物晶体结构

(1) AB 型化合物结构

①NaCl 型结构 (岩盐结构):面心立方点阵, Cl⁻占结点, Na⁺位于八面体间隙。②CsCl 型结构:具有简单立方的布拉菲点阵,一种离子点晶胞结点,另一种离子占体心。③闪锌矿 (立方 ZnS) 结构:面心立方,负离子占结点,正离子占不相邻的四面体间隙。④纤锌矿 (六方 ZnS) 结构:简单六方点阵,负离子占结点,正离子位于5个四面体间隙。

(2) AB₂ 型化合物结构

①萤石 (CaF₂) 结构:面心立方,小正离子占结点,大负离子占四面体间隙。②金红石结构:TiO₂简单正方点阵,电致变色材料,俗称钛白粉。

(3) A₂B₃ 型结构

①刚玉 (α-Al₂O₃) 具有简单六方点阵。

(4) ABO₃ 型结构

①钙钛矿型结构 (CaTiO₃) 简单立方点阵。

(5) AB₂O₄ 型结构

尖晶石,结构特点是:O²⁻离子为立方密排,A和B离子则填充在O²⁻离子间隙中。典型尖晶石有MgAl₂O₄。

24. 氧化物结构的一般规律

氧离子密排。大多数简单的氧化物结构中氧离子排成面心立方、密排六方或近似密排的简单立方,而正离子则位于八面体间隙、四面体间隙或简单立方的体心。

25. 金属间化合物分类

①由负电性决定的原子价化合物 (价化合物) ②由电子浓度决定的电子化合物 ③原子尺寸决定的尺寸因素化合物 (金属与金属形成密排相,金属与非金属形成间隙相或间隙化合物)。

26. 正常价化合物的形成规则 (Hume-Rothery 指出)

(1) 所有金属一般都倾向于与IVB、VB、VIB族元素形成正常价化合物。(2) 金属的正电性越强或B族元素的负电性越强,上述倾向性就越大,而且化合物也越稳定。

27. 电子相的特点

(1)除贵金属外,铁族元素也和某些B族元素形成电子相。

(2)价电子浓度为3/2的电子相有三种可能的结构,即BCC结构(β相)、复杂立方的β-Mn结构(μ相)和密排六方结构(ζ相)(3)大多数典型的电子相都出现较宽的浓度范围内。(4)电子相的主要结合键是金属键,具有明显的金属特性。

28. 密排相原子排列遵从原则

(1)空间填充原则,原子应尽可能致密地填满空间。即应具有尽可能高的配位数(2)对称原则:晶体中原子的排列应形成高对称的结构。(3)连接原则:具有密排结构的晶体中往往形成三维栅状连接。

29.密排相的密排方式:几何密排(形成几何密排相GCP)和拓扑密排(形成拓扑密排相TCP)。

30. AB₂ 型 Laves 相的特点

1) 结构: 可以看成由B原子密排四面体堆垛而成,A原子位于B原子四面体之间。2) 密排: 最近邻的同类原子是相接触的,但异类原子不接触。3) 高配位数: $CN(A) = 4(A) + 12(B) = 16; CN(B) = 6(A) + 6(B) = 12$ 。

31. TCP 特点

1) 密排: 由于TCP相的各组元大小不同,且符合一定的原子半径比,故TCP相中的原子比FCC、CPH纯金属或其它GCP更致密地填充整个空间。

2) 高配位数: TCP相具有高的配位数,而且不同的组元原子或在不同位置的原子可以有不同的配位数。

3) 四面体堆垛: TCP相往往可以看成是由规则或不规则四面体无间隙地填充整个空间。

4) 层状结构: TCP相可以看成是由两类原子的密排层依次相间堆垛而成。

5) Kasper相和Kasper多面体,上述由四面体堆垛而成的TCP相也称为Kasper相,因为Kasper等人发现,这样的TCP相也可看成是由各种配位多面体堆垛而成。

32. 间隙化合物的 Hagg 规则

当 $r_X/r_M < 0.59$ 时,形成结构简单的间隙相,并具有简单的化学式MX, M₂X, M₄X和MX₂。当 $r_X/r_M > 0.59$ 时,形成结构复杂的间隙相,其典型的化学式为M₃C, M₂₃C₆和M₆C。
 $r_X/r_M = 0.23$ 时,准金属原子占据过渡金属结构的四面体间隙;而当 r_X/r_M 在0.41到0.59之间时,占据八面体间隙。

(金属学解释:简单结构的为间隙相,复杂结构为间隙化合物。间隙相的硬度、熔点比间隙化合物大。)

33. 间隙化合物的特性

1) 虽然原子半径比是决定结构的主要因素,但价电子浓度因素对结构也有很大的影响。2) 虽然间隙化合物可以用一个化学式表示,但大多数间隙化合物的成分可以在一定的范围内变化。3) 虽然间隙化合物中准金属元素的含量很高,但它仍具有明显的金属性质。4) 间隙化合物一般具有很高的熔点、极高的硬度和脆性。5) 间隙化合物中的结合键是混合型的6)某些间隙化合物具有超导性。7)

过渡族金属的硼化物和磷化物可通过快冷而成为非晶材料，其力学和电学性能类似于钢。

34. 间隙相、间隙固溶体

间隙相的晶体结构与组元不同，而间隙固溶体保持着溶剂的晶格类型。

晶体的范性形变

1. 弹性变形：晶体中外力作用下会发生变形，当外力较小时，变形是弹性的，即卸载后变形也随之消失。这种可恢复的变形就称为弹性变形。

2. 塑性变形：晶体在外力作用下发生变形时，如外加应力超过一定值时，应力和应变就不再成线性关系，卸载后变形也不能完全消失，而会留下一定残余变形或永久变形，即不可恢复变形。

3. 晶体的弹性性能用：弹性模量表示；塑性性能则用拉伸时的延伸率和断面收缩率表示。

4. 单晶体范性变形的的基本方式：滑移和孪生。滑移和孪生都是剪应变，即在剪应力作用下晶体的一部分相对于另一部分沿着特定的晶面和晶向发生平移。滑移时特定晶面和晶向称为滑移面和滑移方向；孪生时特定晶面和晶向称为孪生面和孪生方向。都用 $\{hkl\} \langle uvw \rangle$ 表示。其基本差别是：滑移不改变晶体各部分的相对取向，也就是不在晶体内部引起位向差；而孪生则相反，发生了孪生的部分和未发生孪生的部分具不同的位向，二者构成镜面对称关系，对称面就是孪生面。

5. 晶体的滑移系首先取决于晶体结构，但也和温度、合金元素等有关。对 FCC、BCC、HCP 晶体来说，滑移方向都是最密排的方向，而滑移面则往往是密排面。

6. **FCC 滑移系统** $\{111\} \langle 110 \rangle$ ，有 4 个取向不同的 $\{111\}$ 面，每个面上有 3 个密排方向，故有 12 个晶体学上等价的滑移系统。**HCP 晶体**的滑移系统和 c/a 有关，对于 c/a 大的晶体如 Zn, Cd, 其密排面是 (0001)，滑移系统是 $(0001) \langle 11\bar{2}0 \rangle$ ，共 3 个等价的滑移系统。对于 c/a 较小的晶体如 Mg, Ti, Zr 等，其滑移面除 (0001) 外，还有 $\{10\bar{1}0\}$ 和 $\{10\bar{1}1\}$ ，因为它们原子密度相差不多，但其滑移方向均为 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 。BCC 晶体可能有 $\{110\}$ 、 $\{112\}$ 和 $\{113\}$ 视具体晶体和温度而定。滑移方向为 $\langle 111 \rangle$ 。晶体沿 3 组面构成的曲折滑移面的滑移叫铅笔状滑移。

7. **BCC 塑性不如 FCC 晶体原因**：BCC 晶体的滑移方向不及面心立方多，同时其滑移面上的原子密排程度也比面心立方金属低，因此它的滑移面间距较小，原子间结合力较大，必须在较大的应力作用下才能开始滑移。

7. 分切应力：决定晶体能否开始滑移的应力一定是作用在滑移面上沿着滑移方向的分切应力。

8. Schmid 定律

作用在滑移面上的沿着滑移方向的分切应力为：

$$\tau = F \cos \lambda / (A_0 / \cos \phi) = (F/A_0) \cdot \cos \lambda \cos \phi = \sigma \cos \lambda \cos \phi = \sigma \mu$$

σ 拉伸应力， μ 取向因子或 Schmid 因子。 ϕ 拉力和滑移面法线 n 的夹角， λ 为 F 和滑移 b 的夹角。

Schmid 用同种材料但取向不同的单晶试验发现，尽管 μ 不同，但开始滑移的分切应力都相同。晶体开始滑移所需的分切应力是： $\tau = \sigma \mu = \tau_c$ τ_c 称为临界分切应力，它是个材料常数。

单晶体没确定的屈服极限，因为单晶体开始塑性变形时 τ_c 是一定的，因而拉应力 σ 并不是一个常数。它取决于单晶体的位向 $\sigma = \tau / \mu$ ，将 μ 值大的位向称为软位向， μ 值小的位向称为硬位向。

9. 晶体在滑移过程中的转动

晶体在发生滑移的同时，还将发生滑移面朝拉伸轴线方向转动。晶体转动的原因：作用在晶体上的任意一个力，总是可以分解为沿滑移方向的分切应力和垂直于滑移面的分正应力。晶体滑移时，滑移面的滑移方向保持不变，则拉伸轴的取向必然发生不断的变化。但通常的力学试验中，由于夹头对试样的约束，其方向是不能随意改变的。因而拉伸过程中试样轴必须始终沿着两个夹头的连线，这样试样在拉伸过程中就必须一面滑移，一面转动。在压缩时，压头将试样的两个端面紧紧压住，因而这两个面在空间的方位也不能改变，因而试样在压缩过程中也必须一面滑移一面转动。

10. 晶体转动规律

单晶体在位伸时滑移方向力图转向拉伸轴；压缩时则滑移面力图转向压缩面。

11. 几何软化：由于晶体的位向变化引起的现象，经滑移和转动后，滑移面的法向与外力轴的夹角越来越靠近 45 度，那么滑移越容易进行。

12. 物理硬化：由于滑移会引起晶体内部结构（主要是位错等缺陷的密度和分布）的变化，因而维持滑移继续进行所需的剪应力将大于 τ_c 。

13. 几何硬化：在拉伸时随着晶体取向的改变，滑移面的法向与外力轴的夹角越来越远离 45 度，从而使滑移越来越困难的现象。

14. **多滑移**：对于滑移系多的立方晶系单晶体来说，可能在某一时刻有几个滑移系相对于外力轴有相同大小的取向因子，因此，当外力达到时，作用在这几个滑移系上的分切应力几乎同时达到临界值。这几个滑移系可以同时进行滑移，这种两个或多个滑移系上同时进行滑移的现象即为多滑移。

15. 滑移过程中次生现象

1) 晶面弯曲

由于局部区域的微观缺陷、杂质等阻碍作用，滑移面可能发生弯曲。晶面弯曲会有星芒现象，即弯曲晶面可近似地看成是由一系列位向差很小的平面组成，因此它的劳

厄斑就不再是明锐的斑点，而是拉长了的斑点。

2) 形变带

由于局部区域存在杂质和各种缺陷，这些区域的转动就受到阻碍，其转角小于远离杂质和缺陷的区域。转角不同的区域就有位向差，因而在显微镜暗存在反差，我们把转角较小的带状区称为形变带。

3) 弯折带

滑移和转动仅发生在一个狭窄的带状区域，这个带状区域就叫弯折带。

15.单晶体的硬化曲线(晶体硬化行为的曲线，晶体拉伸时的切应力-切应变曲线)

根据硬化率可以将硬化曲线分为三个阶段：第1阶段是易滑移阶段， $d\tau/d\gamma$ 非常小。第2阶段是线性硬化阶段， $d\tau/d\gamma$ 为一恒定的最大值。第3阶段是抛物线硬化阶段， $d\tau/d\gamma$ 随着 γ 增加而减小。

硬化曲线与金属类型、晶体的位向、温度、合金元素等因素有关。温度高硬化曲率减小。

样品形貌：第1阶段，样品表面只有一些均匀分布的细小滑移线。第2阶段均匀细滑移线的背景上出现不均匀的粗滑移带。第3阶段出现交叉滑移带。

16.晶体的孪生系统(取决于晶体结构)

FCC晶体的孪生系统是 $\{111\}<112>$ ，BCC晶体的孪生系统是 $\{112\}<111>$ ，HCP晶体的孪生系统是 $\{10\bar{1}2\}<1011>$ 。

17.孪晶：晶体的一部分沿一定的孪晶面和一定的孪晶向相对于另一部分晶体作均匀的切变，在切变区域内，与孪晶面平行的每层原子的切变量与它距孪晶面的距离成正比。这种切变不会改变晶体的点阵类型，但可使变形部分的位向发生变化，并与未变形部分的晶体以孪晶面为分界面构成了镜面对称的位向关系。通常把对称的两部分晶体称为孪晶，形成晶孪的过程称为孪生。

18.孪生原子运动遵守规则

第一，原子的最终位置要和基体中的原子构成映象关系。即孪生面两侧的原子必须对称于孪生面。第二，最小位移原则，根据最小功原理，原子移动的距离应最小。

19.孪生的特点

1) 孪生不改变晶体结构。2) 孪晶与基体的位向不同，二者的位向关系是确定的。3) 孪生时，平行于孪生面的同一层原子的位移均相同，位移量正比于该层到孪生面的距离。相邻两层原子的相对位移为 $1/6[112]$ 。4) 孪生时堆垛次序的变化：孪晶内部是连续的堆垛层错结构。5) 孪晶界面能：孪晶-基体界面上的原子处于较高的能量状态，这种比内部原子高出的能量就是孪晶的界面能。孪晶的界面能很小。

20.滑移和孪生的比较

(1) 相同方面

1) 从宏观上看，二者都是晶体在剪应力作用下发生的均匀剪应变。

2) 从微观上看，二者都是晶体范性形变的基本方式，是晶体的一部分相对于另一部分沿一定的晶面和晶向平移。

3) 二者都不改变晶体结构。

4) 从变形机制看，二者都是晶体中位错运动的结果。

(2) 不同方面

1) 滑移不改变位向，即晶体中已滑移部分和未滑移部分的位向相同。孪生改变位向，即已孪生部分和未孪生部分的位向不同，而且两部分具有特定的位向关系-对称关系。

2) 滑移时原子的位移是沿滑移方向的原子间距的整数倍，而且在一个滑移面上的总位移往往很大。但孪生时原子的位移小于孪生方向原子间距。

3) 滑移时只要晶体有足够的塑性，切变 γ 可以为任意值。但孪生时切变 γ 是一个确定值，且一般都较小。滑移可以对晶体的塑性变形有很大的贡献，而孪生对塑性变形的直接贡献非常有限。但孪生的引起位向改变，可以诱发滑移。

4) 虽然宏观上看，滑移和孪生都是均匀切变，但从微观上看，孪生比滑移变形更均匀，因为在孪生时每相邻两层平行于孪生面的原子层都发生同样大小的相对位移。

5) 滑移过程比较平缓，因而相应的拉伸曲线比较光滑、连续。孪生往往是突然发生的，甚至可以听见急促的响声。

6) 滑移和孪生发生的条件往往不同。晶体的对称度越低，越容易发生孪生。变形温度低，加载速率越高，也越容易发生孪生。

7) 滑移有确定的临界分切应力，而孪生是否也存在着确定的临界分切应力无实验证据，但一般来说，引起孪生所需的分切应力往往高于滑移的临界分切应力。

8) 滑移是全位错运动的结果，孪生则是分位错运动的结果。

21.多晶体范性变形的一般特点

一是各晶粒变形的不同时性，即各晶粒变形有先有后，不是同时进行；二是各晶粒变形的相互协调性。面心立方金属的滑移系多，各个晶粒的变形彼此协调得好，因此多晶体金属表现出良好的塑性。而密排六方金属的滑移系少，很难使晶粒的变形彼此协调，所以它们的塑性差。三是多晶体的塑性变形也具有不均匀性，由于晶界及晶粒位向不同的影响，各个晶粒的变形是不均匀的。

22.晶粒边界：晶粒与晶粒之间的过渡区域。实验表明：低温或室温下，晶界强而晶粒本身弱；高温下则相反。这样必然存在一个温度，在此温度下晶界和晶粒本身强度相等。这个温度称为等强温度。

