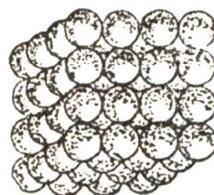


● 刘孝敏 / 编著

# 工程材料的微细观结构 和力学性能

GONGCHENG CAILIAO DE WEIXIGUAN JIEGOU  
HE LIXUE XINGNENG



【中国科学技术大学出版社】

# 工程材料的微细观结构和力学性能

刘孝敏 编著

中国科学技术大学出版社

2003·合肥

## 内 容 简 介

本书系统地介绍了四大类工程材料（金属材料、有机高分子材料、陶瓷材料和复合材料）以及纳米材料的微细观结构和力学性质，阐述材料的微细观结构对材料力学性能的影响。

全书分为三大部分：（1）第 2 章~第 9 章分别介绍金属材料的晶体结构和晶体结构中的缺陷，阐述材料的微细观结构和缺陷对材料的变形、破坏、强度以及其它力学性能的影响。（2）第 10 章~第 12 章分别介绍非金属材料（有机高分子材料、陶瓷材料和复合材料）的微细观结构和力学性能。（3）第 13 章分别介绍纳米材料的微细观结构和力学性能。可作为高校材料科学专业和力学专业的高年级学生或研究生的专业课教材。

### 图书在版编目（CIP）数据

工程材料的微细观结构和力学性能/刘孝敏编著. —合肥：中国科学技术大学出版社，2003.8  
ISBN 7-312-01572-7

I. 工… II. 刘… III. ①工程材料-结构性能-高等学校-教材 ②工程材料-力学性能-高等学校-教材 IV. TB30

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2003）第 057842 号

中国科学技术大学出版社出版发行

（安徽省合肥市金寨路 96 号，邮编：230026）

中国科学技术大学印刷厂印刷

全国新华书店经销

开本：787 mm×1092 mm/16 印张：18 字数：458 千

2003 年 8 月第 1 版 2003 年 8 月第 1 次印刷

印数：1—2 000 册

ISBN 7-312-01572-7/TB·8 定价：22.00 元

# 前 言

材料是国民经济和社会发展的重要物质基础，它与信息、能源一起并列为现代技术的三大支柱。当代科学技术突飞猛进，引起了材料科学领域内的深刻变革。各种适应高技术发展的新型材料不断涌现，传统材料也在不断改进。材料科学领域内的深刻变化对力学研究产生了重大影响。近几十年来，力学研究对象已从传统的金属材料向无机非金属材料，有机高分子材料，复合材料以及一些新型材料（如非晶金属、形状记忆合金、功能梯度材料和纳米材料等）扩展。由于现代高科技对材料的使用条件提出了日益苛刻的要求，力学研究工作已从常规力学性能研究向强冲击、高低温、超高压、辐射等各种极端条件下的力学行为研究发展，而且，材料改性以及材料制备、加工和增强增韧技术中的力学问题的研究也正日益受到重视。力学研究领域发展的这一趋势对力学工作者提出了新的要求。力学工作者对各类工程材料的力学性能应该有一个比较全面的了解，而且，对材料力学性能的本质应该有比较深刻的认识，这就需要进一步了解材料宏观力学性能与材料微观结构之间的关系，以便在未来的研究工作中，当需要解决力学和材料学科交叉渗透的问题时，有比较坚实和宽广的理论基础。为此，我们为力学系学生开设了“工程材料的微观结构和力学性能”课程，并在教学讲义的基础上编写此书。

物质的内部结构决定了它典型的化学、物理和力学性能。因此，探讨材料的宏观力学性能和细、微观结构之间的关系，找出其内在规律，为预测和改进材料性能奠定理论基础是本书最重要的内容之一。在本书中，将以材料的微观结构、宏观力学性能以及两者之间的关系为主线，系统介绍：四大类工程材料的微观结构和缺陷；各类工程材料的力学性能；材料的微观结构和缺陷对材料的变形、破坏、强度以及其它力学性质的影响。在此基础上探讨改善材料力学性能的可行途径。

