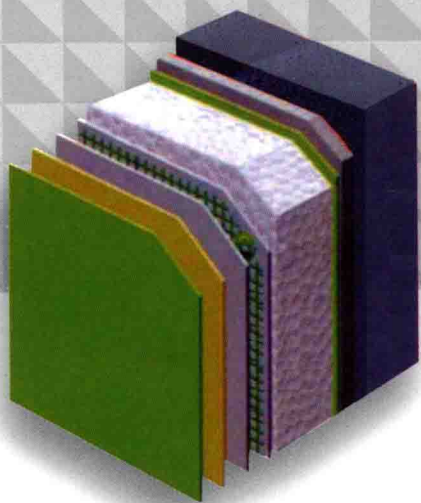


ANALYSIS AND CALCULATION  
OF ENGINEERING MATERIALS

# 工程材料分析与计算

张昭 周霞 编著



科学出版社

# 工程材料分析与计算

张 昭 周 霞 编著

科 学 出 版 社

北 京

## 内 容 简 介

本书主要介绍材料的基本结构、材料的制备与相图、材料的力学性能、塑性变形与再结晶、钢铁的热处理、碳素钢与合金钢、工程材料的合理选用、有色金属及其合金、材料中的计算方法等内容,涵盖了从工程材料基础知识、工程材料计算的基本理论到工程材料的合理运用等多方面的知识,用以掌握工程材料的基本概念和基本知识,为进一步研究工程材料奠定基础。

本书通过介绍工程材料计算的基本方法,为工程材料的计算和仿真提供了基本的理论基础和计算手段。本书适用于工程人员和高校研究生阅读参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

工程材料分析与计算/张昭,周霞编著. —北京:科学出版社,2016.12

ISBN 978-7-03-051353-3

I. ①工… II. ①张… ②周… III. ①工程材料-分析方法②工程材料-分析方法②工程材料-工程计算 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016) 第 322493 号

责任编辑:赵敬伟 田轶静/责任校对:邹慧卿

责任印制:张 伟/封面设计:耕者工作室

**科学出版社** 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

**北京厚诚则铭印刷科技有限公司**印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2017年1月第 一 版 开本:720×1000 1/16

2017年1月第一次印刷 印张:15

字数:288 000

定价:88.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

# 前 言

随着技术装备的不断发展,材料以及计算材料的重要性日益体现,但联系材料基础知识和力学基础知识以及计算材料学的书籍相对较少,本书从基本材料知识和计算材料学知识出发,讲述工程材料的基本知识和基本概念,结合工程问题进行讨论,并进一步论述了计算材料学中的主要计算方法。

本书主要讨论工程材料的基本知识和主要计算方法,第1章绪论主要概述工程材料相关研究进展;第2章材料的基本结构主要讲述晶向、晶面、投影、倒点阵等的基本概念;第3章材料的制备与相图主要论述材料的主要制备方法以及相图及相图的使用;第4章材料的力学性能主要讲述高温力学性能、疲劳、硬度、断裂韧度等,并以机车为例讲述相关的计算和应用;第5章主要讲述塑性变形与再结晶,以鼓风机叶轮为例,讲述残余应力的计算方法和应用;第6章钢铁的热处理主要包括退火、正火、回火、淬火的基本概念和应用;第7章碳素钢与合金钢概述相关钢的分类、牌号和使用;第8章工程材料的合理选用主要讲述齿轮、叶轮、轴、弹簧等典型零部件的选材原则和热处理工艺;第9章有色金属及其合金主要讲述Ti、Al、Mg等合金的牌号、材料特点、热处理工艺等;第10章材料中的计算方法主要讲述几类主流的计算材料学方面的方法,包括MC、CA、晶体塑性、相场法、分子动力学方法、材料的磨损计算等。

