

材料科学基础

——金属作为模型体系探究组织-性能关系

(中文版)

[德] 艾瑞克·杨·密特迈 著
刘永长 余黎明 马宗青 译

Fundamentals of Materials Science

The Microstructure-Property Relationship
Using Metals as Model Systems



机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS

时代教育·国外高校优秀教材精选

材料科学基础

——金属作为模型体系探究组织-性能关系
(中文版)

[德] 艾瑞克·杨·密特迈 著
刘永长 余黎明 马宗青 译
王江涌 主审



机械工业出版社

本书为材料科学基础课程的教学提供了全新的基本概念和基础理论知识体系,精心选择并组织的研究实例增添了读者的兴趣。与以往仅讲授固体物理和固体化学不同,它包含了材料科学的核心知识体系,并对通过模型分述材料显微组织和性能之间的内在联系进行了很好的示范。教材结构上注重深入浅出,便于学生理解和自学。

本书可作为材料科学与工程专业的入门教材,也可作为本科阶段、甚至研究生阶段学习的通用参考书。它介绍了晶体学、点阵缺陷、组织分析、相平衡、相变和力学性能等,还包含了适合于初学者的拓展性内容。

Translation from the english language edition:

“Fundamentals of Materials Science: The Microstructure-Property Relationship Using Metals as Model Systems” by Eric J. Mittemeijer © Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2010. Springer is a part of Springer Science + Business Media.

All Rights Reserved.

本书中文简体字版由 Springer 授权机械工业出版社独家出版。版权所有,侵权必究。

本书版权登记号:图字 01-2011-4266。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学基础:中文版:金属作为模型体系探究组织-性能关系/(德)密特迈著;刘永长,余黎明,马宗青译.一北京:机械工业出版社,2013.2

时代教育·国外高校优秀教材精选

ISBN 978-7-111-40400-2

I. ①材… II. ①密…②刘…③余…④马… III. ①材料科学-高等学校-教材 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 271689 号

机械工业出版社(北京市百万庄大街 22 号 邮政编码 100037)

策划编辑:丁昕祯 责任编辑:丁昕祯 程足芬

版式设计:霍永明 责任校对:张媛

封面设计:张静 责任印制:乔宇

北京机工印刷厂印刷(三河市南杨庄国丰装订厂装订)

2013 年 2 月第 1 版第 1 次印刷

184mm×260mm·25.25 印张·674 千字

标准书号:ISBN 978-7-111-40400-2

定价:55.00 元

凡购本书,如有缺页、倒页、脱页,由本社发行部调换

电话服务

网络服务

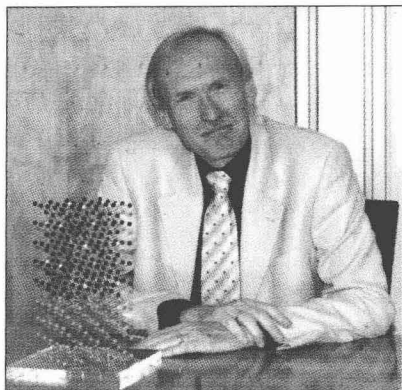
社服务中心:(010) 88361066 教材网:<http://www.cmpedu.com>

销售一部:(010) 68326294 机工官网:<http://www.cmpbook.com>

销售二部:(010) 88379649 机工官博:<http://weibo.com/cmp1952>

读者购书热线:(010) 88379203 封面无防伪标均为盗版

作者简介



Eric Jan Mittemeijer 教授 1950 年生于荷兰哈勒姆。他在代尔夫特理工大学学习“化学工艺”，专业为物理化学，于 1972 年获“ingenieur”学位（相当于理学硕士学位），并于 1978 年在该校获得博士学位。1985 年至 1998 年间，他在代尔夫特理工大学固体化学系担任教授。从 1998 年起，他开始担任位于德国斯图加特的马·普金属研究所所长，同时兼任德国斯图加特大学材料科学系教授、主任及马·普先进材料研究国际学校校长。他带领研究团队在相变领域开拓研究，已在国际期刊上发表（共同发表）600 多篇学术论文。他由于在科研工作中的卓越贡献而获得了很多荣誉。联系方式：e. j. mittemeijer@is. mpg. de.

