

“十二五”普通高等教育本科规划教材

全国本科院校机械类创新型应用人才培养规划教材

# 机械工程材料

(第2版)

主编 戈晓岚  
招玉春

按照最新国家标准修订  
突出应用型人才培养特色  
强调以工程应用为目的



北京大学出版社  
PEKING UNIVERSITY PRESS

“十二五”普通高等教育本科规划教材  
全国本科院校机械类创新型应用人才培养规划教材

## 机械工程材料(第2版)

主编 戈晓岚 招玉春  
副主编 钟利萍 谭群燕  
参编 孙步功 胡世华 冯瑞宁  
主审 张学政



北京大学出版社  
PEKING UNIVERSITY PRESS

## 内 容 简 介

本书注重能力培养，强调应用，将内容和学习指导有机融合，书中的基本术语和材料牌号等均采用了最新标准。全书内容共分8章，分别讲述了材料的结构与组成、材料的力学行为、二元合金相图及相变基础知识、材料的改性、工业用钢及铸铁、有色金属及其合金、非金属材料、材料的选用。每章都安排有帮助读者掌握、巩固、深化学习内容和应用的教学提示、教学要求及习题。

再版教材在第1版教材的基础上，强化了塑变理论的相关内容，并在每章前增加了与本章内容有关的小故事、历史、生活实例、应用实例——导入案例，在每章后增加了内容丰富且与本章内容有关的阅读材料——知识链接。

本书可作为高等院校本科机械类和近机类专业的教材，也可作为高等职业技术学院、高等专科院校相关专业的教材和有关专业人员的参考书。

### 图书在版编目(CIP)数据

机械工程材料/戈晓岚，招玉春主编. —2 版. —北京：北京大学出版社，2013.6

(全国本科院校机械类创新型应用人才培养规划教材)

ISBN 978 - 7 - 301 - 22552 - 3

I. ①机… II. ①戈…②招… III. ①机械制造材料—高等学校—教材 IV. ①TH14

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 105913 号

### 书 名：机械工程材料(第2版)

著作责任者：戈晓岚 招玉春 主编

策 划 编 辑：童君鑫 宋亚玲

责 任 编 辑：宋亚玲

标 准 书 号：ISBN 978 - 7 - 301 - 22552 - 3 / TH · 0349

出 版 发 行：北京大学出版社

地 址：北京市海淀区成府路 205 号 100871

网 址：<http://www.pup.cn> 新浪官方微博：@北京大学出版社

电 子 信 箱：pup\_6@163.com

电 话：邮购部 62752015 发行部 62750672 编辑部 62750667 出版部 62754962

印 刷 者：北京鑫海金澳胶印有限公司

经 销 者：新华书店

720 毫米×1020 毫米 16 开本 19.25 印张 441 千字

2006 年 8 月第 1 版

2013 年 6 月第 2 版 2013 年 6 月第 1 次印刷

定 价：36.00 元

---

未经许可，不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版 权 所 有，侵 权 必 究

举报电话：010 - 62752024 电子信箱：fd@pup.pku.edu.cn

## 第 2 版前言

《机械工程材料》一书，坚持以加强学生成才教育和创新能力培养作为教材编写的目标，突出培养应用型人才的特色，强调理论教学以工程应用为目的。全书以培养学生对材料及其改性方法的选择能力作为教材编写的主线，对工程材料及其相关理论进行适当的提炼、精简和整合，引导学生学以致用，培养学生分析和解决问题的能力。基本理论部分将金属材料与非金属材料的基本理论尽可能结合在一起，既突出共性，又兼顾个性；应用知识方面注重工程材料及改性方法的选择，在保证基础知识的前提下，引入了较多的应用实例，突出应用，强调能力培养。

诸多院校使用第 1 版教材后，普遍认为内容安排有新意，取舍合理、深度适宜、定位准确、适用面广，思路清晰，理论阐述清楚、正确、系统、完整，符合认识规律，反映了本课程特有的思维方法，完整地表达了本课程应包含的知识，反映其相互联系及发展规律，结构严谨；举例丰富、得当，强调应用、注重引导，便于学生理解及知识向能力的转化；习题量较合理，有一定的启发性，有利于激发学生的学习兴趣及各种能力的培养。

再版教材在第 1 版教材的基础上，强化了塑变理论的相关内容，并在每章前增加了与本章内容有关的导入案例，在每章后增加了内容丰富且与本章内容有关的阅读材料——知识链接。

全书由江苏大学戈晓岚、招玉春、中南林业科技大学钟利萍、华北水利水电学院谭群燕、甘肃农业大学孙步功、九江学院胡世华、德州学院冯瑞宁编写，戈晓岚、招玉春任主编，钟利萍、谭群燕任副主编，由戈晓岚教授统一修改并统稿。清华大学张学政教授担任主审，并对全书提出了宝贵的修改意见，在此表示衷心感谢。在编写过程中，编者还参考了国内外许多相关教材、科技著作和论文，在此向这些资料的作者们表示深深的谢意。