研究生吴奇、胡超平、葛芃、谭治军、姚欣欣、赵磊等以及本科生陈捷等的研究方向和研究内容与本书部分内容相关,在此对他们在科研方面的努力和对本书的贡献表示感谢。

由于书中部分图片来源于网络、课件等材料,原始来源已经很难考证,由此导致引用方面的遗漏敬请读者谅解。

限于作者的学识和经验,书中难免有疏忽和纰漏,敬请读者批评指正。

张昭,周霞

2016年10月于大连

# 目 录

前言	
第 1 章 绪论	1
第 2 章 材料的基本结构	6
2.1 晶体结构的基本概念	7
2.2 典型金属的晶体结构	9
2.3 晶面与晶向	13
2.4 晶面及晶向的原子密度	16
2.5 晶体与非晶体材料的区别	17
2.6 实际晶体的结构特征	19
2.7 同素异构转变	23
2.8 纯金属的结晶	24
2.9 组元、相、组织	25
2.10 基本相结构	26
2.11 聚合物	29
2.12 无机材料	31
2.13 晶体的投影	32
2.14 倒点阵	34
第 3 章 材料的制备与相图	35
3.1 材料凝固和结晶条件	35
3.2 金属材料的制备	35
3.3 聚合物的合成	38
3.4 无机材料制备	39
3.5 二元合金相图	40
3.6 几种典型的相图	43
3.7 铁碳合金相图	49
3.8 含碳量影响	56
3.9 钢中的元素	57
3.10 铸铁	58
第 4 章 材料的力学性能	67
4.1 高温下的力学性能	67

4.2	冲击吸收功	69
4.3	疲劳理论及机车疲劳和随机振动	70
4.4	断裂韧性	84
4.5	硬度	87
4.6	提高材料力学性能的方法	90
<b>第 5 章</b>	<b>塑性变形与再结晶</b>	<b>92</b>
5.1	单晶体塑性变形微观机制	93
5.2	孪生	94
5.3	多晶体的塑性变形	95
5.4	冷变形加工对金属组织与性能的影响	98
5.5	残余应力	100
<b>第 6 章</b>	<b>钢铁的热处理</b>	<b>108</b>
6.1	奥氏体形成过程	109
6.2	钢冷却时的转变	110
6.3	钢的退火和正火	116
6.4	淬火	120
6.5	回火	122
6.6	表面淬火	125
6.7	钢的渗碳和渗氮	126
<b>第 7 章</b>	<b>碳素钢与合金钢</b>	<b>128</b>
7.1	碳素钢	128
7.2	合金钢	131
7.3	合金结构钢	133
7.4	合金工具钢	137
7.5	特殊性能钢	142
<b>第 8 章</b>	<b>工程材料的合理选用</b>	<b>146</b>
8.1	概述	146
8.1.1	工程材料的选材依据	146
8.1.2	工程材料的加工工艺路线	147
8.1.3	金属材料的加工工艺	150
8.1.4	零件设计需考虑的问题	151
8.1.5	材料的经济性	151
8.2	齿轮选材	153

8.3 轴类零件选材	161
8.4 叶片选材	168
8.5 弹簧选材	169
8.6 刀具选材	170
8.7 其他零件选材	172
8.8 小结	174
<b>第 9 章 有色金属及其合金</b>	<b>175</b>
9.1 铝及铝合金	175
9.1.1 铝合金牌号	175
9.1.2 铝合金相图	177
9.1.3 铝合金再结晶	181
9.2 镁及镁合金	184
9.2.1 镁合金牌号	185
9.2.2 镁合金相图	185
9.2.3 合金元素在镁合金中的作用	188
9.2.4 镁合金的搅拌摩擦焊与塑性成型	188
9.3 钛及钛合金	192
9.3.1 钛合金分类及牌号	192
9.3.2 钛合金的相变	194
9.3.3 钛合金中的杂质元素	197
<b>第 10 章 材料中的计算方法</b>	<b>198</b>
10.1 蒙特卡罗法	198
10.2 元胞自动机法	202
10.3 分子动力学方法	213
10.4 晶体塑性理论	216
10.4.1 基本概念	216
10.4.2 前差分方法	218
10.4.3 增量法	218
10.4.4 NR 迭代法	219
10.5 相場法	219
10.6 材料的磨损计算	224
<b>参考文献</b>	<b>230</b>

# 第1章 绪 论

材料是指人类用以制造各种有用器件的物质，是人类生产和生活所必需的物质基础。鉴于材料的重要性，历史学家根据人类所使用的材料来划分时代，分为石器时代、青铜时代、铁器时代和新材料时代，如图 1-1 所示，材料是人类文明的标志，也是人类进化的里程碑。