23.晶界在多晶体范性变形中的作用

1) 协调作用: 多晶体作为一个整体, 各个晶粒的变形不能是任意的, 而必须是相互协调, 否则在晶界处就会开裂。协调变形的要求, 是晶界处变形必须连续, 亦即两个相邻的晶粒在晶界处的变形必须相同。

2) 障碍作用: 低温或室温变形时, 由于晶界比晶粒强, 故滑移主要在晶粒内进行。它不可能穿过晶界而在相邻晶粒内进行, 晶界阻碍了滑移。另一方面, 由于晶界内大量缺陷的应力场, 使晶粒内部滑移更困难。

3) 促进作用: 在高温下变形时, 由于晶界比晶粒弱, 故除了晶粒内滑移外, 相邻两个晶粒还会沿着晶界发生相对滑动, 此称为晶界滑动。晶界滑动往往伴随着晶界迁移。所谓晶界迁移就是一个晶粒内的原子通过扩散向另一个晶粒定向移动, 造成晶界从一个位置迁移到另一个位置。

4) 起裂作用: 一方面, 由于晶界阻碍滑移, 此处往往应力集中; 另一方面, 由于杂质和脆性, 第二相往往优先分布于晶界, 使晶界变脆; 这样, 变形过程中裂纹往往起源于晶界。

24.多晶体范性变形的微观特点(多方式、多滑移和不均匀)

1) 多方式(取决于变形温度和应力): 多晶体的范性变形方式除了滑移和孪生外, 还有晶界滑动和迁移, 以及点缺陷的定向扩散。滑移和孪生是室温和低温下范性变形的重要方式, 引时外加应力超过晶体的屈服极限。晶界滑动和迁移是高温下的范性变开方式之一, 此时外加应力往往低于该温度下的屈服极限, 如高温蠕变。试验温度非常高, 外加应力非常低, 可能出现由于点缺陷的定向扩散而引起的塑性变形。

2) 多滑移: 多晶体变形时开动的滑称系统不仅仅取决于外加应力, 而且取决于协调变形的要求, 为了维持多晶体的完整性, 即在晶界处即不出现裂纹, 也不发生原子的堆积, 每个晶粒至少有 5 个滑移系统的同时开动。

3) 不均匀性: 由于晶界等因素的约束作用, 不同晶粒之变形不均匀, 一个晶粒内部的变形也不均匀。晶体转动时, 中心区的转角大于边缘区, 因此多晶体变形后的组织中会出现更多的滑移带、形变带和晶面弯曲。**桔皮组织:** 金属经过冷加工后, 自由表面凹凸不平, 好像用鹅卵石铺成的马路或桔子皮一样。其形成原因是晶粒中心的滑移量大, 因而表面滑移台阶高, 而边缘区滑移量小, 因而滑移台阶低。

派生特点有: 产生内应力、出现加工硬化、形成纤维组织和择优取向。

25.晶粒度: 用单位体积材料中的晶粒数或单位截面面积内的晶粒数来度量。

26.晶粒度对晶体性能的影响

一般来说, 晶粒越细, 阻碍滑移的晶界便越多, 屈服

极限也就越高。屈服极限与晶粒度的关系: $\sigma_y = \sigma_i + Kd^{-1/2}$

晶粒度与硬度的关系: $HB = A + Bd^{-1/4}$

27.内应力: 晶体内部各部分之间的相互作用力。**残余应力:** 由于内应力是在卸载后仍然保留在晶体内部的应力。

28.内应力的危害: ①内应力可能迭加在工作应力上, 使零件在使用时过早破坏或产生过量的塑性变形。②内应力可能迭加在加工应力上, 使材料在加工时裂开。③储能和内应力可以加速退火过程。④储能和内应力使金属化学上不稳定, 可能由于应力作用而加速的腐蚀称为应力腐蚀。

29.应变硬化: 金属对塑性变形的抗力是随变形量的增加而增加。这种流变应力随应变的增加而增加的现象即为应变硬化。

30.FCC 晶体的硬化特点

1) 屈服极限比较低, 往往低于其它晶体。

2) 硬化速率比较高, 往往高于其它晶体。

3) 延伸率高, 即塑性好。FCC 晶体不发生脆性解理断裂。

4) 应力-应变曲线可划分为 4 个区。I—弹性变形区, 应力-应变曲线直线关系(符合虎克定律)。II—过渡区, 硬化速率不断减小。III—线性硬化区, 应变硬化速率保持恒定值。IV—抛物线硬化区, 硬化速度不断减小。

31.BCC 晶体的拉伸曲线

分为三个区: 弹性变形区、特别流动区、抛物线硬化区

其特点有一个明显屈服点。**明显屈服点现象:** 具有明确的屈服点和塑性流动现象。当应力低于某一临界值 σ_{yu} 时, 只有弹性变形。当应力达 σ_{yu} 到时突然发生显著的塑性变形, 且使试样继续变形所需的应力迅速减小到更低的临界值 σ_{y1} 。只要外应力维持在恒定的 σ_{y1} 值, 试样就能继续伸长, 直到第三阶段开始。

流动带: 光滑的 BCC 金属试样在拉伸后表面出现的斜线, 大致和拉伸方向成 45 度角。其形成原因是由于 BCC 晶体变形极不均匀。

应变时效现象: 经过预拉伸至流动平台附近然后卸载的 BCC 晶体, 在第二次拉伸时, 其屈服极限随着卸载停放的时间增加而提高。如果预拉伸卸载后立即进行第二次拉伸, 则屈服极限为 σ_{y1} ; 若卸载后停放了较长的时间再拉伸, 则屈服极限为 σ_{yu} 。

32.影响应变硬化的因素

变形温度、变形速度、晶粒度、合金元素等。

1) 变形温度: 一般温度高, 屈服极限越低, 硬化速率也越小。对 FCC 晶体, 温度主要影响硬化速率, 对屈服极限影响不大。对 BCC 晶体, 屈服极限随着温度降低而急剧增加, 对硬化速率影响不大。

2) 变形速度: 增加变形速度相当于降低温度, 抑止了原子的热运动。高速变形可能出现新的情况, 如金属可自动升温。爆炸变形: 通过炸药爆炸产生高强度冲击波, 使金属变形。其微观特征: 形成大量的孪晶, 产生大的点缺陷, 很容易发生再结晶和相变, 位错密度大大增加。

3) 晶粒度: 晶粒越细, 屈服强度及硬度越高。原因: 在同样外加应力下, 大晶粒的位错塞积所造成的应力集中激发相邻晶粒发生塑性变形的机会比小晶粒大的多。小晶粒的应力集中小, 则需要在较大的外加应力下才能使相邻晶粒发生塑性变形。

4) 合金元素: 强化金属, 提高屈服极限和硬化速率, 或延长硬化阶段。也容易使金属变脆。

33. 变形组织: 多晶体在塑性变形时也伴随着晶体的转动过程, 故当变形量很大时, 多晶体中原为任意取向的各个晶粒会逐渐调整其取向而彼此趋于一致。这种由于塑性变形而使晶粒具有择优取向的组织即为变形组织。

34. 纤维组织和流线 (与热变形类似)

由于晶粒、杂质、第二相、缺陷等都沿着金属的主变形方向拉长成纤维状。

35. 断裂的分类

1) 按照宏观变形分类: 韧性断裂, 脆性断裂, 看断裂前有无明显的塑性变形。

2) 微观裂纹扩展速率分类: 断裂过程中晶体内部有微缝迅速扩展, 称为脆性断裂, 否则称为韧性断裂。

3) 按照引起断裂的应力分类: 剪断: 晶体是在剪应力作用下发生滑移并最终沿滑移面滑开。拉断: 晶体在拉应力作用下没有滑移而是沿某晶面法线方向拉开。

4) 按照断口位置: 断口穿过晶粒内部称为穿晶断裂; 如果断口是沿着晶粒边界, 称为沿晶断裂。

5) 根据使用条件还可以分为: 低温脆性断裂、疲劳断裂、蠕变断裂等。

6) 微观机制分类: 切离和纯剪切断裂、微孔聚集型断裂和解理断裂。

36. 断裂的微观理论-Griffith 裂缝理论

认为固体中本来就存在着某种裂缝, 由于裂缝引起应力集中, 即使平均的外加应力远低于理论强度, 但应力集中的地方应力仍可能达到或超过理论强度, 于是裂缝就会迅速扩展。理论计算得到裂缝扩展所需的应力为: $\sigma = (E\gamma/4c)^{1/2}$ 。也就是晶体的实际断裂强度。

37. 金属脆性断裂的特点

1) 金属在断裂前往往或多或少都有一定的微观塑性变形。非金属在室温下是不能塑性变形的。

2) 金属发生脆性穿晶断裂时往往沿着特定的晶面裂开 (拉断), 这个晶面就称为解理面。

3) 将金属晶体沿解理面拉开所需的正应力是一定的, 引应力称为该金属的临界正应力。

4) 由于解理面是一个晶面, 故金属脆性断裂的断口往往平整光亮, 并和拉应力垂直。

5) 金属中一般不存在足以引起断裂的预裂缝, 因为将一般金属的表面能、杨氏模量、实际断裂强度等参量算出的微裂缝长度远大于金属中的天然存在的裂缝的尺寸。

6) 金属中裂缝的扩展过程十分复杂, 可能导致各种各样的微观形貌。

从微观上讲, 金属脆性断裂与塑性断裂的区别是裂缝扩展行为不同: 前者在裂缝尖端只发生少量的塑性变形, 因而裂缝扩展迅速。后者伴随着大量的局部塑性变形, 因而扩展缓慢。

38. 影响金属韧性、塑性和断裂的因素

1) 温度: 温度对金属的韧性和脆性有很大的影响。温度越高, 韧性越好; 温度越低则越脆。但和金属的结构密切相关。面心立方金属 2 低温也有一定的塑性, 而对称性低的金属, 特别是体心立方金属则只有在较高的温度才发生韧性断裂。在中间某一温度范围出现由韧性到脆性的转变。这个温度范围就称为“韧性-脆性转变温度范围”, 即韧脆性转变温度。

2) 应力状态: $\sigma_{\max}/\tau_{\max}$ 越大, 应力状态越硬, $\sigma_{\max}/\tau_{\max}$ 越小, 应力状态越软。应力状态越硬, 越易发生脆性断裂; 应力状态越软, 易发生韧性断裂。故金属在弯曲时比拉伸时更容易发生脆性断裂, 扭转时容易发生韧性断裂。

3) 加载速率 (应变速率)

加载速率对金属的塑性变形和断裂行为不如温度和应力状态那样大, 而且仅限于体心立方和密排六方金属, 面心立方对加载速率不敏感。应变速率越高, 塑性变形受到限制, 容易发生脆性断裂。

4) 交变应力

发生疲劳断裂或疲劳破坏, 断裂前没有明显的塑性变形, 属于脆性断裂。

5) 环境和介质

① 腐蚀脆化 ② 辐照脆化: 材料经过高能粒子照射后会变脆。

6) 加工方式: 不同的加工方式会产生不同的组织, 从而在某些方向上出现脆性。

7) 晶体结构: FCC 金属具有很高的塑性, 而 BCC、HCP 金属的塑性较差, 容易发生脆性断裂。一般来说, 晶体的对称度越低或结构越复杂, 金属就越脆。

8) 成分和组织

金属越纯, 塑性越好。为了提高金属强度而加入的合金元素往往降低金属的塑性。

9) 晶粒度: 细化晶粒不仅可提高金属的强度, 同时还可以提高其韧性。前者是因为晶界阻碍滑移, 后者是因为晶界不仅阻碍裂纹的扩展, 而且随着晶粒数量的增多, 在每一晶界处应力集中更小了。可以降低韧-脆转变温度。

39. 塑性变形对金属组织和性能的影响

1) 塑性变形对组织组织的影响

①显微组织的变化:当变形量很大时,晶粒呈现出一片如纤维状的条纹,称为显微组织。②亚结构细化。③变形组织:多晶体在塑性变形时也伴随着晶体的转动过程,当变形量很大时,多晶体中原为任意取向的各个晶粒会逐渐调整其取向而彼此趋于一致。这种由于塑性变形的结果而使晶粒具有择优取向的组织。丝织组织,拉拔时形成;板织组织,轧制时形成。

2) 塑性变形对金属性能的影响

①加工硬化:塑性变形过程中,金属内部的组织变化,金属的机械性能发生显著的变化,即随着变形度的增大,金属强度、硬度增加,而塑性、韧性下降。②其它性能的影响:电阻率增加,导磁率、磁饱和度和下降。宏观上看缺陷减少,密度增加。

3) 残余应力

①第一类内应力(宏观内应力):由于物体各部分的不均匀变形所引起的。它是整个物体范围内处于平衡的力。②第二类内应力(微观内应力):晶粒或亚晶粒变形不均匀而引起的,它是在晶粒或亚晶粒范围内处于平衡的力。③点阵畸变(第三类内应力):塑性变形使金属内部产生大量的位错和空位,使点阵中的一部分原子偏离其平衡位置,造成点阵畸变。变种点阵畸变所产生的内应力作用范围很小,只在晶界、滑移面等附近不多的原子范围内维持平衡。使金属的强度硬度升高,而塑性和抗腐蚀能力下降。

晶体中的缺陷

1. 晶体中缺陷分类

- 1) 点缺陷:如果在任何方向上缺陷区的尺寸都远小于晶体或晶粒的线度,因而可以忽略不计,那么变种缺陷就称为点缺陷。如空位、间隙原子等。
- 2) 线缺陷:如果在某一方向上的缺陷区的尺寸可以与晶体或晶粒的线度相比拟,而在其它方向上的尺寸相对于晶体或晶粒线度可以忽略不计,那么这种缺陷就称为线缺陷。如位错。
- 3) 面缺陷:如果在共面和各方向上缺陷区的尺寸可以与晶体或晶粒的线度相比拟,而在穿过该面的任何方向上缺陷的尺寸都远小于晶体或晶粒的线度,那么这种缺陷就称为面缺陷。
- 4) 体缺陷:如果在任决方向上缺陷区的尺寸都可以和晶体与晶粒的线度相比拟,那么这种缺陷就称为体缺陷。如亚结构、沉淀相、气泡等。

2. 点缺陷的类型

两种基本类型:空位和间隙原子。

- 1) 肖脱基缺陷:只形成空位而不形成等量的间隙原

子。迁移到晶体的表面。

弗兰克尔缺陷:同时形成等量的空位和间隙原子。原子迁移到晶格的间隙中。

金属晶体来说,肖脱基缺陷就是金属离子空位,而弗兰克尔缺陷就是金属离子空位和位于间隙中的金属离子。对于离子晶体来说,肖脱基缺陷是等量的正离子空位和负离子空位。弗兰克尔缺陷只可能是等量的正离子空位和间隙正离子。

- 2) 间隙原子; 3) 置换原子。

3. 点缺陷的平衡浓度

$$C = n/N = A \exp(-\Delta E_v/RT)$$

晶体最稳定的状态是含有一定浓度的点缺陷的状态。

$$C = \exp(-\Delta G_v/RT) \quad C = C_0 \exp(-\Delta H_v/RT) \quad C = \exp(-\Delta S_v/R)$$

在一定的温度下,确实存在一个平衡的空位浓度,此时晶体的自由焓最低,因而最稳定。平衡浓度随温度升高而呈指数地急剧增加。

4. 过饱和点缺陷的形成

- 1) 淬火:低温下仍保留高温时的空位浓度。
- 2) 冷加工:位错交割所开成的割阶发生攀移。
- 3) 辐照:高能粒子辐照时,金属点阵上的原子将被击出。

5. 点缺陷对性能的影响

主要影响晶体的物理性质,如比容、比热容和电阻率等。

比容:如晶体内部产生空位,需将该处的原子移到晶体表面上的新原子位置,晶体何种增加。

比热容:形成点缺陷需要向晶体提供附加的能量。因而引起附加的比热容。

电阻率:金属的电阻来源于离子对传导电子的散射。完整的晶体一中,电子基本上是在均匀的电场中运动,有缺陷的晶体,缺陷区点阵的周期性破坏,电场急剧变化,因而对电子产生强烈散射,导致晶体的电阻率增大。