由于编者水平有限，书中难免存在缺点和不足，敬请读者批评指正。

编 者  
2013 年 4 月

# 目 录

绪论 .....	1
<b>第 1 章 材料的结构与组成 .....</b>	<b>5</b>
1. 1 材料的结构 .....	6
1. 1. 1 晶体与非晶体 .....	6
1. 1. 2 晶体中的化学键合 .....	6
1. 1. 3 晶体结构 .....	8
1. 1. 4 晶体中的缺陷 .....	12
1. 2 合金的组成与结构 .....	15
1. 2. 1 金属及合金的化学组成 .....	15
1. 2. 2 合金材料组元的结合形式 .....	16
1. 3 高分子化合物的组成与结构 .....	18
1. 3. 1 高分子化合物的组成 .....	18
1. 3. 2 高分子链的组成与结构 .....	19
1. 3. 3 高分子链的聚集态结构 .....	20
1. 3. 4 高分子材料的组成和织态结构及微区结构 .....	21
1. 4 陶瓷材料的组成与结构 .....	24
1. 4. 1 晶体相 .....	25
1. 4. 2 玻璃相 .....	27
1. 4. 3 气相 .....	27
1. 5 晶体的结晶 .....	28
1. 5. 1 金属的结晶 .....	28
1. 5. 2 结晶理论的应用 .....	30
1. 5. 3 材料的同素异构现象 .....	32
习题 .....	37
<b>第 2 章 材料的力学行为 .....</b>	<b>39</b>
2. 1 材料的性能 .....	40
2. 1. 1 静态力学性能 .....	40
2. 1. 2 动态力学性能 .....	45
2. 1. 3 高低温性能 .....	47
2. 1. 4 材料的工艺性能 .....	48
2. 1. 5 工艺过程对材料性能的影响 .....	48
2. 2 金属的塑性变形与再结晶 .....	50
2. 2. 1 单晶体的弹性及塑性变形 .....	50
2. 2. 2 实际金属的塑性变形 .....	55
2. 2. 3 塑性变形对金属组织与性能的影响 .....	58
2. 2. 4 金属的再结晶 .....	60
2. 3 金属的热加工 .....	62
2. 3. 1 金属的热加工与冷加工 .....	62
2. 3. 2 热加工对金属组织和性能的影响 .....	64
2. 4 高聚物的力学状态 .....	65
2. 4. 1 线型无定型高聚物的力学状态 .....	65
2. 4. 2 结晶和交联对高聚物力学状态的影响 .....	66
习题 .....	70
<b>第 3 章 二元合金相图及相变</b>	
<b>基础知识 .....</b>	<b>71</b>
3. 1 相图的概念 .....	72
3. 1. 1 平衡相图 .....	72
3. 1. 2 冷却曲线 .....	73
3. 1. 3 溶解度与相图的基本类型 .....	74
3. 2 平衡相图的应用 .....	76
3. 2. 1 表象点的研究 .....	76
3. 2. 2 合金的结晶过程分析 .....	77
3. 2. 3 三相反应 .....	80
3. 2. 4 金属化合物 .....	81
3. 2. 5 相图与合金性能之间的关系 .....	82



3.3 铁-碳平衡相图 .....	83
3.3.1 铁碳合金的基本相和组织 .....	83
3.3.2 铁碳合金相图分析 .....	84
3.3.3 铁碳合金在平衡冷却时的转变 .....	86
3.3.4 含碳量对铁碳合金组织性能的影响 .....	92
3.4 钢在加热时的转变 .....	93
3.4.1 奥氏体形成过程及其影响因素 .....	94
3.4.2 奥氏体晶粒度及其影响因素 .....	95
3.5 钢在非平衡冷却时的转变 .....	96
3.5.1 过冷奥氏体等温冷却转变 .....	96
3.5.2 过冷奥氏体连续冷却转变 .....	101
3.5.3 TTT 图与 CCT 图的比较 .....	104
习题 .....	106
<b>第 4 章 材料的改性 .....</b>	<b>108</b>
4.1 钢的预备热处理 .....	109
4.1.1 钢的退火 .....	110
4.1.2 钢的正火 .....	112
4.1.3 退火与正火的选用 .....	113
4.2 钢的最终热处理 .....	113
4.2.1 钢的淬火 .....	113
4.2.2 钢的回火 .....	117
4.2.3 淬火钢的三大特性 .....	123
4.3 热处理新工艺简介 .....	125
4.3.1 形变热处理 .....	125
4.3.2 强韧化处理 .....	126
4.3.3 循环热处理 .....	127
4.4 金属材料的表面改性 .....	127
4.4.1 表面改性的目的 .....	127
4.4.2 钢的表面淬火 .....	128
4.4.3 化学热处理 .....	130
4.4.4 表面变形强化 .....	135
4.5 金属材料的固溶处理及时效强化 .....	135
4.5.1 铝合金的固溶时效强化 .....	135
4.5.2 铜合金的固溶时效强化 .....	137
4.6 高聚物的改性 .....	137
4.6.1 化学改性 .....	137
4.6.2 物理改性 .....	138
4.7 陶瓷材料的改性 .....	139
4.7.1 固溶强化 .....	139
4.7.2 细化晶粒及降低陶瓷的裂纹尺寸 .....	139
4.7.3 第二相强化 .....	140
4.7.4 相变增韧 .....	140
4.7.5 纤维补强 .....	140
习题 .....	141
<b>第 5 章 工业用钢及铸铁 .....</b>	<b>143</b>
5.1 钢的综述 .....	146
5.1.1 钢材生产简介 .....	146
5.1.2 钢的分类、编号和成分特点 .....	147
5.1.3 碳钢和合金钢的特点 .....	151
5.1.4 合金元素在钢中的作用 .....	152
5.2 结构钢 .....	153
5.2.1 工程结构钢 .....	153
5.2.2 机器结构钢 .....	156
5.3 工具钢 .....	164
5.3.1 刀具钢 .....	164
5.3.2 模具钢 .....	169
5.3.3 量具钢 .....	171
5.4 特殊性能钢 .....	172
5.4.1 不锈钢 .....	172
5.4.2 耐热钢 .....	172
5.4.3 耐磨钢 .....	174
5.5 铸铁 .....	175
5.5.1 灰铸铁 .....	178
5.5.2 蠕墨铸铁 .....	180

