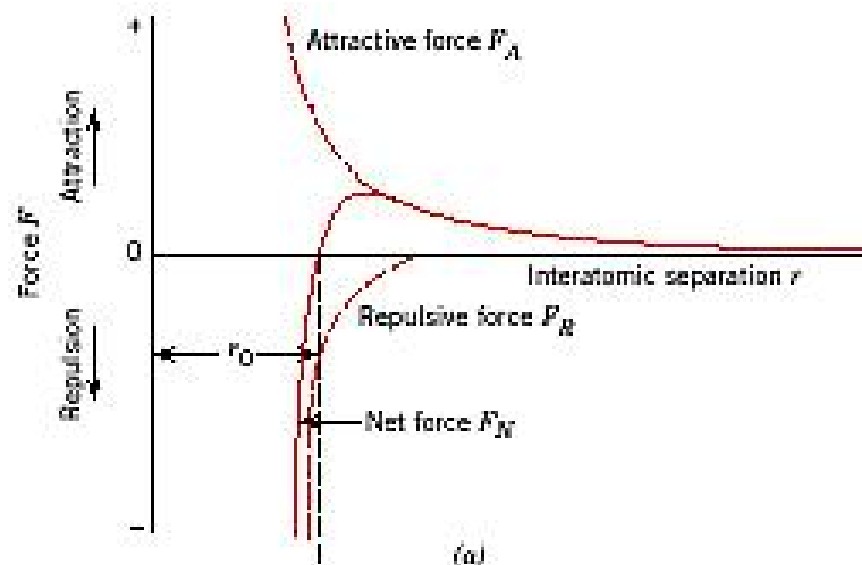


# 第一章 原子结构与键合

**概念：**

- 1、原子间键合类型及本质。**
- 2、金属、高分子、陶瓷材料中的键类型、典型物质名称。**

## 1.2.1 键合力与能量 (Bonding Forces and Energy)



平衡距离  $r_0$

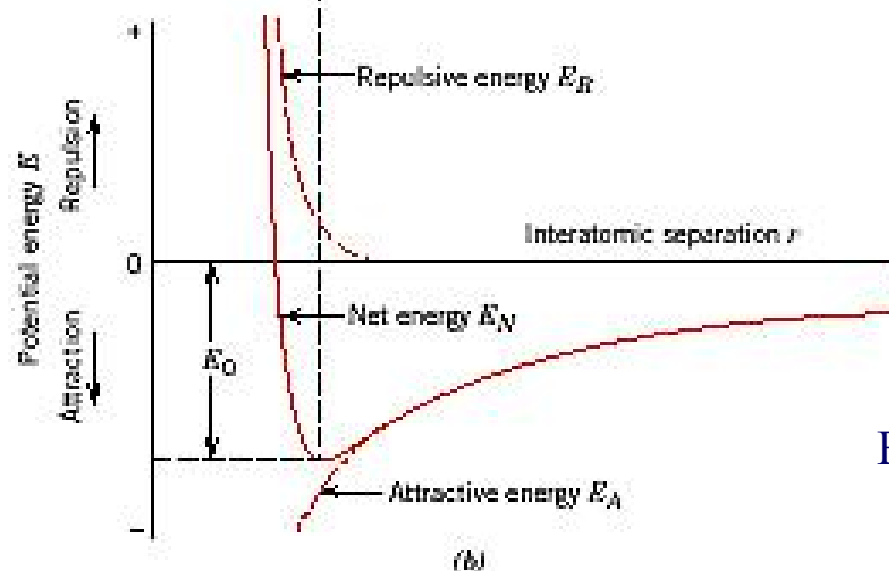
Equilibrium spacing;

当  $F_A + F_R = 0$  时的原子间距

当  $r = r_0$  时,

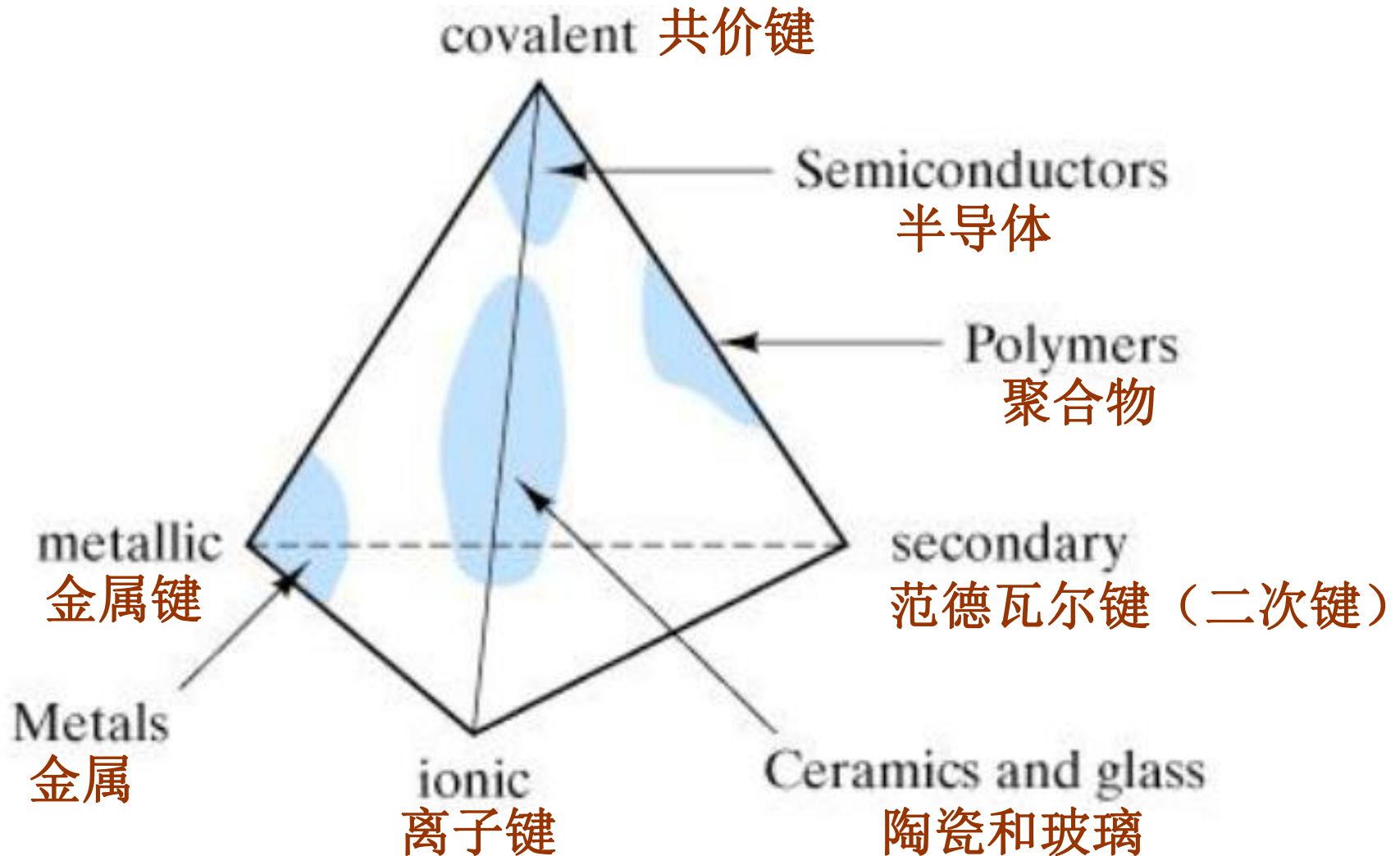
$E_0$  称为结合能 (Bonding energy),  
将2个原子无限分离所需能量。

通常  $r_0 \approx 0.3\text{nm}$  ( $3\text{\AA}$ )



$$E_N = \int_{\infty}^r F_N dr = \int_{\infty}^r F_A dr + \int_{\infty}^r F_R dr = E_A + E_R$$

# 材 料 中 的 键



# 结合键的特性

	离子键	共价键	金属键
结构特点	无方向性或方向性不明显，配位数大	方向性明显，配位数小，密度小	无方向性，无饱和性，配位数极大，密度大
力学特点	强度高，膨胀系数小，劈裂性良好，硬度大	强度高，硬度大	有各种强度，有塑性
热学特点	熔点高，膨胀系数小，熔体中有离子存在	熔点高，膨胀系数小，熔体中有的含有分子	有各种熔点高，导热性好，液态的温度范围宽
电学特点	绝缘体，熔体为导体	绝缘体，熔体为非导体	导电体

根据原子间键和的不同，将材料分为金属、陶瓷和高分子

金属材料：金属键

陶瓷材料：共价键 / 离子键

高分子材料：共价键 / 分子键 / 氢键

# 第二章固体结构

## 1、概念：

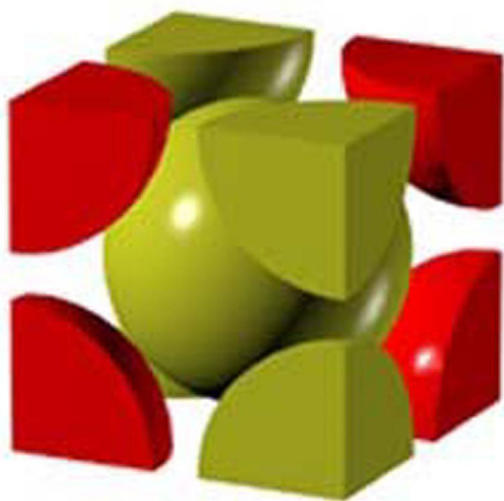
空间点阵、晶体结构、晶胞、晶向族、晶面族、晶带及晶带定律、配位数、致密度、间隙固溶体、置换固溶体、电子浓度、电子化合物、间隙相、间隙化合物、超结构。

## 2、计算

晶向、晶面指数的标定，原子的线、面密度，致密度。

**晶体结构 = 空间点阵 + 基元**

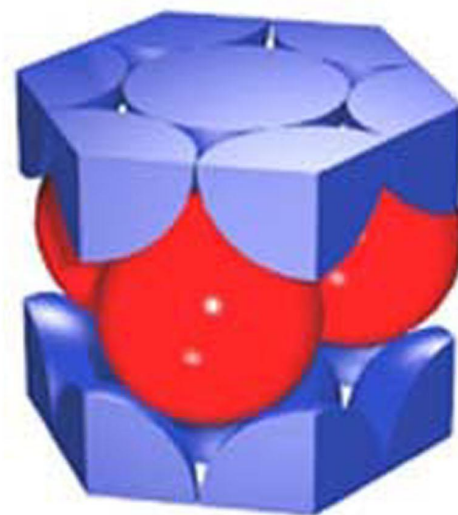
**刚球模型**



(a)



(b)



(c)

**体心立方**

**堆垛因子 (致密度)**

**0.68**

**配位数 : 8**

**面心立方**

**堆垛因子 (致密度)**

**0.74**

**配位数 : 12**

**密排六方**

**堆垛因子 (致密度)**

**0.74**

**配位数 : 12**

# 三种典型金属结构的晶体学特点

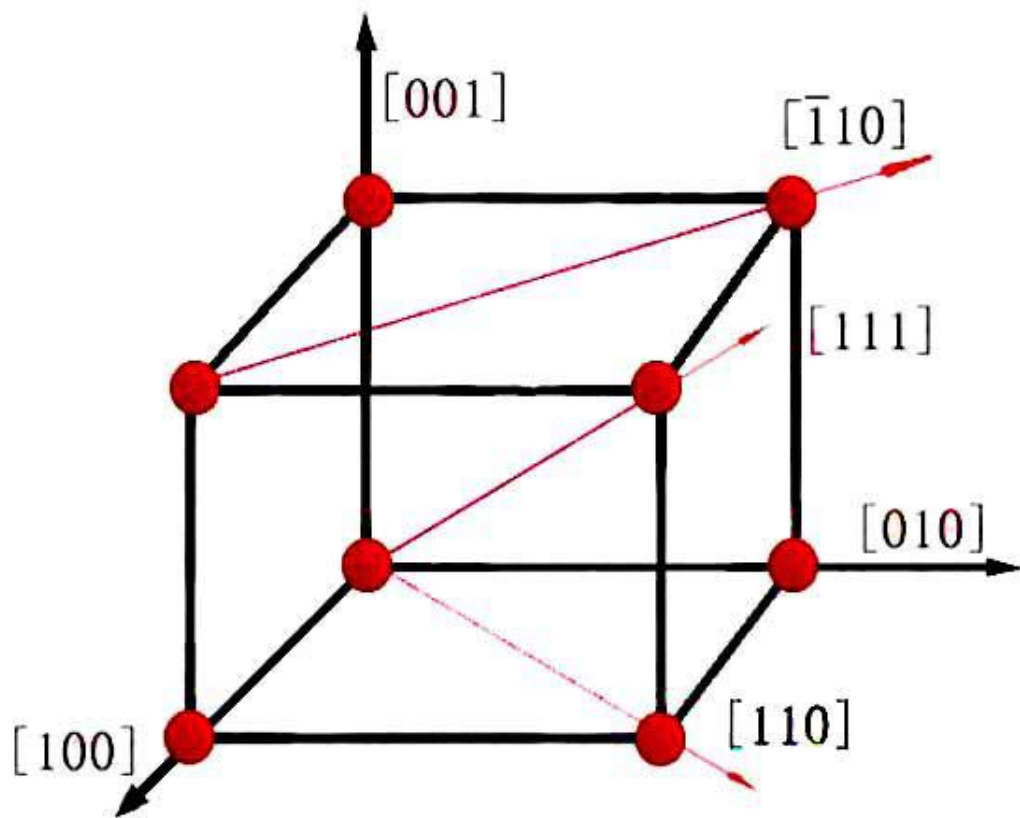
结构特征	晶体结构类型		
	面心立方(A1)	体心立方(A2)	密排六方(A3)
点阵常数	<b>a</b>	<b>a</b>	<b>a, c (c/a =1.633)</b>
原子半径 <b>R</b>	$\frac{\sqrt{2}}{4}a$	$\frac{\sqrt{3}}{4}a$	$\frac{a}{2}, \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} \right)$
晶胞内原子数	<b>4</b>	<b>2</b>	<b>6</b>
<b>配位数</b>	<b>12</b>	<b>8</b>	<b>12</b>
<b>致密度</b>	<b>0.74</b>	<b>0.68</b>	<b>0.74</b>

14种布拉菲点阵  
与  
7个晶系

7个晶系	棱边长度及夹角关系	14种布拉菲点阵
立方	$a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单立方
		体心立方
		面心立方
四方	$a=b\neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单四方
		体心四方
菱方	$a=b=c, \alpha=\beta=\gamma\neq 90^\circ$	简单菱方
六方	$a_1=a_2=a_3\neq c, \alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$	简单六方
正交	$a\neq b\neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单正交
		底心正交
		体心正交
		面心正交
单斜	$a\neq b\neq c, \alpha=\gamma=90^\circ\neq\beta$	简单单斜
		底心单斜
三斜	$a\neq b\neq c, \alpha\neq\beta\neq\gamma\neq 90$	简单三斜