译者序

一本好书，相伴一生。作为材料科学与工程专业的入门教材，本书对材料科学中的基本概念和原理进行了新颖、全面的阐述。与固体物理和固体化学相关专著不同的是，它偏重于通过建立模型来阐述材料显微组织与性能之间的内在联系，囊括了晶体学、点阵缺陷、显微组织分析、相平衡与相变、力学性能等基本内容，是材料科学与工程专业不可多得的强调基础、注重科学实践和提升原始创新能力的一本好书。

三年前，在我第一时间知道导师艾瑞克·杨·密特迈教授正在为材料科学与工程专业的新生编写一本入门教材的时候，立即闪念要把这个礼物带到我们的课堂，期望我们的学生能站在一位世界著名科学家的视角上来审视材料科学的重要性，树立为材料科学发展而不懈追求的远大理想。我的想法立即得到了机械工业出版社的大力支持，冯春生老师迅速协助洽谈版权转让事宜。该书的翻译过程非常辛苦，但对于已经在材料科学与工程领域学习和实践了二十年的我来说翻译此书更是一个学习、感动和受教育过程。

科学的核心价值在于探索未知世界、发现真理、发展先进技术、改造世界和造福人类。材料科学初学者常常会提出“我能做什么”和“我该怎么做”这两个问题，密特迈教授的这一著作对这两个问题给予了很好的阐释，特别是他精心编写的小花絮更能使我们从历史的角度来理解材料科学的发展和变化，这种贯穿全书的系统思维方式对有志于从事材料科学研究的读者必将产生很好的引领和示范作用。

作为著者的学生，我深刻认识到了本书的精髓在于：“**要知道前方的路，就去问那些走过的人。**”这主要体现在两个方面，①在知识体系构建方面，书中的绝大多数内容包含了原著者本人及同行的最新科研成果，这是国内大多数教科书所欠缺的。我同密特迈教授的合作始于2000年9月，那时我刚去德国科学院金属所做博士后。我之前所从事的科研主要在快速凝固方面，而我们的合作却是从固态块状相变开始的，是他开拓性的视野和对细节的精准把握使得我们深化和更新了对这一传统领域的认识，部分知识也被写入了这本书中。我深信，读者肯定会从本书中得到同样的启发并取得比我更好的成绩。②本书在定性定量了解材料科学基础理论知识方面实现了完美结合。毋庸置疑，近年的大多数材料科学研究或多或少聚焦在新材料研发和工艺技术优化两个方面。本书中密特迈教授所倡导的模型建立与定量（性）分析必将为读者将要开展的材料科学研究提供有益指引和启迪。

本书的翻译出版离不开天津大学为我提供的宽松工作环境和课题组全体员工的辛勤劳动。感谢汕头大学王江涌教授耐心细致地完成了书稿的审校工作；感谢我的同事余黎明副教授和马宗青博士在书稿所负责章节翻译中的尽心尽责；感谢研究生蔡奇、胥大坤、周晓胜、杨旭、霍洁、刘晨曦、马秋佳、谭慧等在原稿翻译、译稿录入和校对方面所做的贡献，他们在完成学习的同时，为确保本书的准确翻译默默奉献了很多很多，我深深感受到了他们追求完美的精神风貌。

在理解与翻译本书的过程中，一些知识的传递未必到位，甚至可能出现一些不应该的错误，对此我代表全体翻译人员深表歉意。认识总是可以通过思考与交流来深化，我希望读者能从原著（作者）寻找正确答案的同时与我们互动交流。欢迎读者对翻译书稿内容进行批评指正，我们的电子邮箱是：ycliu@tju.edu.cn；e.j.mittermeijer@is.mpg.de。

我们深信密特迈教授和我们均会从这种互动交流中收获很多。

译者

2013年1月

为中文版发行所做的序言

本书英文版（Springer, 2010 年）出版后不久，我欣然萌发了将本书翻译成中文的想法。非常感谢我过去的同事、现在的同行和朋友刘永长教授（天津大学）所做的建议，在包括我过去的同行王江涌教授（汕头大学）在内的许多同事和同行的帮助下，迅速完成了翻译工作。

在中文版中，我有机会勘正一些原来英文版中的（小）错误，尤其是一些印刷错误。在此，我特别感谢那些为我纠错的同行。

现在我希望这本书也将在中国材料科学领域得以使用，特别是被学生使用。毋庸置疑，中国材料科学家将对未来材料科学的发展做出重要的贡献。如果本书能促进他们在材料科学的研究中取得成绩的话，这无疑将成为本书的一大成就。

Eric J. Mittemeijer

于斯图加特

2012 年 9 月

前 言

在“材料科学与工程”领域，德语和荷兰语中有一个几乎完全相同的词，分别是“Materialkunde”和“Materiaalkunde”。因此，在利用材料为人类服务，发展相应的基础知识和认知材料性质等方面，可以用一种统一的方式来描述。科学与工程相互交错是这一多学科领域的一个关键特征。然而，正如书名所写，本书的介绍集中在材料科学研究方面，而在材料工程方面的讨论要少得多。这样做有两方面的原因：首先，对任何工程而言，成功的先决条件是要有理论背景，因此，工程领域内的任何研究必须先有一个科学的基础；其次，如果将实际应用材料的合成和处理等方面涵盖进来，会使得本书的内容过于臃肿，或者为控制信息量，而使其过于肤浅。