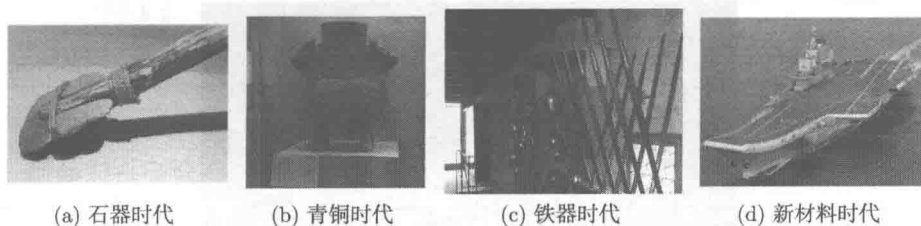


图 1-1 不同历史时期人类所使用的材料

按照化学成分，材料的分类如图 1-2 所示。

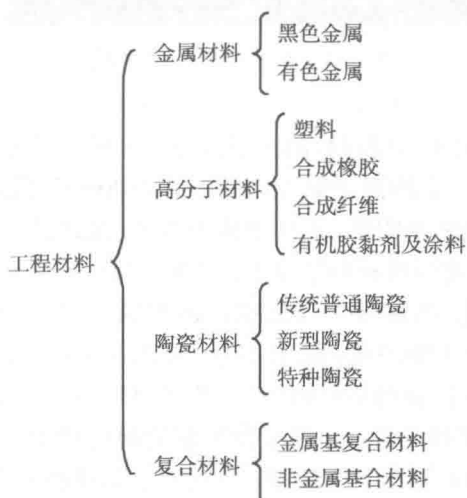


图 1-2 工程材料分类

材料，特别是新型材料，是发展高科技的先导和基石。新型材料一般是指那些新近研制成功或正在研制的、具有比传统材料更加优异的特性和功能、能够满足高新技术发展需要的一类新材料。它具有多学科交叉、知识密集、技术密集的特点，



是一类品种繁多、结构特性好、功能强、附加值高、更新换代快的材料。传统材料是指已大量生产、价格一般较低、在工业应用上已有长期使用经验和数据的材料。但是,新型材料解密后,开始商业化及大量生产并积累了经验之后,就成为传统材料了。也可能一些传统材料采用特殊高科技工艺加工后,具有了新的、更优良的性能,则成为新型材料。以水立方为例,如图 1-3 所示,其使用的人工高强度氟聚合物 (ETFE) 膜是透明建筑结构中品质优越的替代材料,多年来在许多工程中以其众多优点被证明为可信赖且经济实用的屋顶材料。该膜是由 ETFE 制成,延伸率可达 420%~440%。ETFE 膜材料的透光光谱与玻璃相近(俗称软玻璃)。其特有的抗黏着表面使其具有高抗污、易清洗的特点,通常雨水即可清除主要污垢。

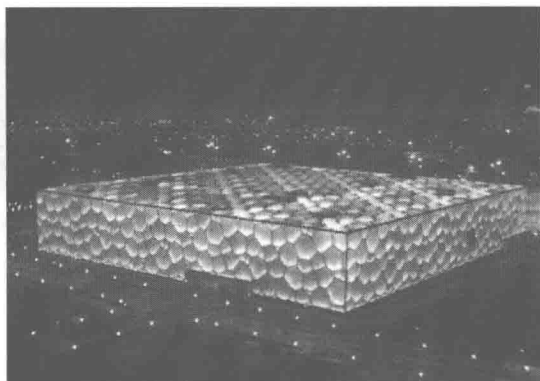


图 1-3 水立方及 ETFE 膜

新技术的需要促进了新型材料的不断发展,如信息传输技术的发展。要架设 1000km 长的同轴电缆,大约需要铜 50000t,铅 200000t;采用新型材料光导纤维,可能仅需几十公斤石英玻璃即可。若用廉价的有机玻璃代替石英用于光纤,更具重要意义。随着经济的飞速发展和科学技术的不断进步,我们对材料的要求越来越苛刻,结构材料向高比强、高强韧性、耐高温、耐腐蚀、抗辐照以及多功能方向发展。在当今时代,新型材料不断涌现,层出不穷,如图 1-4 所示。同时,新世纪发展对材料提出了新要求:① 结构与功能相结合。要求材料不仅能作为结构材料使用,而且具有特殊的功能或多种功能,正在开发研制的梯度功能材料和生物材料即属于此。② 智能化。要求材料本身具有感知、自我调节和反馈能力,即具有敏感和驱动双重功能。③ 减少污染。为了人类的健康和生存,要求材料在制作和废弃过程中对环境产生的污染尽可能少。④ 可再生性。是指一方面可保护和充分利用自然资源,另一方面又不为地球积存太多的废物,而且能再次利用。⑤ 节省能源。制造材料时耗能尽可能少,同时又可利用新开发的能源。⑥ 长寿命。要求材料能长期保持其基本特性,稳定可靠,用来制造的设备和元器件能少维修或不维修。材料的使