点缺陷还会影响其它物理性质,如扩散系数、内耗等。在碱金属的卤化物晶体中,由于杂质或过多的金属离子等缺陷对可见光的选择性吸收,会使晶体呈现色彩,此点缺陷称为色心。

点缺陷对金属力学性能影响不大,但大量的点缺陷和挤塞子,会引起晶体显著硬化和脆化。这种现象称为辐照硬化。

6. 形成位错的方式:局部滑移和局部位移。

7. 刃型位错:位错线垂直于滑移方向。正刃型位错:附加半原子面位于滑移面上方;负刃型位错:附加半原子面位于滑移面下方。两者无本质的差别。

基本特征:①刃型位错是由一个多余半原子平南所形成的线缺陷。②位错滑移矢量垂直于位错线,而滑移面是

位错线和滑移矢量所构成的唯一平面。③刃型位错的形状可以是直线，折线和曲线。④晶体中产生刃型位错时，其周围点阵产生弹性畸变，使晶体处于受力状态，如正刃型位错，滑移面上方原子受到压应力，下方原子受到拉应力。

8.螺型位错：位错线平行于滑移方向。分为左旋和右旋。左旋和右旋螺位错是有本质差别的。

基本特征：①是原子错排成轴对称的一种缺陷。②位错线与滑移矢量相平行，因此位错线只能是直线。③螺型位错线的移动方向与晶体滑移方向、应力矢量相垂直。

9.混合位错：位错线和滑移方向成任意角度。

10.位错线必然是连续的，它不可能起、止于晶体内部，只能起、止于晶体表面或晶界。

11.柏氏回路：在有缺陷的晶体中围绕缺陷区将原子逐个连接而成的封闭回路。

12.柏氏矢量的物理意义

1) \mathbf{b} 是位错的滑移矢量（对可滑移位错）或位移矢量（对刃型位错）。

2) \mathbf{b} 是在有缺陷的晶体中沿着柏氏回路的弹性变形的迭加。

3) \mathbf{b} 越大，由于位错引起的晶体弹性能越高。

13.柏氏矢量的表征及其守恒性，看课本 226 页。

14.刃型位错的运动：滑移和攀移

1) 滑移：位错在滑移面上的运动，也就是局部滑移区的扩大和缩小。滑移面是 $\mathbf{l} \times \mathbf{b}$ 。位错运动的方向就是滑移方向。位错线扫过整个滑移面时两边原子相对位移一个柏氏矢量的距离。

2) 攀移：位错线上原子扩散到晶体中其它缺陷区，从而导致半原子面缩小，位错线沿滑移面法线方向上升；或者反过来，晶体点阵上原子扩散到位错线下方，从而导致半原子面扩大，位错线沿滑移面法线方向下降。这种沿滑移面法线方面的运动称为攀移。半原子面扩大的攀移称为负攀移；半原子面缩小的攀移称为正攀移。

15.螺型位错只能滑移不能攀移。混合位错的运动方向总是和位错线垂直。

看课本 229 中例子。

16.位错密度：单位体积的晶体中位错线的总长度。或者垂直位错线的单位面积的位错露头数。

17.晶须：极细的丝状单晶体，直径只有几个微米，基本不含点缺陷。

20.位错的基本几何性质

1) 位错是晶体中的线缺陷，实质上是一条细长的管状缺陷区，区内的原子严重地错排。

2) 位错可以看成是局部滑移或局部位错区的边界。

3) 柏氏矢量是表征位错的最重要的参量。

4) 位错线必须是连续的。起止于晶体表面或形成封闭回路。

5) 单独讨论位错线的正向或柏氏矢量的正向是没有意义的。为了表示位错的性质，需要按述规则人为地规定位错线和柏氏矢量的正向，规则是：对于刃位错， $\mathbf{l} \times \mathbf{b}$ 指向附加的半原子面；对于螺位错， $\mathbf{l} \parallel \mathbf{b}$ 为右旋， $\mathbf{l} \parallel (-\mathbf{b})$ 为左旋。

6) 最重要的性质是它的守恒性，即流向某一结点的位错线的柏氏矢量之和等于流出该结点的位错线的柏氏矢量之和。

7) 位错的运动

①运动方式：刃型位错只能滑移，不能攀移。螺型位错只能滑移，不能攀移。混合位错可以滑移，也可以一面滑移，一面攀移。②运动面：滑移面是由 \mathbf{l} 和 \mathbf{b} 决定的面。对刃型位错和螺型是唯一的，螺型位错则不唯一，包含位错线的任何平面都可以是滑移面。③运动方向：不论滑移、攀移或是即滑移又攀移，位错线的运动方向是垂直于位错线。④运动量：不论位错作何种运动，当位错扫过单位面积的运动时，运动面两边的晶体的平均相对位移量为 \mathbf{b}/A ，这里 A 是整个运动面的面积。⑤位错的运动方向 \mathbf{v} 、晶体各部分的位移方向 \mathbf{V} 和外应力 σ_{ij} 的关系， \mathbf{v} 、 \mathbf{V} 的关系由 $\mathbf{l} \times \mathbf{b}$ 规则确定。⑥位错线的密度是单位体积晶体中位错线的总长度。

21.柯氏气团：点缺陷择优分布在刃位错的张应力区并紧靠位错线的点缺陷便形成所谓的柯氏气团。

当应力低于某一临界值时，只有弹性变形。当应力达到时突然发生显著的塑性变形，且使试样继续变形所需的应力迅速减小到更低的临界值。只要外应力维持在恒定的 σ_{yl} 值，试样就能继续伸长，直到第三阶段开始。

22.明显屈服现象：体心立方金属在拉伸时存在一个明显的、确定的屈服极限 σ_{yu} ，在拉伸应力小于 σ_{yu} 时完全是弹性变形， σ - ϵ 成直线；而在 $\sigma = \sigma_{yu}$ 时发生明显的塑性变形，且维持变形的拉应力迅速减至 σ_{yl} 。

发生的原因：在于在这些金属中由间隙式元素（如碳、氮、氧等）原子形成的柯氏气团将位错牢牢地钉扎住，因而在 $\sigma < \sigma_{yu}$ 时位错不能起动，因而不发生塑性变形。只有当 $\sigma = \sigma_{yu}$ 时，应力才足以使位错从柯氏气团中“脱钉”而变开“自由”位错。它的运动便产生塑性变形。显然脱钉后的“自由”位错在较低的应力下便可运动，故屈服极限下降至 σ_{yl} 。

23.应变时效原因：金属在第一次拉伸到塑性变形后，位错已经脱钉。此时若卸载立即进行第二次拉伸，则由于间隙原子来不及扩散到位错上，位错仍处于脱钉状态，故在较低的应力下就开始滑移，因而屈服强度为 σ_{yl} 。但是如果卸载后放置了很长的时间再拉伸，则由于间隙原子已扩散到位错线上重新钉扎，因而随后拉伸时又出现明显屈服现象。屈服极限又升高到 σ_{yu} 。

24. 位错的增殖方式（具体看课本 265 页）

1) L 型位错增殖机制和 Frank-Read 位错源

2) 多次交滑移增殖机制

3) 基于位错攀移的增殖机制

25.位错的源地和尾间

位错的一个源地是晶粒边界，因为晶界内有许多的位错网络和点缺陷。位错的另一个源地是沉淀相。

26.位错塞积群：如果滑移面上有一个 F-R 源，在外加应力作用下不断地发射位错环，那么当领先的位错环遇到阻碍物时，后面的各个位错环都受到阻碍而停止滑移，因而滑移面上将塞积一列位错。这列塞积的位错群体就称为位错的塞积群。特点有：①阻碍物对领先位错的反应力为： $\tau_0 = n\tau$ ，可见，塞积的位错越多，反应力就越大。②越靠近阻碍物，位错分布越密。③可能的结果有 a、F-R 源开动所需的应力增加，材料加工硬化。B、塞积位错是刃型的，会出现微裂纹。C、如阻碍物是晶界，可能引发相邻晶粒塑性变形。D、阻碍物是沉淀颗粒，则可发生交滑移。

27.位错的交割

1) 刃型位错和刃型位错的交割

两个柏氏矢量相平行的刃型位错交割，交割后产生**弯折**：位于同一滑移面上的位错台阶。弯折都会在线张力作用下自动消失。最终两条位错线是直线。

两具柏氏矢量相互垂直的不共面刃型位错的交割：交割后产生**割阶**：位于不同滑移面上的位错台阶。割阶不能在线张力作用下自动消失，但一般不影响位错的滑移。

2) 刃型位错和螺型位错的交割

刃位错上产生割阶，不消失。螺位错产生弯折，会自动消失。

3) 螺型位错与螺型位错的交割（细看课本 274 页）

28.**超割阶**：形成长度大于一个原子间距的割阶。分为**短割阶**、**中割阶**和**长割阶**三类。

29.**全位错**：柏氏矢量为沿着滑移方向上的原子间距的整数倍的位错。分位错：柏氏矢量小于滑移方向上原子间距的位错。

30.**Shockley 分位错**：在 FCC 晶体中位于{111}面上的柏氏矢量为 $1/6\langle 112 \rangle$ 的分位错。

其特点：1) 位于孪生面上，柏氏矢量沿孪生方向，且小于孪生方向上的原子间距。2) 不仅是已滑移和未滑移的边界，而且是层错区和无层错区的边界。3) 可以是刃型、螺型或混合型。4) 只能通过局部滑移形成。5) 即使是刃型 Shockley 位错的分位错也只能是滑移，而不能攀移。因为层错不会消失。6) 即使是螺型 Shockley 分位错也不能交滑移，因为螺型 Shockley 分位错是沿 $\langle 112 \rangle$ 方向，而不是两个{111}面的交线 $\langle 110 \rangle$ 。

31.**扩展位错**：由两条平行的 Shockley 分位错，中间夹着一片层错区所组成的缺陷组态。其柏氏矢量定义为

$\mathbf{b} = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$ 。其性能特点如下：1) 位于{111}面上，由两条平行的 Shockley 分位错中间夹着一片层错区组成。2) 柏氏矢量为 $\mathbf{b} = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 = 1/2\langle 110 \rangle$ ， \mathbf{b}_1 和 \mathbf{b}_2 分别是两条 Shockley 分位错的柏氏矢量，它们的夹角是 60 度。3) 组成扩展位错的两个 Shockley 分位错由于交互作用而必然处于相互平行的位置。它们之间的距离 d 即是层错区的宽度，也称为扩展位错的宽度。 d 取决于两个相反的因素：一个是层错能，力图使 d 减小；另一个是两个分位错的交互作用 f ，力图使 d 增大。4) 扩展位错可以是刃型的、螺型或混合型。取决于 \mathbf{b} 和 Shockley 分位错线的相对取向。5) 扩展位错只能滑移，不能攀移。6) 由于扩展位错滑移时需要两个分位错及层错区原子的同时位错，其所需外应力大于使单个位错滑移的应力。7) Shockley 分位错不能交滑移和攀移，但扩展位错在一定条件下可以交滑移或攀移。条件是领先位错遇到阻碍物而停止滑移，跟踪位错在外力作用下继续滑移，直到和领先位错重合，合成一个全位错。8) 一个柏氏矢量为 \mathbf{b} 的全位错分解为两个柏氏矢量分别为 \mathbf{b}_1 和 \mathbf{b}_2 的 Shockley 分位错的过程可表示为 $\mathbf{b} \rightarrow \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$ 。

32.铃木气团：以降低{111}面层错能，来增加扩展位错的平衡深度的置换式元素，择优分布在{111}面上的现象。

33.**正 Frank 分位错**：外禀层错和无层错的边界。负 Frank 分位错：内禀层错和无层错区的边界。柏氏矢量为 $\mathbf{b} = 1/3\langle 111 \rangle$ 。

内禀层错：抽走部分{111}面后形成的一层层错。外禀层错：插入部分{111}面后形成的两层层错。

负 Frank 分位错实际形成原因是晶体中过饱和的空位聚集成空位团，并沿{111}面方向塌陷，形成{111}空位片。由于空位是晶本中固有的，故所形成的位错称为内禀层错。正 Frank 分位错的实际形成原因是晶体由于外来高能粒子辐照产生的过剩间隙原子优先分布在{111}面之间，形成间隙原子片，故称为外禀层错。

特点：1) 位于{111}面上，可以是任何形状，包括直线、曲线和封闭环，但无论什么形状，总是刃型的。2) Frank 分位错不能滑移，只能攀移。这种不能滑移的位错称为**定位错**。

34.**压杆位错**：两个全位错在各自的滑移面上分解，形成扩展位错，外应力作用下，两个扩展位错向滑移面交线处滑移，直到两个领先分位错相遇合成。把合成全的分位错是不能滑移的定位错，称为压杆位错。 $\mathbf{b} = 1/6\langle 110 \rangle$ 。

35.位错反应：几个位错合成一个新位错或由一个位错分解为几个新位错的过程。

位错反应的条件：1) 几何条件：新位错柏氏矢量之和等于老位错的柏氏矢量之和。

2) 能量条件：新位错的总能量应该不大于老位错的总能量。位错的弹性能： $E_c = \alpha G b^2$ 。

36. Thompson 四面体 (课本 285 页)

罗-罗向量就是 FCC 中的全位错的柏氏矢量；不对应的罗-希向量是 FCC 中的 Shockley 分位错的柏氏矢量；对应的罗-希向量就是 Frank 分位错的柏氏矢量；希-希向量就是 FCC 中压杆位错的柏氏矢量。

37. 小角度晶粒边界：位向差较小的晶界（通常小于 5 度，最多不大于 10 度）。可以看成是一个晶粒相对于另一个晶粒绕某一轴旋转一定角度而得到的晶界。确定晶界的结构需 5 个自由度。①晶界平面的位置，由该平面的法线方向的单位向量 n 决定，应有两个自由度， n 的两个方向余弦。②转轴的位置，取决于转轴上的单位向量 u ，也有两个自由度， u 的方向余弦。③转角 θ ，一个自由度。

38. 倾侧晶界：特点是转轴在晶界平面内，即 $u \perp n$ 。分为两种：一种是对称倾侧晶界，只有一个自由度，即转角。这种对称的小角度倾侧角是由位于晶界平面内、柏氏矢量均为 $b=[100]$ 的平行同号刃型位错组成的位错墙。由于晶界平面是两个相邻晶粒的对称平面。故称为对称倾侧晶界。另一种是不对称倾侧晶界，晶界平面和两个相邻晶粒的平均 (010) 面相交成任意 ϕ 角，转轴仍是 $u=[001]$ ，由于 ϕ 也是可变参数，故共有两个自由度。

39. 扭转晶界：特点是转轴垂直晶界平面。 $u \parallel n$ 。

40. 一般小角度晶界自由度为 5。

41. 晶体的实际强度为什么会远低理论强度？

实际晶体的塑性变形是通过局部滑移进行的，故所加外力仅需破坏局部滑移面两边原子结合键，而此局部区域是有缺陷的区域，此处原子本来就处于亚稳定状态，只需很低的外应力就能离开平衡位置，发生局部滑移。

42. 晶体为什么会加工硬化？

晶体在塑性变形过程中位错密度不断增加，使弹性应力场不断增大，位错间的交互作用不断增加，因而位错的运动越来越困难。具体地说，引起晶体加工硬化的机制有：位错的塞积、位错的交割（形成不易或不能滑移的割阶、或形成复杂的位错缠结。）位错的反应（形成不易滑移的定位置错）、易开动位错的位错不断消耗。

43. 金属为什么会退火软化？

金属在退火过程中位错在内应力作用下通过滑移和攀移而重新排列，以及异号位错相消而使位错密度下降。位错的重排发生在低温退火过程，此时同号刃型位错排成位错墙，形成多边形化结构或亚晶粒。其主要效果是消除内应力和使物理性质恢复到冷加工前的数值。位错密度的显著下降发生在高温退火过程，它导致金属显著软化。

44. 位错如何使晶体的弹性模量减小、内耗增大？

处于稳定平衡位置的位错在较小的剪应力作用下发生的位移近似地正比于应力，而在卸载后位错将回到平衡位置，可见位错的位移所对应宏观变形也是可逆的。因此和无位错的晶体相比，在同样应力作用下有位错的晶体的

可逆变形更大了，因而弹性模量减小了。

处于稳定平衡位置的位错在较小的交变应力作用下将围绕平衡位置往复运动，使晶体以热和声波的形式耗散能量，故位错的振动会引起内耗。

45. 合金强化机制

1) 固溶强化：固溶在点阵间隙或结点上的合金元素由于其尺寸不同于基体原子，故产生一定的应力场，阻碍位错的运动，造成固溶强化。由于固溶度有限或由于合金原子与基体原子的半径差较小，均匀分布的合金元素的固溶强化效果是较小的。但如果合金元素偏聚，则可造成显著的固溶强化效果。

2) 沉淀强化和弥散强化：合金通过相变过程得到的合金元素与基体元素的化合物和机械混掺于基体材料中的硬质颗粒都会引起合金强化，前者称为沉淀强化（沉淀相与基体原子间有化学的交互作用），后者称为弥散强化（弥散相与基体原子没有化学的交互作用）。两种强化的机制都是由于第二相周围形成很强的应力场，阻碍了位错的滑移。

3) 有序强化：有序合金中的位错是超位错。（超位错：和 FCC 中的扩展位错类似，在 Cu_3Au 有序合金中也会形成两 $b=1/2[110]$ 的平行分位错线，中间夹着一片反相畴界面的原子组态。）要使金属发生塑性变形就需要超位错的两个分位错同时运动（以保持反相畴边界的平衡宽度），因而需要更大的应力，这就是有序强化。在许多合金中，析出的沉淀相是有序相，此时要使合金塑性变形，合金中的位错在滑移过程中必须通过沉淀相，而这样一来将破坏沉淀相的有序排列，因而需要更高的外应力，因此，含有有序相的合金的强化机制包括一般的沉淀强化和有序强化两种机制。

相图部分

1. 相图：用来表示材料相的状态和温度及成分关系的综合图形，其所表示相的状态是平衡状态，因而是在一定温度、成分条件下热力学最稳定、自由焓最低的状态。

2. 相律：表示材料系统相平衡条件下的热力学表达式，具体表示系统的自由度、组元数和相数之间关系，以公式表示： $f=c-p+1$ 。

3. 离异共晶：在亚（过）共晶合金中，初生相周围的共晶不具有典型的共晶形态，往往形成二相分离的离异共晶。这是由于初生相 α 析出后，周围共晶液相结晶时，共晶中相 α 可依附于初生 α 而长大，使周围液体富集溶质，形成 β 相，结果形成 β 相孤立分布于 α 周围的离异共晶组织。

4. 伪共晶：在过冷条件下，共晶成分附近的亚（过）共晶成分的液相同时处于二相的过饱和区，因而该成分范围的合金可全部获得共晶组织。这种非共晶成分所得到的共晶组织叫伪共晶。

5. 结晶过程的分析、杠杆定律等细看课本 364→380.