上述讨论表明这是一本关于材料科学基础的专著，具有基础性的特征。同时这本书意在可作为学习材料科学与工程的初始教程使用，这看起来似乎是一件不可能的事情。作为开始，读者只好放弃许多还不熟练的数学方法，但我确信这并不妨碍对物理和化学的理解。当然这样做，一些深奥理论的重要结果就不得不在没有数学证明的情况下被引入和接受，但为了在这一基础领域内建立一个良好的基础，这也不是什么严重的阻碍。恰恰相反，这将为今后学习各种单独开设的进阶课程做最好的准备，如，量子力学、材料热力学及动力学。如果本书能够令人满意地达成上述初衷，那么读者也将在他们后续的学习过程中应用本书的内容，因为根据本书给出的基础知识，他们能很快地掌握所学新知识的背景。因此，本书所涵盖的内容比关于材料科学一般介绍性的课程所涉及的内容更为全面。换句话说，本书可为研习相关专题的高级教科书提供必要的准备，如“化学键”、“扩散”和“晶格缺陷”等，这些专题在本书中只是以章节形式进行论述。这样的教科书不乏其数，但在我看来，目前有关材料科学领域的介绍教程不是太肤浅就是太抽象，因此我确实觉得有必要编写本书。

秉承上述理念，我在编写本书的时候有时也要做一些艰难选择。这体现在一些专题没有被纳入本书。例如，在位错动力学（第5章），建立在吉布斯自由能组分相关性基础上的相图推导（第7章），柯肯达尔效应和相应的达肯方法（第8章）以及（本征）弹性各向异性（第11章）等方面没有进行定量讨论。这些内容书中确有涉及，且对材料学家至关重要，但它们在本书中仅做基础性的论述，因其在一定程度上已远超过新课程的应有内容[如“晶体学”（第4章）、“相变”（第9章）和“材料的力学性能”（第11章）]。这一点并不妨碍本书在初级教学中的使用，也正是这一点使得本书作为一本介绍性教材在本科

甚至研究生的整个学习阶段都大有裨益,可为更详尽的专业论文和专著的学习研究打下坚实的基础,这也是本书的使命。

书名使用了“材料科学基础”这一说法,因此这是一本关于材料现象而不是材料本身的书。不得不承认本书明显侧重于金属材料的讨论,关于此说明如下。

一个虽不重要但又不可忽略的明显事实是:在元素周期表中,自然存在的元素绝大部分是金属(92种),非金属的数量很有限(约15种)。不可否认在这些非金属中,有几种元素(C、N、O和H)对地球上的生命而言是相当重要的,但也必须承认,若不是金属的应用,人类生活不会发展成现在这样。还有一点需要指出的是:金属的范畴事实上比人们按上述元素分类方法所设想的要大得多,因为通过致密化,任何物质都可以变成金属态。因此,在高压下氢可变成金属态,而硅在熔融过程中也可变成金属态。关于这种现象的实质,即为为什么如此,本书第3.5节将进行讨论。毋庸置疑,其他类型的材料,无论是人造的还是自然存在的,如微电子中的硅基元件、陶瓷、聚合物和生物材料等也都具有非常重要的作用。然而,一个核心观点是,对材料基本特性的认识并不完全依赖于所考虑材料的类型。晶体学、扩散、相变热力学和动力学等知识和理论并不限于某类特定的材料。

从金属被认为或许是世界上最重要的材料起,材料科学就逐渐发展成为了一门独立的学科[见Cahn RW(2001年) *The coming of materials science*. Pergamon (Elsevier Science), Amsterdam]。不管这一观点现在是否被接受,但是它的确说明了一个事实,即我们对材料行为的认识是以金属材料为研究对象而得以发展的。不同材料类别,如金属、陶瓷、高分子和生物材料等,在合成方式(该主题在本书完全没有涉及)和应用(诸如高分子和生物材料)上显著不同。然而,它们的显微结构与特性之间关系的基本理念还是大致相同的。历史上,这种关于显微结构与特性之间关系的研究首先始于金属。我们应当认识到,最初以金属为对象首先建立起来的概念,现在需要被用于表征和解释新的材料类别的特性,且已在陶瓷、半导体和高分子材料方面得以应用。不可否认,一些非常独特的性能的确是特定的材料类别相关,橡胶的弹性就是一个例子(见第11.6节)。但未来新型材料仍将会在相同的知识体系上进行研究。材料种类的复杂性似乎随着“年龄”的增长而趋向简单。综上所述,我们可以得出,作为一类特定材料的“金属”对材料学家来说有着特别重要意义的另一个原因是,金属是最简单的一类材料,它为人们研究隐藏于材料行为背后的概念提供了最佳开端。