用和研究必须遵循可持续发展战略,在保证满足使用性能的条件下,尽量选用节约资源、降低能耗的材料,开发与选用具有环境相容性的新材料,并对现有材料进行环境协调性改性,尽可能地选用可降解材料,针对积累下来的污染问题,开发门类齐全的生态环境材料,对环境进行修复、净化或替代等处理,逐渐改善地球的生态环境,使之向可持续发展的方向前进。

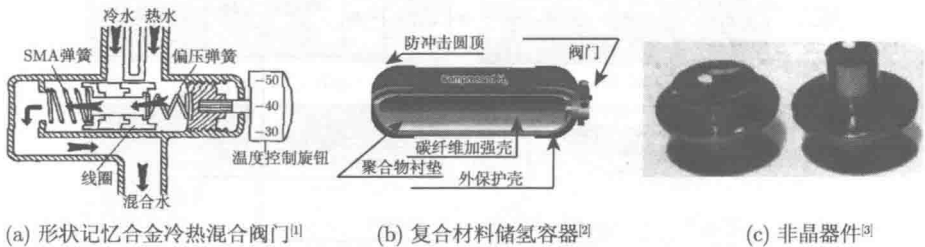


图 1-4 新型材料及其应用

产品的再制造是有效利用材料的一种重要方式。再制造是指以机电产品全生命周期理论为指导,以废旧机电产品实现性能提升为目标,以优质、高效、节能、节材、环保为准则,以先进技术和产业化生产为手段,对废旧机电产品进行修复和改造的一系列技术措施或工程活动的总称。再制造的重要特征是再制造产品的质量和性能不低于新品,有些能够超过新品。再制造作为装备制造业产业链的延伸,为循环经济提供关键技术支撑,已成为当今世界最具前景的技术领域之一。《国家中长期科学和技术发展规划纲要》将“在重点行业和重点城市建立循环经济的技术发展模式,为建设资源节约型和环境友好型社会提供科技支持”作为我国科学技术发展的重要目标。2010年5月,中华人民共和国国家发展和改革委员会(简称国家发改委)、科技部等11部委联合下发《关于推进再制造产业发展的意见》,指导全国加快再制造产业发展,并将再制造产业作为国家新的经济增长点予以培育。2010年10月,中共中央十七届五中全会审议通过了《中共中央关于制定国民经济和社会发展第十二个五年规划的建议》,明确要求“开发应用再制造等关键技术,推广循环经济典型模式”。开展机械装备再制造基础科学问题研究,符合国家中长期发展战略重大需求。再制造工程以机电产品全寿命周期理论为指导,以旧件实现性能跨越式提升为目标,以优质、高效、节能、节材、环保为准则,以先进技术和产业化生产为手段对旧件进行修复和改造。再制造的重要特征是再制造产品的质量和性能要达到或超过新品,成本仅是新品的50%左右,节能60%左右,节材70%以上<sup>[4]</sup>,其工艺流程如图1-5所示。

材料的加工工艺对材料的力学性能影响很大,焊接、拉拔、等径弯曲等工艺对材料的晶粒形貌和力学性能均有不同程度的影响,如图1-6所示,需要在选材和加工时予以考虑。图1-6所示为铝合金搅拌摩擦焊作用下焊接区不同晶粒形貌,