6. 铁碳相图：重点看 381-386.

7. 三元相图：看课本 387

8. 浓度三角形几个基本性质

1) 等含量规则：平行于三角形一边的直线上的任一点的，都含有等量的对面顶点组元。

2) 等比例规则：浓度三角形中一顶点与其对边上任一点边线上的所有成分点所代表的一组三元合金中，两个组元含量的比值保持不变。

3) 背向规则：如三元合金 M，如果 A、B 组元比例保持不变，C 组元含量不断减少，组成新的三元合金，则一系列新三元合金成分沿 CM 延线背离 C 点成分变化，直到无 C 组元。

9. 三元相图中的直线法则、杠杆定律及重心规则（看课本 389-390）

当三元合金在某一温度下处于三相平衡状态，各组成相的相对量由重心法则确定。

10. 相图部分计算，作图题细看课本。

界面部分

1. 晶界分类

1) 界面两边物质状态分类

①表面。②晶界、亚晶界：二维晶体几何自由度为 2，三维晶体需要 5 个自由度。对称的亚晶界需要 1 个自由度，不对称的亚晶界需要 2 个自由度。③相界。

2) 界面两边晶体取向差角度分类

①小角度晶界：晶体取向差小于 10 度。界面由位错组成，刃型位错组成的叫倾侧晶界；螺位错组成的叫扭转界面。②大角晶界

3) 界面上原子排列情况和吻合程度分类

①共格晶面：界面两侧为两相，界面上原子同时处于两相晶格的结点上，或者两相晶格结点的原子在界面处相互吻合。②半共格界面：界面处吻合的两相原子排列相近，但原子间距差别大，两相原子在界面处不能全部吻合，形成共格界面，而是部分吻合形成共格区，不吻合处形成刃型位错。③复杂半共格界面：引入位错再加入单原子结构台阶，以增大界面的共格程度。④非共格界面：两侧晶体结构和原子间距相差很大，界面原子混乱、无序，不相吻合，形成非共格界面。即大角度界面。

当 $0.05 \leq \delta \leq 0.25$ ，形成半共格界面； $\delta < 0.05$ ，形成共格界面； $\delta > 0.25$ ，形成非共格晶界面。 δ -失配度。

2. 界面迁移的驱动力

1) 变形储能：变形储能越大，则与无畸变部分相邻界面迁移的驱动力越大。冷变形金属在再结晶退火中核心的形成和长大即以变形储能为驱动力。

2) 界面曲率：在无变形的退火态晶体，界面曲率成为界

面迁移的驱动力。

3. 影响界面迁移率的因素

1) 溶质原子：微量杂质或溶质原子会使迁移率下降，原因阻碍界面迁移。

2) 第二相质点：阻碍界面迁移。

3) 温度：温度高，迁移率增大，界面迁移速度加快。温度影响扩散速度，还影响第二相粒子温度高，第二相粒子溶解，粒子对界面的抑制作用消失。

4) 晶粒间位向差：随着位向差减小，界面迁移率降低。

扩散部分

1. 扩散：大量原子的热运动而引起的物质的宏观迁移。

2. 扩散分类：1) 浓度的均匀程度分（是否发生浓度变化）①自扩散：不伴有浓度的变化，与浓度梯度无关。如纯金属和均匀固溶体中晶粒长大，驱动力为表面能的降低。原因是晶界迁移时溶质和溶剂原子扩散方向相同②互扩散：有浓度差的空间扩散，伴有浓度变化，异类原子相对扩散，互相扩散。2) 按扩散方向是否与浓度梯度方向相同分：①下坡扩散（顺扩散）：由高浓度区向低浓度区扩散，即是沿着浓度降低的方向扩散，如铸锭子均匀化退火、渗碳等。②上坡扩散（逆扩散）：低浓度区向高浓度区扩散即沿着浓度梯度升高的方向扩散。驱动力为化学位梯度。3) 按原子的扩散路径分：①体扩散：在晶粒内部的扩散。②表面扩散：沿表面的进行的扩散。③晶界扩散：沿晶界进行的扩散。表面扩散和晶界扩散比体扩散速度要快。前两种情况又称为短路扩散。4) 根据扩散过程中是否出现新相分：①原子扩散：基体晶格不变，没有新相产生。②反应扩散：通过扩散使固溶体的溶质组元浓度超过固溶体极限而形成新相的过程称为反应扩散。反应扩散的特点：①相界面处产生浓度突变②二元系的扩散层中不可能存在两相区。

3. 稳态扩散：扩散过程中，对于任一体积元，在任一时刻流入的物质质量与流出的物质质量相等，即各处的浓度只随距离变化，浓度不随时间变化。

4. 非稳态扩散：在扩散过程中，各处的浓度不仅随距离变化，而且还随时间发生变化。

5. 菲克第一、第二定律均表明扩散的过程总是使不均匀体系均匀化，由非平衡逐渐到平衡。

6. 柯根达尔效应：1947 年，柯根达尔和斯密吉加斯用实验证明了在互扩散过程中组元的扩散系数不同，以及置换式扩散的空位机制。实验中，在黄铜与其镀层铜中包入钼丝，其中钼丝仅作标志物，在整个过程中不参加扩散反应。扩散组元是铜和锌，二者构成置换式固溶体。在置换式固溶体的扩散过程中，放置在原始界面上的标志物朝着低熔点的方向移动，移动距离与时间成抛物线关系。造

成现象原因是：低熔点的组元扩散快，高熔点组元扩散慢，是这种不等量的原子交换造成了克根达尔效应。

7. 扩散微观机制

1) 直接换位机制的否定：这种换位势必使交换原子对附近的晶格发生强烈的畸变，因此种机制存在可能性不大。

2) 间隙机制：适用于间隙固溶体中间隙原子的扩散。其中发生间隙扩散的主要是间隙原子，阵点上的原子则可以认为是不动的。C、H、N、B、O 等尺寸较小的原子在固溶体中的扩散是按照一个间隙位置跳动到近邻的另一个间隙位置的方式进行的。

3) 空位机制：空位机制适用于置换式固溶体的扩散。它是 FCC 金属中扩散的主要机构，在 BCC 和 HCP 金属、离子化合物和氧化物中，也起重要作用。

4) 其它类型扩散机制：① 环形扩散机制：3 个以上原子呈环形转动、循环交换位置，其畸变能比两个原子的直接换位机制要低得多。② 填隙子机制：较大原子进入间隙位置，如辐照后形成的缺陷，它不是跳入另外的间隙中，而是将其相邻近的处于平衡位置的原子推入到间隙中，它自己则占据这个空下的平衡位置，如此反复进行，就会不断地发生扩散。如 Ag 在 AgBr 中的扩散。③ 挤列子机制：两个原子共享一个格点。

8. 扩散激活能：在扩散过程中，原子从原始平衡位置跳动迁移到新的平衡位置所必须越过的能垒值。

9. 扩散系数 D 与温度的关系： $D=D_0e^{-Q/RT}$ 。 D_0 和 Q 物质的成分和结构，与温度无关。 D_0 扩散常数， Q 扩散激活能。一般来说，空位机制比间隙机制需要更大的扩散激活能。

10 影响扩散的因素

1) 温度的影响：由扩散系数的表达式 $D=D_0e^{-Q/RT}$ ， D_0 和 Q 物质的成分和结构，与温度无关。可知扩散系数与温度呈指数关系， T 对 D 有强烈的影响。温度越高，原子的能量越大，越容易迁移，因此扩散系数越大。许多卤化物、氧化物等离子化合物的扩散系数与离子电导在某一温度会发生突变，这反映在高于或低于这一温度受两种不同的扩散机制所控制。高温区以热缺陷引起的扩散为主，（包括弗伦克尔缺陷和肖特基缺陷）称为本征扩散；低温区一般以杂质产生或控制的缺陷所引起的扩散为主，称为非本征扩散。

2) 成分的影响

① 组元特性：原子在点阵中扩散需要的克服能垒，即需要部分地破坏邻近原子的结合键才能实现跃迁。微观上讲，固溶体中组元原子的原子尺寸相差愈大，畸变就越大，扩散容易，则 Q 越小，而 D 值越大；组元间亲合力强，负电性相差越大，则溶质原子扩散越难；溶解度越小的元素扩散越容易；对于一价贵金属（如银）为溶剂的合金中，溶质元素的原子价大于溶剂，则其激活能小于基体金属的

扩散激活能；并且溶质原子序数越大，激活能就减小。 T_m （熔点）， L_m （熔化潜热）， L_s （升华潜热）越高，或 κ （体积膨胀系数）、 α （体积压缩系数）越小，则 Q 越大。溶质使溶剂的熔点下降，则 D 增加，使 B 的熔点升高，则 D 下降。

② 组元浓度：一般扩散系数是浓度的函数，某些元素在铜中的扩散系数与浓度成正比，Ni、Mn、C 在 γ -Fe 中的扩散随浓度呈正比，铁的自扩散系数随含碳量的升高而增大；相反情况如 Au-Ni 合金中，随着镍含量的增加， D, D_{Ni}, D_{Au} 均明显降低。实验证明，溶质浓度对扩散系数的影响是通过 Q 和 D_0 两个参数起作用的。通常是 Q 值增加， D_0 值也增加；而 Q 值减小， D_0 值也减小。

③ 第三组元的影响：合金元素对碳在奥氏体中的扩散的影响。如 Co 增加扩散系数，W 和 Mo 降低扩散系数，Mn 和 Ni 对扩散系数的影响不大。原因是：改变了碳的活度；引起点阵畸变、改变了碳原子的迁移率，从而改变了扩散激活能；细化晶粒，增加了短路扩散的通道；合金元素使空位浓度改变，由于短程交互作用，改变了杂质近邻原子的跃迁几率等。硅对碳在钢中的影响是：使碳从低碳浓度区向高浓度区流动，发生上坡扩散。这种现象原因是由于硅增加了碳的活度，从而增加了碳的化学位。

3) 晶体结构的影响

① 结构的类型：在致密度较小的结构中，无论是自扩散还是合金元素的扩散都易于进行。② 固溶体类型：置换式原子的扩散激活能比间隙原子大得多。③ 各向异性：对称性较低、原子和间隙位置的排列呈各向异性的晶体中，扩散速率也是各向异性。对称性较高的立方晶系中，扩散系数各向同性。

4) 短路扩散：扩散沿着表面、界面、位错等缺陷部位进行。温度较低时，短路扩散起主要作用；温度较高时，点阵内部扩散起主要作用。温度较低且一定时，晶粒越细扩散系数越大，这是短路扩散在起作用。一般来说，表面扩散系数最大，其次是晶界扩散系数，而点阵扩散系数最小。① 表面扩散② 晶界扩散：具有结构敏感性，在一定温度下，晶粒越小，晶界扩散越显著；晶界扩散与晶粒位向、晶界结构有关，其扩散深度与晶界两侧晶粒间的位相差有关， θ 在 10° 至 80° 之间，晶界上的扩散深度大于晶粒内部， $\theta=45^\circ$ 时出现最大值。③ 过饱和空位及位错的影响：对较低的温度下扩散起很大作用，使扩散速率显著提高。

11 反应扩散：通过扩散而形成新相的现象。

12. 反应扩散的过程：一个是扩散过程；另一个是界面上达到一定浓度即发生相变反应的过程。

13. 二元系中扩散区不存在双相区的相律解释： $f=c-p+2$ 式中，由于压力及扩散温度是一事实上的，故应去掉两个自由度的数目，此时 $f=c-p$ 。在单相时， $f=2-1=1$ ，说明该相的浓度是可以改变的，因此，在扩散过程中可以

是有浓度梯度,即扩散过程是可以发生。然而若出现平衡共存的双相区, $f=2-2=0$, 意味着每一相的浓度均不能改变,说明在此双相区中不存在浓度梯度,扩散在此区域不能发生。

14. 固态金属扩散的条件

1) 温度足够高: 固态扩散是依靠原子的热激活而进行的过程。温度越高,原子热振动越激烈,原子被热激活而进行迁移的几率就越大,低于一定温度,表面不出物质输送的宏观效果,如同扩散被“冻结”一样。

2) 时间要足够长

3) 扩散原子要固溶: 扩散原子在基体中必须有一定的固溶度,能够溶入基体晶格,形成固溶体,才能进行固态扩散。

4) 扩散要有驱动力: 扩散的驱动力不是浓度,而是化学位梯度。此外在温度梯度、应力梯度、表面自由能差、以及电场和磁场的作用下,也可以引起扩散。

14. 固态烧结: 热力学角度,烧结而导致材料致密化的基本驱动力是表面、界面的减少从而系统表面、界面能的下降。从动力学角度,要通过各种复杂的扩散传质过程。

凝固与结晶

1. 结晶: 液态金属转变为金属晶体的过程。实质是由不稳定的具有近程有序排列的原子集团的液体结构转变为稳定的长程有序的晶体结构。

2. 液态金属结构: 液态金属是由近程有序排列的原子集团所组成。这些原子集团不是稳定的,瞬时形成,瞬时消失,与系统的能量起伏相对应,这些原子集团的尺寸也是不同的,形成结构上的起伏。

3. 过冷现象: 金属的实际结晶温度 T_n 与理论结晶温度 T_m 之差,称为过冷度。以 ΔT 表示, $\Delta T = T_m - T_n$ 。过冷度取决于金属本性和纯度及冷却速度。金属不同,过冷度不同;纯度高,过冷度大;冷却速度越大,过冷度越大。

4. 结晶潜热: 结晶时从液相转变为固相放出的热量

5. 熔化潜热: 金属熔化时从固相转变为液相吸收的热量。

6. 相变潜热: 一摩尔物质从一个相转变为另一个相时,伴随着放出或吸收的热量。

7. 孕育期: 当液态金属过冷至理论结晶温度以下的实际结晶温度时,晶核并未立即出生,而是经过一定的时间后才开始出现第一批晶核。结晶开始前的这段停留时间称为孕育期。

8. 理论结晶温度 T_m : 两相的自由能相等,即: $G_L = G_S$, 它表示两相可以同时共存,同样的稳定性。

9. 为什么结晶温度一定要低于理论结晶温度?