如前所述,本书侧重于材料科学而对工程涉及较少,与此同时,在现有的材料种类中金属材料也更受重视,因此,关于材料行为的大多数基础研究从过

去到现在始终是针对金属材料[⊖]开展的。这是合乎情理也是可以理解的，且完全不妨碍关于材料性能方面的基本和普遍知识的传授，而这正是本书的目的。

材料科学领域内最具代表性的概念便是材料的显微结构。材料的显微结构包括所有关于材料的原子排列方面的知识，有了这些知识我们才能进一步理解材料的性能。若将我们的研究仅限于大多数固态晶体材料，则显微结构的关注焦点从一开始就不是理想晶体结构，而是晶体中的缺陷，如组分不均匀性，相的数量和分布，晶粒尺寸、形状及其参数分布函数，晶粒（晶体）取向分布（称为织构或择优取向），晶界和表面，空位、位错、堆垛、孪晶断层等缺陷的浓度和分布，以及由于应变和应力等产生的畸变等 [本书特别收录了关于“显微结构分析、晶格缺陷的分析”的内容（第6章）]。这个列举虽不完全，但我们仍可基于此预想到显微结构在很大程度上将决定材料的性能。材料科学的核心内容或许可归结为提出一个可以给出显微结构和性能之间关系的模型。这样一种综合的、桥接长度尺度（从微观到介观到宏观）的方法是材料科学区别于单纯的固体物理和固体化学的基本特征。如果本书成功传递了这一信息，作为作者，我会感到非常欣慰。

科学，不是完美的神所主导的抽象活动。我在书中的很多地方插入了附注，如脚注、“小花絮”和“结语”等，这些附注会涉及一些具有启发性的历史故事，或者指出了目前存在的争议。这些附注意在说明科学进步的过程是怎样的，且科学的认知通常是长期奋斗的结果，并不具备无限永恒的价值。

Eric J. Mittemeijer 于斯图加特

2010年8月

⊖ 我回想起几十年前去伦敦参加的一个会议时的一件趣闻。A. H. Cottrell 是一本名为《理论结构冶金学》的著作的作者，我至今仍很喜爱此书。他在大会上做了一次关于金属的演讲。在可靠参考文献的基础上，他指出，如果人们相信在汽车行业里聚合物将替代金属的那些预言，那么人们在20世纪70年代就应该已经开上塑料汽车了。他的这一评论所传递的信息是：那些主张应用某一特定新材料并预言其在未来的重要性甚至主导地位的人，仅仅从新材料的性能做出对其未来的预言，似乎无视了与之相比的传统材料的继续发展，就好像传统材料已不在被研究了一样。从这个意义上讲，开发新材料就如同追逐移动目标一般。就这里讨论的例子而言，高强度低合金（HSLA）钢的出现似乎被塑料的支持者们忽视了，或者他们压根就没察觉。这并不意味着塑料不能最终替代金属在汽车行业的地位，但是即使到现在，也只是部分替代。重点是：每一种新材料的出现（准晶、高温超导体、碳纳米管、石墨烯等），人们往往倾向于夸大其在上应用上的可能性，但是不应忘记，一个值得警醒的例子是，发展全陶瓷内燃机这一曾经广受重视和倡导的设想似乎已经彻底宣告破灭。因此，对任何一种轰动性的新材料的发现采取批判而开放的态度是合适的。

致谢和深深的敬意

这本书的撰写用了5年多时间，它（至少部分）是我在代尔夫特和斯图加特曾经讲授过的一些课程的总结，尤其是针对大学新生在材料科学方面的基础课程，以及材料热力学、显微组织、衍射学、表面工程和固态动力学方面的专业课程。当然，我本人在材料科学与工程领域从事的研究工作使我对这一领域的感悟，也在本书中有所体现。作为大学教授和一所“出类拔萃”研究机构的负责人，这双重职业使我更加坚定信念：为了成为一位对学生而言杰出的教师，我必须是一名优秀和积极的研究工作者。因为学生问的一些基本问题，有时会是些出色的问题，教学工作就必须考虑知识的根源。为了回答学生的这些问题，一个充满热情和积极的研究工作者就必须处于科学的前沿。我非常感谢我的本科生、研究生、过去和现在的博士生：通过与他们的交流，我学到了很多。