图 1-7 所示为不同变形率下钛合金的晶粒形貌。图 1-8 所示为升温到不同温度后的钛合金最终晶粒形貌。

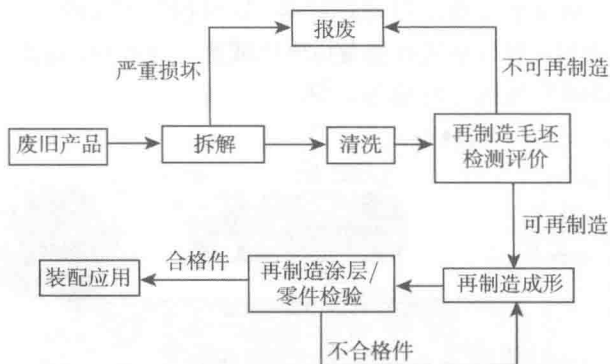


图 1-5 再制造工艺流程<sup>[4]</sup>

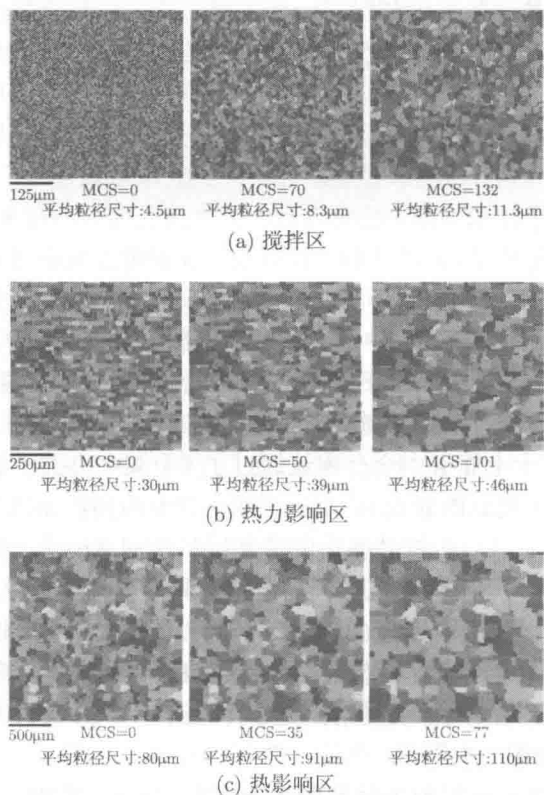


图 1-6 铝合金搅拌摩擦焊作用下焊接区不同晶粒形貌<sup>[5,6]</sup>

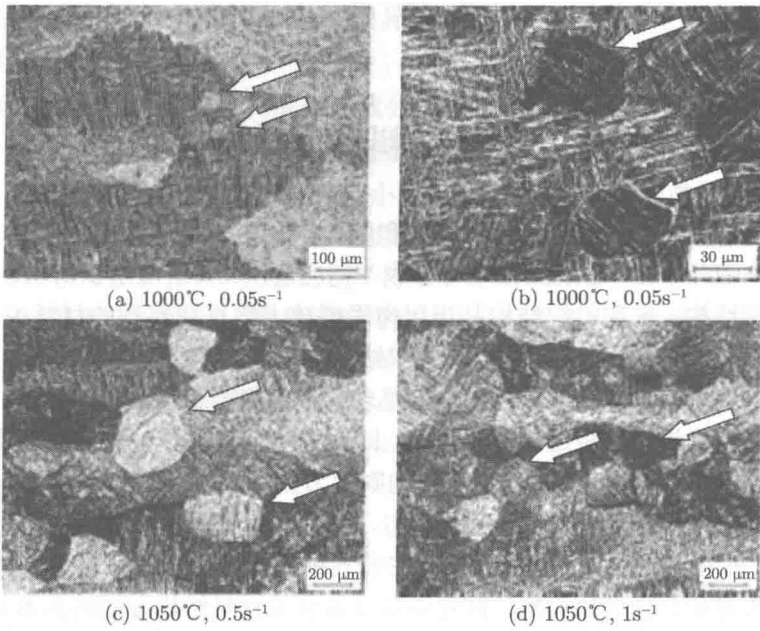


图 1-7 不同变形率下钛合金的晶粒形貌<sup>[7]</sup>

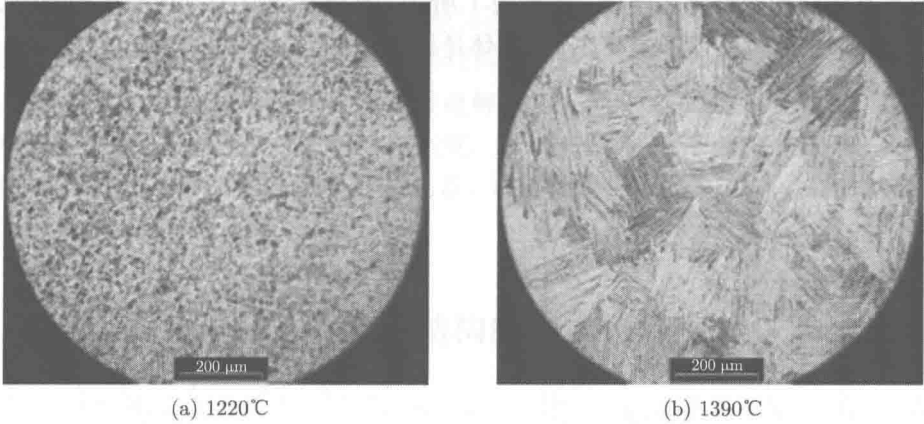


图 1-8 升温到不同温度后的钛合金最终晶粒形貌<sup>[7]</sup>

## 第2章 材料的基本结构

材料的性能主要决定于其化学组成和结构。所谓“结构”系指材料中原子的排列位置和空间分布。从宏观到微观可分成不同的层次，即宏观组织结构、显微组织结构及微观结构。宏观组织结构是指用肉眼或放大镜可观察到的材料内部的形貌图像（即晶粒、相的集合状态）。显微组织结构是指借助光学显微镜、电子显微镜可观察到的材料内部的微观形貌图像（即晶粒、相的集合状态或微区结构）。微观结构是指比显微组织结构更细的一层结构，即原子和分子的排列结构。习惯上，把宏观和显微组织结构称为组织，而微观结构则称为结构。固体材料的结构若为规则排列则是晶态，若为不规则排列则是非晶态。在绝大多数情况下，晶体结构并不是十分完整的，即在其规则排列中，局部存在着各种缺陷。因此作为工程技术人员，要做到正确选择和合理使用材料，首先必须具备有关材料结构方面的基本知识。