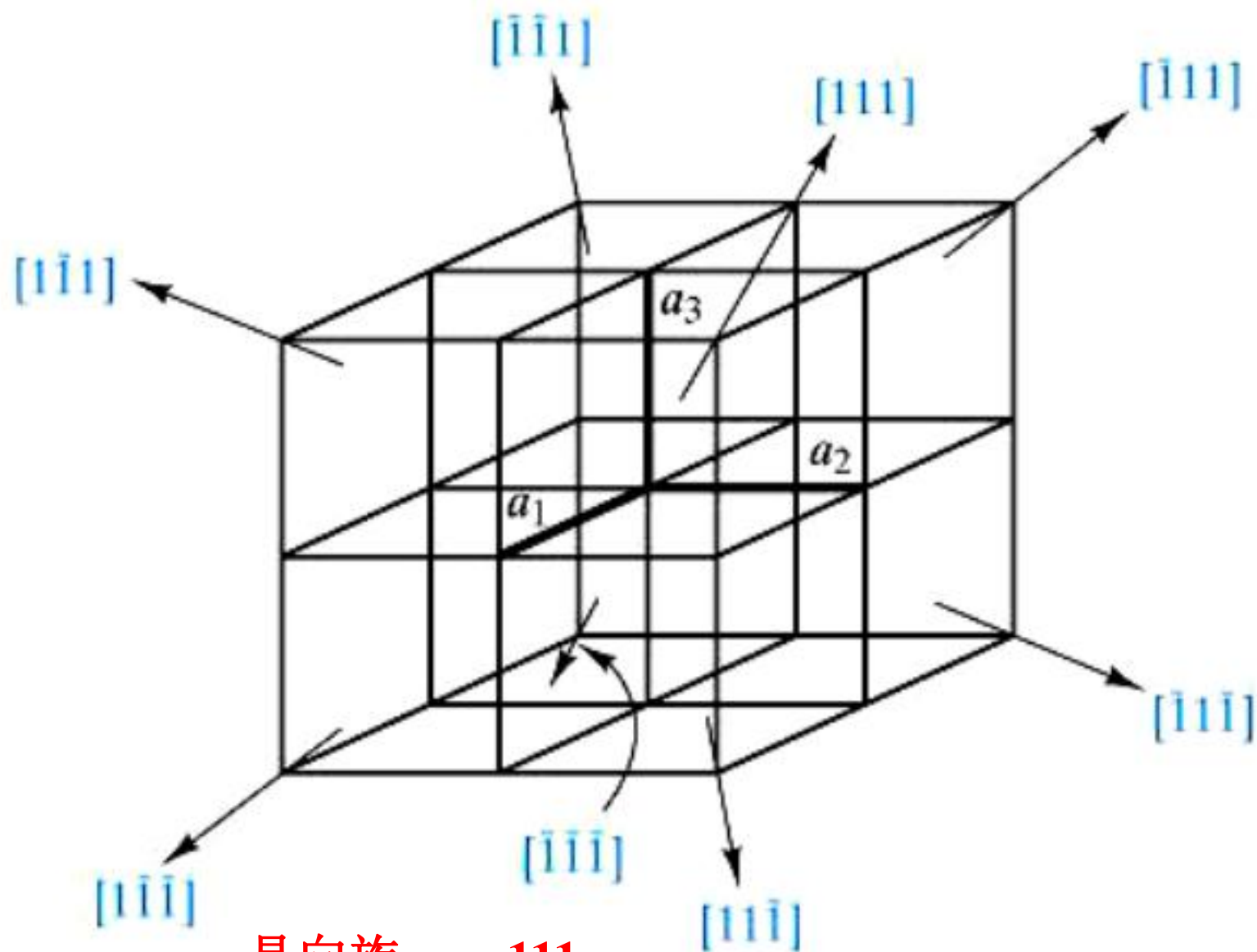


# 立方晶系常见晶向



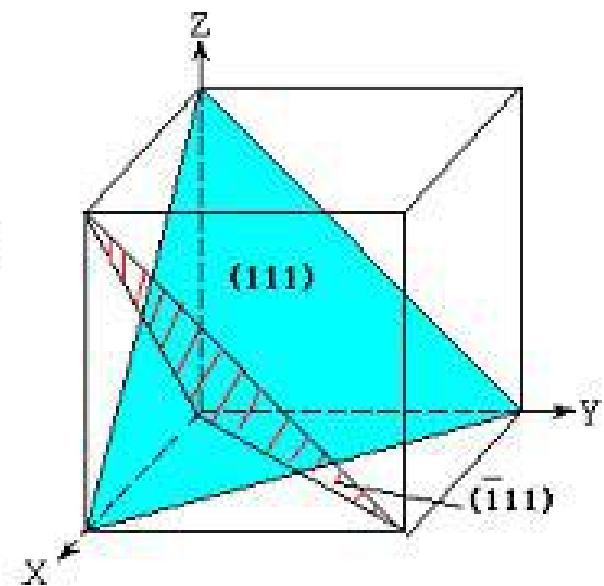
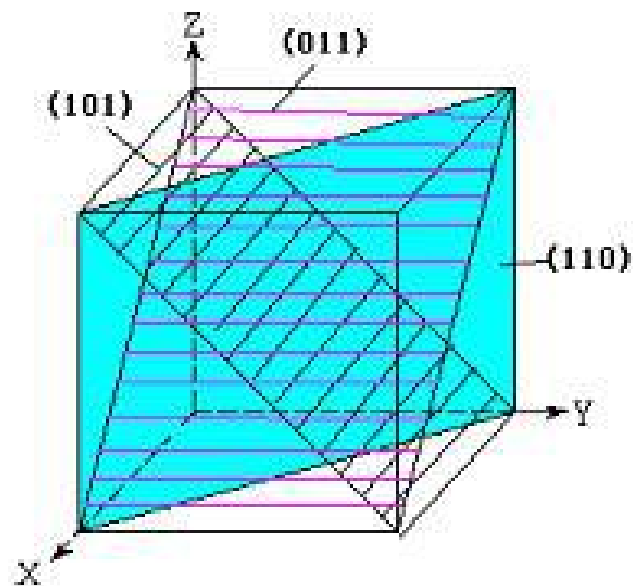
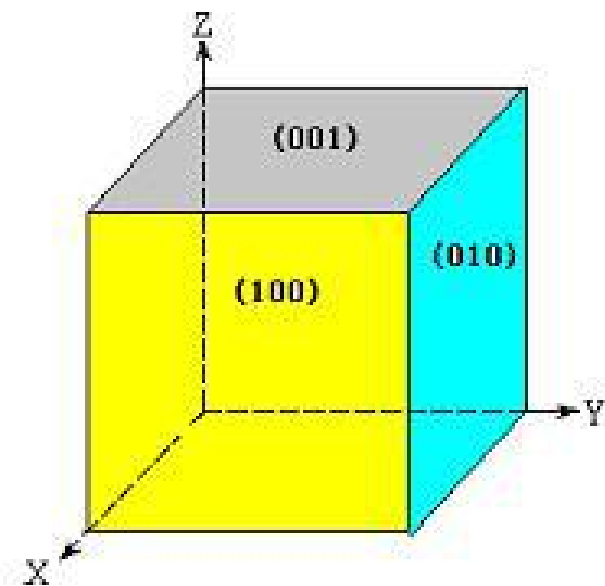
✚ 由于3个坐标轴存在正、负值，因此在晶向指数中也可存在负值。

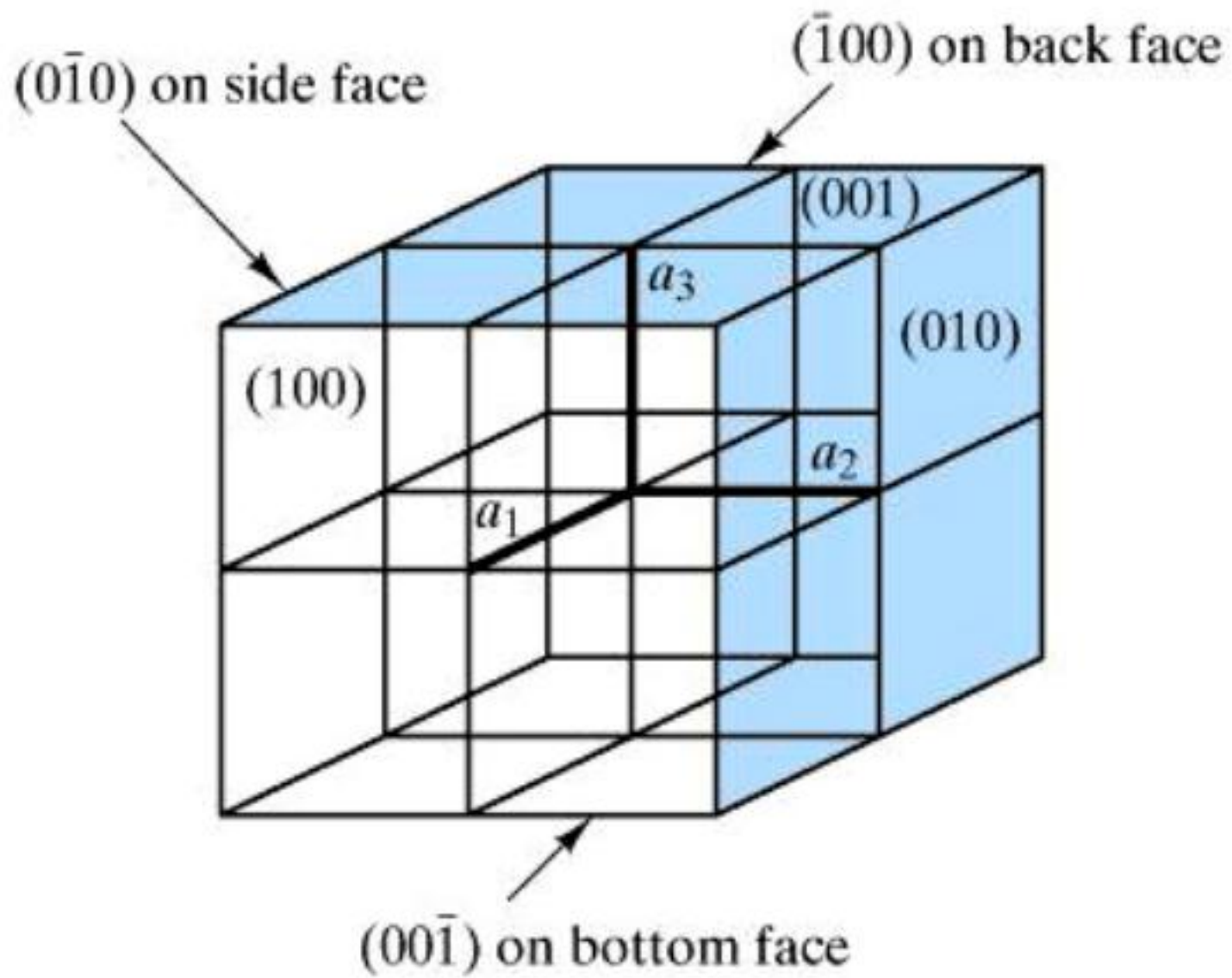
如：  $[1\bar{1}1], [\bar{1}11], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$



晶向族:  $111$

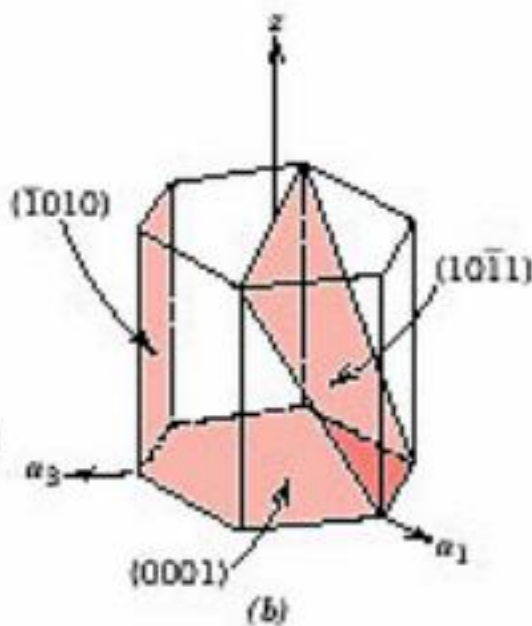
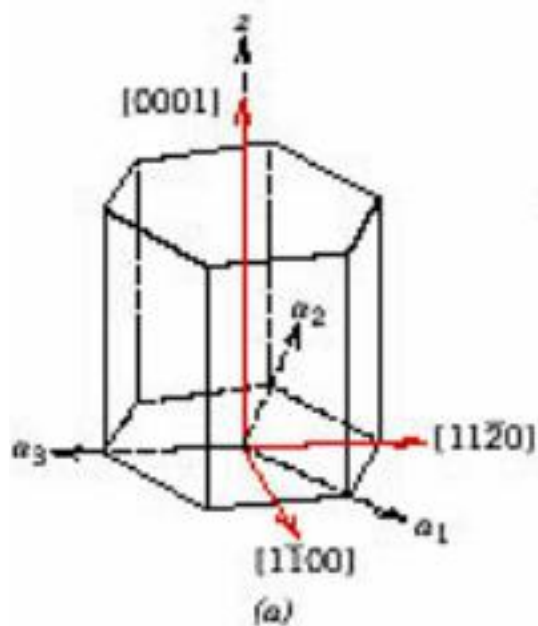
# 立方晶系常见晶面





晶面族:  $\{100\}$

# 六角晶系中的晶向、晶面



(a) 晶向  $[0001]$   
 $[1\bar{1}00]$   
 $[11\bar{2}0]$

(b) 晶面  $(0001)$   
 $(10\bar{1}1)$   
 $(\bar{1}010)$

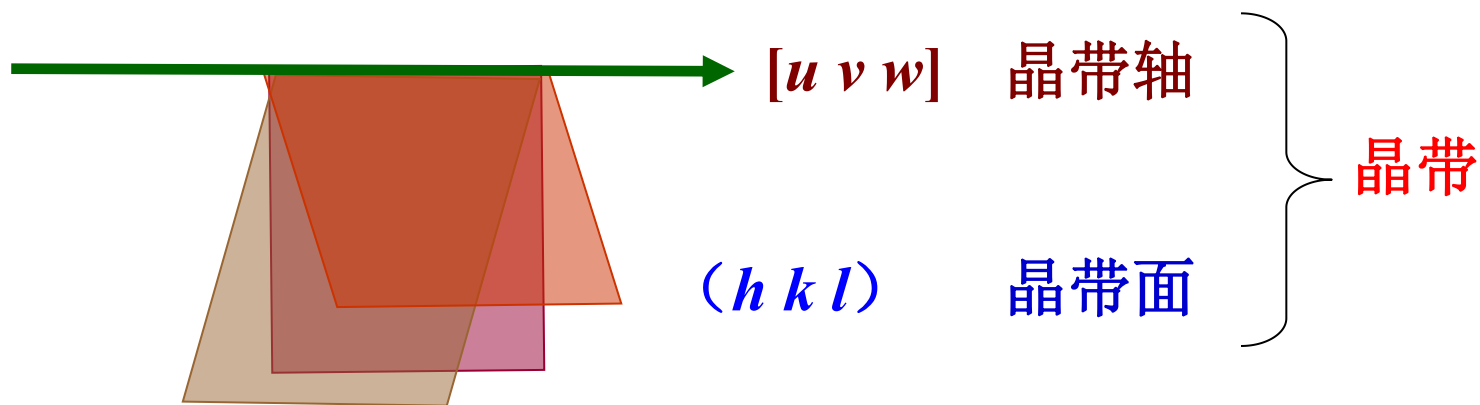
注意：三指数系统与四指数系统转换关系

# 晶带定律

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

晶带轴 $[u \ v \ w]$ 与该晶带的晶面 $(h \ k \ l)$ 之间存在以下关系：

$$hu + kv + lw = 0$$



# 线性与平面原子密度

**线原子密度**：在特定的晶向上，线矢量通过原子中心，2个原子中心间的线段长度为 $l$ ，此线段中包含的原子部分的尺寸为 $c$ ， $c/l$ 为线原子密度（LD）。

**面原子密度**：在特定的晶面上，晶面通过原子中心，由几个原子中心构成的平面的面积 $A_p$ ，此平面中包含的原子部分的面积 $A_c$ ， $A_c / A_p$ 为面原子密度（PD）。

# 密度计算

$$\rho = \frac{nA}{V_c N_A}$$

$\rho$  — 密度

$n$  — 晶胞中的原子数

$A$  — 原子重量

$V_c$  — 晶胞体积

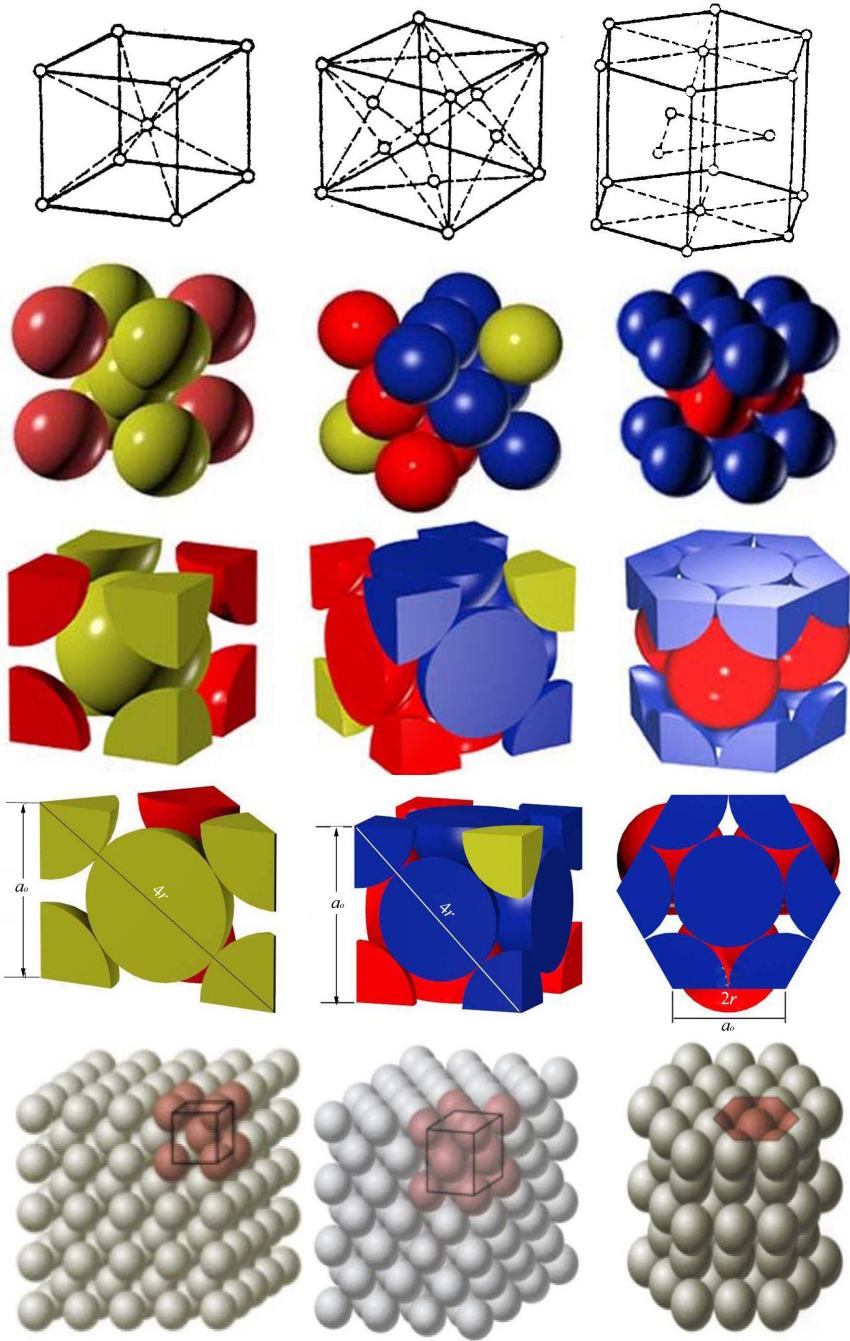
$N_A$  — 阿伏加多罗 *Avogadro* 常数,  $6.023 \times 10^{23} \text{ atoms /mol}$



# 密排面 密排方向

	密排面	数量	密排方向	数量
体心立方	{110}	6	<111>	4
面心立方	{111}	4	<110>	6
密排六方	六方底面	1	底面对角线	3

晶体结构可以视为原子密排面在空间一层一层平行堆垛的结果。



# 32种点群、 230种空间群

**点群：** 是指一个晶体中所有**点对称元素的集合**。点群在宏观上表现为晶体外形的对称。

**晶体外形中只能有32种对称点群的原因：**

- (1) 点对称与平移对称两者共存于晶体结构中，它们相互协调，彼此制约；
- (2) 点对称元素组合时必须通过一个公共点，必须遵循一定的规则，使组合的对称元素之间能够自洽。