我投身于材料科学研究是深受两位前辈的影响。一位是已逝的 W. G. Burgers 教授（见第 5.2.3 节和第 10.2.1 节），我听了 he 最后一次（在 1970/1971 年）讲授的固体物理化学课程。当时他已经非常年长了，但当他讲课的时候，仍不乏年轻人的那种热情和活力（考虑到他身体的缺陷，就更突显出与众不同），他讲授了该课程已建立的基础知识体系，不时穿插着奇闻轶事以及他与其他人的研究成果，特别是他将他对科学的热爱传递给我们。这门课使我决定将我的硕士论文以及后来的博士论文转向从事材料科学的研究，我没想到这也成为我毕生的舞台。同时，我相信，Burgers 教授课程的理念和他教学的风格直到今天还在很大程度上影响了我的授课方式，当然这本书也不例外。

Burgers 教授的继任人 B. Okkerse 教授，他已经退休多年，是我的博士生导师。他不仅是一位有才华的实验学家（见第 8.6.1 节），更是一个有条不紊的人，他以一种无可挑剔的方式领导和关怀着他的团队。我从他身上学习到一个人可以同时处理好多份工作，多年来，在没有怠慢我的教学和研究指导工作的情况下，完成了这本书，以及在我领导研究部门的方式等许多其他方面，都离不开我从跟随他所学到的经验。

在这本基础教材中加入了許多插图和例证，它们是我这些年与同事和合作者们进行研究的证明。我认为这些例子比较合适，但是不表示不能从现有的文献中挑选出合适的例子：大部分挑选出的例子源于我的研究工作，主要是因为这些例子我最熟悉。

感谢在本书撰写期间帮助我的所有人。我特别想提到的是（按字母顺序）：P. van Aken 教授、E. Jägle 博士、A. Leineweber 博士、W. Sigle 博士、F. Sommer

教授和 U. Welzel 博士，他们都阅读了本书的早期版本，并给我提出了一些有价值的、批判性的意见。晶体学这一章的大部分内容是由 A. Leineweber 博士撰写的初稿，并且接连几稿都是他与我讨论并修改。硕士生 J. Aufrecht 完成了大量的图表绘制工作，并在我没有太多指点的情况下绘制了许多图。当然，我将对本书中任何可能的疏漏负责。

其次感谢我的妻子（和秘书）Marion。我们相遇、结婚都比较晚，余生在一起的时间也相对有限，我的专业工作占用了大量的白天时间，因此，编写该书意味着主要得占用晚上、夜间和周末的时间。这对我们是一种考验，特别在感觉时光流逝时就尤为困扰。Marion 接受了这个现实，因为她懂得完成这件我自己给自己的任务多么的重要。我无法用语言来感谢她给予我的理解、支持和宽容：她使这本书成为可能。只要我还在工作，我将不会再着手这样一项工程。实际上，似乎许多科学专著和教科书都是在编者退休之后撰写的。

最后，还要感谢我那只叫 C 的猫。它每晚在我的书桌旁陪我奋斗几个小时直至深夜，不时地呜呜叫，将它的黑色毛发留在了我的手稿和论文上。这些“黑头发”后来被我的学生和同事们发现，但他们给予了错误的演绎，这本书也是对她的一个美好回忆。

斯图加特

Eric J. Mittemeijer

2010 年 8 月

目 录

作者简介

译者序

为中文版发行所做的序言

前言

致谢和深深的敬意

第 1 章 引言	1
1.1 材料的概念	1
1.2 金属的定义	2
1.3 模型和实验	2
1.4 桥接长度尺度	3
1.5 认识自然, 科学的作用: 想象、探索 和模型	4
第 2 章 原子的电子结构——元素周期 表	7
2.1 质子、中子和电子	7
2.2 卢瑟福模型 (1911 年)	7
2.3 玻尔模型 (1913 年)	7
2.4 波或量子力学模型 (海森堡/薛定谔, 1926 年) 和量子数	9
2.5 泡利不相容原理和“原子构造原理”	13
2.6 电子概率密度分布形状	23
参考文献	27
第 3 章 固体中的化学键与材料性能的 探索	28
3.1 引力和斥力、热膨胀系数和弹性模 量	28
3.2 成键模型评述	31
3.3 离子键与晶格能以及马德隆常数	32
3.4 共价键	36
3.5 金属键	40
3.6 范德华键	61
3.7 氢键	63
参考文献	67
第 4 章 晶体学	68
4.1 晶体几何学	71
4.2 元素的晶体结构	86