5.5.3 可锻铸铁 .....	181	7.2.3 现代陶瓷 .....	229
5.5.4 球墨铸铁 .....	182	7.2.4 金属陶瓷 .....	231
5.5.5 合金铸铁 .....	183	7.3 复合材料 .....	234
5.5.6 铸铁热处理特点 .....	184	7.3.1 复合材料的增强机制与 性能 .....	234
习题 .....	187	7.3.2 常用复合材料 .....	236
<b>第6章 有色金属及其合金 .....</b>	<b>189</b>	习题 .....	242
6.1 铝及铝合金 .....	191	<b>第8章 材料的选用 .....</b>	<b>244</b>
6.1.1 综述 .....	191	8.1 零件的失效分析 .....	249
6.1.2 变形铝合金 .....	191	8.1.1 失效的概念 .....	249
6.1.3 铸造铝合金 .....	195	8.1.2 零件失效类型及 原因 .....	250
6.2 铜及铜合金 .....	197	8.1.3 失效分析方法 .....	251
6.2.1 综述 .....	197	8.2 材料选用的原则与方法 .....	252
6.2.2 黄铜 .....	198	8.2.1 使用性能与选材 .....	252
6.2.3 青铜 .....	199	8.2.2 工艺性与选材 .....	254
6.3 轴承合金 .....	202	8.2.3 经济性与选材 .....	255
6.3.1 锡基轴承合金 .....	202	8.2.4 选材的一般方法 .....	257
6.3.2 铅基轴承合金 .....	203	8.3 常用材料的性能比较 .....	259
6.3.3 其他轴承合金 .....	204	8.3.1 材料的力学性能比较 .....	259
6.4 其他有色金属及合金 .....	205	8.3.2 材料的物理性能比较 .....	261
6.4.1 钛及钛合金 .....	205	8.4 典型零件的选材 .....	263
6.4.2 锌基合金 .....	206	8.4.1 轴类零件的选材 .....	263
6.4.3 镍基合金 .....	206	8.4.2 齿轮类零件的选材 .....	267
习题 .....	210	8.4.3 箱体支承类零件的选材 .....	269
<b>第7章 非金属材料 .....</b>	<b>212</b>	8.4.4 工模具的选材 .....	270
7.1 高分子材料 .....	216	8.5 常用机械用材 .....	272
7.1.1 工程塑料 .....	216	8.5.1 常用机械用材情况与 趋向 .....	272
7.1.2 橡胶 .....	223	8.5.2 材料的代用与节材 .....	273
7.1.3 聚合物合金及互穿聚合物 网络 .....	225	习题 .....	280
7.1.4 胶粘剂 .....	227	<b>附录 .....</b>	<b>282</b>
7.2 工业陶瓷 .....	228	<b>参考文献 .....</b>	<b>293</b>
7.2.1 普通陶瓷 .....	229		
7.2.2 特种陶瓷 .....	229		

# 绪论

工程材料(表0-1)是指工程上使用的材料，其种类繁多。金属材料是目前应用最广泛的工程材料，包括纯金属及其合金。在工业上，把金属材料分为两类：一类是黑色金属，指铁、锰、铬及其合金，其中以铁为基的合金(钢和铸铁)应用最广；另一类是有色金属，指除黑色金属以外的所有金属及其合金。按照特性的不同有，有色金属又分为轻金属、重金属、贵金属、稀有金属和放射性金属等。

非金属材料是近几十年来发展很快的工程材料，预计今后还会有更大的发展。非金属材料包括有机高分子材料和无机非金属材料两大类。有机高分子材料的主要成分是碳和氢，按其应用可分为塑料、橡胶、合成纤维；而无机非金属材料是指不含碳、氢的化合物，其中以陶瓷应用最广。两种或两种以上不同性质或不同组织结构的材料以微观或宏观的形式组合在一起构成了复合材料。复合材料是一种新型的、具有很大发展前途的工程材料。它不仅保留了组成材料各自的优点，而且具有单一材料所没有的优异性能。

表0-1 工程材料的基本特点

分类	基本组成	原子间结合键	结构类型	材料举例	弹性模量	弹性变形量	强度	硬度	塑韧性	耐热性	熔点	耐蚀性	导电、导热性	成形性	其他性能
金属材料	金属元素为主	金属键为主	晶体	钢、铸铁、铜合金、铝合金	较高	较小	较高	良好 (除铸铁等)	较高	较高	一定 程度	良好	良好	密度大、不透明、有金属光泽	
有机高分子材料	有机高分子化物为主	分子内共价键，分子间弱键或共价键交联	无定形态、晶态(混有无定形态区)	塑料、橡胶	小	很大或 较大	较低	较低	变化大	较低	高	绝缘、 导热不良	良好	密度小、热膨胀系数大、抗蠕变性能低、减摩性好	
陶瓷材料	硅酸盐、氧化物、碳化物等	离子键为主，也有共价键	晶体为主	瓷器、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{MgO}$ 、 $\text{BN}$ 、 $\text{TiC}$ 、 $\text{WC}$ 、 $\text{SiC}$	高	极小	抗压 强度高	高	脆	高	高	绝缘、 导热不良	差	耐磨性好、抗热振性差、抗拉强度低	
复合材料	几种材料的组合	复杂	混合	硼、碳、玻璃、金属等纤维复合材料	高于 单一 材料	高于 单一 材料			高于 单一 材料		高于 单一 材料	技术 复杂			