**空间群：** 用以描述晶体中原子组合的所有可能方式，  
是确定晶体结构的依据。

**230种空间群：** 晶体结构中**32个点群**和**14种布拉菲点阵**的组合得到。

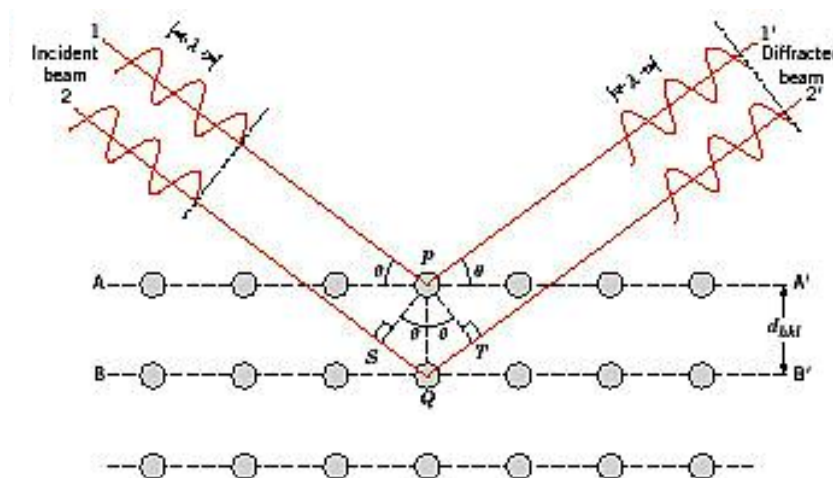
# X-射线衍射与Bragg定律

X-射线与周期性排列原子发生衍射的**必要条件**：

相同密勒指数 ( $hkl$ ) 的AA', BB'面,  
晶面间距 $d_{hkl}$ ; 2列 (1, 2) 单色X射线  
波长 $\lambda$ , 以 $\theta$ 角入射, 散射波为(1',  
2'), 路径差为 (衍射条件) :

$$\begin{aligned}n \lambda &= \underline{SQ} + \underline{QT} \\&= d_{hkl} \sin \theta + d_{hkl} \sin \theta \\&= 2 d_{hkl} \sin \theta\end{aligned}$$

(布拉格定律 Bragg Law)



$n$  — 为反射级数 (the order of reflection), 为整数 (1、2、3 ...)  
 $2\theta$  — 衍射角 (diffraction angle)

# 合金相结构

**合金 ( Alloy )** : 两种或两种以上金属元素，或金属元素与非金属元素，经熔炼、烧结或其它方法组合而成并具有金属特性的物质。

**组元 ( Component )** : 组成合金最基本的独立的物质，通常组元就是组成合金的元素，也可以是稳定的化合物。组元间由于物理的或化学的相互作用，可形成各种相。

**相 ( Phase )** : 是合金中具有同一聚集状态、相同晶体结构、成分和性能均一，并以界面（相界）相互分开的组成部分。

**合金中的相结构** : 可分为固溶体和中间相两大类。

## 合金中的相结构：

固溶体： 置换式固溶体  
间隙式固溶体

中间相（金属间化合物）：

正常价化合物\_符合化合物原子价规律

电子化合物(休姆-罗塞里相)\_电子浓度决定晶体结构

间隙相\_ $r_X/r_M < 0.59$ 时，形成简单晶体结构

间隙化合物\_ $r_X/r_M > 0.59$ 时，形成复杂晶体结构,  $\text{Fe}_3\text{C}$

电子浓度: 合金中价电子数目与原子数目的比值，即  $e/a$

$$e/a = \frac{A(100-x) + Bx}{100}$$

A, B分别为溶剂、溶质的原子价,  $x$ 为溶质的原子分数(%)

# 固 溶 体

**定义：**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，这种类型的合金相称为固溶体。

**固溶体种类：**根据溶质原子在溶剂中的位置，可分为置换式（Substitutive）固溶体与间隙式（Interstitial）固溶体。

表 1-1 碳、氮原子在  $\gamma$  铁和  $\alpha$  铁中的溶解度

	温 度 (°C)	溶 解 度	
		重 量 %	原 子 %
C 在 $\gamma$ 铁中	1150	2.04	8.8
	723	0.80	3.6
C 在 $\alpha$ 铁中	723	0.02	0.095
	20	<0.00005	<0.00012
N 在 $\gamma$ 铁中	650	2.8	10.3
	590	2.35	8.75
N 在 $\alpha$ 铁中	590	0.10	0.40
	20	<0.0001	<0.0004

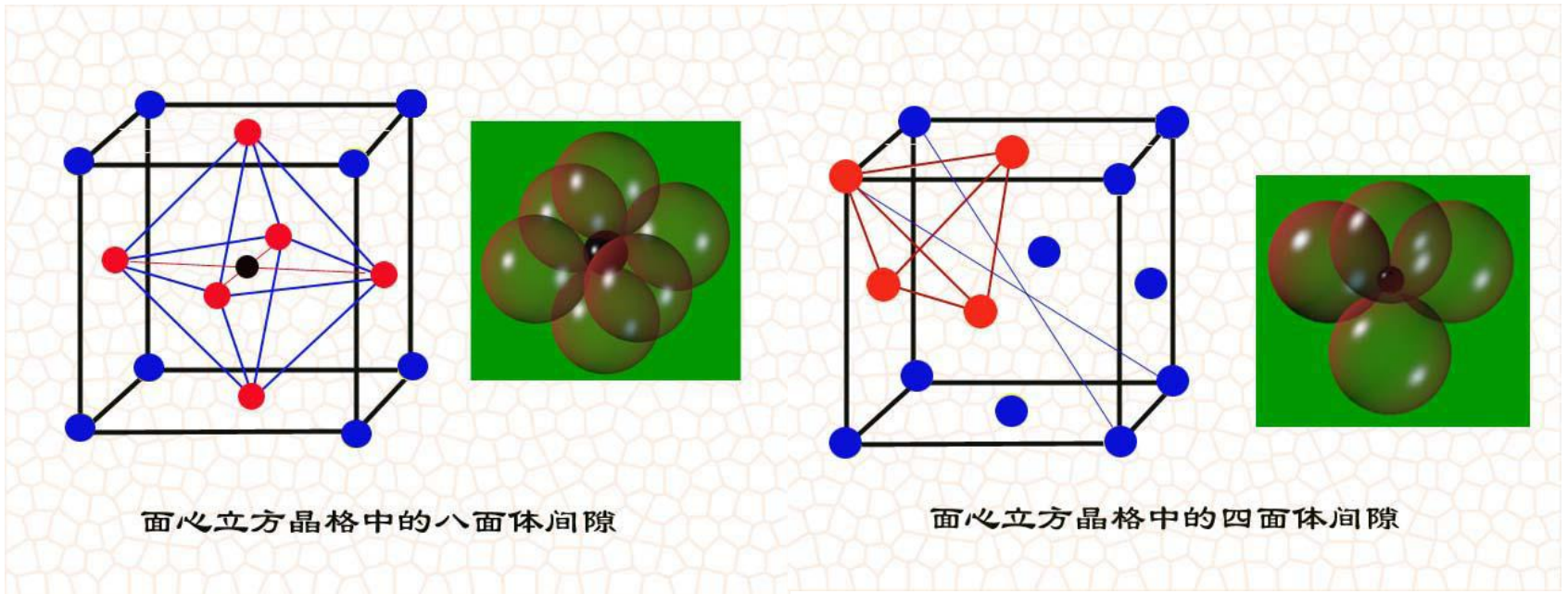
# 间隙固溶体

- 当溶质原子半径小，与溶剂原子半径差  $\Delta r > 41\%$  时，溶质原子可能进入溶剂晶格间隙中形成间隙固溶体
- 通常原子半径小于  $0.1\text{nm}$  的非金属元素，如H、C、N、O等容易成为溶质间隙原子
- 由于溶质原子大小比晶格间隙的尺寸大，引起溶剂点阵畸变，故间隙固溶体都是有限固溶体



# 面心立方晶格中的间隙

设原子半径为 $r_A$ , 间隙中能容纳的最大圆球半径为 $r_B$



位于晶胞中心，由六个原子所组成的八面体中心（共4个）

$$r_B/r_A = 0.414$$

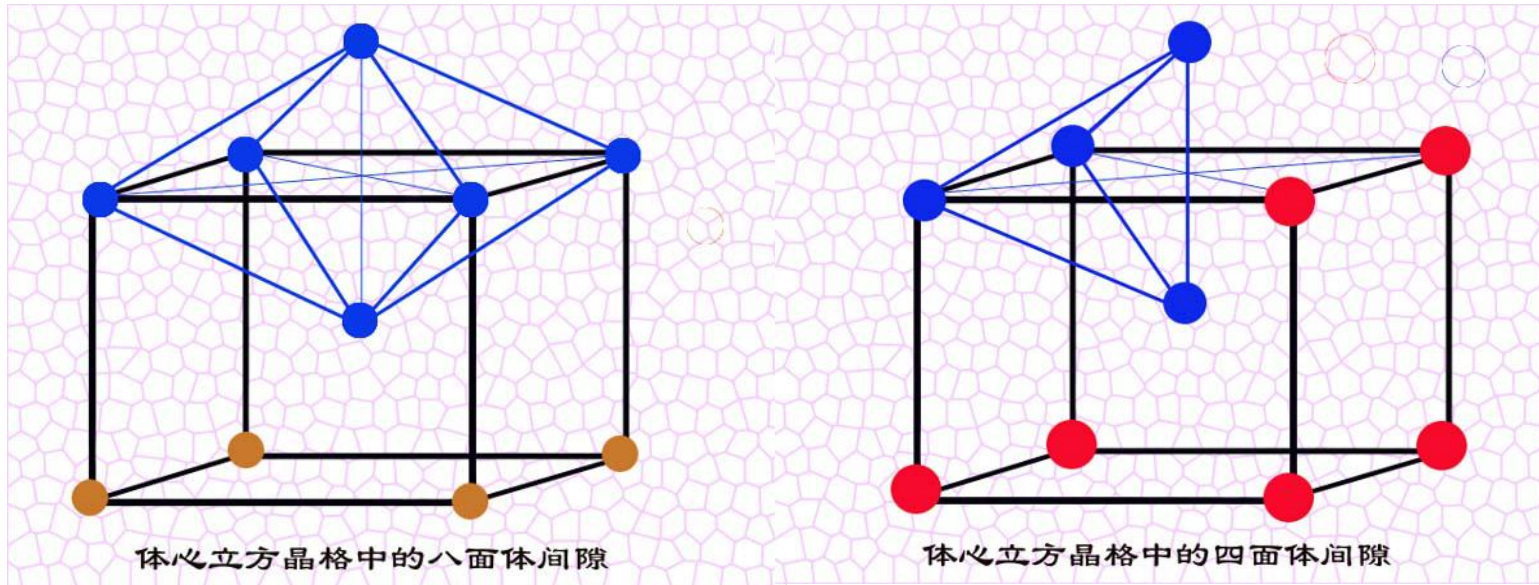
位于晶胞体对角线上靠结点1/4处，由四个原子所组成的四面体中心（共8个）

$$r_B/r_A = 0.225$$



# 体心立方晶格中的间隙

设原子半径为 $r_A$ , 间隙中能容纳的最大圆球半径为 $r_B$



位于晶胞六面体的面中心，由六个原子所组成的八面体中心（共6个）

$$r_B/r_A = 0.15$$

由四个原子所组成的四面体中心（共12个）

$$r_B/r_A = 0.29$$

注：体心立方结构的四面体和八面体间隙不对称（其棱边长度不全相等），这会对间隙原子的固溶及其产生的畸变有明显的影响。

# 置换固溶体

## — 溶解度的影响因素

- **晶体结构**：晶体结构相同是组元间形成**无限固溶体**的必要条件。组元的**晶体结构类型不同**，其溶解度只能是有限的。
- **原子尺寸**：组元的原子半径差 $\Delta r < 15\%$ 时，有利于形成溶解度较大的固溶体；当 $\Delta r \geq 15\%$ 时， $\Delta r$ 越大则溶解度越小。
- **化学亲和力（电负性因素）**：组元间**电负性相近**，可能具有大的溶解度；**电负性差大**，则化学亲和力大，易形成化合物，而不利于形成固溶体，固溶体的溶解度愈小。
- **原子价因素**：溶质的**原子价（电子浓度）**影响固溶体的溶解度，**最大溶解度时**，电子浓度  $e/a$  接近1.4。

# 中间相（金属间化合物）

■ 两组元A和B组成合金时，除了可形成固溶体之外，如果溶质含量超过其溶解度时，便可能形成**新相**，其成分处于A在B中、和B在A中的最大溶解度之间，故称为**中间相**。

■ 中间相可以是**化合物**，也可以是以**化合物为基的固溶体**（**第二类固溶体**或**二次固溶体**）。它的晶体结构不同于其任一组元，结合键中通常是**金属键**和其它典型键（如**离子键**、**共价键**和**分子键**）相混合。因此中间相具有一定的**金属特性**，又称为**金属间化合物**。

■ 金属间化合物种类很多，主要包括三种：

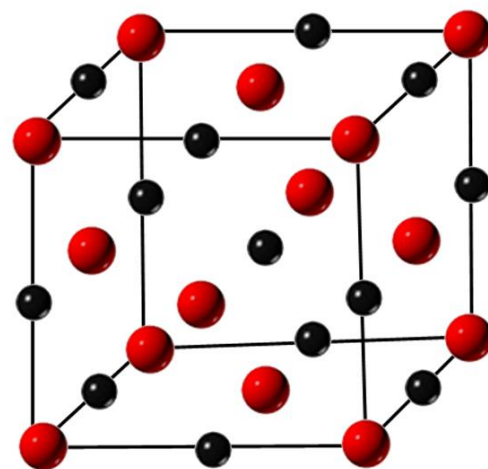
- 正常价化合物
- 电子化合物
- 间隙相和间隙化合物

## 正常价化合物

■ 正常价化合物是指符合化合物原子价规律的金属间化合物。它们具有严格的化合比，成分固定不变。

■ 它的结构与相应分子式的离子化合物晶体结构相同，如分子式具有AB型的正常价化合物其晶体结构为NaCl型。

■ 正常价化合物常见于陶瓷材料，多为离子化合物。



例如：

$\text{Mg}_2\text{Pb}$ 、 $\text{Mg}_2\text{Sn}$ 、 $\text{Mg}_2\text{Ge}$ 、 $\text{Mg}_2\text{Si}$  等等

# 电子化合物（休姆-罗塞里相）

## Hume-Rothery phase

- 电子化合物是指按照一定价电子浓度的比值组成一定晶格类型的化合物，即电子浓度决定晶体结构。
- 电子化合物不符合化学价规律，原子间以金属键为主，具有明显的金属特性。  
如：价电子浓度（ $e/a$ ）： $3/2$  — 体心立方（ $\beta$  相）； $7/4$  — 密排六方晶格（ $\epsilon$  相）； $21/13$  — 复杂立方（ $\gamma$  相）；
- 电子化合物的熔点和硬度都很高，而塑性较差，是有色金属中的重要强化相。

# 间隙相

- 当非金属原子半径 ( $r_X$ ) 与金属原子半径 ( $r_M$ ) 的比值  $r_X/r_M < 0.59$  时, 将形成具有简单晶体结构的金属间化合物, 称为间隙相。
- 在间隙相晶格中金属原子位于晶格结点位置, 而非金属原子则位于晶格的间隙处。
- 间隙相中原子间结合键为共价键和金属键。间隙相具有极高的熔点和硬度, 同时其脆性也很大, 是高合金钢和硬质合金中的重要强化相。
- 通过化学热处理或气相沉积等方法, 在钢的表面形成致密的间隙相薄层, 可显著提高钢的耐磨性或耐腐蚀性。

# 间隙化合物

■ 当非金属原子半径与金属原子半径的比值 $r_X/r_M > 0.59$ 时，将形成具有复杂晶体结构的金属间化合物，其中非金属原子也位于晶格的间隙处，故称之为间隙化合物。

例如 $\text{Fe}_3\text{C}$ 是铁碳合金中的重要组成相，称为渗碳体，具有复杂的正交晶格。 $\text{Fe}_3\text{C}$ 中的Fe原子可以部分地被其它金属原子（Mn、Cr、Mo、W）所置换，形成 $(\text{Fe}, \text{Mn})_3\text{C}$ 等，称为合金渗碳体。

➤ 间隙化合物中原子间结合键为共价键和金属键。间隙化合物也具有很高的熔点和硬度，脆性较大，也是钢中重要的强化相之一。但与间隙相相比，间隙化合物的熔点、硬度、以及化学稳定性都要低一些。

# 第三章 晶体缺陷

## 1、概念

肖脱基空位、弗仑克尔空位、刃型位错、螺型位错、柏氏矢量、位错密度、位错的滑移及攀移、弗兰克-瑞德源、汤普森四面体、位错反应、扩展位错、表面能、界面能、重整位置点阵、失配度、对称倾侧晶界、非共格晶界。

## 2、计算

点缺陷浓度，位错密度。

## 3、分析判断

位错反应条件，位错受力分析。



# 缺陷种类 Imperfections, Defects

**点缺陷 (Point defects)**：最简单的晶体缺陷，在结点上或邻近的微观区域内偏离晶体结构的正常排列。在空间三维方向上的尺寸都很小，约为一个、几个原子间距，又称**零维缺陷**。

包括空位、间隙原子、杂质、溶质原子等。

**线缺陷 (Linear defects)**：在一个方向上的缺陷扩展很大，其它两个方向上尺寸很小，也称为**一维缺陷**。主要为位错。

**面缺陷 (Interfacial defects)**：在两个方向上的缺陷扩展很大，其它一个方向上尺寸很小，也称为**二维缺陷**。

包括晶界、相界、孪晶界、堆垛层错等。

# 点缺陷的形成条件

## — 原子热运动

### 点缺陷的平衡浓度:

设由N个原子组成的晶体中含有n个空位，形成一个空位所需能量为 $E_v$ ，振动熵为 $\Delta S_f$ ，k为波尔兹曼常数，则空位在T温度时的空位平衡浓度C:

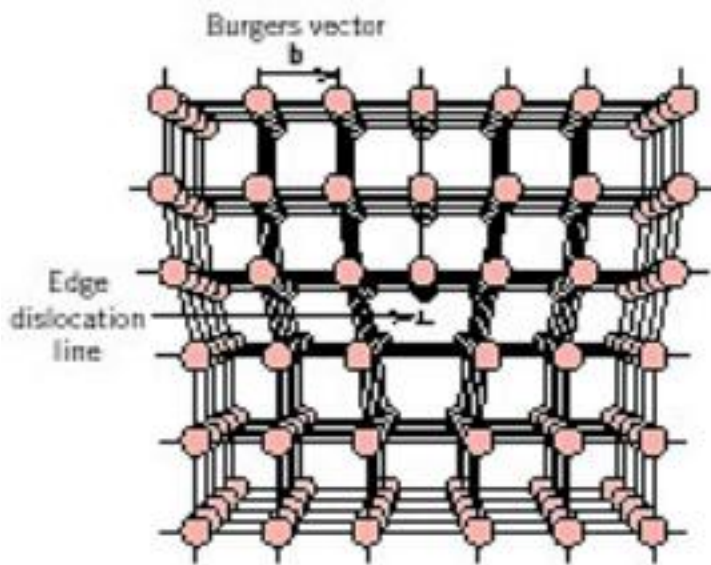
$$C = \frac{n}{N} = \exp\left(\frac{\Delta S_f}{k}\right) \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right) = A \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right)$$

类似的，间隙原子平衡浓度C' :

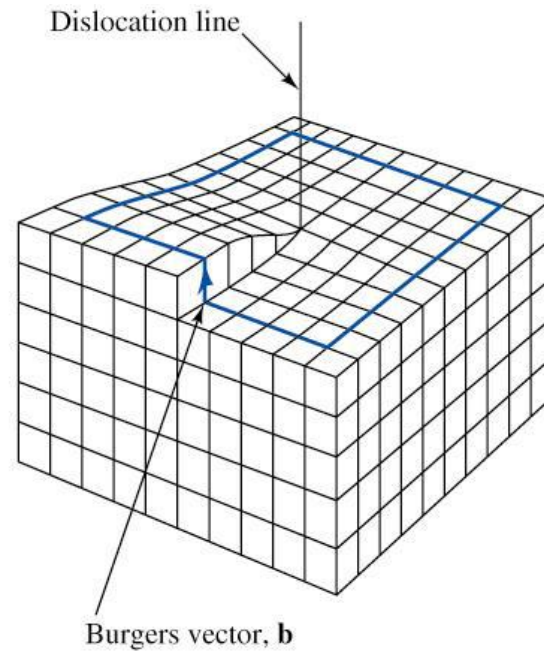
$$C' = \frac{n'}{N'} = \exp\left(\frac{\Delta S'_f}{k}\right) \exp\left(-\frac{E'_v}{kT}\right) = A' \exp\left(-\frac{E'_v}{kT}\right)$$

✚ 一般，晶体中间隙原子的形成能比空位的形成能大3-4倍，间隙原子的量与空位相比可以忽略。

✚ 热平衡缺陷（thermal equilibrium defects）：由于热起伏促使原子脱离点阵位置而形成的点缺陷。



刃型位错



螺型位错

# 位错的运动

位错运动是位错的重要性质之一，它与晶体的力学性能，如强度、塑性、断裂等密切相关

位错的运动方式主要是： 滑移 slip  
攀移 climb

位错的滑移（守恒运动）：在外加切应力作用下，位错中心附近的原子沿柏氏矢量方向在滑移面上不断作少量位移（小于一个原子间距）而逐步实现

# 位错滑移的特点

位错滑移的切应力 // 位错滑移方向 // 柏氏矢量  
位错线方向 ⊥ 位错运动方向

- 1) 刃型位错：滑移的切应力方向与位错线垂直；  
螺型位错：滑移的切应力方向与位错线平行。
- 2) 刃型位错：滑移方向与位错运动方向一致；  
螺型位错：滑移方向与位错运动方向垂直。
- 3) 螺型位错：如果在原滑移面上运动受阻时，有可能转移到与之相交的另一滑移面上继续滑移，这称为交滑移。

## 位错反应：位错线之间可以合并或分解

**几何条件：**反应前后诸位错的柏氏矢量之和相等，

$$\mathbf{b} \rightarrow \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$$

**能量条件：**反应后位错的总能量小于反应前位错的能量

$$|\mathbf{b}|^2 > |\mathbf{b}_1|^2 + |\mathbf{b}_2|^2$$

## 运动位错的交割：

**扭折：**位错交割形成的曲折线段在位错的滑移面上。

**割阶：**该曲折线段垂直于位错的滑移面。

# 位错的应变能

**位错的能量：** 位错周围点阵畸变引起的弹性应力场，导致晶体能量的增加

- 位错中心畸变能 $E_c$  (大约为总应变能的1/10-1/15)
- 位错应力场引起的弹性应变能 $E_e$  (主要部分)

单位长度刃型位错的应变能：
$$E_e^e = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \cdot \ln \frac{R}{r_0}$$

单位长度螺型位错的应变能：
$$E_e^s = \frac{Gb^2}{4\pi} \cdot \ln \frac{R}{r_0}$$

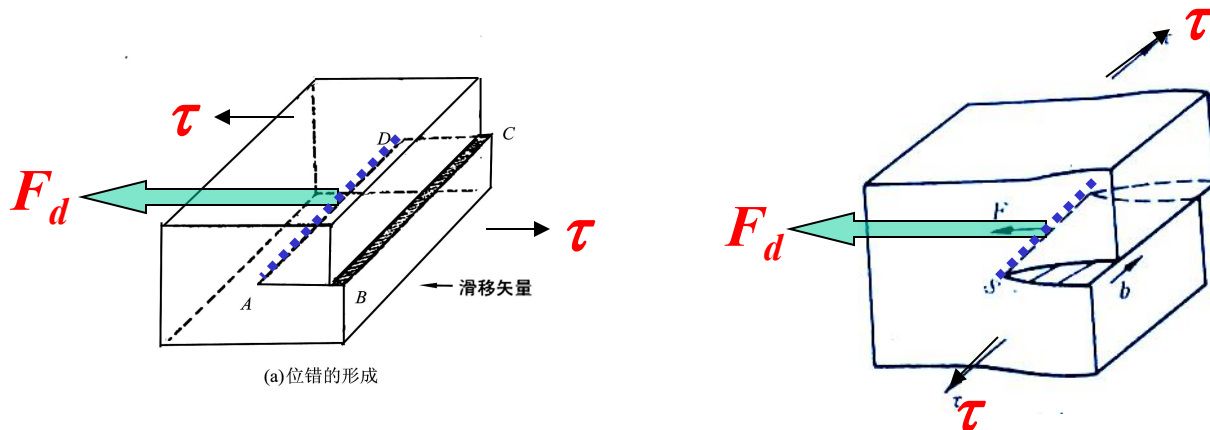
单位长度混合位错的应变能：
$$E_e^m = \frac{Gb^2}{4\pi K} \cdot \ln \frac{R}{r_0}$$

$G$  — 切变模量  
 $K$  — 角度因素  
 $\alpha$  — 几何系数  
 $b$  — 柏氏矢量  
 $\nu$  — 泊松比

简化的单位长度位错的总应变能： $E = \alpha Gb^2$       $\alpha$  约为0.5 - 1

# 作用在位错的力

- 在外切应力  $\tau$  的作用下，位错的移动可以理解为有一个垂直于位错线的力  $F_d$  作用于位错线上。 $F_d = \tau b$
- $F_d$  的方向总是与位错线相垂直，并指向滑移面的未滑移部分
- 作用在位错上的力只是一种组态力，它不代表位错附近原子实际所受力，也区别于作用在晶体上的力，其方向与外切应力方向不一定一致
- 一根位错具有唯一的柏氏矢量，只要作用在晶体上的切应力是均匀的，则各段位错所受的力大小相同





# 位错的线张力

- 线张力 $T$ 可以理解为使位错增加单位长度所需的能量，

故： $T = kGb^2$ ， $k$  约为0.5-1

- 若位错长度为 $ds$ ，单位长度位错线所受的力为 $\tau b$ ，

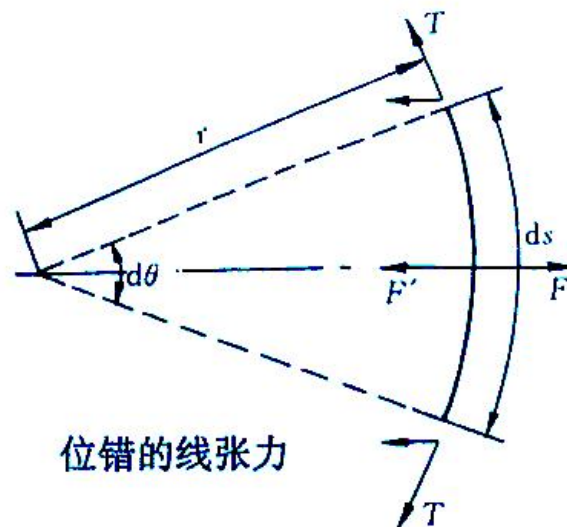
则： $\tau b \cdot ds = 2T \sin(d\theta/2)$ ，

由于 $ds = r d\theta$ ，当 $d\theta$ 很小时， $\sin(d\theta/2) \approx (d\theta/2)$

因此： $\tau b = T/r \approx Gb^2/2r$

- 两端固定的位错在切应力 $\tau$ 作用下  
与位错线弯曲度 $r$ 的关系

$$\tau = Gb/2r$$



# 位错间的交互作用力

1) 两平行螺位错的交互作用  $f = \tau_1 b_2 = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi r}$

## 2) 两平行刃位错的交互作用

沿x方向的切应力分量（滑移）： $f_x = \tau_{yx} b_2 = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$

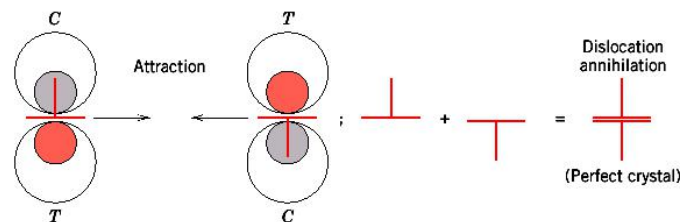
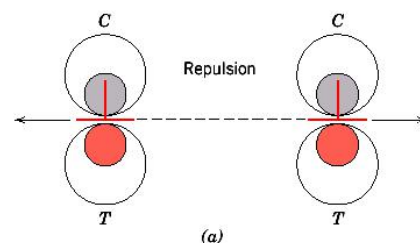
沿y方向的正应力分量（攀移）： $f_y = -\sigma_{xx} b_2 = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$

■ 在同一滑移面上的位错，同性相斥、异性相吸（见右图）

■ 在不同滑移面上的位错，小角度晶界的形成。

■ 相互平行的螺位错和刃位错之间不发生相互作用（柏氏矢量相互垂直）

■ 混合位错，先分解、再叠加



# 位错的生成和增殖

## 位错的密度 Density of dislocations:

位错密度是单位体积晶体中所含的位错线的总长度:

$$\rho = L/V \text{ (1/cm}^2\text{)}$$

一般，位错密度也定义为单位面积所见到的位错数目

- ✓ 充分退火的多晶体金属中，  $\rho = 10^6 - 10^8 \text{ cm}^{-2}$
- ✓ 剧烈冷变形的金属中：  $\rho = 10^{10} - 10^{12} \text{ cm}^{-2}$
- ✓ 超纯金属单晶体：  $\rho < 10^3 \text{ cm}^{-2}$

# 面缺陷 Interfacial Defects

## — 表面及界面 Surface、Interface、Boundary

**界面：**通常包含几个原子层厚的区域，其原子排列及化学成分不同于晶体内部，可视为二维结构分布，也称为晶体的面缺陷。界面对晶体的物理、化学和力学等性能产生重要的影响

➤ **外表面：**指固体材料与气体或液体的分界面。它与摩擦、吸附、腐蚀、催化、光学、微电子等密切相关

➤ **内界面：**分为晶粒界面、亚晶界、孪晶界、相界面等

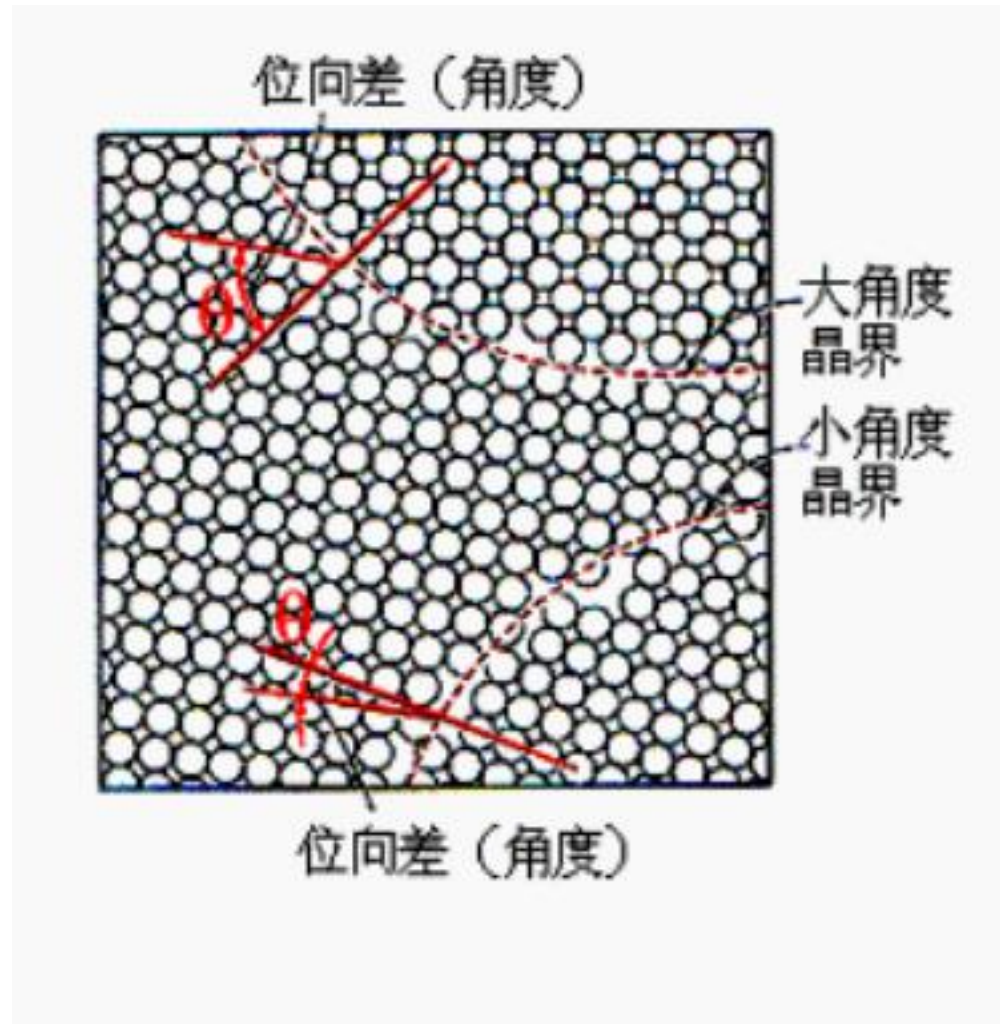
# 晶界分类(根据相邻晶粒位相差)

**小角度晶界** Low-angle grain boundary :

相邻晶粒的位相差小于 $10^\circ$ ,  
亚晶界一般为 $2^\circ$ 左右。

**大角度晶界** High-angle grain boundary :

相邻晶粒的位相差大于 $10^\circ$



# 晶界能

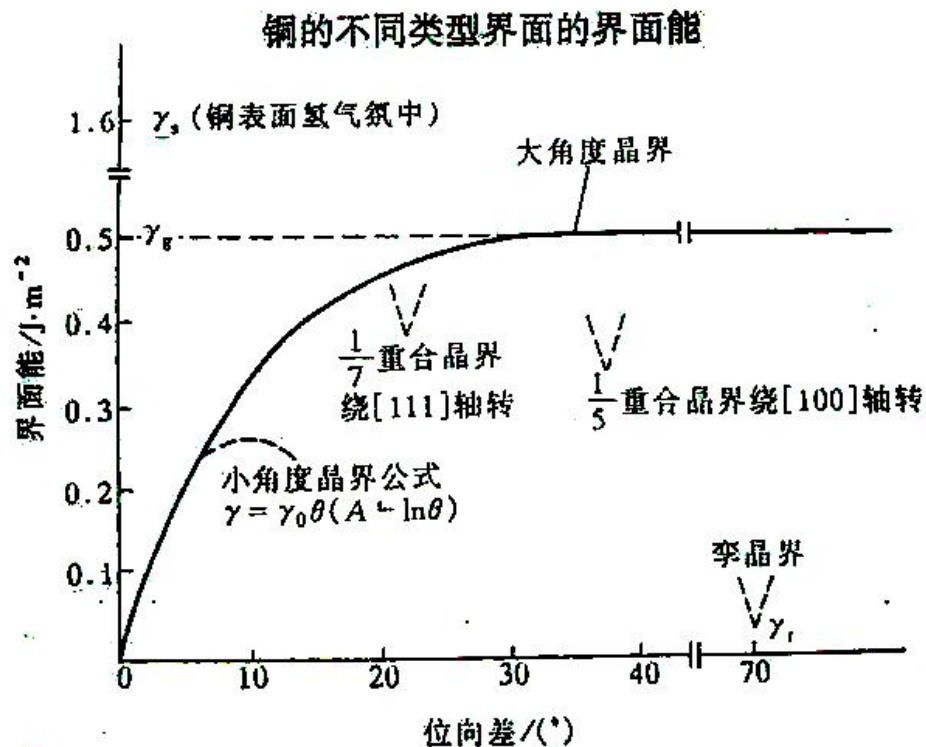
晶界上原子畸变引起的系统自由能的升高，单位： $\text{J/m}^2$

■ 小角度晶界能量主要来自位错能量，与位相差  $\theta$  有关：

$$\gamma = \gamma_0 \theta (A - \ln \theta)$$

■ 大角度晶界能量基本为定值，与晶粒之间位相差  $\theta$  无关：

$$0.25 \sim 1.0 \text{ J/m}^2$$



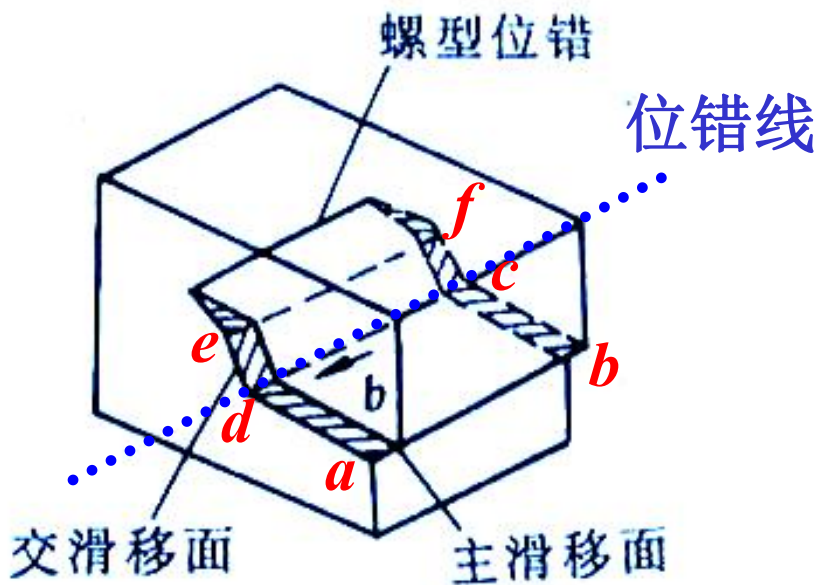
## 作业题答案:

试分析在 (111) 面上运动的柏氏矢量为  $\bar{b} = \frac{a}{2}[\bar{1}10]$  的螺型位错受阻时，能否通过交滑移转移到  $(1\bar{1}1), (11\bar{1}), (\bar{1}11)$  面中的某个面上继续运动？为什么？

### 相关知识:

**交滑移：**由于螺型位错可有多个滑移面，螺型位错在原滑移面上运动受阻时，可转移到与之相交的另一个滑移面上继续滑移。

**晶带：**所有平行或相交于同一直线的晶面构成**晶带**，此直线称为**晶带轴**，属于此晶带的晶面称为**晶带面**。



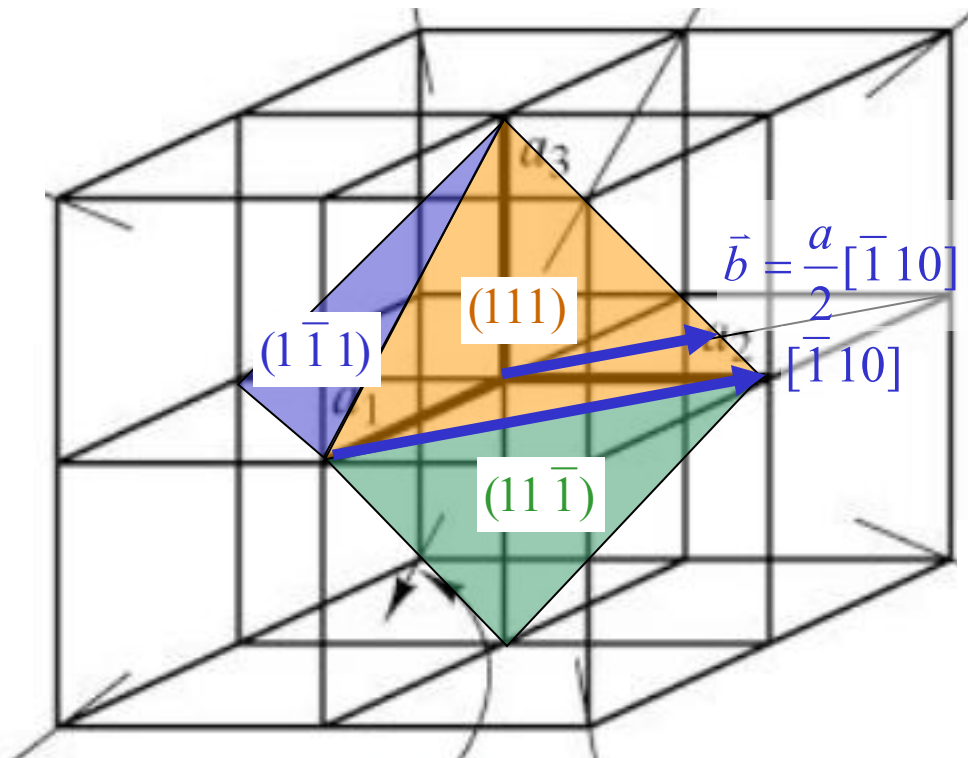
晶带轴 $[u \ v \ w]$ 与该晶带的晶面 $(h \ k \ l)$ 之间存在以下关系:

$$hu + kv + lw = 0$$

## 称为晶带定律

晶带轴（伯氏矢量）： $[\bar{1}10]$

在  $(1\bar{1}1), (11\bar{1}), (\bar{1}11)$  中属于以上晶带的晶带面： $(11\bar{1})$





# 第四章 凝固与扩散

## 1、概念

凝固、结晶、过冷、过冷度、结构起伏、能量起伏、均匀形核、非均匀形核、临界晶核半径、临界形核功及物理意义、形核率、光滑界面、粗糙界面；扩散通量、稳态扩散、非稳态扩散、扩散系数、扩散激活能、菲克第一定律、菲克第二定律、柯肯达尔效应、互扩散(化学扩散)、自扩散、上坡扩散、反应扩散。

## 2、分析、判断、计算

- 液态金属在正、负温度梯度下的生长过程，控制凝固后晶粒大小方法；
- 扩散相关物理量计算；
- 分析影响扩散的因素，解释一些现象；
- 利用一些结论。如“钢铁材料渗碳处理时，扩散需要的时间  $t$  与扩散距离  $x$  的平方成正比，即  $t \propto x^2$ ”；以及“同一个扩散系统，扩散系数  $D$  与扩散时间  $t$  的乘积为一常数，即  $D \cdot t = \text{常数}$ ” 解决实际问题。

✦ **结构起伏 Structural undulation**：液态金属中存在着原子排列规则（有序）的小区域（**原子团**），这些大小不一的原子集团是与固态结构类似的；这些原子集团不稳定，一会儿在这里消失，一会儿在那里出现（原子重新聚集），**此起彼伏**，这种现象称为**结构起伏**。

✦ **能量起伏 Energy undulation**：造成结构起伏的原因是液态金属中存在着能量起伏，**能量低**的地方有序原子团才能形成，遇到**能量高峰**又散开成无序状态。

✦ **结构起伏与能量起伏是对应的**

# 结晶过程

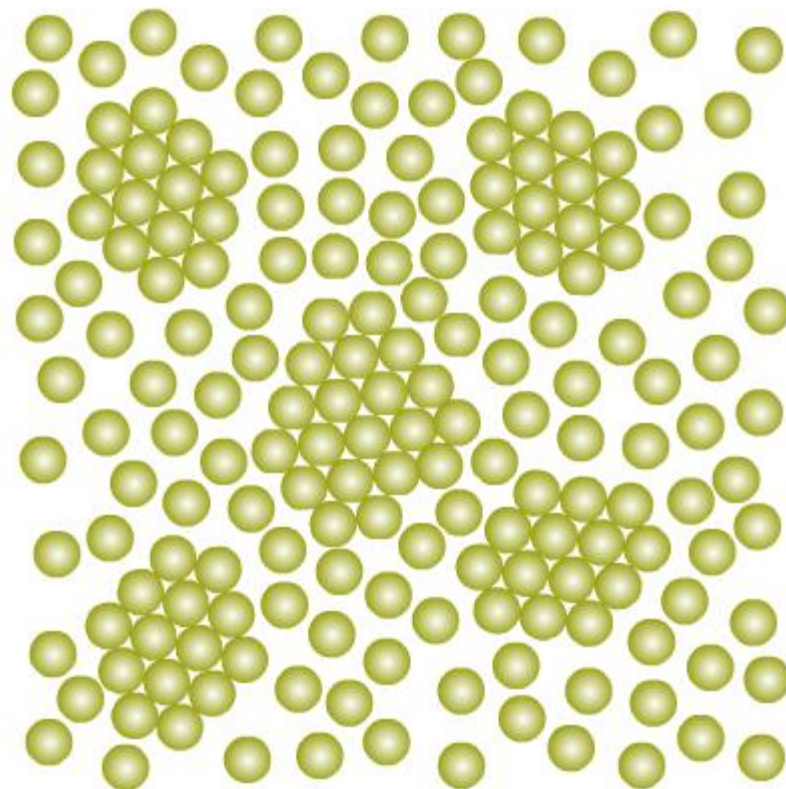
## ✓ 晶核形成（形核）：

在过冷的金属液体中，尺寸较大的晶胚不再被熔化掉，能够稳定保留下来的晶胚就成了开始结晶的核心；

## ✓ 晶核长大：

然后晶核不断长大。随着结晶过程的进行，固相逐渐增多，液相逐渐减少，直至全部转变为固相

结构起伏、能量起伏



**驱动力 Driving force**：固、液两相的自由能之差  $\Delta G = G_S - G_L$  就是结晶的驱动力

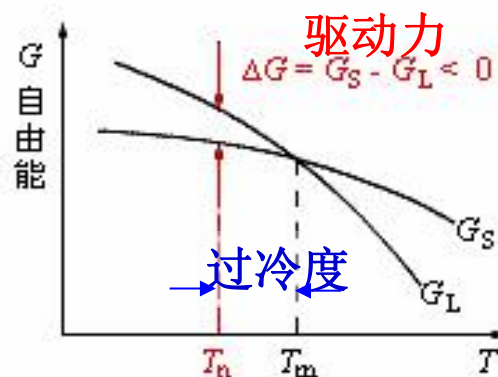
在恒温、恒压的条件下，单位体积的液体与固体的自由能之差为：

$$\Delta G_V = \frac{-L_m \Delta T}{T_m}$$

“-” — 表示由液态转变为固态自由能降低；

$L_m$  — 熔化潜热；

$\Delta T = T_m - T$  — 过冷度 Undercooling



自由能随温度变化示意图

✚ 过冷度  $\Delta T$  越大，结晶的驱动力也就越大；  $\Delta T = 0$ ， $G_V = 0$ ，即没有驱动力，结晶不能进行

✚ 结晶的热力学条件：结晶必须有一定的过冷度（热过冷）

# 形核 Nucleation

**金属结晶时，形核方式有两种：**

➤ **均匀形核 Homogeneous nucleation:**

指在均匀单一的液相中形成固相结晶核心的过程

➤ **非均匀形核 Heterogeneous nucleation :**

由于外界因素，如杂质颗粒、铸型内壁等，促进结晶晶核的形成

# 均匀形核的自由能变化

在过冷的条件下，金属液体中晶胚的形成和增大，将引起系统自由能变化：

- 转变为固态的那部分体积，引起自由能下降；
- 晶胚与液相之间增加的界面，造成自由能（表面能）增大

设单位体积自由能的下降为  $\Delta G_v$  ( $\Delta G_v < 0$ )，单位面积的表面能为  $\sigma$ ；假设晶胚为球体，半径为  $r$ ，则过冷条件下形成一个晶胚时，系统自由能的变化为：

$$\Delta G = \frac{4}{3}\pi r^3 \Delta G_v + 4\pi r^2 \sigma$$

# 临界晶核

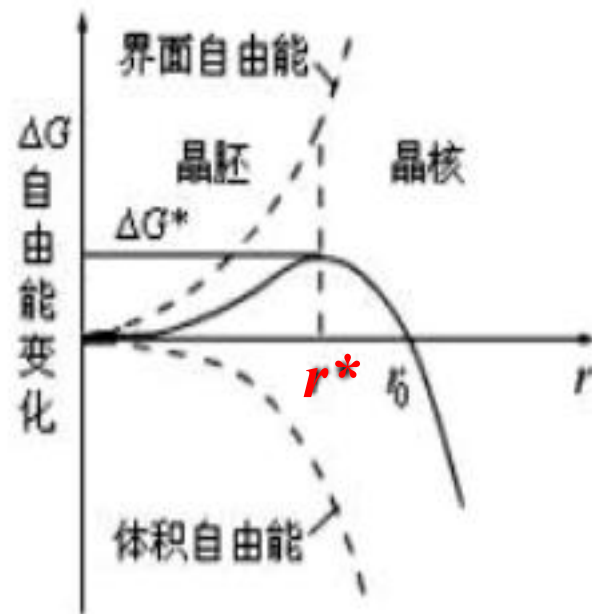
**临界晶核：**过冷金属液体中的晶胚，只有大于一定尺寸 $r^*$ 后，才能稳定存在并继续长大，即实现晶胚向晶核的转变

令  $\frac{d\Delta G}{dr} = 0$ ，则可求得  $r^*$ ：

$$r^* = -\frac{2\sigma}{\Delta G_V} = \frac{2\sigma \cdot T_m}{L_m \cdot \Delta T}$$

✚ 随过冷度  $\Delta T$  增大，临界晶核半径减小。即金属液体中会有更多的晶胚可以成为晶核，形核的几率增大

✚ 对于纯铜的均匀形核，一个临界晶核大约包含200个原子



自由能变化与晶胚（核）  
半径的关系

# 形核率 Nucleation rate

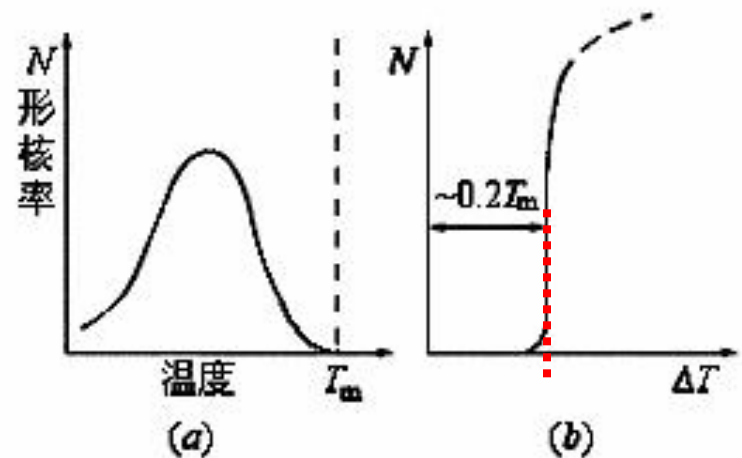
**形核率：**是指在单位时间内、单位体积的金属液体中形成的晶核数

$$\dot{N} = A \exp\left(-\frac{\Delta G^*}{kT}\right) \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right)$$

$A$  — 常数约为 $10^{35}$ ;  
 $\exp\left(-\frac{Q}{kT}\right)$  — 约为 $10^{-2}$ ;  
 $\Delta G^*$  — 临界形核功

均匀形核的形核率主要受**过冷度**的控制，然而，过冷度的影响却是**两个矛盾的方面**：

- ✓ 随过冷度增大， $r^*$ 和 $\Delta G^*$ 减小，有利于形核；
- ✓ 随过冷度增大（温度降低），原子从液相向晶胚扩散的速率降低，不利于形核



形核率 $N$ 与温度(a)及过冷度(b)的关系

- ✦ 如图，金属的结晶在达到某一过冷度（ $\sim 0.2T_m$ ）时， $N$ 急剧上升
- ✦ 均匀形核所需的过冷度，**Fe**为**295°C**、**Ni**为**319°C**，过冷度较大！



# 非均匀形核原理

设一个晶核  $\alpha$ ，在已有固相  $W$  的平面上形成， $L$  表示液相（如图），晶核  $\alpha$  的形状是半径为  $r$  的球冠，球冠底圆半径为  $R$

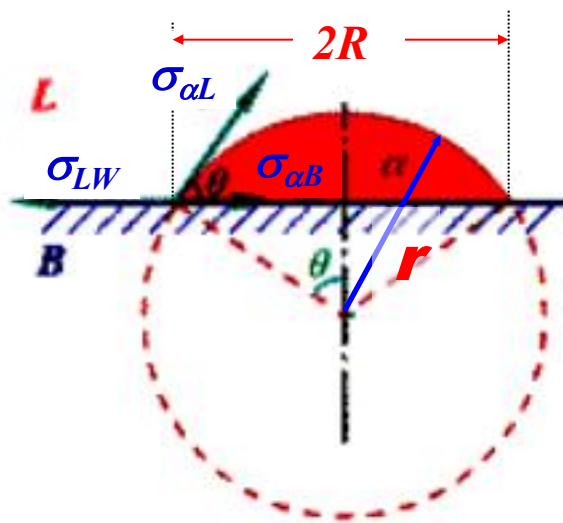
此晶核形成时，自由能的变化为：

$$\Delta G = \Delta G_t + \Delta G_s \quad (1)$$

$\Delta G_t$  — 体积自由能变化（下降）

$\Delta G_s$  — 表面自由能的变化（增加）

✚ 晶核形成后，不仅增加了晶核  $\alpha$  与液相  $L$  之间的 ( $\alpha$ - $L$ ) 界面，而且还增加了一个晶核  $\alpha$  与原固相  $W$  之间的 ( $\alpha$ - $W$ ) 界面，但是，减少了一个与后者面积相同的 ( $W$ - $L$ ) 界面



非均匀形核示意图

此晶核形成时，表面自由能的变化为：

$$\Delta G_s = A_{\alpha L} \cdot \sigma_{\alpha L} + A_{\alpha W} \cdot \sigma_{\alpha W} - A_{\alpha W} \cdot \sigma_{LW} \quad (2)$$