4.3 合金、固溶体、有序固溶体以及化 合物的概念	102
4.4 固溶体及化合物	103
4.5 晶体结构的确定、X-射线衍射分析	116
4.6 极射投影	120
4.7 多晶体织构、极图、反极图和取向 分布函数	123
4.8 非周期性晶体	129
参考文献	136
第 5 章 晶体缺陷和晶格缺陷	138
5.1 点缺陷 (零维): 热空位和组分空位, 间隙原子、置换原子和反结构原子, 肖脱基空位和弗兰克尔空位	138
5.2 线缺陷 (一维)、刃型与螺型位错	142
5.3 面缺陷 (二维): 晶界、孪晶界、 堆垛层错和反相畴界, 共格界面和 非共格界面	156
5.4 体缺陷 (三维): 第二相颗粒和孔 隙	165
参考文献	166
第 6 章 显微结构分析、晶格缺陷分 析、光学与电子显微以及 X- 射线衍射方法	168
6.1 透镜	168
6.2 成像	171
6.3 (反射式) 光学显微镜	173
6.4 科勒照明法	175
6.5 分辨力	177
6.6 光学显微镜的明暗场与其他成像技 术	178
6.7 透射电子显微镜	183
6.8 扫描电子显微镜	195
6.9 缺陷显微组织的 X-射线衍射分析	198
参考文献	206
第 7 章 相平衡	208
7.1 相的定义	208
7.2 组元的定义	209

7.3 平衡态和稳态的概念: 内能、熵、 (亥姆霍兹) 自由能、吉布斯自由 能	209
7.4 自由度和相律	212
7.5 相图	213
7.6 依据相图分析显微组织变化	228
参考文献	230
第8章 扩散	232
8.1 连续法描述扩散: 菲克第一定律和 第二定律	232
8.2 原子法描述扩散的原子机制	234
8.3 菲克定律求解	235
8.4 晶体中的扩散机制	237
8.5 跳跃频率和扩散激活能	239
8.6 显微结构和扩散	243
参考文献	251
第9章 相变	253
9.1 相变热力学和动力学、热激活和激 活能	254
9.2 形核能量学、均匀和非均匀相变、 均匀和非均匀形核	255
9.3 扩散与无扩散型相变	258
9.4 扩散型相变及实例	259
9.5 无扩散相变及实例	271
9.6 相变动力学分析	289
9.7 热力学和动力学的联系	312
参考文献	312
第10章 回复、再结晶及晶粒长大	315
10.1 回复	316
10.2 再结晶	319
10.3 晶粒长大	324
参考文献	335
第11章 材料的力学性能	336
11.1 弹性变形与塑性变形、延性材料和 脆性材料	336
11.2 单轴变形的基本模式、应力应变的 概念、单轴弹性变形定律	337
11.3 弹性各向同性材料和弹性各向异性 材料	340
11.4 双轴和三轴加载下的弹性变形	342
11.5 弹性应变能	345
11.6 橡胶的弹性和高弹性行为	346
11.7 粘弹性/滞弹性及力学滞后	348
11.8 塑性变形的特征	350
11.9 拉伸应力-应变曲线、真应力和真 应变	351
11.10 双轴和三轴载荷条件下的屈服准 则	357
11.11 临界分切应力——单晶体的塑性 变形	360
11.12 多晶体的塑性变形	362
11.13 宏观、微观和纳米尺度的硬度参 数	363
11.14 强化、硬化机制(尤其对于金 属)	369
11.15 断裂失效及裂纹扩展	373
11.16 蠕变失效	377
11.17 疲劳失效	380
11.18 残余内应力	384
参考文献	389

第 1 章 引 言

1.1 材料的概念

“材料”可以说是随着人类的活动而出现的，它是一种人类在当前或是在不久的将来可应用的物质^①。因此，并不是所有的物质都可以称为材料。

当前可应用的材料有：木头、钢铁、尼龙。

在撰写本书时，人们普遍认为在未来会有很好发展潜力的材料有：

- 1) 高临界转变温度的超导体。
- 2) 石墨烯和富勒烯（碳纳米管和巴基球）^②。

材料分为天然材料和人造材料。天然材料是指地球上存在的原有状态就基本上可以使用的材料，如木材、黄金和铜均以它们原本的形态服务于人类。人造材料是指经过加工制成的产品，典型的例子就是钢。近代，用于防磨损和起装饰作用（表现为闪亮的金色）的 TiN 片层，也是无数新材料中的一种。

人们一直尝试着对材料进行分类，至今仍在使用的最常见也是最传统的分类方法是：

- 1) 金属（铁、铜等；关于金属的定义后文将详细介绍）。
- 2) 陶瓷（金属-非金属的结合，如金属氧化物、金属碳化物和金属氮化物）。
- 3) 高分子（主要由碳和氢组成，以巨大的分子尺寸为特征）。