我国古代在金属及加工工艺方面的成就极其辉煌。商朝(公元前 16 世纪至公元前 11 世纪)已是青铜器的全盛时期,当时青铜冶铸技术精湛,在河南安阳武官村出土的后母戊鼎(图 0.1)是商朝的大型铸件,鼎重 875kg,其上花纹精致。战国时制剑术已相当高明,说明当时已掌握了锻造和热处理技术。明朝宋应星所著《天工开物》一书,论述了治铁、铸钟、锻造、淬火等金属加工的方法,是世界上有关金属加工的最早的科学著作之一。

图 0.2 说明通过基础学科已有的知识指导材料成分、结构与性能的研究,也指导了工艺流程的发展,通过工艺流程生产出可供使用的工程材料,而工程材料在使用过程中所暴露的问题,再反馈到成分、结构与性能的研究,进而改进工艺过程,得到更为合适的工程材料。如此反复,使材料不断改进而更加成熟。

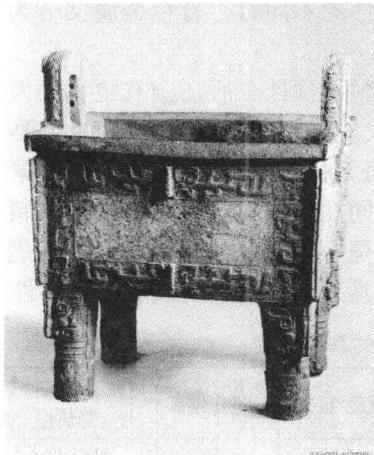


图 0.1 后母戊鼎

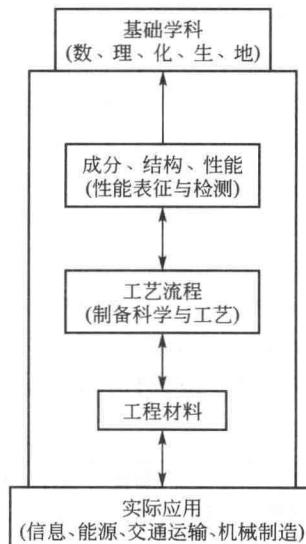


图 0.2 材料科学及其基础  
科学与使用间的关系

为开发新的工程材料,材料学家们先是设计出新的材料结构,再开发出新的制造方法,使材料的种类呈几何级数增长。据粗略统计,目前我们共拥有 45000 种金属合金,15000 种聚合物,还有近千种陶瓷、木材、复合材料和纺织品。让我们看一下一辆小轿车所用材料的更新情况。以 1986 年梅塞德斯-奔驰轿车为例,使用了 67% 的钢铁,12% 的聚合物,4% 的铝合金和 12% 的纺织品。而一辆 1996 年的同牌号汽车,钢铁下降到 62%,聚合物增加到 18%,铝合金增加到 6%。不仅是汽车行业,其他行业中使用聚合物的比例也在增高。在日常生活中更不必说,每个人都能感受到身边的塑料用品越来越多。图 0.3 是材料成熟曲线,它是根据了解到的发展规划绘制的。从图中可以看出,聚合物、陶瓷、复合材料的应用将大幅度增加。复合材料是一种或多种材料的结合体。玻璃钢与混凝土是两个最熟知的例子。当然今天的复合材料不会那样简单,而是集高强度、低重量于一身的工程化材料。

在材料的使用过程中有一部分会自动回到最初在大自然中的存在形式,在物品的使用寿命过后,大部分材料可以被重新利用。物质在这一系列过程中,从一种存在形式转化为另一种存在形式,生生不息。这一过程可以看做一个循环圈,称为材料环。从图 0.4 所示

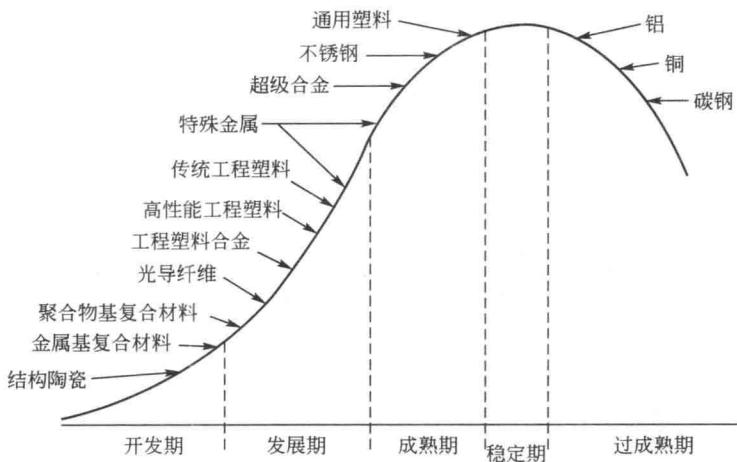


图 0.3 材料成熟曲线

的材料环中，我们可以看到物质如何被转化成为材料、材料的存在形式如何转变，更重要的是我们可以看到材料被发掘利用的各个阶段，由此可以看到材料在日常生活中和工程技术中的重要性。