材料一般是在固体状态下使用。按固体中原子排列的有序程度，可分为晶体结构和非晶体结构两种基本类型，如图 2-1 所示。晶体是指原子呈规则排列的固体，常态下金属主要以晶体形式存在，非晶体是指原子呈无序排列的固体，在一定条件下晶体和非晶体可互相转化。

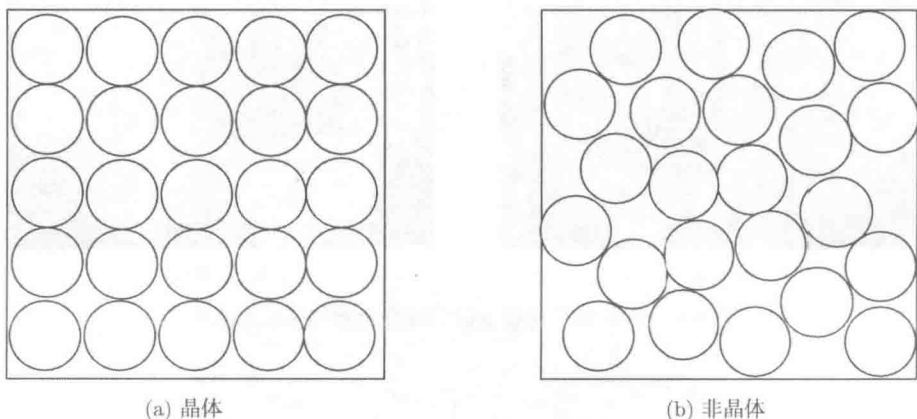


图 2-1 晶体与非晶体结构示意图

“长程有序”(远程有序)指的是原子在很大范围内均是按一定规则排列(即原子在三维空间做有规则的周期性重复排列)，具有长程有序排列的材料即为晶体材料。这种长程有序排列的特征(形式)就称为晶态结构。晶体材料的特点是：

- (1) 结构有序，物理性质表现为各向异性；
- (2) 具有固定的熔点；
- (3) 晶体的排列状态是由构成原子或分子的几何学形状和键的形式决定的；
- (4) 一般当晶体的外形发生变化时，晶格类型并不改变。

所谓“短程有序”，系指原子仅在很小的范围(约几十个原子的尺度)内呈一定的规则排列，而从大范围来看，则找不到规则排列的规律。若固体材料中仅存在短程有序，则称其为非晶体材料(或无定形材料)。这种短程有序排列的特征，即称为非晶态结构(或无定形结构)。非晶态结构被认为是“冻结了”的液态结构，即非晶体在整体上是无序的，但原子之间也是靠化学键结合在一起的，所以在有限的小范围内观察，还是有一定的规律性。非晶体材料的共同特点是：