由热力学知: 状态自由能: $G = H - TS$, $dG = VdP - SdT$, 等压条件下, $dP = 0$, 故 $dG = -SdT$ 或者 $dG/dT = -S$ 。由于液

态 $S_L > S_S$, 固液相自由能下降的快,所以只有当温度低于 T_m 时, 固态金属的自由能才低于液态金属的自由能, 液态金属才能自发地转变为固态金属。如果温度高于 T_m , 液态金属不能转变为固态。固态和液态两相自由能的变化之差构成了金属结晶的驱动力。

10 推导单位体积自由能 ΔG_v 的变化与过冷度 ΔT 的关系。

因为 $\Delta G_v = G_L - G_S$, 所以 $\Delta G_v = H_L - TS_L - (H_S - TS_S) = (H_L - H_S) - T(S_L - S_S)$

由于 $H_L - H_S = L_m$ 熔化潜热。当温度 $T = T_m$ 时, $\Delta G_v = 0$, 即 $L_m = T_m(S_L - S_S) = T_m \Delta S$

当 $T < T_m$ 时, 由于 $\Delta S = L_m/T_m$ 变化小, 视为常数, 得 $\Delta G_v = L_m - T(L_m/T_m) = L_m(\Delta T/T_m)$

11. 为什么金属结晶时必须过冷?

要获得结晶过程所必需的驱动力, 一定要实际结晶结晶低于理论结晶温度, 这样才能满足结晶的热力学条件。过冷度越大, 液、固两相自由能差值越大, 即相变驱动力越大, 结晶速度越快。

12. 晶胚: 根据结晶热力学条件, 只有在过冷液体中出现的尺寸较大的相起伏才有可能在结晶时转变成晶核, 这些相起伏就是晶核的胚芽。

13. 结晶凝固过程包括: 晶体核心的形成和晶核长大。

14. 金属凝固时形核方式: ①均匀形核: 金属液体中依靠自身的结构均匀自发地形成核心 ②不均匀形核: 依靠外来夹杂物所提供的异相界面非自发不均匀地形核。

15. 均匀形核和能量条件

系统自由能变化为: $\Delta G = -V_s \Delta G_v + A_{SL} \cdot \gamma_{SL}$

核心为球形, 半径为 r , 则 $\Delta G = -(4/3)\pi r^3 \cdot \Delta G_v + 4\pi r^2 \cdot \gamma_{SL}$

由式看出, ΔG 随 r 变化的曲线为一有极大点的曲线, 在 $r = r^*$ 处, 有极大值。当 $r < r^*$ 时, r 增大, 系统自由能增加, 相反, r 减小, 系统自由能降低。故半径小于 r^* 的原子集团在液相中不能稳定存在, 只能溶解至消失。半径小于 $r < r^*$ 的原子集团称为晶胚。当 $r > r^*$ 时, r 增大, ΔG 减少, 系统自由能下降, 故大于 r^* 的原子集团可以稳定存在, 作为晶核而长大, $r = r^*$, 叫临界晶核, 或晶核临界尺寸。

$d\Delta G/dr = 0$, 得到 $r^* = 2\gamma_{SL}/\Delta G_v$

$r^* = (2\gamma_{SL} \cdot T_m)/(L_v \cdot \Delta T)$

$\Delta G^* = (16/3) \pi \gamma_{SL}^3 / \Delta G_v$

形核功是表面能的三分之一, 形成临界晶核时所降低的体积吉布斯自由能只能补偿三分之二的表面自由能。形核功依靠系统的能量起伏来提供。

16. 形核率: 单位时间单位体积液相中形成的晶核数目, 以 N 表示, 单位为 cm^{-3}/s 。受两个因素控制: 一方面是随着过冷度的增加, 晶核的临界半径和形核功减小, 易于形核; 另一方面临界形核或晶核长大, 必须伴随着原子向晶核迁移, 即受扩散能力影响。

因此形核率可用下式表示： $N=N_1N_2$ N_1 受形核功的影响的形核率因子， N_2 受原子扩散能力影响的形核因子

两者共同作用，使 N 曲线出现了极大值，开始时形核率随过冷度的增加而增大，当超过极大值后，形核率又随过冷度的增加而减小。

实际金属形核率 $N \propto e^{-1/\Delta T^2}$ ，在达到极大值之前金属已凝固完全了。 r^* 与 r 的过冷度关系曲线相交于 ΔT^* 处，小于 ΔT^* 时，液相中不存在具有 r^* 大小的原子集团，因而不能形核，大于 ΔT^* 时，液相中存在满足 r^* 尺寸要求，而发生均匀形核。 ΔT^* 叫临界过冷度，也叫有效过冷度。**有效过冷度大约等于 $0.2T_m(K)$ 。**

17. 非均匀形核的能量条件

形核半径：

形核功：

非均匀形核时的临界晶核尺寸与均匀形核临界尺寸相同，而非均匀形核的形核功低于均匀形核的形核功。

18. 非均匀形核率的决定因素

1) 过冷度：过冷度越大，非均匀形核率也越大，与均匀形核对比，相同的形核功，非均匀形核需要更小的过冷度；相同的过冷度，需要更低的形核功。

2) 外来夹杂：①夹杂特性： θ 越小，形核率越大，夹杂与固体晶核间的界面张力越小，提供大的形核率。有两类夹杂具有低的界面张力，可作为非均匀形核的基底，提供大的形核率，一类是同晶或活性夹杂，与固相具有相同的晶体结构；另一类是非同晶的难熔活化夹杂，其凹孔处包含难熔的同晶固相，可作为形核的基底。②夹杂基底表面形态：形态不同，形成临界晶核的体积不同，凹形基底的夹杂形成临界晶核的体积最小，形核率大。③夹杂数量：数量越多，非均匀形核率越大。

3) 液体金属的过热：当液体温度过热，可使难熔夹杂熔化或是使其表面的活性去除，失去活化夹杂的特性，减少活性夹杂数量。形核率下降。

19. 纯金属晶体的长大

晶体的长大可从宏观和微观两个方面分析：宏观长大指晶体长大中液-固界面所具有的形态；微观长大则指原子进入固相晶核表面的方式。

20. 晶体长大固-液界面的形态取决于界面前沿液体中的温度分布。

21. 决定晶体长大方式和长大速度的主要因素是：晶核的界面结构和界面附近的温度分布状况。

22. 液体中的温度分布

1) 正温度梯度：液相的结晶从冷却最快、温度最低的部位（模壁）开始。液体中心有较高的温度，液相的热量和结晶潜热沿已结晶的固相和模壁散失，因而界面前沿液体的过冷度随离开界面距离增大而降低，液体内部是过

热的。

2) 负温度梯度：极缓慢的冷却条件下，液体内部温度分布比较均匀，冷到一定过冷度下，液中某些能量有利区形成晶核并长大，长大放出潜热，使液固界面处温度高于液体内部，而出现随离开界面的距离增加，液体的过冷度增大，液体处于过冷状态。

23. 晶体的宏观长大方式

1) 平面方式长大：液体具有正温度梯度分布情况下，晶体以平界面方式推移长大。

2) 树枝状方式长大：液体具有负温度梯度的条件下，界面上偶然凸起将伸入过冷的液体，液体有更大的过冷度，有利于晶体长大和凝固潜热的散失，从而形成枝晶的一级轴，一个枝晶的形成，其潜热使邻近液体温度升高，过冷度降低，因此类似的枝晶只在相邻一定间距上的界面上形成，相互平行分布。在一次枝晶处的温度比枝晶间温度要高，这种负温度梯度使一级轴上长出二级轴分枝，以及多级的分枝。枝晶生长的最后阶段，由于凝固潜热，使枝晶周围的液体温度升高到熔点以上，液体中出现正温度梯度，此时晶体依靠平界面方式推进，直至枝晶间隙全部填满。

24. 固液界面的微观结构

1) 粗糙界面： $\alpha \leq 2, x=0.5$ ，相应于界面上有一半位置为原子占据，一半为空位。界面在微观范围是粗糙的，高低不平，界面由几个原子厚的过渡层组成，但在宏观上是平直的。

2) 光滑界面（或平整型界面）：当 $\alpha > 5, x \rightarrow 0$ 和 $x \rightarrow 1$ 处出现稳定的界面， $x \rightarrow 0$ 相应于固相原子在表面极少， $x \rightarrow 1$ 相应于空位在表面极少，因而界面保持晶体学光滑表面的特性，界面为一个原子的过渡层，与液相截然分开，界面上各自晶体学表面取向不同，因此宏观上看界面是曲折、锯齿形小平面。一般有机物形成光滑界面。

25. 晶体微观长大方式和长大速率（与界面结构有关）

1) 具有粗糙界面的物质（垂直长大机制）：界面有 50% 的空位，可以接受原子，故液体中的原子可以单个进入空位界面沿其法线方向垂直推移，晶体连续向液相生长，即**连续长大**，长大速率与过冷度呈正比： $G_1 = K_1 \cdot \Delta T$ 。大多数金属采用这种生长方式，最快的生长速度。

2) 光滑界面晶体的长大（二维晶核长大机制）：以均匀形核的方式在晶体学小平面界面上形成一个原子层厚的**二维晶核**，与原界面间出现台阶，个别原子可在台阶上填充，使二维晶核侧向生长，当该层填满后，再在新的界面上形成新的二维晶核，如此反复。长大速率取决于二维晶核的形核率， $G_2 = K_2 e^{-B/\Delta T}$ 。过冷度增加，长大速率增加，当过冷度很大时，长大速率接近粗糙界面的连续长大速率。

螺旋长大方式（螺型位错长大机制）：光滑界面存在

螺位错的露头，该界面成为螺旋面，形成台阶，原子附着台阶上使晶体长大。其速率与过冷度关系： $G_3=K_3 \cdot \Delta T^2$ ，长大速率低于连续长大，过冷度大，螺位错多，生长速度快。

26. 宏观与微观长大方式综合

正温度梯度下：宏观以平面方式生长，微观粗糙界面以连续生长方式，微观光滑界面以二维晶核生长方式；金属型粗糙微观界面有光滑或平直宏观界面，平整型光滑微观界面有曲折的小平面状宏观界面。

负温度梯度下：微观粗糙界面以树枝状方式生长，微观光滑界面也有树枝状长大的倾向。

27. 区域熔炼：以感应加热的方法将金属逐步熔化，金属棒从一端到另一端进行局部熔化，凝固过程也随之逐步进行。熔化区从开始端到终端，杂质元素就富集于终端，重复移动多次，金属棒纯度大大提高。

28. 成分过冷：由于在不平衡凝固时，液相中溶质分布不均匀，在正温度梯度下，也会引起过冷，这种由于成分不均匀引起的过冷叫成分过冷。产生成分过冷的条件：液相中低的温度梯度，大的凝固速度和高的溶质浓度。

29. 在正温度梯度下，单相固溶体晶体的生长方式取决于成分过冷程度。

30. 液体温度梯度的不同成分过冷程度可分为三个区：第1区，液相温度梯度大， $T_D > T_L$ ，不产生成分过冷。离开界面，过冷度减小，液相内部处于过热状态。固溶体晶体以平界面方式生长，形成稳定的平界面。第2区，液相温度梯度减小，产生小的成分过冷区，形成胞状界面。出现胞状结构。第3区，液相温度梯度平缓，成分过冷程度很大，晶体以树枝状方式生长，形成树枝状骨架。最后结晶潜热放出，温度升高，进一步减小过冷度，分枝生长停止，平界面生长，填充枝晶间隙。

31. 晶体中的偏析

1) 宏观偏析：在不存在成分过冷，晶体以平面方式生长，先结晶部分溶质浓度低，后结晶部分溶质浓度高，晶体宏观各区成分不均匀。

2) 胞状偏析：有小的成分过冷，晶体以胞状方式生长时，先结晶的胞状凸出部分，溶质含量低，被排出的溶质，向周围扩散，在侧向富集，最后结晶，因而胞晶内部溶质浓度低，胞界部位富集溶质，形成胞状偏析。

3) 树枝状偏析：当成分过冷很大，晶体以树枝状方式生长时，先结晶的枝晶主干部分溶质含量低，后结晶的枝晶外围部分富集溶质，形成树枝状偏析。

32. 两相共晶体的长大

金属与金属组成的共晶具有典型形态。二金属具有相近的过冷度和长大方式，形成规则的层片状或杆状共晶。金属与非金属组成的共晶具有非典型形态。非金属具有光滑界面，长大靠二维晶核方式，故二者组成相的生长

不同，金属晶体领先，非金属晶体滞后，领先相形成树枝状、鱼骨状、弯曲状，滞后生长的非金属填补金属未占据的间隙，最后形成非典型形态的共晶组织。

33. 层片状共晶的凝固生长速度随最小层片间距的减小和过冷度的增加而增大。

34. 典型的铸锭组织的三区：①紧靠模壁表面的细晶区②垂直模壁表面生长的柱状晶区③铸锭中部的等轴晶区。

35. 铸锭三区的形成

1) 表面细晶区：是与模壁接触的液体薄层在强烈过冷的条件下结晶而形成的。温度较低的模壁有强烈的吸热和散热作用，使靠近模壁的一薄层液体具有极大地过冷度，加上模壁及其上的杂质可以作为非均匀形核的基底，因此过冷液体可以产生大量的晶核，并可以树枝状向各个不同方向长大，因而形成细小、等轴的晶粒。由于晶核数量很多，相邻的晶粒很快相遇，加上结晶区结晶快，放的潜热来不及散失，而使液固界面的温度急剧升高，使细晶区很快停止，得到一层很薄的细晶区壳层。（表层细晶区形核数目决定于模壁的形核能力及模壁处所能达到的过冷度大小。后者依赖于铸锭模的表面温度、铸锭模的热传导能力和浇注温度等因素。）

2) 柱状晶区：细晶区形成以后，模壁温度升高，散热减慢，液体冷速降低，过冷度减小，不再生核，细晶区中生长速度快的晶体可沿垂直模壁的散热反方向发展，其侧向生长因相互干扰而受阻，因而形成一级主轴发达的柱状晶，具有较大生长速度的柱状晶的晶体学方向在面心和体心立方晶体中是 $\langle 100 \rangle$ ，在密排六方晶体中为 $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ 。

3) 中心等轴晶区：柱状晶长大中，铸锭温度升高，中心液体温度逐渐降低至熔点以下，达到一定的过冷度，或者，对合金铸锭，由于结晶固相中排出溶质原子，使液相富集溶质原子，产生成分过冷。在中心区的过液体中，依靠外来夹杂、浇注时流动冲刷到中心区的细晶区小晶体、重熔脱落飘移至中心液体中的柱状晶枝晶等可以非均匀形核，这些晶核在过冷液体中的生长没有方向性，而形成等轴晶体。

36. 铸锭组织的控制

1) 影响晶粒大小的因素：晶粒大小指等轴晶的大小和柱状晶的粗细。

①冷却速度：冷却速度大，过冷度大，形核率增加，晶粒变细。②变质处理：实际铸锭凝固，主要依靠非均匀形核，人为加入形核剂可增加非自发晶核的形核数目，这种处理称为变质处理，形核剂称为变质剂。常用的变质剂有高熔点的金属和化合物，如铝合金中加入 Ti, Nb 和 TiC，铜合金中加入 Fe，低合金钢中加入 Ti, Al，碳化物。③加热温度：金属熔化后加热温度叫作过热。对晶粒大小有重要的影响，一方面过热可使作为非自发形核基底的夹杂

熔化,降低形核率,另一方面能促使液态金属过冷,增大过冷度,形核率增加。锭模冷却能力不大时,过热起减小自发形核的作用,晶粒变粗;锭模冷却能力大,液体量不多,过热促进过冷的作用,晶粒细化。④液体金属的振动:增加晶核的数目,细化晶粒。

2) 影响晶区分布的因素:晶区分布指柱状晶区和等轴晶区的分布(取决于散热方向,单向散热柱晶发达,各向散热形成等轴晶区)。

①冷却强度:强度大,形成大的温度梯度,引起发达的柱状晶②液体金属的过热:过热,增大内外温度差和温度梯度加强了单向散热,不易形成等轴晶,延长了柱状晶生长。③外来夹杂或变质剂:易形成等轴晶,柱状晶区缩短。

总:液体金属过热得到粗而长的柱晶,加大锭模冷速发展细而长的柱晶,锭模预热得到粗大的等轴晶,添加变质剂发展细小的等轴晶。

回复与再结晶部分

1. 一般变形金属需要两类退火:一类为去应力退火,发生回复过程,以消除应力,防止开裂;第二类为软化退火,发生再结晶过程,以提高塑性,恢复变形能力,使工件可以进一步变形。

2. 变形金属加热时变化过程分三个阶段:回复、再结晶和晶粒长大。

3. 变形金属变化条件:①热力学条件:变形金属的变形储能 ΔE 增加,熵变 ΔS 不大,吉布斯自由能升高,金属处于热力学不稳定状态,有降低能量的趋势,变形储能成为回复、再结晶的驱动力。②变化的动力学条件:变形金属加热时发生的变化通过空位移动和原子扩散进行。提高温度,满足动力学条件,变化过程才可能发生。