材料环是不完整的，不是完美的圆形，它存在缺口。材料的发掘利用给自然界、人类社会带来了后遗症。采矿、钻井、森林砍伐都会造成破坏性的后果。矿尾经雨水的冲刷给植物、动物、河流、湖泊造成污染；钻井会造成有害物质的溢出；森林砍伐更会造成水土流失，并使动物无家可归。

但另一方面，如果不采矿，不钻井，不砍伐森林，我们无法拥有今天巨大的物质财富，不可能拥有今天繁荣的世界。但我们必须认识到资源是有限的，可丢弃废物的空间更是有限的。每个人都应该利用材料学的知识，最大程度地合理利用自然资源，保护自然环境，保护我们唯一的家园。

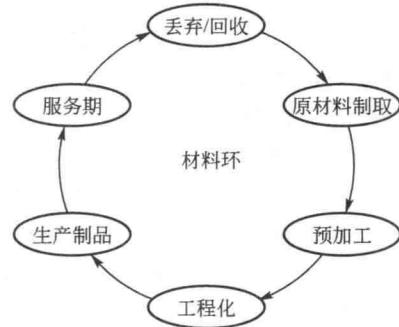


图 0.4 材料环

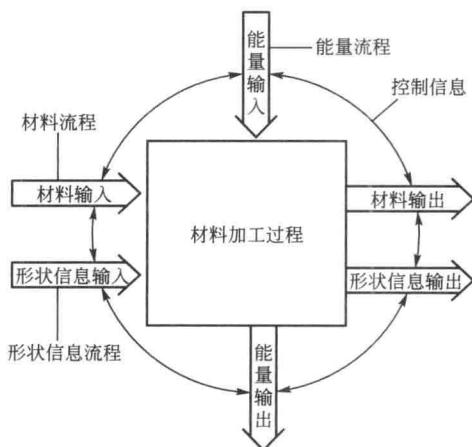


图 0.5 机械制造系统流程

从日常生活用具到高、精、尖的产品，从简单的手工工具到技术复杂的航天器、机器人，都是由不同种类、不同性能的材料加工而成的。材料只有经过各种加工(包括材料的成形、改性、连接等)最终形成产品，才能体现其功能和价值。对机械制造业而言，其生产过程就是将原材料加工成为产品的过程。而不同的产品，则应选择相应的材料，采用与之相适应的成形方法及加工过程。在现代生产中，整个制造系统流程总是与信息流、材料流、能量流联系起来的(图 0.5)。这里的“信息流”主要是指计划、管理、设计、工艺等方面的信息；“能量流”主要是指动力能源系统；而“物质流”则主要指从原材



料经过加工、制造、装配到成品的过程。可见材料及加工工艺在制造业中占有重要的位置。

“机械工程材料”是机械类各专业必修的技术基础课。学习本课程前，学生应先学完材料力学，参加过金工实习，对机械工程材料的加工过程及其应用有一定的感性认识。通过本课程的学习，为从事机械设计与制造、机械产品质量控制以及后续课程的学习奠定必要的基础。

本书的内容体系是建立在材料科学基础之上，并紧紧围绕材料选用这一主线，对现有的相关教材进行必要的分析，“保持特色、精炼基础；拓宽知识、跟踪时代；注重应用、强化能力”，坚持“精、实、广、新、活”的六字目标。精：提高起点、精炼基础；实：注重应用，培养能力；广：拓宽知识面，注重各学科知识的综合；新：知识适当更新，既保持特色，又注意学科前沿；活：强调自学能力和科学思维方法的训练，变“学会”为“会学”。

本课程是一门理论和实践性很强的课程，机械工程材料的工程应用是本教材的核心内容。基本原理与基本知识的学习要落实在机械设计与机械制造的具体工程应用上。讲授时应注意教学方法，尽可能列举学生能接受的生产应用实例，辅以课堂讨论，强化实验，加深学生对课程内容的理解。在学习中，学生应以成分→工艺→结构→性能→应用这条主线进行学习。同时还应充分应用学过的知识，及时复习，认真阅读每章的学习指导，认真完成实验和课外作业，在学习中应常进行“①对不对(判断性思考)？②是什么(叙述性思考)？③为什么(理性思考)？④还有什么(扩散性思考)？”的检查，尽可能消化和理解工程材料的基本理论知识，达到能初步应用的目的。

本书将教材内容和学习指导有机融合，每章都有帮助读者消化、巩固、深化学习内容和应用的学习指导和习题。书中基本术语和材料牌号等采用了最新国家标准。

# 第1章

## 材料的结构与组成



### 本章教学要点

知识要点	掌握程度	相关知识
晶体结构	重点掌握	晶格、晶胞、晶面、晶向，以及三种常见晶格；实际晶体的结构和晶体的三种缺陷
合金的组成与结构	掌握	组元、相、组织、合金；固溶体与化合物的本质区别和它们的性能特点
固溶强化和弥散强化	重点掌握	固溶强化和弥散强化的概念和实际意义
高分子化合物的组成与结构	掌握	大分子链的结构、构象及柔顺性、高分子材料的聚集态结构和微区结构
陶瓷材料的组成与结构	了解	陶瓷的典型组织和结构
金属的结晶过程	重点掌握	金属的结晶过程、过冷度、晶核、晶粒、晶界及晶粒细化方法；纯铁的同素异构转变，同素异构及同分异构对材料的性能产生的影响