全书分为三大部分：

- （1）金属材料的晶体结构及力学性能；
- （2）非金属材料（有机高分子材料、陶瓷和复合材料）的微观结构和力学性能；
- （3）一种新型结构材料（纳米材料）的微观结构和力学性能。

本书适用于工程力学和应用力学专业的本科生、研究生，还可供从事力学和材料学科工作的科技工作者参考。

由于作者水平有限，书中恐有不当之处，恳请读者批评指正。

刘孝敏

2002年12月

## 目次

<b>第1章 绪论</b> .....	1
1.1 材料结构概述 .....	1
1.1.1 原子的电子结构 .....	1
1.1.2 原子的结合方式和结合键 .....	2
1.1.3 各类材料的结合键特点 .....	5
1.2 材料力学性能概述 .....	6
1.3 研究内容 .....	6
参考文献 .....	8
<b>第一编 金属材料</b>	
<b>第2章 纯金属的晶体结构</b> .....	9
2.1 晶体结构的一般知识 .....	10
2.1.1 晶体结构的一些重要概念 .....	10
2.1.2 晶体中晶面和晶向的表示方法 .....	14
2.2 纯金属的典型晶体结构 .....	17
参考文献 .....	18
<b>第3章 晶体缺陷</b> .....	19
3.1 晶体缺陷概述 .....	19
3.2 晶体中的点缺陷 .....	19
3.2.1 点缺陷的基本类型 .....	19
3.2.2 点缺陷的形成能及热平衡浓度 .....	21
3.3 晶体中的位错 .....	22
3.3.1 位错概念的引入 .....	23
3.3.2 位错的基本类型及其几何特征 .....	24
3.3.3 位错的普遍定义和伯格斯矢量 .....	26
3.3.4 位错的应力场和应变能 .....	29
3.3.5 位错的线张力 .....	35
3.3.6 位错在外应力场中所受的力 .....	36
3.3.7 平行位错间的相互作用力 .....	38
3.3.8 位错与点缺陷间的相互作用 .....	40
3.3.9 位错的运动 .....	43
3.3.10 位错的增殖 .....	48

3.3.11 位错的塞积	52
3.3.12 位错的交割	54
3.3.13 位错反应	56
3.3.14 实际晶体中的位错	57
3.3.15 位错对力学性能的影响	57
3.4 晶体中的面缺陷	58
3.4.1 晶体表面	58
3.4.2 晶界	58
3.4.3 相界	62
参考文献	62
<b>第4章 合金的相结构和显微组织</b>	<b>64</b>
4.1 合金概述	64
4.2 合金的相结构	64
4.2.1 固溶体	65
4.2.2 金属间化合物(中间相)	67
4.3 合金的显微组织和相图	69
4.3.1 相图概述	69
4.3.2 几种基本的二元合金相图	72
4.3.3 根据相图推断合金的性能	77
4.4 铁碳合金的显微组织和相图	78
4.4.1 铁碳合金的平衡相图和显微组织	78
4.4.2 钢的热处理原理	85
参考文献	96
<b>第5章 金属材料常规力学性能</b>	<b>97</b>
5.1 金属单向拉伸力学性能	97
5.1.1 金属单向拉伸应力-应变曲线	97
5.1.2 金属单向拉伸的力学性能指标	98
5.1.3 脆性材料的拉伸性能	100
5.2 金属扭转性能	101
5.2.1 等截面直圆柱试件在扭矩作用下的应力和应变	101
5.2.2 扭矩-扭角图和金属扭转性能指标	102
5.3 金属材料的抗弯强度	103
5.3.1 弯曲试验	103
5.3.2 脆性材料的抗弯强度	104
5.4 金属单向压缩的力学性能	104
5.4.1 塑性材料的应力-应变曲线及力学性能指标	104
5.4.2 低塑性和脆性材料的应力-应变曲线和力学性能指标	105
5.5 金属硬度	106