4. 冷变金属加热时组织变化

回复阶段:显微组织几乎看不出变化,晶粒仍保持伸长的纤维状;

再结晶阶段:变形的晶粒内部开始出现新的小晶粒,随着时间的延长,新晶粒不断出现并长大,这个过程一直进行到塑性变形后的纤维状晶粒完全改组为新的等轴晶粒。

晶粒长大阶段:新的晶粒逐步相互吞并而长大,晶粒长大到一个较为稳定的尺寸。

5. 变形金属加热时储存能及内应力的变化

加热进程中,原子具备了足够活动能力,将向能量较低的平衡位置迁移,内应力得以松弛,储存逐渐能释放出来。回复阶段大部或全部第一类内应力可以得以消除,第二类或第三类内应力只能消除一部分,经再结晶后,内应力可完全消除。

6. 机械性能变化

回复阶段,硬度、强度略有下降,塑性有所提高,但变化很小。再结晶阶段硬度与强度显著下降,塑性大大提高。推知:回复阶段位错密度减小有限,再结晶阶段位错密度显著下降。

7. 其它性能变化

回复、再结晶时电阻变化都较显著。加热温度升高,电阻不断下降。(原因电阻与点缺陷有关,点缺陷引起的晶格畸变使电子产生散射,比位错散射作用强烈。

可知回复阶段点缺陷密度显著降低,金属密度不断增加,应力腐蚀倾向减小。

亚晶粒尺寸,回复阶段的前期,变化不大,后期,接近再结晶温度时,亚晶粒尺寸显著增大。

8. 回复过程的特征

1) 回复过程中组织不发生变化,仍保持变形状态伸长的晶粒;

2) 回复过程中使变形引起的宏观第一应力全部消除,微观第二应力大部消除。

3) 回复过程中一般力学性能变化不大,强度、硬度仅稍有降低,塑性稍有提高,某些物理性能有较大的变化,电阻率显著降低,密度增大。

4) 变形储能可在回复阶段部分释放。

9. 回复过程的机制

回复过程分为:低温回复、中温回复、高温回复

1) 低温回复(0.1~0.3TmK):与空位变化有关,变形中,形成过饱和的空位,低温回复时过饱和的空位消失,空位的消失是由于空位与位错、晶界、间隙原子以及空位本身结合、交互作用的结果。空位消失使物理性能如电阻率显著降低,密度增大,而对力学性能影响不大。

2) 中温回复(0.3~0.5TmK):中温回复涉及异号位错的对消和位错密度的变化。同一滑移面上的异号位错在热激活作用下,相互吸引,汇聚而消失。不在同一滑移面上的异号刃型位错则通过空位凝聚消除半原子面或空位逃逸制造半原子面而消失。密排六方单晶体力学性能回复大,而对面心或体心立方回复时力学性能回复小。

3) 高温回复(>0.5TmK):主要机制是多边形化。因原始变形状态位错组态不同,多边形化分为稳定多边形化和再结晶前多边形化。

稳定多边形化在同号刃型位错沿滑移面上塞积而导致点阵弯曲的晶体中发生,回复过程中发生位错的运动和重排,位错由沿滑移面的水平排列转变为沿垂直滑移面的排列,形成位错壁,组成亚晶界,亚晶界将弯曲变形晶体分割成具有低界面曲率、小角位向差的小晶块,即形成亚晶。稳定多边形化驱动力是来自位错应变能的降低。稳定多边形化的过程分三个阶段:①单个位错的攀移和滑移,形成亚晶界。②亚晶界合并形成Y结点,是多边形化的进一步发展。亚晶界的合并通过位错的滑移和攀移。③Y结

点移动，亚晶长大，完成多边形化。

再结晶前的多边形化是在变形后具有位错胞结构的晶体中发生，变形后位错分布不是均匀的，而是塞积在位错胞壁，当加热发生多边形化过程时，通过螺位错的交叉滑移和刃位错的攀移，引起位错的重新分布和部分消失以及位错胞壁的平直化，形成具有相当高曲率较平直的亚晶界。

小变形下不形成位错胞结构，发生**稳定多边形化**；大变形下，形成位错胞结构，回复中发生**再结晶前多边形化**。**稳定多边形化**结构稳定，亚晶界不易迁移，不能成为再结晶的核心，并且释放储能，降低驱动力**阻碍以后的再结晶**。而**再结晶前多边形化**所形成的亚晶，具有高的迁移率，因而可成为再结晶核心而**促进再结晶过程**。

有利于多边形化过程的因素：较高的温度（易于原子扩散和位的攀移）、高的金属的纯度和高的层错能。

10. 亚晶粒：在多晶体中的每一个晶粒内，晶格位向也非完全一致，而是存在着许多尺寸很小，位向差很小的晶块，它们相互镶嵌而成晶粒。

11. **回复动力学：描述冷变形金属在回复过程中性能恢复的速率。**

12. 再结晶过程的特征

1) 组织发生变化，由冷变形的伸长晶粒变为新的等轴晶粒。

2) 力学性能发生急剧变化，强度、硬度急剧降低，塑性提高，恢复至变形前状态。

3) 变形储能再结晶过程中全部释放。三类应力消除，位错密度降低。

13. 再结晶过程机制

再结晶过程新晶粒的形成是通过**生核**和**核心长大**两个基本过程。

1) 晶界凸出形核

当预先变形量较小时，再结晶是在原晶界处生核。多晶体的变形具有不均匀性，不同晶粒的变形不同，变形大的晶粒具有高的位错密度，变形小的晶粒位错密度低。不同变形程度和位错密度的两个晶粒被晶界所分开，在一定能量条件下，局部毗邻低位错密度区的晶界 AB 段，可以扩张至高位错密度的晶粒，晶界扫过区域，位错密度头小，能量降低，成为低畸变或无畸变区，经一定时间，晶界扫过形成的低畸变区达到一定尺寸，即成为稳定的再结晶核心。

形成再结晶核心的条件是：当晶界扩展时能量可以降低。晶界弓出生核的实质是晶界的迁移。扩展的能量条件是： $R > 2\gamma/\Delta E_s$ 。稳定再结晶**核心的临界尺寸**为：弓出晶界最小的曲率半径 $R^* > 2\gamma/\Delta E_s$ 。相应再结晶核心为半球形。在晶界弓出至半球形以前的扩张阶段即为**形核孕育期**。

2) 亚晶转动、聚合形核

当预先变形量较大或材料层错能较高时，再结晶形核采取亚晶转动、聚合的方式，通过再结晶前多边形化，形成较小的亚晶，亚晶界曲率不大，不易迁移但某些亚晶界中位错可通过攀移和交滑移而迁出，使亚晶界消失，相邻亚晶转动，位向接近而聚合成为更大的亚晶，消失的位错进入邻近的亚晶界中，使与周围亚晶界位向差增大，当小角亚晶界转变有大角晶界，并达到形核的临界尺寸时，即成为再结晶核心。

3) 亚晶界迁移、亚晶长大形核

当变形量大或材料层错能较低时，再结晶核心也是在再结晶前多边形化所产生的无应变较大亚晶的基础上形成的。由于变形大，位错密度高，亚晶界曲率大，易于迁移。亚晶界迁移中清除并吸收其扫过相邻亚晶的位错，使亚晶界获得更多位错，与相邻亚晶取向差增大变为大角晶界，当大角晶面达到临界曲率半径。便成为稳定再结晶核心。

14. 再结晶形核率：单位时间、单位体积形成的再结晶核心数目，以 N 表示。

15. 影响形核率因素

1) 变形程度：预先变形量越大，N 越大。变形程度大，储能增大，临界尺寸减小，形核数多。

2) 材料纯度：材料纯度低，杂质原子多，对形核率有两方面影响：一方面阻碍变形，使变形储能增大，增加形核率；另一方面因杂质原子在界面处偏聚，阻碍形核时的界面迁移以及杂质原子钉扎位错阻碍位错攀移和亚晶的长大，使再结晶核心不容易形成，而降低形核率。

3) 晶粒大小：晶粒细小，增大变形阻力，相同变形量下，位错塞积、畸变区增多，变形储能增高；另外细晶晶界面积大，生核区域多，这两个因素均使形核率增大。

4) 温度：温度升高，位错攀移容易，亚晶界容易迁移长大，亚晶也容易转动、聚合发展成为再结晶核心，从而使形核率增大。

16. 再结晶核心的长大：实质是具有临界曲率半径的大角界面向变形基体迁移，消耗变形基体，直至再结晶晶粒相碰，变形基体全部消失为止。长大速率： $G = (D_B/KT) \cdot (E_s/\lambda)$ 预先变形量大、原始晶粒细小、温度升高长大速度加快；微量溶质原子和杂质原子阻碍界面迁移而使长大速度降低。

17. **再结晶动力学**：描述再结晶过程速度，即等温下再结晶体积分分数与等温时间的关系。

18. 再结晶温度：开始再结晶温度和完成再结晶温度。

开始再结晶温度：指变形晶粒中出现第一个新晶粒或观察到因凸出形核、晶界出现锯齿边缘的温度。

完成再结晶温度：指冷变形金属接近全部发生再结晶、形成等轴新晶粒尚未长大的温度。

再结晶开始温度可利用包奇瓦尔经验公式： $T_r = (0.35 \sim 0.40) T_m$ 条件是工业纯金属，大变形（70%）退火时间 0.5~1h。

19. 影响再结晶温度的因素

1) 预先变形程度：金属的变形程度增大，冷变形储能增加，使形核率和长大速度都增大，再结晶容易发生，故再结晶温度降低。变形量增大到一定程度，再结晶温度基本稳定，变化不大。

2) 杂质和微量元素：微量溶质原子，可提高再结晶温度。材料越纯，再结晶温度越低。

3) 原始晶粒大小：原始晶粒细小，晶界增多，提供更多的有利生核的区域，此外，细晶粒金属有更大的形变抗力，相同变形度下，变形储能高，再结晶驱动力大。因此，细晶粒容易发生再结晶，使再结晶温度降低。

4) 退火时间：随退火时间增加，再结晶温度下降。

5) 第二相粒子：第二相粒子存在即可促进又可阻碍再结晶。促进时再结晶温度低，阻碍时再结晶温度高。促进作用是因为第二相粒子阻碍位错运动，引起位错塞积，增加位错密度和变形储能，使再结晶驱动力增大。阻碍作用是因为加热再结晶退火时，第二相粒子的存在会阻碍位错重排构成亚晶界并发展成大角晶界的再结晶生核过程，和阻碍大角晶界迁移的再结晶核心长大过程。当第二相粒子直径和间距较大时促进作用主导作用；当第二相粒子直径和间距较小时，阻碍作用主导。

20. 再结晶后晶粒大小：取决于形核率和核心长大速度。 N/G 值增大，晶粒细小。

21. 影响再结晶后晶粒大小的因素

1) 预先变形程度：临界变形度是刚刚开始得以发生再结晶并形成粗大晶粒的变形度。变形量增大，晶粒变细。

2) 退火温度：对晶粒大小只有较弱的影响。

3) 原始晶粒大小：原始晶粒细小，得到较细小的新晶粒。

4) 微量溶质原子（杂质原子）：微量溶质原子存大提高变形抗力，并阻碍界面迁移，因而再结晶后得到较小的晶粒。

22. 晶粒长大两种型式：正常晶粒长大和反常晶粒长大。

23. 正常晶粒长大：在再结晶完成后继续加热或保温过程中，在界面曲率驱动力的作用下，晶粒发生均匀长大的过程。其驱动力是：界面能与晶界的曲率。

23. 晶粒长大是界面迁移过程，以界面曲率为驱动力，弯曲界面向其曲率中心的方向移动，以减小曲率，降低能量；为保证界面张力平衡的要求，单相合金或纯金属在三晶粒会聚处，界面交角为 120 度时，界面张力达到平衡，因此晶粒长大达到稳定形状应是规则六边形，具有平直界面，交角互成 120 度。如晶粒未达到六边形形状，为保持

界面张力平衡，维持 120 交角，则边数小于 6 的晶粒形成外凸出的界面，边数大于 6 的晶粒则具有内凹的界面，在界面曲率驱动力作用下，界面向曲率中心迁移，结果，大于六边形的晶粒将长大，而小于六边形的晶粒则缩小并消失。

24. 影响晶粒长大因素（影响界面迁移率的速度）

1) 温度：温度影响界面迁移速度，温度越高，界面迁移速度越大，因而晶粒长大速度也越快。

2) 时间：正常晶粒长大时，一定温度下，平均晶粒直径随保温时间的平方根而增大。

3) 第二相粒子：第二相粒子对界面迁移有约束力，阻碍界面迁移、晶粒长大。粒子尺寸越小，粒子的体积分数越大，极限的平均晶粒尺寸也越小。

4) 表面热蚀沟：金属在高温下长时间加热时，晶界与表面相交处为达到表面张力间的相互平衡，以趋向于热力稳定状态，将会通过表面原子的扩散过程形成热蚀沟。

5) 相邻晶粒的位向差：晶界的界面能与相邻晶粒间的位向差有关，小角度晶界的界面能小于大角度晶界，故小角度的移动速度小于后者。

25. 反常晶粒长大：是在一定条件下，继晶粒正常、均匀长大后发生的晶粒不均匀长大的过程。长大过程中，晶粒尺寸相差悬殊，少数几个晶粒择优生长，逐渐吞并周围小晶粒，直至这些择优长大的晶粒互相接触，周围小晶粒消失，全部形成粗大晶粒，过程结束。

26. 二次再结晶：在不均匀长大中，少数大晶粒相当于核心，有特别大的长大能力，吞并其他晶粒而长大，形成超过原始晶粒几十倍或者百倍的粗大晶粒的过程。

27. 形成反常晶粒长大或二次再结晶的基本条件：稳定基体、有利晶粒和高温加热。

1) 稳定基体：一次再结晶完成后发生晶粒长大，长大过程中由于某些因素的阻碍，大部分晶粒长大缓慢，以致在晶粒长大结束后，整体上形成稳定的细晶粒基体。阻碍因素有：①弥散第二相粒子阻碍界面迁移、晶粒长大。②形变织构引起再结晶时的再结晶织构，晶粒间位向接近，位向差小，界面迁移率低，阻碍晶粒长大。③薄板材料有表面热蚀沟存大，阻碍界面迁移、晶粒长大。

2) 有利晶粒：在正常长大后稳定细晶粒的再结晶基体中，存在少数有利于长大的晶粒，可作为二次再结晶的核心。有利因素有：①具有有利尺寸②具有有利位向③具有有利表面④具有有利能量。

3) 高温加热：只有高温加热条件下，具有有利长大晶粒稳定基体中，第二相粒子溶解，创造了晶粒长大的条件。反常长大或二次再结晶过程的驱动力是相邻不均匀晶粒单位体积晶界能的差值。

28. 再结晶图：综合表示再结晶退火后晶粒长大与冷变形程度及退火温度间关系的空间图形。

29. **再结晶组织**: 冷变形金属在再结晶退火后所形成的组织。

30. **退火孪晶**: 面心立方金属和合金, 如铜、黄铜、不锈钢、钢中的奥氏体组织等, 在退火加热时, 晶粒中出现孪晶。因在退火中形成, 故叫退火孪晶。

31. 退火孪晶形态: ①贯穿晶粒的完整退火孪晶, ②未贯穿晶粒的不完整退火孪晶, ③在晶界交角处的退火孪晶。

32. **退火孪晶形成原因**: 退火中晶界迁移时, 在长大的晶粒内原子因沿 $\{111\}$ 面偶然错排, 出现层错和共格孪晶界面, 在一定能量条件下, 在晶界处形成退火孪晶。

33. 形成**退火孪晶的能量条件**: 形成孪晶后的界面能量低于形成前的大角界面能。

34. 再结晶组织两种情况: 一是保持原有的形变组织, 再结晶组织与原形变组织相同; 二是原有形变组织消失, 而代之以新的再结晶组织。

35. 再结晶组织的形成理论

1) 定向形核理论: 认为再结晶时的核心具有与形变基本相同的位向, 这些位向晶核靠消耗变形基体的生长所形成再结晶晶粒必然具有与形变基体相同的组织。再结晶核心与形变基体有相同位向是由于再结晶生核靠晶界弓出、亚晶界迁移长大的机制中所形成的核心都与形变基体有相同的位向。因此, 在有形变组织存在时, 必然产生定向晶核。