## 沙漠的诱惑

历史称物理学中的第一片沙漠为晶体。在西游记中猪八戒有36变，孙悟空能72变。晶体按方向对称有32变，按平移构造有230变；数学家分别称之为32种点群和230种空间群。连西游记的作者也想不到36和72之外还有没有别的变化，数学上却已严格证明了32和230之外不可能再存在别的晶体点群或晶体空间群。徒弟们的36变和72变确保了唐僧平安到达西天，晶体的32变和230变帮助人类发展出今天的科学技术文明。历史记载下科学家参悟出32变和230变的研究晶体的艰难历程，使得17世纪中叶以后的二三百年间，晶体学被欧洲人称为物理学中的沙漠，在物理学渡越这第一片大沙漠的旅程中，曾经留有多少英雄为之折腰。关于晶体的研究，数学家将代数进一步加以抽象，发展成为抽象数学的一个新分支，称为群论，而代数、几何和函数分析等，只不过是初等具体的数学。从牛顿时期到20世纪30年代，物理学形成了从宏观到微观的系统的基本原理。在20世纪四五十年代，物理学家以之为基础，加上运用群论的抽象数学方法，创建了一整套的固体理论，后者是研究材料和设计其巧妙应用的依据，被称为材料的物质几乎都是固体，半导体的能带理论就是其中的重要成果之一。在这些物理学知识的指导下，工程师才能够做出锗和硅等特种人工晶体，用来加工复杂的芯片，并组装成各种电子设备和计算机，这就是信息时代文明的由来。人们已经乐于在满园春色的信息网络中漫游；两三百年间在沙漠中挣扎的科学家的辛酸苦辣，可为丰盛的晚餐提供调味品。

## 1.1 材料的结构

### 1.1.1 晶体与非晶体

固态物质按其内部原子或分子的排列是否有序，可分为晶体和非晶体两大类。

晶体是原子(离子或分子)在三维空间作有规则的周期性排列的物体。非晶体中这些质点则呈无规则排列。自然界中绝大多数固体都是晶体，如常用的金属材料、半导体材料、磁性薄膜及光学材料等。晶体材料被广泛应用于各个领域。

### 1.1.2 晶体中的化学键合

各种材料都由不同元素的原子、离子或分子结合而成。原子间的结合力称为结合键。材料的许多性能在很大程度上都取决于其键合方式。根据结合键的强弱可把结合键分为两大类：

- (1) 一次键(又称主价键)：结合力较强，包括离子键、共价键和金属键。
- (2) 二次键(又称次价键)：结合力较弱，包括范德华键(分子键)和氢键。

#### 1. 金属键及金属晶体

金属原子之间的结合键称为金属键。金属原子间依靠金属键结合形成金属晶体。

金属键的基本特点是电子共有化。在金属原子相互紧密接近时,由于原子间的相互作用,金属原子的价电子便从各个原子中脱离出来,为整个金属所共用,形成“电子云”。金属正离子与自由电子间的静电作用,使金属原子结合起来,形成金属晶体,这种结合方式称为金属键,如图 1.1 所示。

除铋、锑、锗、镓等亚金属为共价键结合外,绝大多数都是金属晶体。

在金属晶体中,价电子弥漫在整个体积内,所有的金属离子都处于同样的环境中,全部离子(原子)均可看成具有一定体积的圆球,所以金属键无所谓方向性和饱和性。金属晶体具有良好的导电性、导热性、正的电阻温度系数及排列紧密和呈现特有的金属光泽等都直接起因于金属键结合。

## 2. 离子键及离子晶体

当正电性金属原子与负电性非金属原子形成化合物时,通过外层电子的重新分布和正、负离子间的静电作用而相互结合,从而形成离子晶体,这种结合键为离子键,如图 1.2 所示。大部分盐类、碱类和金属氧化物都属离子晶体,部分陶瓷材料( $MgO$ 、 $Al_2O_3$ 、 $ZrO_2$  等)及钢中的一些非金属夹杂物也以此键结合。

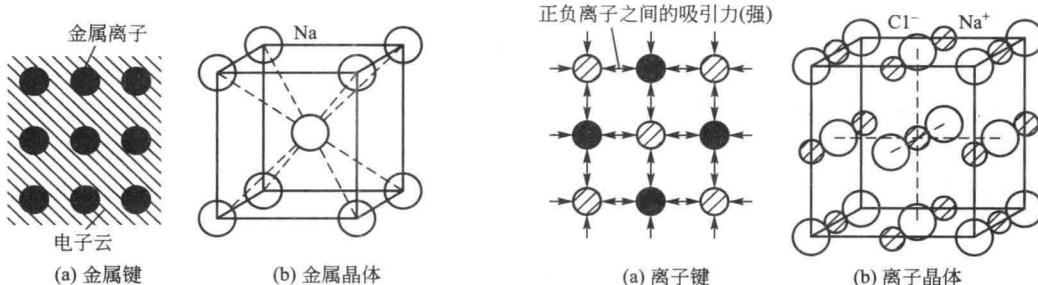


图 1.1 金属键及金属晶体

图 1.2 离子键及离子晶体

离子键的结合力很大,因此离子晶体的硬度高、强度大、热胀系数小,但脆性大。离子键中很难产生自由电子,所以离子晶体都是良好的绝缘体。

## 3. 共价键及共价晶体

当两个相同的原子或性质相差不大的原子相互接近时,它们的原子间不会有电子转移。此时相邻原子各提供一个电子形成共用电子对,以达到稳定的电子结构。这种由共用电子对所产生的力称为共价键(图 1.3(a)),以此键结合的称为共价晶体(图 1.3(b))。