5.5.1 布氏硬度 (HB)	106
5.5.2 洛氏硬度	107
5.5.3 维氏硬度	108
5.5.4 维氏显微硬度	109
5.6 金属材料的冲击韧性	109
参考文献	110
<b>第6章 金属的弹性和塑性</b>	<b>111</b>
6.1 金属弹性变形的物理基础	111
6.1.1 广义虎克定律	111
6.1.2 弹性变形的物理本质	113
6.2 金属塑性变形的物理基础	115
6.2.1 单晶体塑性变形机制	116
6.2.2 多晶体塑性变形的特征	123
6.3 金属的屈服	124
6.3.1 屈服现象	124
6.3.2 非均匀屈服	124
6.3.3 均匀屈服	127
6.3.4 连续屈服	128
6.3.5 影响金属屈服强度的因素	129
6.4 金属晶体的应变硬化 (加工硬化)	130
参考文献	132
<b>第7章 金属的断裂</b>	<b>133</b>
7.1 金属断裂的基本类型和断口形貌	133
7.2 理论断裂强度和实际晶体的脆断强度	136
7.2.1 理论断裂强度	136
7.2.2 脆性断裂的 Griffith 理论和实际晶体的断裂强度	137
7.2.3 Griffith 裂纹的形核机制	139
7.3 韧性 (延性) 断裂	142
7.4 脆性-韧性转变和影响材料断裂形式的基本因素	143
7.4.1 应力状态和应力状态柔度系数 (软性系数)	143
7.4.2 温度和加载速率对断裂行为的影响	144
7.4.3 材料的微细观结构对断裂行为的影响	145
7.5 断裂韧性和裂纹开裂的宏观准则	146
7.5.1 三种基本断裂模型	147
7.5.2 裂纹尖端附近的应力场和应力强度因子	147
7.5.3 断裂韧性和裂纹失稳扩展判据	150
参考文献	152
<b>第8章 金属疲劳</b>	<b>153</b>

8.1 疲劳特征	153
8.2 金属疲劳的有关概念: 循环应力和疲劳寿命	154
8.3 金属疲劳性能	155
8.3.1 应力疲劳性能	155
8.3.2 应变疲劳(低周疲劳)性能	158
8.4 疲劳裂纹的形成和扩展机制	161
8.4.1 疲劳裂纹的形成	161
8.4.2 疲劳裂纹的扩展(疲劳条纹、Paris 定律和疲劳门槛值)	163
8.4.3 疲劳裂纹的闭合	166
8.5 累积损伤理论和疲劳寿命估算	167
参考文献	170
<b>第 9 章 金属的高温力学性能和低温力学性能</b>	171
9.1 金属的高温力学性能	171
9.1.1 金属的高温蠕变	171
9.1.2 蠕变断裂和蠕变断裂机制	174
9.2 金属的低温脆性	176
参考文献	177

## 第二篇 非金属材料

<b>第 10 章 高分子材料</b>	178
10.1 高聚物的结构和分子运动特点	178
10.1.1 高分子链的结构	179
10.1.2 高分子的聚集态结构	183
10.1.3 高聚物分子运动的特点	184
10.2 高聚物的力学状态和转变	186
10.2.1 线型无定型高聚物的三种力学状态及二种转变	186
10.2.2 结晶性高聚物的力学状态和转变	187
10.2.3 交联高聚物的力学状态及转变	188
10.2.4 高聚物的次级转变	188
10.3 高聚物的力学性能	188
10.3.1 高聚物力学性能概述	189
10.3.2 高聚物的高弹性	190
10.3.3 高聚物的粘弹性	196
10.3.4 高聚物的屈服和塑性变形	208
10.3.5 高聚物的银纹现象	213
参考文献	213
<b>第 11 章 陶瓷材料</b>	215
11.1 陶瓷材料概述	215