2) 定向长大理论: 是依据在恒定驱动力作用下, 晶界迁移速度与晶界两侧晶粒间的位向差有关而提出的。认为再结晶形成的核心具有多种位向, 但**核心的长大速度取决于变形基体与晶核的位向差**, 具有某些特殊位向差的晶核可通过消耗变形基体而迅速长大并抑制其他位向晶核的长大, 从而形成与形变组织不同的再结晶组织。

3) 定向形核和长大的联合理论: 由于变形组织多由几种组织成分所组成, 因而核心与变形基体有不同的位向差, 各个晶核的长大速度可能不同, 因而有可能形成与形变组织相同的再结晶组织, 也可能形成与之不同的新的再结晶组织。

36. 定向形核的情况

1) 经强烈变形的材料, 在快速加热的条件下短时退火, 加热温度超过普通加热速度所获得的温度。

2) 以普通速度加热到相当低的温度通过大量核心的形成, 有足够的时间完成一次再结晶, 但晶粒长大实际上完全不能进行, 此时通过定向形核而保留变形组织。

3) 通过原始晶粒的大角界面局部迁移, 而进行的再结晶弓出形核, 容易实现定向形核保留变形组织。

4) 对某时效硬化合金, 在过饱和固溶体状态进行冷变形, 加热时和再结晶过程平等出现固溶体的分解, 弥散第二相的会阻碍某些位向核心的定向生长, 从而在定向生

核的前提下形成与形变组织相同的再结晶组织。

37. 长期退火、高温加热, 在晶粒长大和二次再结晶中主要是定向生长起作用, 形成新的再结晶组织。

38. 制耳现象: 在冲制筒形和杯形零件时, 各向变形不均匀, 造成薄厚不均、边缘不齐的现象。

39. 金属的**热变形**: 金属在再结晶温度以上进行的加工、变形。热变形的实质是变形中形变硬化和动态软化同时进行的过程, 形变硬化为动态软化所抵消, 因而不显示加工硬化作用。

40. 冷变形: 低于再结晶温度的加工。

41. 动态回复和动态再结晶: 在热变形过程中, 与形变硬化同时发生的回复、再结晶过程。

42. 亚动态再结晶: 热变形停止后, 继续进行的动态再结晶过程。

43. 动态回复: 对**层错能高的金属**, 如铝、 α -铁、铁素体钢以及一些六方金属等, 交滑移容易进行, 在热变形中**动态回复是其软化的主要方式**。其热变形中的应力-应变曲线有三个阶段: 第一阶段为**微应变阶段**, 应变量为 $0.1\% \sim 0.2\%$, 曲线急剧上升; 第二阶段是最小流变应力 σ_T 之后的**流变阶段**, 有加工硬化, 加工硬化率逐渐降低; 第三阶段为**稳态流变阶段**, 应力-应变曲线为水平线, 此时, 加工硬化实际速率为零。动态回复引起的软化过程是通过刃位错的攀移、螺位错的交滑移、使异号位错对消, 位错密度降低的结果。

44. 动态再结晶: 对**具有低层错能的材料**, 如铜及其合金、镍和镍合金, 金和钯及其合金, 奥氏体钢及奥氏体合金, 不易发生交滑移和动态回复, 此时, **动态再结晶成为动态软化的主要方式**。热变形中发生动态再结晶的应力-应变曲线形状取决于**应变速率**。

高的应变速率下, 曲线有一个峰值, 分三个阶段: I 为加工硬化阶段, 此时变形低于临界变形度 ε_c , 不发生再结晶。II 开始再结晶阶段, $\varepsilon_c < \varepsilon < \varepsilon_s$, 超过临界变形度, 开始发生动态再结晶, 当应力小于 σ_{max} 时, 硬化效应大于软化效应, 只是曲线斜率减小, 当应力达到 σ_{max} 后, 再结晶加快, 软化效应为主, 曲线下降。III 稳态流变阶段, $\varepsilon > \varepsilon_s$ 由于发生再结晶, 流变应力下降至屈服应力与 σ_{max} 之间, 变形引起的硬化和再结晶引起的软化达到平衡, 出现稳态流变, 应力-应变曲线呈水平线。

低应变速率下, 应力-应变曲线上有较多的峰值出现, 第一阶段加工硬化阶段; 第二阶段出现动态再结晶软化由于应变速率低, 加工硬化与动态软化达不到平衡, 位错密度来不及增长到足以使再结晶达到能与加工硬化相抗衡的程度, 因而不出现第三阶段稳态流变阶段。

动态再结晶是**生核与核心长大**的过程。其**生核机制**是大角界面的迁移过程。

应变速率低时, 以晶界弓出方式生核, 出现锯齿行晶

界。当应变速率大时，形变量大，形成亚晶，不稳定的亚晶可能消失，使亚晶聚合长大而形核，或者，亚晶界迁移亚晶长大而形核。动态再结晶具有反复形核，有限长大的特点。动态再结晶后得到等轴晶粒组织，因反复再结晶，晶粒较为细小，晶粒大小决定于应变速率和变形温度。这种组织比静态再结晶组织有较高的强度和硬度。

45.亚动态再结晶进行过程，中断热变形，此时动态再结晶过程仍可继续，一是已形成但未生长的再结晶核心的长大，二是长大未结束的再结晶晶核继续其过程。二者均不需要孕育期。

46.热变形引起组织、性能的变化

1) 改善铸造状态的组织缺陷

铸造材料的某些缺陷（如气、疏松）在热变形时左部分可被焊合，使组织致密性增加，铸态粗大的柱状晶通过变形和再结晶被破坏，形成细小的等轴晶；铸态组织中的偏析通过热变形中的高温加热和变形使原子扩散加速而减少或消除。其结果使材料的致密性和机械性有所提高，因此材料经热变形后较铸态有较佳的机械性能。

2) 热变形形成流线，出现各向异性

铸态组织中夹杂物一般沿晶界分布，热加工时晶粒变形，晶界夹杂物也承受变形，塑性夹杂被拉长，脆性夹杂被打碎成链状，都沿变形方向分布，晶粒发生再结晶，形成不同于铸态的新的等轴晶粒，而夹杂仍沿变形方向呈现纤维状分布，这种夹杂的分布叫**流线**。由一条条流线勾划出来的组织，叫**纤维组织**。流线形成使金属的机械性能出现各向异性，沿纵向取样，钢材料机械性能高，而横向机械性能差。

3) 带状组织的形成

复相合金中的各个相，在热加工时沿着变形方向交替地呈带状分布，称为**带状组织**。如热变形后亚共析钢中的铁素体和珠光体成条带状分布。

亚共析钢中条带组织形成的原因有两种，一是在两相区温度范围内变形，铁素体沿奥氏体晶界析出后变形伸长，再结晶后奥氏体与铁素体变形成等轴晶粒，但其分布成条带状；另一情况是铸锭中存在着偏析元素和夹杂，变形后夹杂物形成流线，可作为冷却时铁素体析出的核心，使铁素体与珠光体成条带状分布，微观分析可看到铁素体中夹杂的存在。

防止带状组织：一是不在两相区变形，二是减少夹杂元素含量，三是采用高温扩散退火，消除元素偏析。

4) 热变形冷却后的晶粒变化

采用低的变形终止温度、大的最终变形量和快的冷却速度，可得到细小晶粒，加入微量合金元素，阻碍热变形发生的静态再结晶和晶粒长大。

47.超塑性：在一定条件下进行热变形，材料可得到特别大的均匀塑性变形，而不发生缩颈，延伸率可达 500%

到 2000%，材料的这种特性即为超塑性。

固态相变部分

1.固态相变时伴随着三种变化：晶体结构变化，化学成分变化，有序程度的变化。

2.固态相变特点

1) 固态相变时阻力大

固态相变时形核的阻力，来自新相晶核与基体间形成界面所增加**界面能 E_r** ，以及**体积应变能（弹性能） E_e** 。界面能 E_r 可分为两部分，一部分是在母相中形成新相界面时，由同类键、异类键的强度和数量变化引起的化学能，称为界面能中的化学项；另一部分是由界面原子不匹配，原子间距发生应变引起的界面应变能，称界面能中的几何项。体积应变能 E_e 的形成是母相中的原子产生新相时，由于二者的比容不同，会引起体积应变，这种体积应变通常是通过新相母相的弹性应变来调节，产生体积应变能。

2) 原子迁移率低

固态金属中的原子键合远比液态中牢固，所以原子扩散速度远比液态的低。但固态更易于过冷，亦即当冷却速度增加时，可获得更大的过冷度，同样驱动力也相应增加。当驱动力增大效果超过了扩散系数降低对相变的影响时，将导致相变速度增加。当过冷度超过一定程度后，扩散系数降低的影响将会超过相变驱动力的增大的效果。所以进一步增大过冷度会造成由扩散控制的相变速度减小。

3) 非均匀形核

固相中的形核几乎总是非均匀的。母相的晶粒越细，缺陷的密度越高，则形核率越多。相变速度越大。

4) 低温相变时会出现亚稳相

5) 新相往往都有特定的形状

液-固相变一般为球形成核，其原因在于**界面能**是晶核形状的主要控制因素。固态相变中**体积应变能**和**界面能**的共同作用，决定了析出物的形状。新相呈碟形（片状）时应变能最小，呈针状时次之，呈球形时应变能最大，而界面能却按上述次序递减。当应变能为主要控制因素时，析出物多为碟形或针状。在固态相变中凡是和母相成一定位相关系的片状析出物叫作**魏氏组织**。

6) 按新相-母相界面原子的排列情况不同，存在共格、半共格、非共格等多种结构形式的界面。

①完全共格界面：新相与母相的晶体结构和取向都相同，点阵常数也非常接近，则界面上的原子可以同时位于两个相的晶格结点上。此时，界面能中的几何项极低，化学项也不高，界面能很小；晶体结构相同，晶胞尺寸相近，体积差几近于零，故体积应变能也趋于零。②伸缩型部分共格界面：当失配度继续增大，体积应变能过大，完全共格界面逐渐破坏，同时，在界面上出现失配位错，形成了某种界面结构，虽然界面能增大，但体积应变能下降颇多，

所以系统总能量降低。这种共格界面是靠拉应力维持的。
③切变型部分共格界面：即使新相与母相晶体结构不同，点阵常数不同，但如果结构中的某些晶面的点阵相似时，也可以由这些晶面构成共格界面。构成的共格界面靠弹性切变维持。④非共格界面：其性质与大角度晶界相似，界面能中的化学项高而几何项很低，但界面总能量高。

7) 新相与母相之间存在一定的位向关系

根本原因是在于降低新相与母相的界面能，通常是以低指数的、原子密度大的匹配较好的晶面彼此平等构成确定位向关系的界面。共格或半共格界面时，新相与母相必有位向关系；如果没有确定的位向关系，则两相的界面肯定是非共格的。

8) 为维持共格关系，新相往往在母相的一定晶面上开始形成。母相中的这个晶面称为**惯析面**，一般为母相中表面能最低的晶面。

3. 固态相变分类

1) 按热力学分类

一级相变： $G_1=G_2, \mu_1=\mu_2$ ，但自由能的一阶偏导数不相等。一级相变时，具有体积和熵（及焓）的突变。焓的突变表示相变潜热的吸收与释放。

二级相变： $G_1=G_2, \mu_1=\mu_2$ ，而且自由能的一阶偏导数相等，只是自由能的二阶偏导数不相等。二级相变时，体积、及焓均无变化，而 C_p 、 β 材料压缩系数及 α 材料的膨胀系数具有突变。

三级相变：当相变时两相的自由能相等，其一阶、二阶偏导数连续，但三阶偏导数不连续。依此类推， n 阶偏导数不连续时，称为 n 级相变。

晶体的**凝固、沉积、升华和熔化**，**金属及合金中的多数固态相变**都属于一级相变。**超导态相变、磁性转变**及合金中部分的**无序-有序转变**都为二级相变。量子统计爱因斯玻色凝结现象为三级相变。

2) 按动力学分类

按动力学，或相变过程中原子迁移特征进行分类，固态相变可分为**扩散型相变**和**无扩散型相变**。无扩散型相变是通过**切变方式**使相界面迅速推进的，从相变开始到完成，单个原子的移动小于一个原子间距。扩散型相变是通过**原子热激活扩散**进行的。

扩散相变分为：脱溶沉淀、共析转变，需要原子的长程扩散；有序化、块型转变、同素异构转变。没有任何成分改变或长程扩散的情况。

无扩散型相变：马氏体相变。

3) 平衡状态分类

平衡相变：**A** 纯金属的同素异构转变：纯金属在温度、压力改变时，由一种晶体结构转变为另一种晶体结构的过程，称为同素异构转变。**B** 多形性转变：固溶体的同素异构转变称为多形性转变。**C** 共析转变：冷却时，

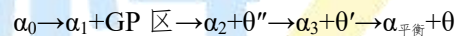
固溶体同时析出分解为两个不同成分和结构的相的固态相变。**D** 包析转变：冷却时由两个固相合力转变为一个固相的固态相变过程。**E** 平衡脱溶：在高温相中固溶了一定量合金元素，当温度降低时溶解度下降，在缓慢冷却的条件下，过饱和固溶体将析出新相。**F** 调幅分解：某些合金在高温时形成单相的均匀的固溶体，缓慢冷却到某一温度范围内时，通过上坡扩散，分解为两相，其结构与原固溶体相同，但成分不同，是成分不均匀的固溶体，这种转变称为调幅分解。**G** 有序化转变：在平衡条件下，固溶体中各组元原子的相对位置由无序到有序的转变过程称为有序化转变。**Fe—Al** 合金、**Au—Cu** 合金、**Cu—Zn** 合金等合金系中都可以发生有序化转变。

非平衡转变：伪共析转变、马氏体相变、贝氏体相变、块状转变、不平衡脱溶沉淀。

4. 脱溶反应：从过饱和固溶体分离出一个新相的过程，通常这个过程是由温度变化引起的。合金应首先进行固溶处理，即加热到单相区得到均匀的固溶体，若缓慢冷却固溶体就会发生脱溶反应，析出平衡的沉淀相。

5. 时效：固溶处理的均匀的固溶体，如急冷淬火，则单相固溶体来不及分解，在室温得到亚稳的过饱和固溶体，此过饱和固溶体若在室温或较高温度保持，便会发生分解反应。也叫做过饱和固溶体分解。

6. 过饱和固溶体的时效过程中的脱溶顺序：



这里的 α_0 是原始的过饱和固溶体， α_1 是与 GP 区共存的基体成分， α_2 是与 θ'' 共存的成分。亚稳的过渡相 GP 区、 θ'' 和 θ' 要先于 θ 平衡的相析出。其自由能依次降低。

7. 回归：一般把低温形成的预沉淀相在较高温度下可以重新溶解的现象。产生回归的原因是由于不同结构的脱溶产物稳定存在的温度区间不同，而低温析出亚稳相溶解度较高所致。利用回归现象，可对于一些高强度合金进行双时效处理

8. 过渡相的结构

Al-4.5%Cu 合金的脱溶产物及特性

1) GP 区：溶质原子偏聚区，又称 GP I 区。

成分为 90%Cu；

结构：铜原子在铝基体的 $\{100\}$ 晶面上偏聚。偏聚区的晶体结构仍与基体相同，无明显界面，与基体保持共格联系，但铜原子小于铝原子，引起共格变形，使晶格畸变。

析出物形貌：GP 区形如圆盘直径约 8nm，而厚度 0.3~0.6nm，密度为 $10^{18}/\text{cm}^3$ ；

取向关系惯析面：偏聚区沿一定的晶面 $\{100\}$ 形成。

宏观性能的影响：硬度第一峰值。

宏观性能影响的原因：原子偏聚，产生共格变形的晶格畸变。位错线切过析出物，会增加界面能、反相畸变能，再加上位错线与高密度析出物的长程相互作用，使材料强

度增加。

2) θ'' 析出相: 早期称为 GP II 区, 但与 GP I 不同, 是一个真正的**过渡相**。它是重新在 α 中形核并借 GP 区溶解而形成的, 也可能是 GP 区转化的结果。

成分: 接近 CuAl_2 。

结构: 有序区, 亚稳的共格预沉淀。具有正方点阵, $a=b=0.404\text{nm}$ (与基体的点阵常数一致), $c=0.768\text{nm}$ (c 为垂直片状方向)。基本上是一个畸变了的 FCC 结构。