共价键结合时,由于电子对之间强烈的排斥力,使共价键具有明显的方向性。由于方向性不允许改变原子之间的相对位置,使材料不具有塑性且比较坚硬,如金刚石就是材料中最坚硬的物质之一。共价键的结合力很大,熔点高,沸点高,挥发性低。锡、锗、铅等亚金属及金刚石、 $SiC$ 、 $Si_3N_4$ 、 $BN$  等非金属材料都是共价晶体。

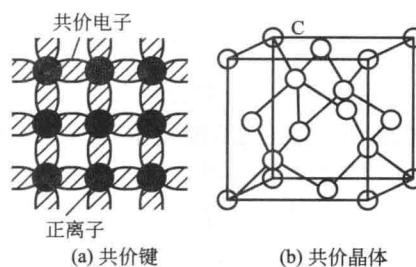


图 1.3 共价键及共价晶体



#### 4. 分子键与分子晶体

一次键的结合方式都是依靠外层电子的转移或形成共用电子对而形成稳定的电子结构，从而使原子相互结合起来。在另外一些情况下，原子和分子本身已具有稳定的电子结构，如已经形成稳定电子壳层的惰性气体 He、Ar、Ne 等和分子状态的 CH<sub>4</sub>、H<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>O 等在低温时能凝聚成液体或固体。它们不是依靠电子的得失或共享结合，而是借助于原子之间的偶极吸引力结合而成的。这种存在于中性原子或分子之间的结合力称为二次键。图 1.4 为范德华键结合示意图。

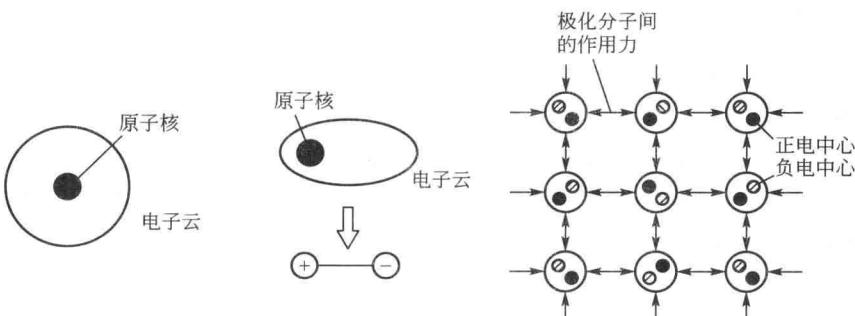


图 1.4 范德华键结合示意图

分子键(又称范德华键)与氢键都是二次键，即依靠原子(或分子、原子团)的偶极吸引力结合而成，只是氢键中的氢原子起了关键作用，即氢原子在两个电负性很强的原子或原子团之间形成一个桥梁，把两者结合起来。或者说，氢键是一种较强的、有方向性的范德华键。

依靠分子键结合起来的晶体称分子晶体。高分子材料大分子内的原子之间为共价键结合，而大分子链与大分子链之间结合成固体则依靠范德华键结合；在带有—COOH、—OH、—NH<sub>2</sub> 原子团的高聚物中常依靠氢键将长链分子结合起来。

#### 5. 混合键

实际上，大多数材料内部原子的结合键往往是几种键的混合，其中以一种结合键为主，如金属主要是金属键结合，但也会出现一些非金属键；陶瓷化合物则常为离子键和共价键混合。

#### 1.1.3 晶体结构

##### 1. 晶体、晶格、晶胞

晶体(图 1.5(a))是内部原子规则排列的物体，但排列的方式有多种。晶体中原子(分子或离子)在空间的规则排列的方式称为晶体结构。为便于描述晶体结构，把每个原子抽象成一个点，把这些点用假想直线连接起来，构成空间格架，称为晶格，如图 1.5(b)所示。组成晶格的最小几何组成单元称为晶胞，晶胞的大小和形状可用晶胞的棱边长度  $a$ 、 $b$ 、 $c$  和棱边夹角  $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$  来表示，如图 1.5(c)所示，它们被称为晶格常数，其长度单位为  $10^{-10}\text{m}$ 。晶格中的每个点称为结点。

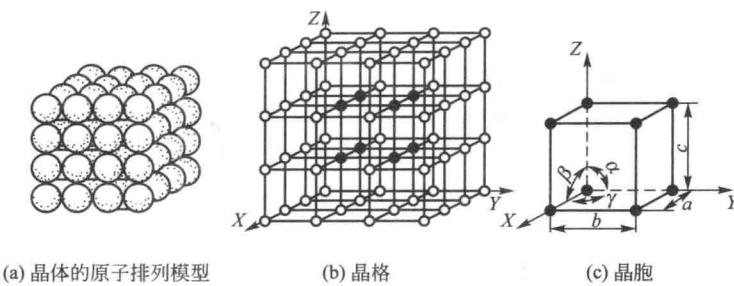


图 1.5 晶体、晶格和晶胞示意图

## 2. 晶面和晶向的表示方法

在晶体中，任意两个原子之间的连线称为原子列，其所指方向称为晶向；由一系列原子所组成的平面称为晶面。为了分析方便，通常用一些晶体学指数来表示晶面和晶向，分别称为晶面指数和晶向指数，其确定方法如下。

### 1) 晶面指数

晶面指数的确定步骤如下：

- ① 选取三个晶轴为坐标系的轴，各轴分别以相应的晶格常数为量度单位，其正负关系同一般常例；
- ② 从欲确定的晶面组中，选取一个不通过原点的晶面，找出它在三个坐标轴上的截距；
- ③ 取各截距的倒数，按比例化为简单整数  $h$ 、 $k$ 、 $l$ ，而后用括号括起来成  $(hkl)$ ，即为所求晶面的指数。 $(hkl)$  实际表示一组原子排列相同的平行晶面。