有时，半导体（顾名思义，它介于导体和绝缘体之间）被单独提出来作为一类材料。

现如今新材料的革命性发展引出了将一些分离出来的材料定义为新类别的提议，比如复合材料、生物或仿生材料、准晶和碳纳米管。

材料的种类不胜枚举，但每一种分类都不是非常准确，事实上经过严格审视，各种分类间的界限都是模糊的。如果有人能尝试给出金属、陶瓷和高分子材料的精准定义，那么这一问题将立刻变得清晰。但是以上给出的只是描述性的语言，无论如何是不充分的。

下面以金属为例来进行说明。

-
- ① 在引言这一章，部分概念（如“准晶”和“位错”）没有进行阐述。相信这并不会影响本章的阅读和理解。当然，读者也可随后重读本章。
- ② 石墨烯是由一层碳原子组成的、没有缺陷的二维密排六边形结构，石墨就是由这样的石墨烯层按特定的空间堆砌方式而形成的。比石墨烯还薄的材料是不可能存在的。它的强度比另外一种由碳原子三维排列组成的金刚石要高出很多（见第 3 章和第 4 章），同时具有很好的抗弯性能。它的室温电导率在所有已知的固体中是最大的。石墨烯层可以卷成三维的富勒烯：圆柱形的（碳）纳米管和足球对称形状的巴基球（最典型的例子是 C₆₀ 分子和由 20 个相连六边形和 12 个五边形组成的足球烯 C₆₀，如图 3-36 所示。这些材料因具有非常独特的化学和物理（力学、光学、热学和电学）性能而展现出重要的应用前景。在引言这里提到石墨烯和富勒烯的原因是这些“新”材料其实是已经伴随我们很长时间的“旧”材料，只是最近才引起大家的注意，如 1985 年发现富勒烯（巴基球），1992 年发现纳米管和 2004 年发现石墨烯。“新”材料也不一定要通过新的合成途径来得到。

1.2 金属的定义

金属既有良好的电导率、热导率（使得它们作为功能材料而应用，如电缆），也具有高机械强度和良好韧性的结合（使得它们作为结构材料而应用，如工具），同时金属还具有典型的金属光泽。因为金属的电阻随着温度的升高而显著增大，而它们的热导率随着温度的升高而降低，因此最好是用电阻的温度系数来定义所考虑的这种金属类型。

上文，事实上假设所有金属原子的集合均考虑在内。如果只考虑单个金属原子，之前给出的关于性质的描述就不适用了。显然，我们涉及的是对“物质的金属态”的描述。

金属也可以在单个原子的基础上来定义。为此，我们可以利用元素周期表，也称为元素周期系来定义金属，如图 2-9 所示。从大约 1860 年到 1870 年，门捷列夫和迈耶等人发现了元素周期规律：随着相对原子质量的增大，元素的性质呈周期性变化。元素在同一周期性（行，水平方向）和族（列，垂直方向）内按原子序数递增排列，这样同一族的元素便具有相似的性质。在此基础上，可以知道在元素周期表中哪种元素缺失（即还没有被发现），以及预测元素可能具有的性质。人们通过 50 多年的研究澄清了元素周期表存在的根本原因：原子的电子结构（电子在原子内部的排布）具有特定特征，直接导致了它们在周期表中表现出规律性（见第 2 章）。可以看到大多数天然元素（约 90 个）是金属；只有大约 15 种元素可以被认为是非金属（见表 2-9）。介于金属和非金属中间的元素有 B、Si、As 和 Te 等。

1.3 模型和实验

模型在材料科学中扮演着重要的角色。它们为材料的结构和性能之间建立了联系，而这就是材料科学的全部！

模型不是真实的，它是人们思维的构建，为在一定的体系下对观察到的现象提供解释。因此，模型描述的是我们已知（“经验”）但并不“理解”的，即缺乏一个统一的理论概念。同时，为某一系统设计的模型可以预测一定条件下该系统可能发生的现象。只要实验结果与模型所预测的结果相吻合，那么就认为该模型是对系统属性的一个合理描述，否则该模型就必须进行修正或者不得不建立一个新的模型。

很多情况下，虽然已知模型不能对所有的实验现象进行合理解释，但仍被使用。例如，众所周知原子中的质量分布非常不均匀：原子（半径为 10^{-10}m 数量级）由一个几乎占有它所有质量的微小的核（半径 10^{-14}m 数量级）和周围许多质量可忽略的电子构成（见第 2 章）。而在很多情形下，如为了讨论晶体结构（见第 4.2 节）。原子被看成巨大的（乒乓）球，即我们倾向于用这种最简单的模型来解释观察到的现象。