- (1) 结构无序，物理性质表现为各向同性；
- (2) 无固定熔点；
- (3) 导热性和热膨胀性均小；
- (4) 塑性形变大；
- (5) 组成的变化范围大。

从理论上分析，如果抑止晶化固态反应过程，则任何物质均能发生非晶态固化反应，从而获得非晶态材料。如纯金属液体在高速冷却( $10^6 \sim 10^8 \text{K/s}$ )下可得到非晶态金属。从已得到的结果看：非晶态材料具有较高的强度、硬度和抗蚀性能等。非晶材料由 A. Brenner 于 1947 年通过电解、沉积方法获得。温度变化时，在很窄的温度区间内，可能发生明显的结构相变，是一种亚稳相。非晶金属材料，又叫金属玻璃，制作方法有单辊甩带、双辊甩带、熔模吸铸、离子溅射等，目前比较成熟且应用较多的是单辊甩带(速凝)。

## 2.1 晶体结构的基本概念

以纯铁为例，纯铁的微观组织形貌如图 2-2 所示。晶体结构中的几个基本概念包括：晶体结构、原子堆砌模型、晶格、晶胞、晶格常数。晶体结构是指晶体中原子(离子或分子)规则排列的形式。原子堆砌模型是指假想理想晶体中的原子都是由固定不动的钢球堆砌而成，如图 2-3 所示。晶格是指假想的空间直线按一定规律把原子“点”连接起来，构成三维的空间构架，如图 2-4 所示，晶格形象地反映了原子排列的空间网格，网格线代表原子之间的相互作用，小球代表原子。晶胞是指从晶格中取出一最基本的、有代表性的几何单元，如图 2-5 所示，表征晶胞特征的参数是晶格常数。原子半径( $r$ )是指晶胞中相距最近的两个原子之间平衡距离的一半。晶胞原子数( $n$ )是指一个晶胞所包含的原子数目。配位数( $C$ )是指晶格中与

任一原子最近邻且等距离的原子数目。致密度 ( $K = n \cdot v/V$ ) 是指晶胞中原子所占体积与晶胞体积之比, 式中,  $v$  为一个原子体积,  $V$  为晶胞体积,  $n$  为晶胞原子数。