11.2 陶瓷材料的物质结构和显微组织	215
11.2.1 陶瓷的晶体相	216
11.2.2 陶瓷的玻璃相和气相	219
11.3 陶瓷材料的力学性能	220
11.3.1 陶瓷材料的弹性	220
11.3.2 常温下陶瓷材料的塑性和脆性	222
11.3.3 陶瓷材料的脆性断裂与强度	224
11.3.4 陶瓷材料的脆性及其改善	226
11.3.5 陶瓷材料的高温蠕变	228
参考文献	230
<b>第12章 复合材料的力学性能</b>	231
12.1 复合材料概述	231
12.1.1 复合材料的定义及分类	231
12.1.2 复合材料的力学特点	232
12.1.3 复合材料的增强材料和基体材料	233
12.1.4 研究内容	236
12.2 单向连续纤维增强复合材料的力学性能	236
12.2.1 单向复合材料的弹性性能	237
12.2.2 平面应力下单向复合材料的强度和破坏准则	241
12.3 单向连续纤维增强复合材料力学性能的细观分析	245
12.3.1 单向复合材料的应力和应变	245
12.3.2 单向复合材料的工程常数	246
12.3.3 单向复合材料的强度	249
参考文献	252
<b>第三篇 新材料</b>	
<b>第13章 纳米材料</b>	253
13.1 纳米材料概述	253
13.2 纳米结构材料的基本单元	255
13.3 纳米微粒的基本物理效应	256
13.4 纳米固体材料的微结构和力学性能	258
13.4.1 纳米固体的分类及其基本构成	258
13.4.2 纳米固体材料的力学性能	260
13.5 纳米复合材料的结构与力学性能	264
参考文献	265
附录	266

# 第1章 绪 论

科学技术的迅猛发展为人类提供了成千上万种性能优良、用途广泛的固体材料。固体材料有很多种分类方法，最常见的两种方法是：（1）将固体分为晶体和非晶体两大类。晶体中的原子（或离子、分子）在三维空间中做规则的周期性排列，形成长程有序的点阵结构。非晶体中粒子的排列短程有序，但没有明显的周期性，不存在像晶体那样的点阵结构。（2）根据固体材料的化学成分、结合键和内部结构的特点，将固体材料分为金属材料、陶瓷、有机高分子材料和复合材料四个大类。无论是在国民经济建设中，还是在国防和科学技术中，固体材料都占有十分重要的地位。

固体材料的宏观力学性能主要取决于它的化学成分和内部组织结构<sup>[1.1, 1.2]</sup>。因此，固体材料力学性能的研究必然涉及两个相互关联的目的：第一是研究材料的力学行为（包括变形和断裂破坏行为等），并在此基础上对材料的力学行为给予适当的宏观描述（包括确定材料的强度、本构关系以及其中包含的材料常数等）；第二是从材料的微细观结构出发研究材料力学性能的本质，探讨微细观结构与宏观力学性能之间的内在联系，为预测和改进材料力学性能奠定理论基础。

在本书中，将系统介绍：（1）各类工程材料的微细观结构；（2）各类材料的力学性能；（3）材料的微细观结构（包括原子的电子结构，原子排列和相互之间的结合方式，材料的显微组织）对材料力学性能的影响；（4）探讨改进材料力学性能的可行途径。

## 1.1 材料结构概述

材料结构研究的目的在于了解材料的微细观结构与力学性能之间的关系。固体材料由大量原子（或离子、分子）按一定方式排列而成，其微细观结构可分为三个层次来进行研究：

（1）原子的电子结构。

（2）原子之间的结合键和原子排列的方式。对于晶体，其内部原子规则排列的方式和原子之间的键合方式就是晶体的结构。

（3）显微组织。所谓晶体的组织是指晶体内部原子群的组合状态。对于只具有一种晶体结构的单相多晶体，其组织是指各晶粒的组成、分布和几何形貌等，它们都会影响材料的性质；对于同时存在几种晶体结构的多相混合物，其组织是指各相的总体。这种用光学或电子显微镜可以观察到的组织就是显微组织。