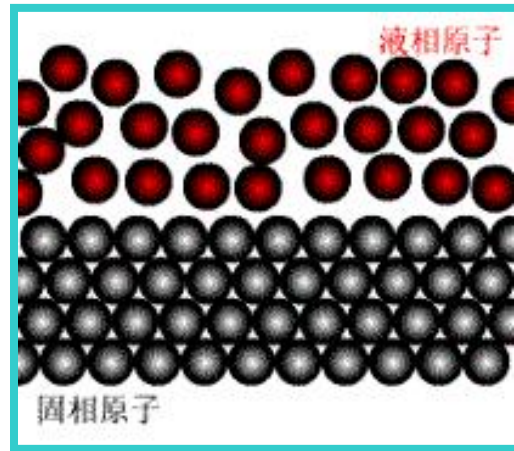
$A$  — 球冠表示面积；  $\sigma$  — 单位界面能（用表面张力表示）

# 晶体长大 Crystal Growth

- 晶核形成后，立即开始长大。晶体长大就是液相原子向固相转移（扩散）的过程，即通过液体中单个原子或若干个原子同时依附（吸附）到晶体的表面上，并按照晶面原子排列的要求与晶体表面原子结合起来。
- 固-液界面的微观结构必然影响晶体的长大方式。
- 固-液界面处的温度低于熔点一定值，即具有一定的过冷度，是晶体得以长大的必要条件。过冷度越大，晶体长大率度越快。
- 晶体长大的方式和长大速率对金属的结晶组织影响很大。

## 光滑界面（小平面对界面）：

指固相表面为基本完整的原子密排面，固液两相截然分开，从微观上看界面是光滑的，但是从宏观来看，界面呈锯齿状的折线。



微观

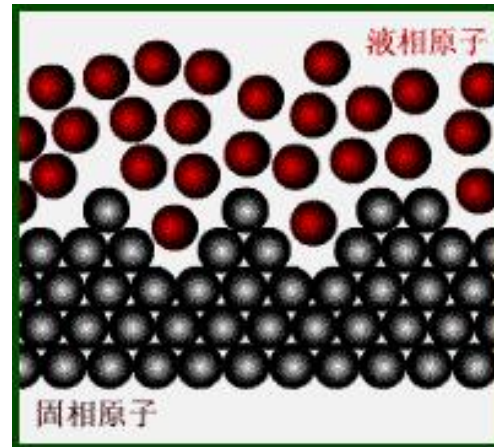


宏观

从微观上划分界面！

## 粗糙界面：

在微观上高低不平、粗糙，存在几个原子厚度的过渡层，但是宏观上看，界面反而是平直的。



微观



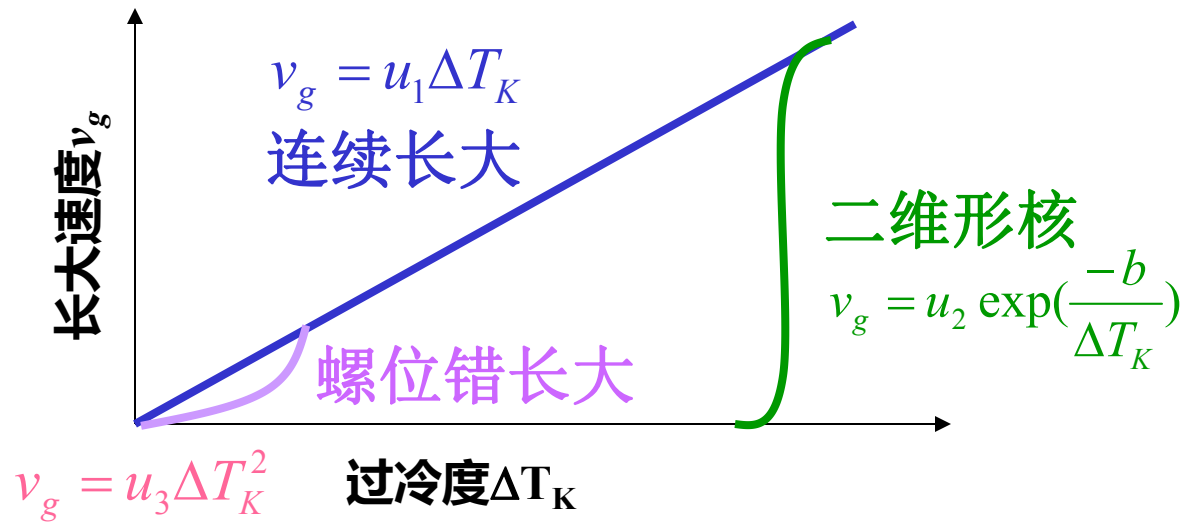
宏观

# 晶体长大方式和生长速率

- 晶体长大也需要一定的过冷度。长大所需的界面过冷度称为动态过冷度，用 $\Delta T_k$ 表示
- 具有光滑界面的物质，其 $\Delta T_k$ 约为 $1\sim 2^\circ\text{C}$ ；具有粗糙界面的物质， $\Delta T_k$ 仅为 $0.01\sim 0.05^\circ\text{C}$
- 不同结构类型的界面，具有不同的长大机制

# 晶体长大机制比较

— 长大速率  $v_s$  过冷度



# 结晶动力学

✓ 约翰逊 - 梅尔 Johnson-Mehl 动力学方程：

$$\varphi_r = 1 - \exp\left(-\frac{\pi}{3} N v_g^3 t^4\right)$$

$\varphi_r$  - 已转变晶核体积分数； $N$  - 形核率； $v_g$  - 长大速率； $t$  - 时间

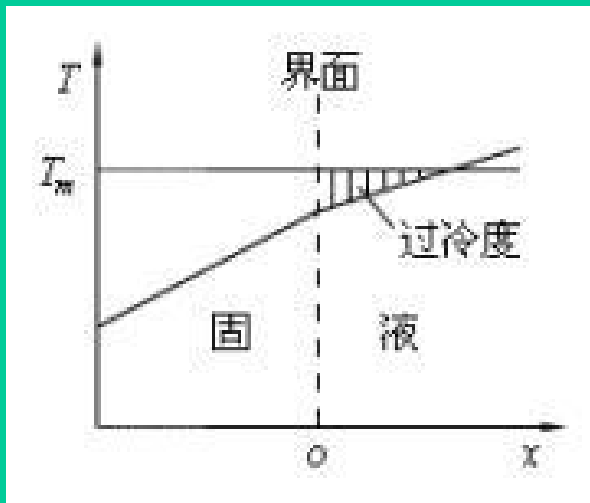
✓ 阿弗拉密 Avrami 方程： $\varphi_r = 1 - \exp(-kt^n)$

$\varphi_r$  - 已转变晶核体积分数； $k$  - 常数； $n$  - 阿弗拉密指数，与相变机制相关，取 1~4

✚ 阿弗拉密方程，是描述结晶和固态相变中转变动力学的唯象方程

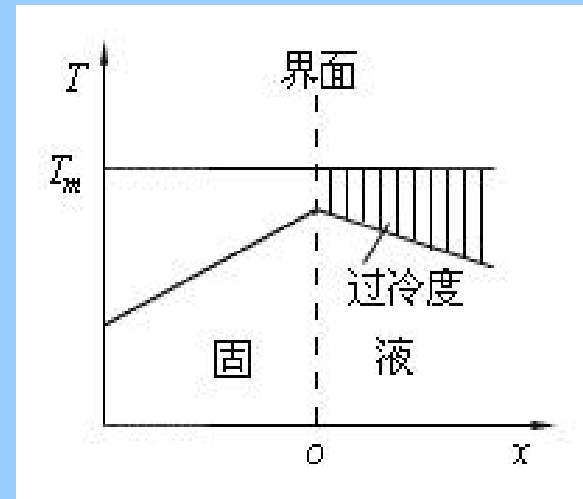
# 纯金属晶体的生长形态

在正温度梯度：平面式推进



正温度梯度示意图

负温度梯度：树枝状生长



负温度梯度示意图

# 固溶体的凝固理论

液态合金的凝固过程，除了遵循金属结晶的一般规律外，由于第二组元的加入，溶质原子要在液、固两相中重新分布，这对合金的凝固方式和晶体的生长形态产生重要的影响，而且会引起宏观偏析和微观偏析

正常凝固方程：在非平衡凝固过程中，固相质量浓度随凝固距离的变化规律

$$\rho_s = \rho_0 k_0 \left(1 - \frac{x}{L}\right)^{k_0 - 1}$$

$\rho_s$  — 非平衡凝固时固相质量浓度  
 $\rho_0$  — 最初结晶的液相质量浓度（原合金质量浓度）  
 $k_0$  — 平衡分配系数；  $L$  — 铸锭长；  $x$  — 凝固距离



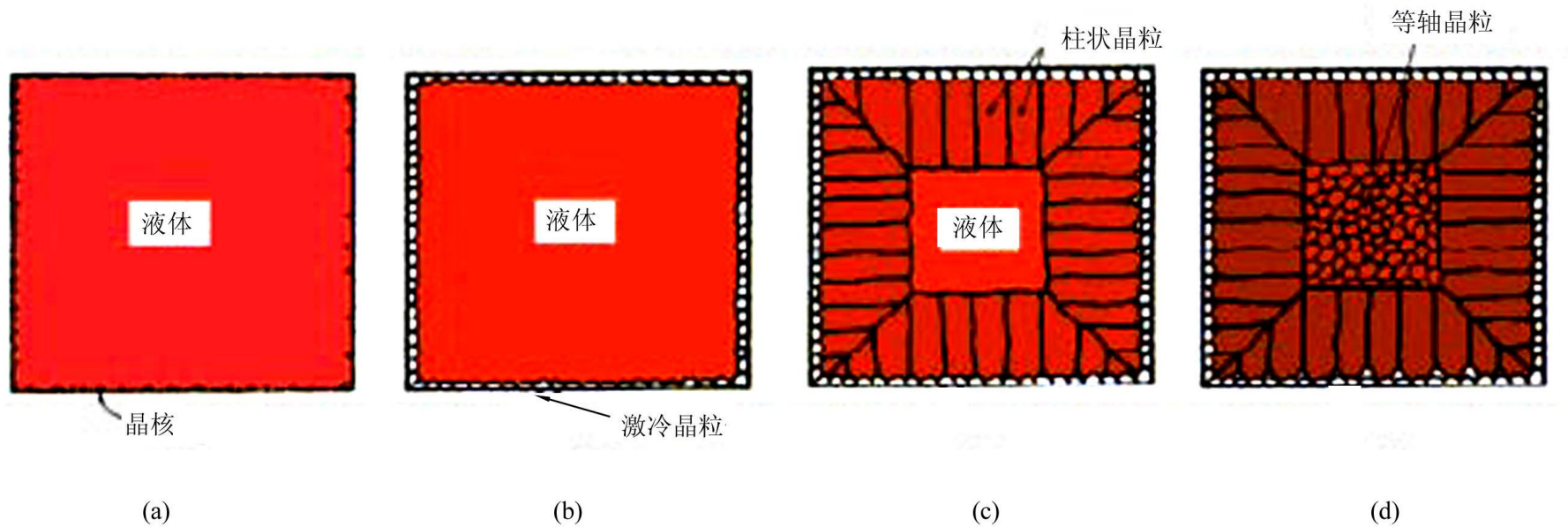
# 合金凝固中的成分过冷

**成分过冷：**在合金凝固过程中，由于液相中溶质分布发生变化而改变了凝固温度（理论值），与界面前沿液体中的实际温度产生过冷，称为**成分过冷**

**形成条件：**能否产生成分过冷及程度，取决于液-固界面前沿液体中溶质浓度分布和实际温度分布

**成分过冷、热过冷的区别：**热过冷是液态金属的实际温度低于熔点 $T_m$ 引起的过冷，成分过冷是合金凝固有别于纯金属凝固的主要特征

# 铸锭(件)三晶区的形成



1. 表层细晶区    2. 柱状晶区    3. 中心等轴晶区

# 研究扩散的有两种方法

**1、表象理论：**根据所测量的参数描述物质传输的速率和数量等（宏观层面）

菲克第一定律、菲克第二定律、达肯方程等

**2、原子理论：**扩散过程中原子是如何迁移的（微观层面）

扩散的微观机制、影响因素原子层次分析等

# 菲克第一定律 Fick's first law

1855年，菲克就提出了：扩散通量 $J$ 与该截面处的浓度梯度  $\frac{d\rho}{dx}$  成正比，也就是说，浓度梯度越大，扩散通量越大。数学表达式如下：

$$J = -D \frac{d\rho}{dx}$$

$D$  — 扩散系数( $\text{m}^2/\text{s}$ )； $\rho$  — 扩散物质浓度； $\frac{d\rho}{dx}$  — 浓度梯度；  
“ $-$ ”号 — 表示扩散方向为浓度梯度的反方向，即扩散组元由高浓度区向低浓度区扩散。

 **菲克第一定律，只适合稳态扩散的场合**

# 扩散系数

是描述扩散速度的重要物理量，它相当于浓度梯度为1时的扩散通量， $D$  值越大则扩散越快。

遵循阿累尼乌斯 Arrhennius 方程：

$$D = D_0 e^{-\frac{Q}{RT}}$$

$D_0$  — 扩散常数( $\text{m}^2/\text{s}$ )，与温度无关，主要决定于晶体结构和原子振动频率；

$Q$  — 扩散激活能( $\text{J/mol}$ )； $R$  — 气体常数； $T$  — 扩散温度( $\text{K}$ )

✚ 对于固态金属中的扩散，扩散系数  $D$  值都是很小。例如， $1000^\circ\text{C}$ 时碳在  $\gamma$ -Fe中的扩散系数  $D$  仅为 $10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$  数量级。

✚ 固溶体中溶质原子的扩散系数  $D$  是随浓度变化，为了使求解扩散方程简单些，往往近似地把  $D$  看作恒量处理。

# 一些纯金属的熔点和激活能

类型	金属	T <sub>m</sub> /K	Q(KJ·mol <sup>-1</sup> )
bcc (碱金属)	Rb	312	39.4
	K	337	40.8
	Na	371	43.8
	Li	454	55.3
bcc (其它金属)	β -Ti	1933	251.2
	Cr	2130	308.6
	Ta	3269	413.3
	W	3683	641.0
fcc	Al	933	142.0
	Ni	1726	279.7
	γ -Fe	1805	284.1
	Pt	2046	278.4
hcp	Zn // c	692	184.6
	Zn ⊥ c		176.9
	Mg // c	922	200.3
	Mg ⊥ c		279.7

# 柯肯达尔效应

## — 置换型固溶体中的扩散

**柯肯达尔 Kirkendall 效应：**对于置换固溶体，即溶剂与溶质原子半径相差不大时，原子扩散时必须与相邻原子作置换，两者的可动性大致属于同一数量级，须考虑溶剂和溶质原子的不同扩散速率。这种不等量扩散现象称为柯肯达尔效应。

**达肯 Darken 方程：**柯肯达尔效应的唯相解析，仍具有菲克第一定律的形式，即：

$$\begin{cases} J_1 = -\tilde{D} \frac{d\rho_1}{dx} \\ J_2 = -\tilde{D} \frac{d\rho_2}{dx} \end{cases} \quad \tilde{D} = D_1 x_2 + D_2 x_1$$

$\tilde{D}$  — 互扩散系数，来代替两种原子的扩散系数  $D_1$ 、 $D_2$

$J_1$ 、 $J_2$  — 为两种原子的扩散通量，两者方向相反

$x_1$ 、 $x_2$  — 分别代表两种原子在合金中的摩尔分数

# 菲克第二定律 Fick's second law

在非稳态扩散过程中，在距离 $x$ 处，浓度随时间的变化率 $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ 等于该处的扩散通量 $J$ 随距离变化率 $\frac{\partial J}{\partial x}$ 的负值，即：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x}$$

将  $J = -D \frac{d\rho}{dx}$  代入，得菲克第二定律的数学表达式：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{d\rho}{dx} \right)$$

偏微分  
方程！

若扩散系数 $D$ 与浓度 $\rho$ 无关，则简化为： $\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$

✚ 对于非稳态扩散，要应用菲克第二定律

✚ 实际上，大多数扩散过程都是在非稳态条件下进行



# 菲克第二定律的实际应用

## 一端成分不受扩散影响的扩散体

原始碳浓度为 $\rho_0$ 的渗碳零件，可作为半无限长的扩散体，远离碳源的一端的碳浓度为 $\rho_0$ ，碳源（渗碳气氛）浓度为 $\rho_s$ ，扩散时间为 $t$ ，渗层深度 $x$ ，扩散系数为 $D$