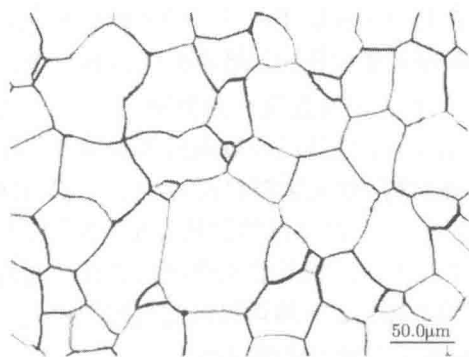


图 2-2 工业纯铁组织形貌

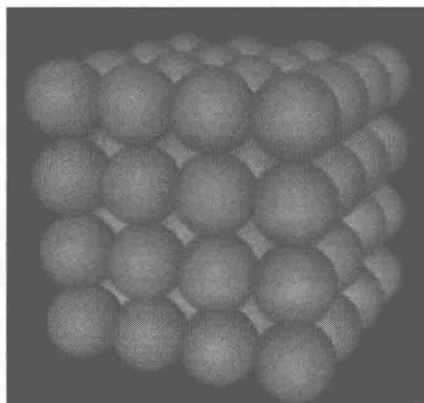


图 2-3 原子堆砌模型

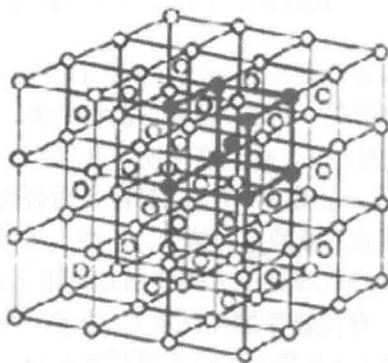


图 2-4 晶格模型

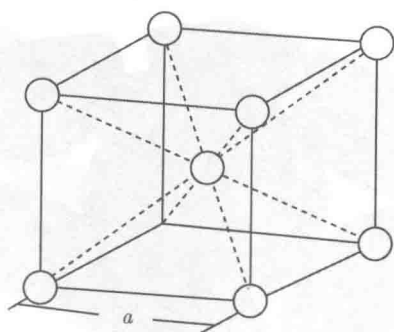


图 2-5 晶胞

## 2.2 典型金属的晶体结构

已知的 80 余种金属元素，大都属于体心立方、面心立方或密排六方晶格。

### 1. 体心立方晶格

体心立方晶格 (body centered cubic, BCC) 晶胞是一个立方体，立方体的 8 个顶点各有一个原子，中心还拥有一个原子，如图 2-6 所示，其晶格常数为  $a$ ，晶胞原子数如图 2-7 所示，为  $\frac{1}{8} \times 8 + 1 = 2$ 。其原子半径为相距最近的两个原子之间平衡距离的一半，显然是对角线上两个原子间距最小，如图 2-8 所示，其原子半径计算公式为

$$\frac{\sqrt{(\sqrt{2}a)^2 + a^2}}{2 \times 2} = \frac{\sqrt{3}a}{4}$$

因此， $r = \frac{\sqrt{3}a}{4}$ 。配位数  $C=8$ 。致密度  $K = \frac{nv}{V} = 2 \times \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = 0.68 \times 100\% = 68\%$ 。同类金属主要包括  $\alpha$ -Fe, Cr, Mo, W, V, Nb,  $\beta$ -Ti, Ta 等约 30 种金属。

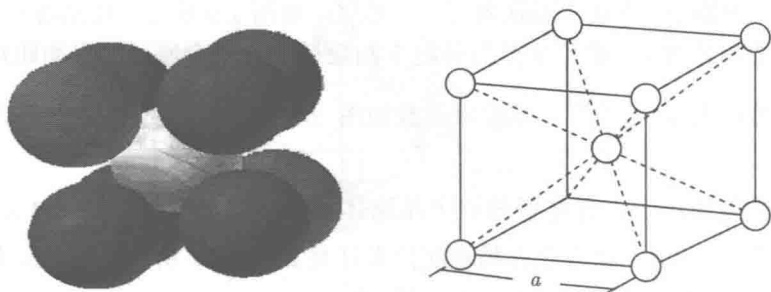


图 2-6 体心立方晶格原子堆砌模型和晶胞



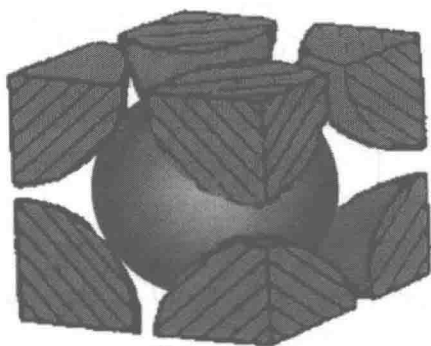


图 2-7 体心立方晶胞原子数

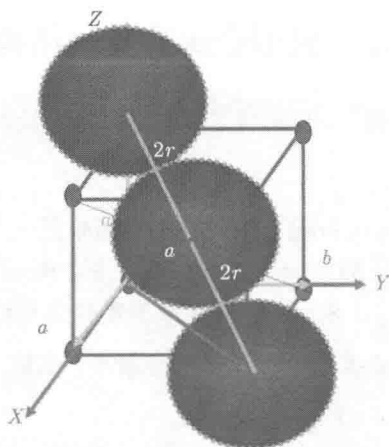


图 2-8 体心立方晶格原子半径

## 2. 面心立方晶格

面心立方晶格 (face centered cubic, FCC) 晶胞是一个立方体, 立方体的 8 个顶点各有一个原子, 六面中心还各有一个原子, 如图 2-9 所示, 其晶格常数为晶胞的各条棱边的长度  $a$ , 原子半径为晶胞中相距最近的两个原子间平衡距离的  $1/2$ ,

很容易计算得出  $r = \frac{\sqrt{2}a}{4}$ , 晶胞原子数如图 2-10 所示,  $\frac{1}{8} \times 8 + \frac{1}{2} \times 6 = 4$ 。致

密度表征晶胞中原子占有体积与整个晶胞体积的比值,  $K = \frac{nv}{V} = 4 \times \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = 0.74 \times 100\% = 74\%$ 。面心立方晶格配位数计算如图 2-11 所示,  $C=12$ 。同类金属主要包括  $\gamma$ -Fe、Cu、Al、Pb、Au、Ag、Ni 等。