### 1.1.1 原子的电子结构

原子由带正电荷的原子核和围绕核旋转的带负电荷的电子组成，两者电荷的总量相等，

整个原子呈电中性。元素的原子序数等于原子中的核电荷数（或电子数）。原子内部每个电子的运动状态需由四个量子数（主量子数  $n$ 、角量子数  $l$ 、磁量子数  $m$  和自旋量子数  $m_s$ ）来表征。前三个量子数的数值，分别决定电子在其运动状态下的能量、轨道角动量和轨道角动量在空间中某个给定方向上的分量值；自旋量子数  $m_s$  则表示电子自旋的性质。

(1) **主量子数  $n$** ：它是决定电子能量的主要参数。它代表电子所处的量子壳层。 $n=1、2、3、4、5、6、7$ ，分别称为第 1、第 2、…、第 7 壳层，通常记为 K、L、M、N、O、P、Q。

(2) **角量子数  $l$** ：它决定了电子运动的轨道角动量。在主量子数为  $n$  的量子壳层中，又可按  $l$  值分成若干个次壳层： $l=0、1、2、\dots、n-1$ 。通常用 s、p、d、f 表示  $l=0、1、2、3$  的次壳层。

(3) **磁量子数  $m$** ：它决定了轨道角动量在外磁场方向上的分量值。它给出每个角量子数的能级或轨道数。磁量子数取值从  $-l$  到  $l$ ，共  $2l+1$  个。

(4) **自旋量子数  $m_s$** ：根据泡利（Pauli）不相容原理，在一个原子中不能有两个电子同时处于四个量子数完全相同的状态，因此，在每一个轨道上至多只允许存在两个自旋方向相反的电子， $m_s$  规定为  $+\frac{1}{2}$  和  $-\frac{1}{2}$ ，以反映不同的自旋方向。

将主量子数的数值、角量子数的小写字母和轨道电子数目（作为上角标）组合在一起，可以表示原子的电子结构。如镁原子的原子序数 12，原子的电子结构为  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ ，它表示在第一电子壳层， $l=0$  的轨道上有两个电子；在第二壳层， $l=0$  的轨道上有两个电子， $l=1$ ， $m=-1、0、1$  三个轨道上各有两个电子；在第三壳层， $l=0$  的轨道上有两个电子。附录 1-1 给出所有元素原子的电子结构。

主量子数愈大，电子的能级愈高；主量子数相同时，角量子数愈大，能级愈高。根据能量最小原理，原子处于正常状态时，每个电子趋向占有最低的能级，因此，电子在核外的排列，一般是从能量最低的轨道排起，然后往能量较高的轨道排列，离核最近的壳层，首先被电子填满。但在某些情况下，相邻电子壳层之间可能出现能级交错的情况，电子可能在  $n$  层尚未填满的情况下便开始填充到主量子数较大的  $n+1$  壳层。这一情况，在周期表的第四个周期就开始表现出来，例如第四周期中的铁元素，原子序数为 26，在第 3 电子壳层未填满情况下便填充到第 4 壳层了。因此，铁原子具有结构  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$ ，而不是  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8$ 。

## 1.1.2 原子的结合方式和结合键

使原子结合成分子或固体的结合力称为结合键。从本质上讲，这种结合力都起源于原子核和电子之间的静电相互作用力。

### 1.1.2.1 价电子和原子价

当原子结合成分子或固体时，原子间产生较强的相互作用力，结合的方式和结合力的大小与外层电子数有关。一般说来，主要是处于最高能级的外层电子的运动状态发生变化，形成化学键。这些电子称为价电子。而处于较低能级的内层电子的运动状态只发生较小变化，以致常常将它忽略。

原子与其它元素原子结合的能力可以用原子价来表示。一般情况下，原子价可由原子最

外电子壳层中 s 和 p 能级中的电子数来决定。例如 Na:  $1s^2 2s^2 2p^6 [3s^1]$ , 原子价等于 1。但是, 在很多情况下, 原子价还和化学反应的性质有关, 如

P:  $1s^2 2s^2 2p^6 [3s^2 3p^3]$ , 与氧反应时, 原子价等于 5;