析出物形貌: 圆盘状, 直径 30nm , 厚度 2nm , 比 GP 区大。

取向关系惯析面: $(001)_{\theta''} // (001)_{\alpha}$ $[100]_{\theta''} // [100]_{\alpha}$
 $\{100\}_{\alpha}$ 共格。

对宏观性能的影响: 硬度高。硬度第二峰值。

原因: 为了保持脱溶产物与基体共格, 界面区域内产生高的点阵畸变, 导致垂直扁片方向的基体内产生弹性应变, 这种共格应变, 导致合金强化。原子偏聚或形成有序化区域, 产生共格变形的晶格畸变。位错线切过析出物, 会增加界面能、反相畴界面能、再加上位错线与高密度析出物的长程相互作用, 使材料强度增加。

3) θ' 相 (过渡相)

成分: $\text{Cu}_2\text{Al}_{3.6}$ 。

结构: 有序区, 亚稳的半共格预沉淀, 正方点阵 $a=b=0.404\text{nm}$, $c=0.580\text{nm}$ 。

析出物形貌: 在 $\{100\}_{\alpha}$ 上形成片状脱溶物非均匀形核, 在位错线上或亚组织边界上析出。

取向关系惯析面: 宽面共格, 片的边缘非共格或半共格, $\{100\}_{\alpha}$ 半共格。

对宏观性能的影响: 硬度第二峰值。

原因: 位错线与析出物的长程相互作用, 位错线绕过析出物, 从而使材料强化。

4) θ 相 (平衡相)

成分: 接近 CuAl_2 。无确定的取向关系。

结构: 平衡沉淀相复杂体心正方结构, 非共格 $a=b=0.607\text{nm}$, $c=0.487\text{nm}$ 。

析出物形貌: 在光学显微镜下可以看到稀疏分布的粗大脱溶物。

对宏观性能的影响: 硬度下降。原因: 随着析出物粗大, 位错线与析出物的长程相互作用, 位错线绕过析出物, 从而强化材料的作用减弱。

9. 固溶体脱溶方式: 形核长大和调幅分解。形核长大靠热激活使晶胚达到临界尺寸; 调幅分解无需形核, 只需成分起伏, 便可以使均匀固溶体发展成成分不同的、结构相同且无明确界面的两个相。

10. 调幅分解: 又称增幅分解或拐点分解, 其特点是新相的形成不经形核长大, 而是通过自发的成分涨落, 浓度的振幅不断增加, 固溶体最终自发地分解成结构相同而成

分不同的非均匀固溶体的过程。

11. 不易变形颗粒的强化机制: 位错绕过颗粒。由于不易形变颗粒对位错斥力足够大, 运动位错线在颗粒前受阻、弯曲。随着外加切应力的增加, 迫使位错以继续弯曲的方式向前运动, 直到在 A、B 相遇。由于位错的方向在 A、B 相反, 所以互相抵消, 留下一个围绕颗粒的位错环, 实现位错增值, 其余位错线绕过颗粒, 恢复原状, 继续向前滑移。

12. 易形变颗粒的强化机制: 切过颗粒。颗粒与基体一起形变。可分两类:

一类是短程交互作用 (作用距离小于 $10b$), 其中包括: ①位错切过质点形成新的表面积, 增加了界面能。②位错扫过有序结构时会形成错排面或叫做反相畴。从而产生反相畴界面能。③颗粒与基体的滑移面不重合时, 会产生割阶及颗粒的派-纳力高于基体等, 都会引起临界切应力增加。

短程交互作用对强化贡献主要与相界面能、畴界面能、颗粒体积分数和颗粒半径有关, 增大颗粒尺寸或增大体积分数, 都有利于提高可变形颗粒的短程强化效果。

另一类是长程交互作用 (作用距离大于 $10b$)。由于颗粒与基体的点阵不同, 导致共格界面失配, 从而造成应力场, 当位错靠近一个颗粒时, 位错应力场与颗粒在基体中造成的应力场之间的相互作用而引起临界切应力的增加。

综合 1、2 类知: 当颗粒的体积分数一定时, 颗粒尺寸越大, 强化效果越显著。当颗粒尺寸一定时, 颗粒的体积分数越大, 强化效果越高。

13. **马氏体相变**: 马氏体相变是无扩散相变, 相变过程中只有晶格的改变而没有成分改变; 新相总是沿一定晶体学面形成, 且与母相之间有严格的取向关系, 靠切变维持共格联系。

14. **马氏体相变基体特性**

1) **无扩散性**

马氏体的均匀切变形成方式说明, 原子之间的相对位移不超过一个原子间距, 所以不存在溶剂原子的自扩散。同时溶质原子也不可能扩散, 原因有马氏体可以在相当低的温度下形成; 马氏体相变速度相当地快; 马氏体相变前后的化学成分没有改变。

2) **马氏体相变是点阵畸变式转变, 有其特点结构, 是低温亚稳相**

马氏体是正方点阵。钢中的马氏体是碳在 $\alpha\text{-Fe}$ 中的过饱和固溶体。碳在 BCC 的八面体间隙中。

3) **伴随马氏体相变的宏观变形——浮凸效应**

表面浮突: 在预先抛光的试样表面出现浮凸或倾动。马氏体是以**均匀切变方式**形成的: 均匀切变——晶格原子间的相对位移是相同的; 切变形成的马氏体与母相之间保持共格关系, 界面上的原子归两相共有; 在新相长大时, 原子作有规律的迁移而不改变界面的共格状态。

4) 在马氏体相变过程中存在宏观不畸变面——惯析面

马氏体在母相奥氏体特定晶面上形成的，这个晶面称为 **habit plane**，为马氏体与基体所共有。惯析面是一个宏观上无畸变、无转动、半共格的、具有高度活动性的相间界。以母相晶面指数来表示。

钢中马氏体的惯析面：

$C\% < 0.4\%$ —— $\{111\}_\gamma$;

$0.5\% < C\% < 1.4\%$ —— $\{225\}_\gamma$;

$C\% > 1.4\%$ —— $\{259\}_\gamma$

随着马氏体形成温度降低，惯析面趋于向高指数变化。

5) 在基体点阵和马氏体点阵之间一般存在着确定的位向关系

A) K-S (Kurdjumov-Sachs) 关系

第一次在 1.4%C 的钢中测出：

$\{111\}_\gamma // \{110\}_{\alpha'}$ $\langle 110 \rangle_\gamma // \langle 111 \rangle_{\alpha'}$,
($\langle 1\bar{1}0 \rangle_\gamma // \langle 1\bar{1}1 \rangle_{\alpha'}$)

每个奥氏体 $\{111\}$ 晶面上有 6 个 $\langle 110 \rangle$ 晶向，共有 4 个奥氏体 $\{111\}$ 面，所以，K-S 关系共有 24 种可能的马氏体取向。

B) 西山关系 (Nishiyama) 关系

在 Fe-30%Ni 合金中低温形成马氏体具有的关系：

$\{111\}_\gamma // \{110\}_{\alpha'}$ $\langle 112 \rangle_\gamma // \langle 110 \rangle_{\alpha'}$

在每个 $\{111\}_\gamma$ 面上有 3 种可能取向，所以共有 12 种可能的马氏体取向。

与 K-S 关系相比：晶面关系相同，晶向之间相差 $5^\circ 16'$ 。

C) G-T (Greninger-Troiaon) 关系

精确测量了一种 Fe-C-Ni 合金，发现 K-S 关系存在偏差：

$\{111\}_\gamma // \{110\}_{\alpha'}$ 差 1° $\langle 110 \rangle_\gamma // \langle 111 \rangle_{\alpha'}$ 差 2°

注意：有些教科书不承认 G-T 关系。

6) 一个板条或透镜状的马氏体通常具有内部结构

板条马氏体显微组织：一个原始奥氏体晶粒可以形成几个位向不同的晶区，一个晶区有时又可被几个马氏体板条束所分割，每个马氏体板条束由排列成束状的细长的板条所组成。马氏体束之间以大角度晶界分开，板条束内的很多平行排列的细长的马氏体板条晶之间以小角度晶界分开。板条马氏体内有大量的位错，这些位错分布不均匀，形成胞状结构，称为位错胞。板条马氏体又称为位错马氏体。

透镜马氏体在光学显微镜下呈针状或竹叶状。马氏体片不相平行，在奥氏体晶粒内，第一片马氏体贯穿整个奥氏体晶粒，以此形成的马氏体受限制。透镜马氏体亚结构为孪晶，厚度为 5nm 左右。故又称孪晶马氏体。

7) 马氏体相界

马氏体相界是包含位错的半共格界面。

8) 马氏体有一定的起始相变温度 M_s 和一定的终止相变温度 M_f

马氏体转变开始于 M_s 点，终止于 M_f 点。其间，马氏体的量与转变速度无关，而与转变温度有关：温度越低，马氏体量越多。

钢中马氏体转变具有不完全性，即使到达 M_f 也不能转变为 100% 的马氏体，存在“残余奥氏体 (retained austenite)”。如果 M_f 在室温以下，淬火后会得到相当数量的残余奥氏体，一般进行冷处理。

含碳量越大， M_s , M_f 越低；除 Co, Al 以外，所有合金元素都降低，但效果不如碳显著。

9) 奥氏体的热稳定化

淬火时因缓慢冷却或在冷却过程中停留引起奥氏体稳定性提高，而使马氏体转变迟滞的现象。

10) 塑性变形对马氏体相变的影响

11) 马氏体逆转变

马氏体转变可逆性：把马氏体以足够快的速度加热时，马氏体可以不分解而直接转变为高温相。

注意：马氏体在不发生分解时转变为高温相才算作“逆转变”。

已经发现有逆转变的合金有：Fe-Ni, Fe-Mn, Cu-Al, Cu-Au, In-Tl, Au-Cd, Ni-Ti 等，碳钢中马氏体加热时极易分解，尚未观察到可逆转变。

逆相变也存在开始和终止温度 A_s 、 A_f 。

12) 热弹性马氏体及伪弹性

13) 形状记忆效应

就其本质而言发生马氏体相变的合金形变后，被加热到逆相变终止温度以上，使低温的马氏体逆变为高温母相而恢复到形变前固有的形状，或在随后的冷却过程中，通过内部弹性能的释放又返回到马氏体形状的现象。

其它补充部分

1. 细化晶粒对金属材料的力学性能有何影响？有哪些途径可以细化晶粒？

细化晶粒可以提高韧性，有助于防止脆性断裂发生，可以降低脆性转化温度，提高材料使用范围，在低强度钢中，利用细化晶粒来提高屈服强度有明显效果。

细化途径：(1) 改变结晶过程中的凝固条件，尽量增加冷却速度，另一方面调节合金成分以提高液体金属过冷能力，使形核率增加，进而获得细化的初生晶粒。(2) 进行塑性变形时严格控制随后的回复和再结晶过程以获得细小的晶粒组织。(3) 利用固溶体的过饱和分解或粉末烧结等方法，在合金中产生弥散分布的第二相以控制基体组织的晶粒长大。(4) 通过同素异形转变的多次反复快速加

热冷却的热循环处理来细化晶粒。

2.派一纳模型。假设：经典的弹性介质假设和滑移面上原子的相互作用为原子相对位移的正弦函数假设。意义：i 位错运动所需派一纳力比晶体产生整体、刚性滑移所需要的理论切屈服应力 $T_m = G/2\pi$ 小许多倍。ii b 越小，a 越大，则临界切应力越小 iii 其他条件相同时，刃位错的活动性比螺位错的活动性大。

3.扩散变形机理包括：扩散-位错机理；溶质原子定向溶解机理；定向空位流机理。

4.扩散-位错机理：扩散对刃位错的攀移和螺位错的割阶运动产生影响；扩散对溶质气团对位错运动的限制作用随温度的变化而不同。

5.溶质原子定向溶解机理：晶体没有受力作用时，溶质原子在晶体中的分布是随机的，无序的，如碳原子在 $\alpha\text{-Fe}$ ，加上弹性应力 σ （低于屈服应力的载荷）时，碳原子通过扩散优先聚集在受拉棱边，在晶体点阵的不同方向上产生了溶解碳原子能力的差别，称之为定向溶解，是可逆过程。定向空位机理则是由扩散引起的不可逆的塑性流动机理。

6.面心立方金属形变单晶体的表面现象。i 除了照明特别好（暗场），用光学显微镜一般看不到滑移线。ii 光学显微镜在暗场下可以看到滑移线，线长随应变的增加而递减，电镜观察到的单个滑移线比第一阶段粗而短。iii 出现滑移带，带中包括许多靠的很近的滑移线，应变增加，带间不在增加新的线，形变集中在原来的带中，滑移带端出现了碎化现象。

7.固溶强化机理：固溶强化机理即溶质原子与位错的相互作用，有四种主要类型。（1）溶质原子与位错的弹性相互作用：溶质原子对位错的钉扎形成气团；由于溶质原子的溶入而导致合金弹性模量的变化；因为溶质原子与溶剂原子尺寸差异而引起的弹性应力场阻碍了位错运动。（2）溶质原子与位错的化学相互作用：铃木钉扎。（3）溶质原子与位错的电学相互作用（4）几何相互作用。

8.由于溶质原子对位错的钉扎，对于处在低温变形或较高温度变形后的体心立方金属的应力—应变曲线，变形材料的外观、性能将产生什么样的影响？为什么？

应力—应变曲线上出现上、下屈服点和屈服延伸区，出现屈服效应现象，当温度从室温上升时，出现动态应变时效，上下屈服点反复出现，变形材料的外观出现吕德斯带缺陷，变形材料引起金属软化，使加工硬化减弱。

9. 聚合型两相合金中有一相为硬脆相时，请分析硬脆相的存在及其形状对合金的力学性能有哪些影响？

(1)渗碳体以片层状分布于塑性较好的铁素体中，铁素体变形受阻，位错运动被限制在碳化物片层之间的很短距离内，使连续变形甚为困难，碳钢的强度随渗碳体片层距离的减小而增高，片层间距越小，其强度越高，塑性不降低

(2)球状珠光体中，渗碳体呈球状，对铁素体变形的阻

碍作用降低，故强度降低，塑性显著提高，片状渗碳体比球状渗碳体强度高，塑性低。（3）如硬而脆的第二次渗碳体呈网状碳化物分布在晶界上，影响晶粒间的结合，并使晶粒内部的变形受阻导致应力集中，造成过早的断裂，反而强度下降，塑性也会明显下降（4）渗碳体成细小弥散微粒分布在铁素体中，流变应力大大增加。

10.弥散分布型两相合金中对于沉淀强化合金系其实现沉淀强化所具备的基本条件是什么？沉淀强化的机理是什么？

沉淀强化合金系的基本要求使固溶度随温度的降低而减少。

沉淀强化机理：（1）切过第二相的强化机理：当第二相质点细小的情况下，位错直接切与基体仍然存在着共格关系的第二相质点（2）绕过第二相的强化机理：当第二相质点长大到难以借助切过的方式通过的时候，位错只能用绕过的方式前进，位错借助于绕过的方式通过第二相。

11. 为什么在沉淀强化合金中，强化相质点存在着对应于最佳强化效果的最佳第二相粒子尺寸间距？

下图表示了沉淀强化合金的强化效果与质点尺寸关系，如果位错以切过的方式通过第二相质点时，位错运动的阻力将随质点尺寸加大而增加，如曲线 B 所示，如果位错以绕过的方式通过第二相的质点时位错阻力将随质点尺寸减小而增加，如曲线 A 所示，因为在体积分数一定时，粒子越小，数量必然就越多，间距就越小，但位错总是选择需要克服阻力最小的方式、最容易通过的方式来通过第二相质点。质点较小时，容易切过，按曲线 B 决定强度，质点较大时，容易绕过，按曲线 A 决定强度，当质点相当于两曲线交点 P 所对应的尺寸大小时，位错运动遇到了最大的阻力，得到最佳强化效果，对应的尺寸就是最佳的尺寸。

12. 热变形的优缺点。

优点：（1）变形抗力低，能耗少；（2）热加工时在加工硬化的同时也存在回复和再结晶的软化过程，使塑性变形容易进行；（3）不易产生织构；（4）不需要中间退火，简化生产工序，降低成本；（5）通过控制热加工过程，改变金属材料的组织结构以满足性能需要。

不足：（1）对过薄或过细的工件由于散热快，保持热加工温度困难；（2）热加工后工件表面不如冷加工生产的光洁，尺寸也不如冷加工的精确；（3）热加工后产品组织、性能不如冷加工的均匀；（4）热加工金属材料的强度比冷加工低；（5）某些金属材料不适合热加工。