初始条件：  $t = 0, x \geq 0, \rho = \rho_0$

边界条件：  $t > 0, x = 0, \rho = \rho_s$

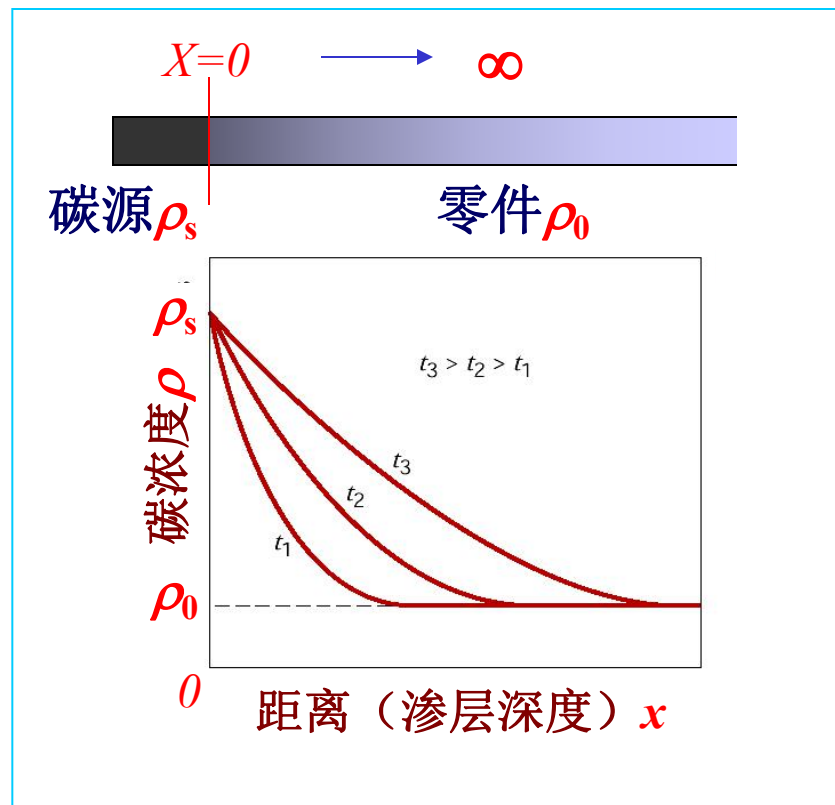
$x = \infty, \rho = \rho_0$

则浓度 $\rho(x,t)$ 可表示为（求解过程见讲义）：

$$\rho(x,t) = \rho_s - (\rho_s - \rho_0) \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$



$$t \propto x^2$$
$$D \cdot t = \text{常数}$$



# 扩散的热力学分析

**下坡扩散：**菲克第一定律描述了物质从高浓度向低浓度扩散的现象，扩散的结果导致浓度梯度的减小，使成份趋于均匀

**上坡扩散（逆向扩散）：**物质也可能从低浓度区向高浓度区扩散，扩散的结果提高了浓度梯度

**扩散的驱动力：**并不是浓度梯度，而扩散前后自由能之差（化学势梯度）

# 固态扩散的分类

- 化学扩散、互扩散 **interdiffusion**: 依赖于**浓度梯度**的扩散  
包括：原子扩散、反应扩散、上坡扩散、下坡扩散
- 自扩散 **self-diffusion**: 仅由**热振动**而产生扩散，不依赖于浓度梯度的扩散
- ✚ 互扩散、自扩散的区别：在于扩散前后**是否有浓度的变化**，有浓度变化则为互扩散（化学扩散），无浓度变化则为自扩散

# 扩散机制 Diffusion mechanisms

## — 扩散原子理论

扩散机制，就是扩散原子在晶体点阵中迁移的具体方式  
包括：

- 1、交换扩散（**exchange diffusion**）
- 2、间隙扩散（**interstitial diffusion**）
- 3、空位扩散（**vacancy diffusion**）
- 4、晶界及表面扩散（**grain boundary or surface diffusion**）
- 5、位错扩散（**dislocation diffusion**）

# 第五章 形变与再结晶

## 1、概念

应力、应变、应力 - 应变曲线、滞弹性、弹性模量、泊松比、屈服强度、抗拉强度、塑性、滑移、孪生、滑移带、临界分切应力、加工硬化、柯氏气团、形变织构、残余应力、金属强化机制、断裂（脆性、延性）、回复、再结晶、多边化、二次再结晶、弓出形核。

## 2、计算、分析、判断

形变相关物理量计算、相关机理分析判断。

# 晶体的塑性变形

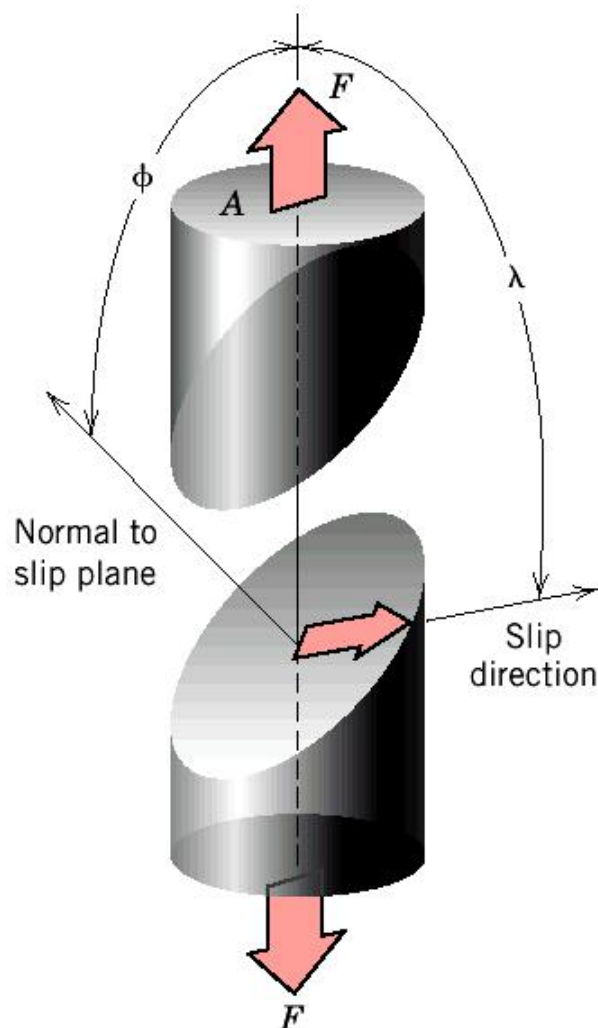
## — 单晶体

单晶体的塑性变形，主要通过滑移，还有孪生、扭折等

### 变形的微观过程

- 弹性变形—外力克服单晶原子间的键合力，使原子偏离其平衡位置，试样开始伸长
- 晶面滑移—当外力大于屈服极限后，沿单晶的某一特定晶面原子的产生相对滑移。随应力的增加，发生滑移的晶面增加，塑性变形量加大。

滑移系 = 滑移面 + 滑移方向



## 临界分切应力

$$\tau = \frac{F}{A} \cos \phi \cos \lambda$$

宏观起始  
屈服强度

取向因子

# 滑移的位错机制

## — 点阵阻力（派-纳力）

- 实测晶体滑移的临界切应力，较理论计算低3~4个数量级，表明晶体滑移是借助位错在滑移面上运动而逐步实现的
- 晶体滑移需克服点阵阻力，由派尔斯 *R. Peierls* 和纳巴罗 *F.R.N. Nabarro* 首先估算了此阻力，即派-纳力  $\tau_{N-P}$ ，相当于简单立方晶体中使刃形位错运动所需的临界分切应力：

$$\tau_{P-N} = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left[-\frac{2\pi d}{(1-\nu)b}\right] = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left[-\frac{2\pi W}{b}\right]$$

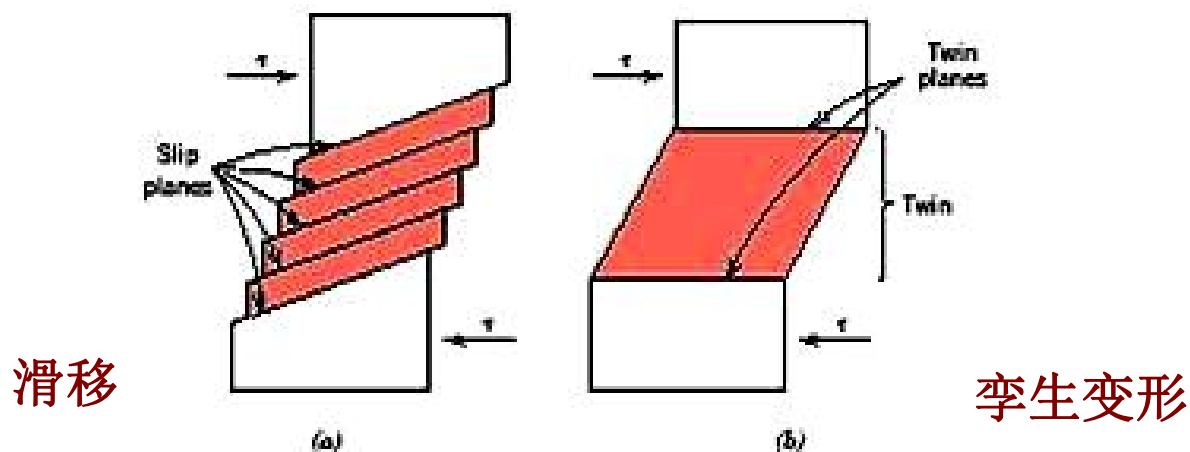
$d$  — 滑移面的面间距；  $b$  — 柏氏矢量（滑移方向上的原子间距）；

$\nu$  — 泊松比；  $W = \frac{d}{1-\nu}$  — 位错宽度



# 滑移与孪生变形的区别

- 孪生通过晶格切变使晶格位向改变，使变形部分与未变形部分呈镜面对称；而滑移不引起晶格位向改变
- 孪生时，相邻原子面的相对位移量小于一个原子间距；而滑移时滑移面两侧晶体的相对位移量是原子间距的整数倍
- 孪生所需要的临界切应力比滑移大得多，变形速度大得多，接近声速
- 孪生可在位错滑移受阻时调整晶体的变形能力

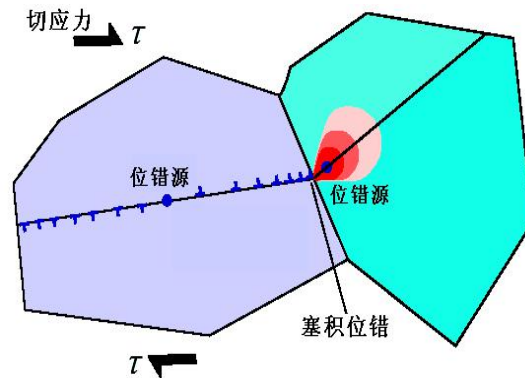
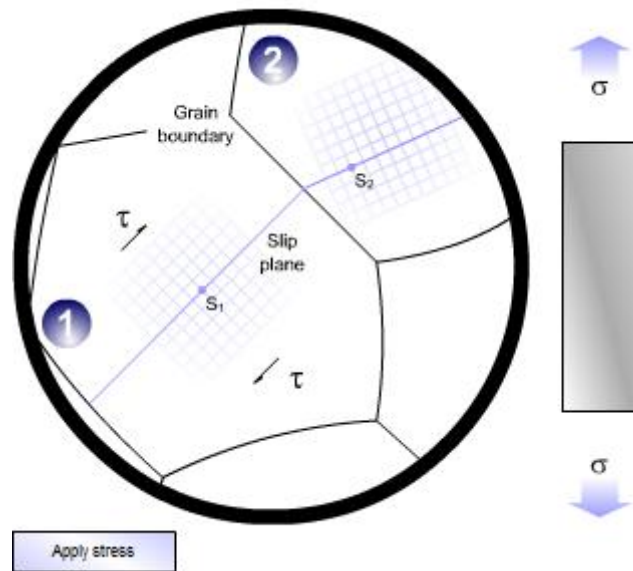


# 晶体的塑性变形

## — 多晶体

### 晶界的影响：

晶界上原子排列不规则、点阵畸变、两侧滑移方向和滑移面不一致，因此，室温下晶界对滑移具有**阻碍效应**。位错在晶界处的**位错塞积效应**抑制了位错源的开动。



增加了多晶体金属的  
宏观塑性变形抗力

# 金属的强化机制：与约束和钉扎位错的滑移有关

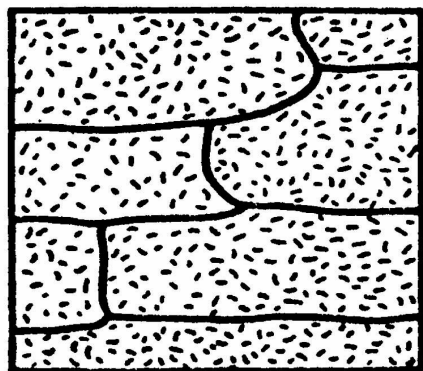
1、固溶强化：柯氏*Cottrell*气团

2、加工硬化：冷加工程度，  $CW\% = \frac{A_0 - A}{A} \times 100\%$

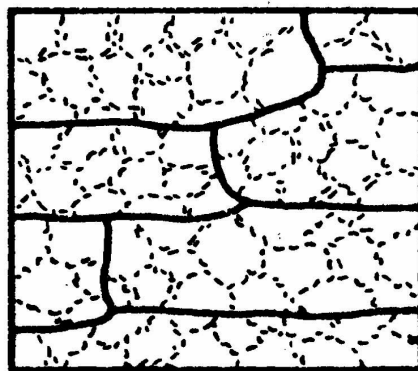
3、细晶强化：*Hall-Petch* 公式  $\sigma_y = \sigma_0 + k_y / \sqrt{d}$

4、弥散强化：

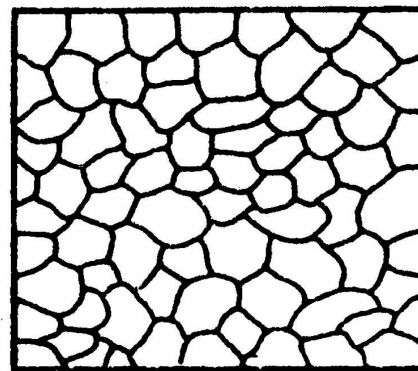
# 冷变形金属的加热 — 组织变化



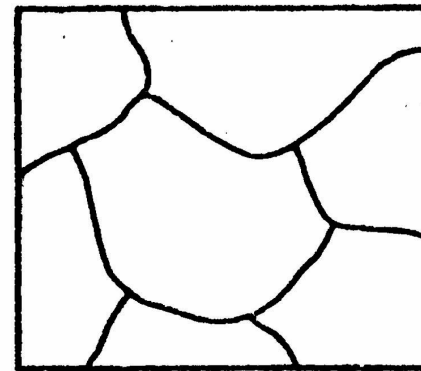
(a) 冷变态  
*Cold work*



(b) 回复  
*Recovery*



(c) 再结晶  
*Recrystallization*



(d) 晶粒长大  
*Grain growth*

回复：晶粒的形态、大小与变态相同，但亚结构、性能已有变化

再结晶：出现无畸变的等轴晶粒，逐步取代变形晶粒

晶粒长大：再结晶结束后的晶粒继续长大

# 冷变形金属的加热

## — 性能变化

### — 强度和硬度：

回复阶段变化小；

再结晶阶段变化大(与位错密度有关)

### — 电阻：

回复阶段已有大的变化(与点缺陷有关)

### — 内应力：

回复阶段消除大部或全部内应力；

再结晶阶段全部消除微观内应力

### — 亚晶粒尺寸：

回复阶段变化小；

接近再结晶时，显著增大

### — 密度：

再结晶阶段急剧增高(缺陷减少)

### — 储存能的变化：

再结晶阶段释放多

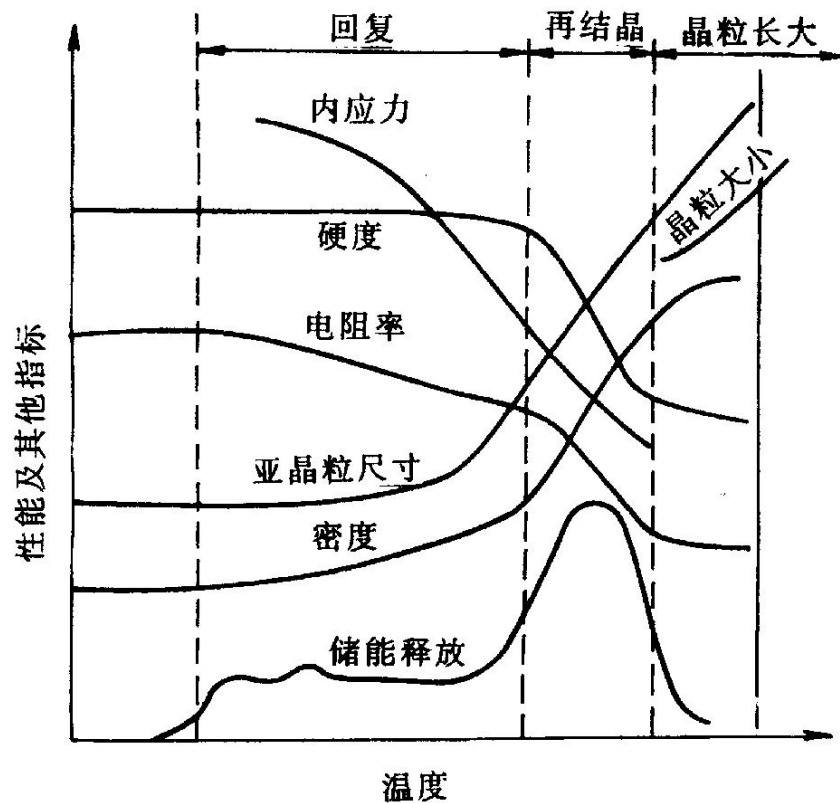


图 5.46 冷变形金属退火时某些性能的变化

# 回复 *Recovery*

**现象：**除内应力大大减少外，在光学显微镜下看不到金相组织的变化。在电子显微镜下观察，点缺陷有所减少，位错在形态上也有变化，但数量没有明显减少

## 回复阶段退火的作用：

- 提高扩散
- 促进位错运动
- 释放内应变能

## 回复退火产生的结果：

- 电阻率下降
- 硬度、强度下降不多
- 降低内应力

# 再结晶 *Recrystallization*

冷变形金属加热到一定温度后，在原变形组织中重新产生了无畸变的等轴新晶粒，性能发生明显的变化、并恢复到变形前状况的过程

**现象：**显微组织重新改组的过程，原来的晶粒全部被新的小晶粒所代替，基本消除加工硬化的影响

**驱动力：**变形金属经回复后未被释放的储存能（相当于变形总储能的90%）

**过程：**再结晶的形核和长大过程

**特点：**无晶体结构、化学成分的变化，不是相变；新晶粒长大通过短程扩散；再结晶程度依赖于温度和时间

# 再结晶形核模式

- 晶界弓出形核（应变诱导晶界移动、凸出形核）
- 亚晶合并机制
- 亚晶迁移机制



# 再结晶温度

**再结晶温度：**一定条件下，冷变形金属开始进行再结晶的最低温度

**定义1：**一般以显微镜中出现第一颗新晶粒的温度，或硬度下降50%所对应的温度

**定义2：**工业上通常以经过大变形量（70%以上）的冷变形金属，经1小时退火完成再结晶（转变量大于95%）所对应的温度

表 5.8 一些金属的再结晶温度( $T_R$ ) (工业纯, 经强烈冷变形, 在 1h 退火后完全再结晶)