当某晶面与一晶轴平行时，它在这个轴上的截距可看成是  $\infty$ ，则相应的指数为 0。

当截距为负值时，在相应的指数上边加以负号。

图 1.6 所示为立方系的几个晶面和它们的指数。

在立方晶系中，由于原子的排列具有高度的对称性，往往存在有许多原子排列完全相同但在空间位向不同（即不平行）的晶面，这些晶面总称为晶面族，用大括号表示，即  $\{hkl\}$ 。如立方晶胞中  $(111)$ 、 $(\bar{1}11)$ 、 $(1\bar{1}1)$ 、 $(11\bar{1})$  等同属  $\{111\}$  晶面族，可用式 (1-1) 表示：

$$\{111\} = (111) + (\bar{1}11) + (1\bar{1}1) + (11\bar{1}) \quad (1-1)$$

### 2) 晶向指数

晶向指数的确定步骤如下：

- ① 以晶胞的三个棱边为坐标轴  $x$ 、 $y$ 、 $z$ ，以棱边长度（即晶格常数）作为坐标轴的长度单位；
- ② 通过坐标原点作一与所求晶向平行的另一晶向；
- ③ 求出这个晶向上任一结点的矢量在三个坐标轴上的分量（即求出任一结点的坐标数）；
- ④ 将此数按比例化为简单整数  $u$ 、 $v$ 、 $w$ ，而后用方括号括起来成  $[uvw]$ ，即得所求的晶向指数。如坐标数为负值，即在相应指数上边加负号，例如  $[\bar{u}\bar{v}w]$ 。

若两组晶向的全部指数数值相同而符号相反，如  $[110]$  与  $[\bar{1}\bar{1}0]$ ，则它们相互平行或

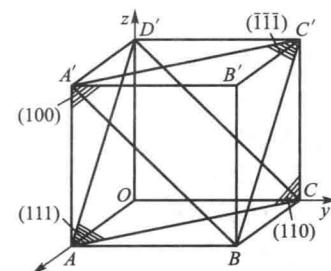


图 1.6 立方系的几个晶面和它们的指数



为同一原子列，但方向相反。若只研究该原子列的原子排列情况，则晶向  $[110]$  与  $[\bar{1}\bar{1}0]$  可用一指数  $[110]$  表示。

图 1.7 所示为立方晶胞中的主要晶向。

与晶面相似，原子排列情况相同而在空间位向不同(即不平行)的晶向统称为晶向族，用尖括号表示，即  $\langle u v w \rangle$ 。如：

$$\langle 100 \rangle = [100] + [010] + [001] \quad (1-2)$$

晶体中一系列晶面可相交于一条直线或几条相平行的线，这些晶面合称一个晶带，这些直线所代表的晶向称晶带轴。晶带轴  $[uvw]$  与其所属晶面  $\{hkl\}$  之间各指数满足式(1-3)：

$$hu + kv + lw = 0 \quad (1-3)$$

在立方晶系中，晶面指数与晶向指数在数值上完全相同或成比例时，它们是互相垂直的，例如  $[111] \perp (111)$ ，如图 1.8 所示。

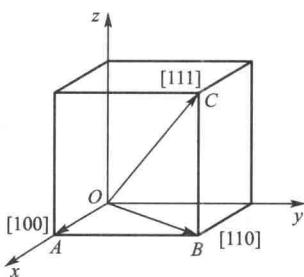


图 1.7 立方晶胞中的主要晶向

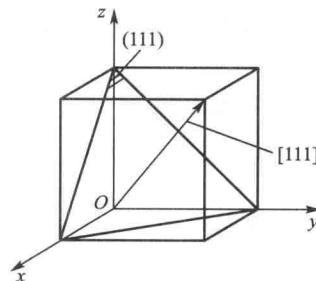


图 1.8 晶面与晶向互相垂直

### 3. 金属的晶体结构

金属中由于原子间通过较强的金属键结合，原子趋于紧密排列，构成少数几种高对称性的简单晶体结构。在金属元素中，约有 90% 以上的金属晶体结构都属于下列三种晶格形式。

#### (1) 体心立方晶格(胞)(body-centered cubic lattice, B.C.C. 晶格)

如图 1.9 所示，在体心立方晶格的晶胞中，立方体的 8 个角上各有一个原子，在立方体的中心排列一个原子。

体心立方晶格具有如下特征：

① 晶格常数： $a=b=c$ ,  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 。

② 晶胞原子数：体心立方晶胞每个角上的原子为相邻的八个晶胞所共有，因此实际上每个晶胞所含原子数为： $1/8 \times 8 + 1 = 2$ (个)(图 1.9(c))。

③ 原子半径：因其体对角线方向上的原子彼此紧密排列(图 1.9(a)), 显然体对角线长度  $\sqrt{3}a$  等于四个原子半径，故体心立方晶胞的原子半径  $r = \frac{\sqrt{3}a}{4}$ 。

④ 致密度：晶胞中原子排列的紧密程度可用致密度来表示，致密度是指晶胞中原子所占的体积与该晶胞体积之比。体心立方晶胞中原子所占的体积为  $\frac{4}{3}\pi r^3 \times 2$ ，晶胞体积为  $a^3$ ，故可算出其致密度为 0.68。即在体心立方晶格金属中，有 68% 的体积被原子所占据，