当然，一个相对简单的模型虽然不可能解释所观察到现象的所有细节，但在许多情况下甚至比从基本粒子间相互作用出发的“从头计算”更适合于揭示和解释自然界主要的运动规律。关注太多的细节只会掩盖而不是揭示材料的内部结构。

可以通过一个简单的例子来解释用模型来描述自然现象的局限性^①。人们可以观察到任何咖

① 这个例子不是作者的原创，它是从我做学生的时候读的一本参考书 [Sebera DK (1964 年) 编, Electronic Structure and Chemical bonding, Blaisdell Publishing Company, New York] 中读到的，从那时起我就记住了这个例子。

啡机投入一枚硬币以后, 咖啡机就会自动倒出一杯咖啡。对这种现象至少有两个可能解释, 即可以给出两个实际的模型。这台机器可能由一个包括发动机、泵和齿轮等结构在内的系统组成, 并通过电力驱动; 或者机器里面可能住着某一侏儒, 他被训练成只要有硬币投入就准备一杯咖啡。即便有模型解释了迄今为止观察到的所有现象, 但最终也不可能确定这一模型是否正确, 只有打开机器对其内部进行观察, 才能得到最终的结论。这种“打开”系统往往不是我们通常能做到的, 只能通过建立模型来完成。实验由此成为了判定一个模型是否比其他模型更接近事实的决定性因素。对于上述那个有趣的例子, 我们可以尝试停止给那个咖啡机供电。如果机器在投币后没有提供咖啡的话, 那么“电动机/水泵/齿轮”模型的提出者就会立刻宣称这个实验验证了他们的模型。然而, 提出“侏儒”模型的人就会假设侏儒需要电力来让他看见操作过程或者他不愿意在黑暗里操作。这个例子说明了关于哪个模型更适当、更有效的争论很难平息。实际上, 科学史上充满了这种长期的争论, 这也是科学研究活动的最主要特征之一。

量子力学中的“不确定性原理”(见第2章)意味着我们将永远不可能“打开检查”一个单独的原子。所以无论在什么情况下, 我们对于原子的描述将永远只是一个模型而已, 即使这一模型能非常好地解释所有已得到的实验数据, 但也绝不能说它完全等同于自然本质。

1.4 桥接长度尺度

材料科学中一个主要的任务是桥接的长度尺度, 以便在原子尺度的知识基础上, 宏观试样的性能也能得到很好的解释, 即认识了作用在物质最小单元之间的力, 并不意味着就能描述物质的宏观行为。

原子间的化学键源于基本的物理、电子间的相互作用。在此基础上才能发生原子的聚集, 如分子和晶体。这样可以形成由可能含有很多缺陷的集合体(晶体)组成的致密显微结构。在这个范围内热力学和动力学是描述材料行为的主要方法。最终, 在工程领域, 所希望得到的是材料工件性能的宏观平均值, 如力学性能等。以下将介绍各种长度尺度:

(1) 原子 考虑两个典型的模型: 原子的电子结构, 即电子围绕在一个原子核周围(见图2-2); 且将原子看做是一个巨大的球体(见第1.5节)。

(2) 原子的空间排列 原子可以随机地排列(如理想气体), 也可以严格按照规律排列并表现出平移对称性(如晶体是由规则排列的晶胞构成的, 见第4章), 或者在完全随机排列的基础上, 不同原子优先成为近邻原子而形成短程有序结构(如非晶体)。

(3) 由含有缺陷的晶体构成的试样(晶体缺陷) 多晶试样由很多晶体(晶粒)组成; 单个晶粒存在如位错(见第5章)等晶格缺陷, 且含有内部应变场。试样中的这些缺陷很大程度上影响了它们的性能, 如机械强度(见第11章)、扩散和相变性能(见第8章和第9章)、耐蚀性等。

(4) 工作 材料体, 如机器等, 通常由不同材料的零件构成。为了保证这种组合设计的安全, 需要对工件所用材料的宏观行为有一个基本认识。

材料科学家所考虑的不同尺度可以大致归纳如下:

1) 纳米尺度(纳米范围内), 需要原子手段。

2) 微观尺度(纳米—微米—毫米之间)。在这一中等长度尺度范围了解材料的行为是材料科学的核心(也因此奠定了材料科学与固体物理和固体化学的本质区别, 后者并不考虑显微结构对材料应用的重要性), 在这一尺度将会表现出如位错和晶界等独立单元协同作用的影响。