金 属	再结晶温度 /°C	熔点/°C	( $T_R/K$ )/( $T_m/K$ )	金 属	再结晶温度 /°C	熔点/°C	( $T_R/K$ )/( $T_m/K$ )
Sn	<15	232	—	Cu	200	1083	0.35
Pb	<15	327	—	Fe	450	1538	0.40
Zn	15	419	0.43	Ni	600	1455	0.51
Al	150	660	0.45	Mo	900	2625	0.41
Mg	150	650	0.46	W	1200	3410	0.40
Ag	200	960	0.39				

通常再结晶温度在  $(0.35 \sim 0.5) T_m$  , 最高可达  $0.7 T_m$

# 晶粒长大

晶粒长大：再结晶结束后，材料通常得到细小等轴晶粒，  
若继续提高加热温度或延长加热时间，引起晶  
粒进一步长大的现象

驱动力：总晶界能的降低

按特点分类：

- 正常长大：大多数晶粒几乎同时逐渐均匀长大
- 异常长大：少数晶粒突发性的不均匀长大

# 再结晶组织

具有变形组织的金属，经再结晶后的新晶粒仍具有择优取向

再结晶组织与变形组织的关系：

- 与原有的组织相一致（类似遗传）；
- 原有组织消失而代之以新的组织（类似变异）；
- 原有组织消失不再产生新的组织

再结晶组织的形成机制

- 定向生长理论：晶核位向各异，只有特殊位向的容易长大
- 定向形核理论：再结晶晶核具有择优取向

# 第六章二元相图

## 1、概念

组元、相、相区、相图、自由度、相律、匀晶转变及条件、共晶转变、包晶转变、平衡与非平衡凝固、枝晶偏析、杠杆定律、共析转变、稳定化合物、包析转变、伪共晶、离异共晶。

Fe-Fe<sub>3</sub>C相图（能够默画，标注P、S、E、C点成分及共晶、共析转变温度，并用相和组织标注相图），铁素体、奥氏体、渗碳体、一次渗碳体、二次渗碳体、三次渗碳体、珠光体、莱氏体、变态莱氏体、工业纯铁、钢、铸铁。

## 2、分析、计算、判断

利用杠杆定律计算成分、利用相律判断、Fe-Fe<sub>3</sub>C相图中特定成分的冷却过程及组织形成。

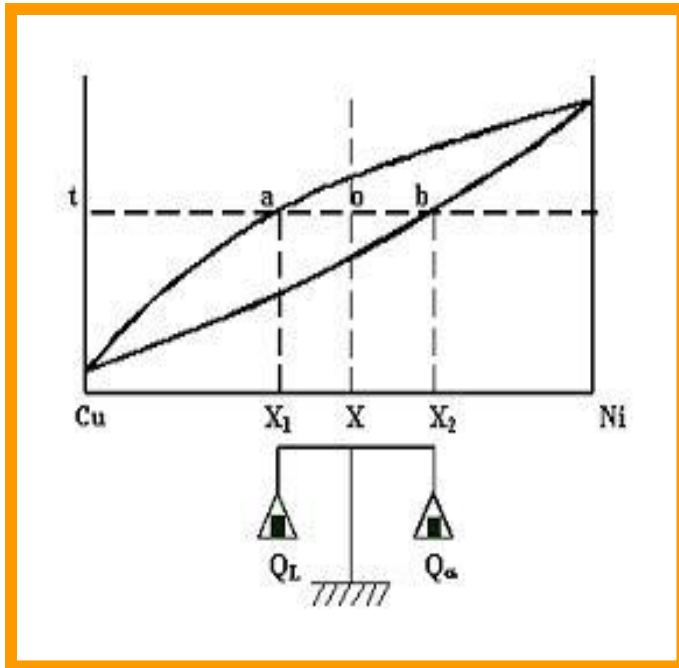
## 相律： $F = C - P + 1$ （压力确定）

$F$ ——系统的自由度数，即不影响系统状态的条件下，能够独立变化的因素数

$C$ ——组成物的组元数

$P$ ——系统中能够同时存在的相数

## 杠杆定律：

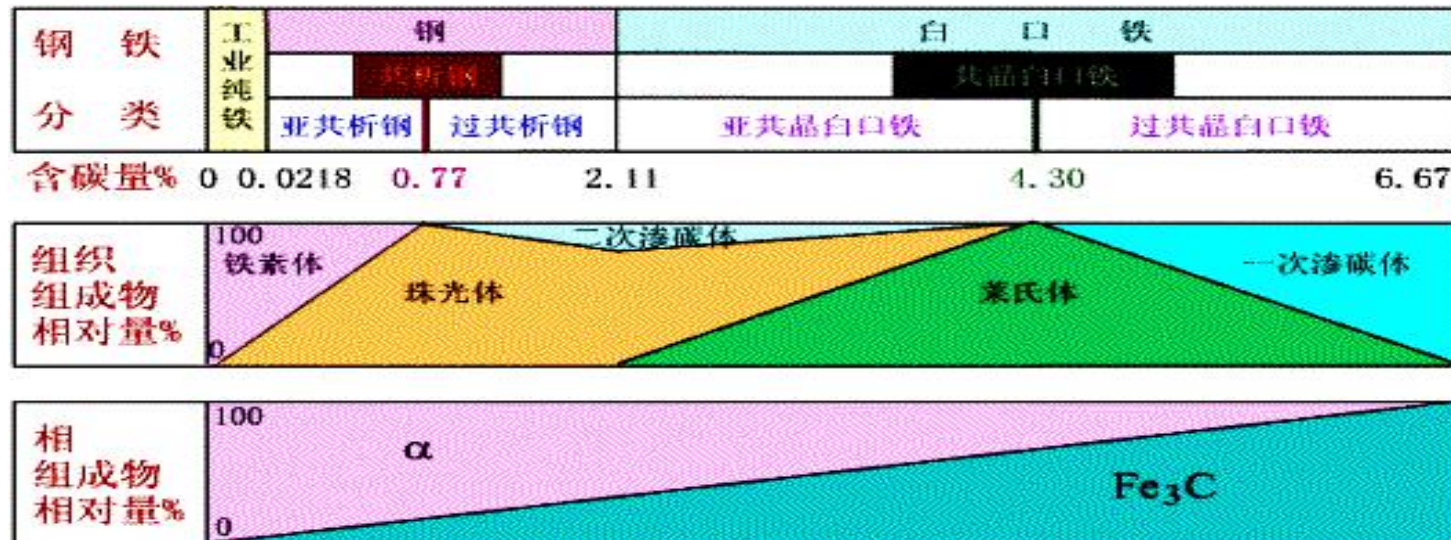


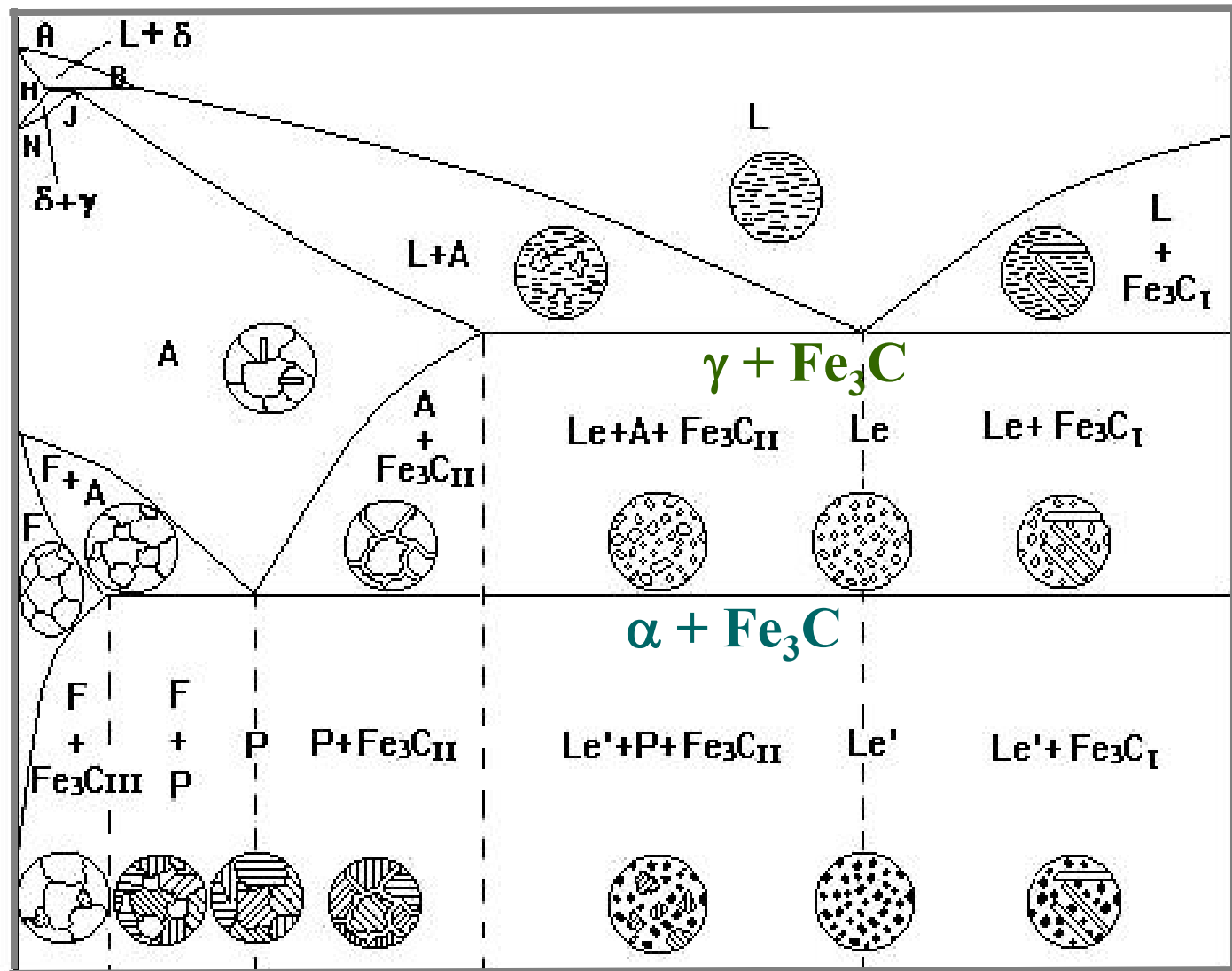
两相的重量比为：

$$\frac{Q_L}{Q_\alpha} = \frac{xx_2}{x_1x} (= \frac{ob}{ao})$$

# 组织组成物与相

- ◆ **组织组成物**是指组成合金显微组织的独立部分，差别主要在形态上。如 $\alpha_I$ 、 $\alpha_{II}$ 和共晶 $\alpha$ 的结构成分相同，属同一个相，但它们的形态不同，分属不同的组织组成。
- ◆ **相**与相之间的差别主要在结构和成分上。





Fe

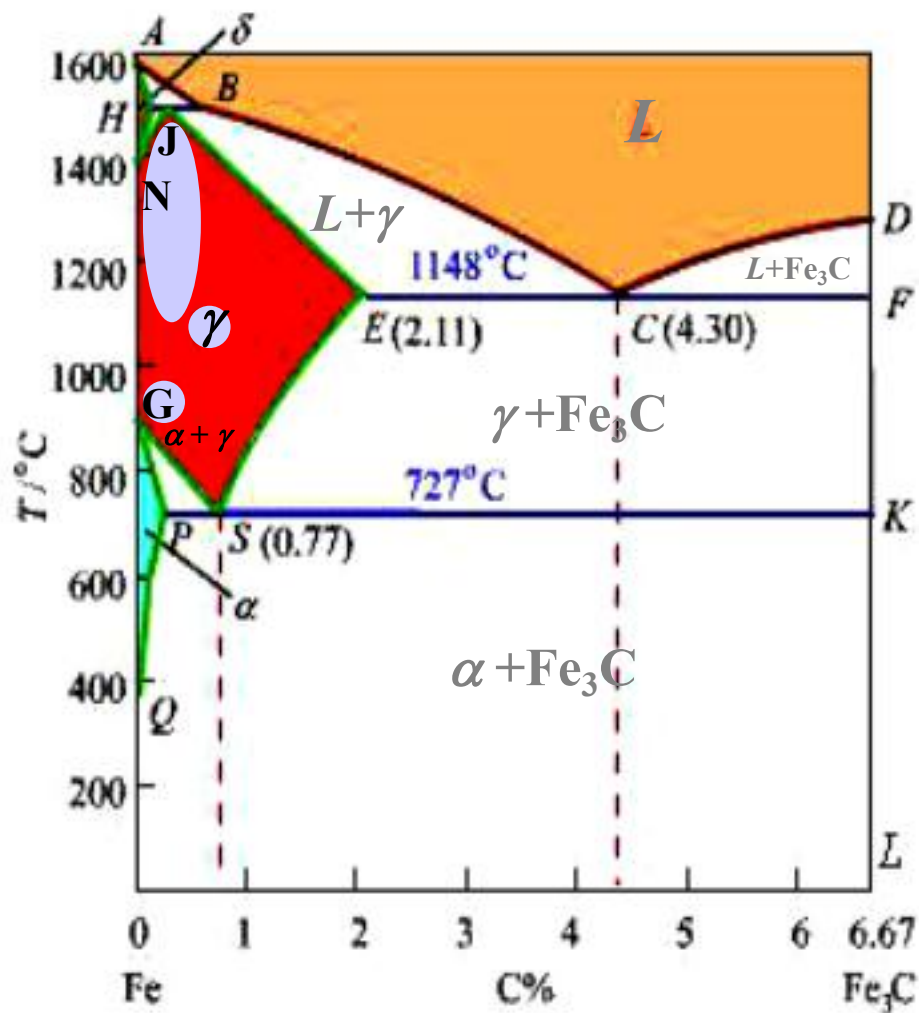
C%

$Fe_3C$

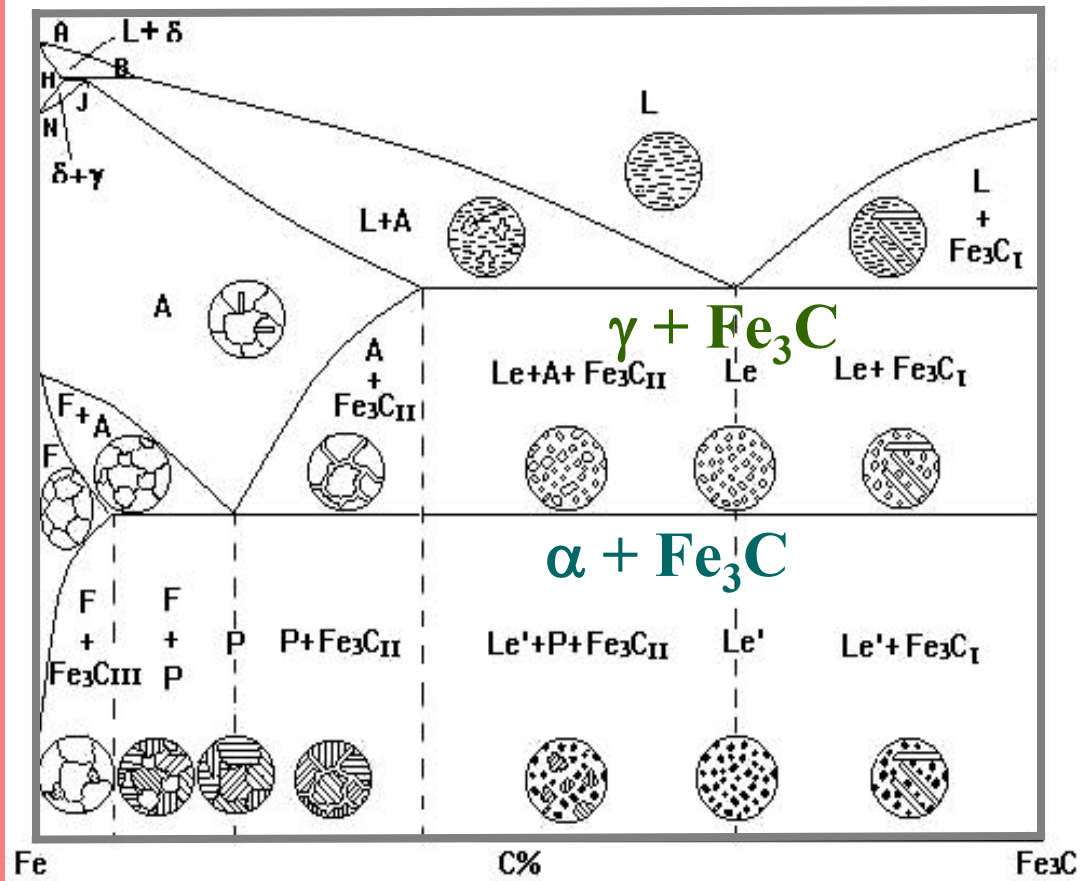


# 铁碳合金相图

符号	T/℃	C %	说 明
A	1538	0	纯铁的熔点
B	1495	0.53	包晶转变时液相成分
C	1148	4.30	共晶点 $L_c$ $\gamma_E + Fe_3C$
D	1227	6.69	渗碳体的熔点
E	1148	2.11	碳在 $\gamma$ -Fe 中的最大溶解度
F	1148	6.679	渗碳体的成分
G	912	0	纯铁 $\alpha$ $\gamma$ 转变温度
H	1495	0.09	碳在 $\delta$ -Fe 中的最大溶解度
J	1495	0.17	包晶点 $L_B + \delta_H$ $\gamma_J$
K	727	6.69	渗碳体的成分
N	1394	0	纯铁 $\gamma$ $\delta$ 转变温度
P	727	0.0218	碳在 $\alpha$ -Fe 中的最大溶解度
S	727	0.77	共析点 $\gamma_s$ $\alpha_p + Fe_3C$
Q	室温	0.0008	室温下碳在 $\alpha$ -Fe 中的溶解度







获取更多资讯请关注  
材料人考学微信公众号