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 [3p^3]$ , 与氢反应时, 原子价等于 3。

### 1.1.2.2 结合键

根据键合后价电子围绕原子的分布方式, 可将结合键分为离子键、共价键、金属键和分子键四种。前三种键属于化学键或主价键, 后一种称为物理键或次价键。此外, 在  $H_2O$ 、 $NH_3$  等物质以及含氢聚合物中存在一种由于氢离子的尺寸小而引起的特殊键, 即氢键。原子键合的方式不同, 键合后价电子围绕原子的分布方式也不同。当原子间相互作用时, 通常倾向于使键合后各原子的外层电子结构成为稳定的“八电子层”结构, 即  $(ns)^2 (np)^6$  结构。惰性元素, 其最外层轨道已填满了电子, 因而是最稳定的电子结构。

#### 1. 离子键和离子晶体

当周期表中相隔较远的金属元素原子和非金属元素原子接触时, 前者失去最外层电子变成带正电荷的正离子, 后者捕获电子填满 sp 层而成为稳定的电子层结构, 整个原子变成带负电荷的负离子。正离子和负离子由于静电引力而相互吸引, 但当它们十分靠近时, 电子云相互的排斥力又逐渐增强, 当引力和斥力相等时, 形成稳定的离子键。

靠离子键结合的晶体称为离子晶体。图 1.1.1 表示一典型的离子晶体结构。在氯化钠晶体中, 钠原子有一个价电子, 氯原子有七个价电子, 钠原子失去一个电子成为  $Na^+$ , 氯原子获得一个电子成为  $Cl^-$ 。正负离子依靠静电引力相互吸引, 直至引力被斥力所平衡而形成离子化合物。在氯化钠晶体中, 钠离子和氯离子相间排列, 整个晶体呈电中性。

离子键的结合力比较大, 所以离子晶体具有较高的硬度, 较高的强度和熔点, 但较脆。由于离子键不产生可以自由运动的电子, 所以离子晶体导电能力弱。

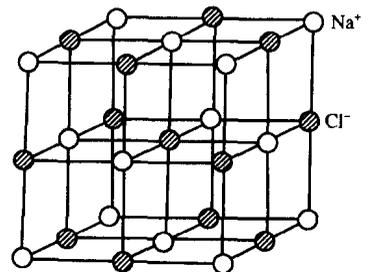


图 1.1.1 NaCl 晶体结构

#### 2. 共价键和共价晶体 (原子晶体)

共价键的特点是两个原子共享价电子对。

处在周期表中间位置的一些元素, 获得和丢失电子的能力相近。当这些元素的原子之间或与周期表中位置相近的元素原子结合时, 它们的原子之间不会有电子转移, 而是由共用价电子的方式分别形成稳定的八电子外层电子结构。被共用的价电子主要在这两个相邻原子核之间运动, 形成一个负电荷比较集中的区域, 与带正电荷的原子核之间由于静电引力而相互吸引, 形成很强的化学键。这种由共用价电子对而形成的化学键称为共价键。由共价键形成的晶体为共价晶体。

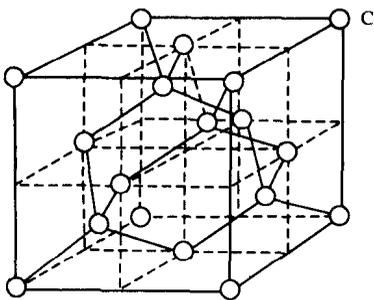


图 1.1.2 金刚石晶体结构

图 1.1.2 表示共价晶体金刚石的晶体结构。金刚石由碳原子组成, 每个碳原子具有四个价电子, 与周围的四个碳

原子各形成一个共价键，从而使每个原子最外层成为有八个电子的稳定壳层。由于一个最外层电子数为  $N$  的原子最多只能与  $8-N$  个原子形成共价键，所以共价键具有饱和性。此外，共价键具有方向性。在共价晶体中，原子以一定的角度相邻接，各键之间有确定的方位。

共价键是强键，共价键的结合力很大，所以共价晶体具有高强度、高硬度和高熔点。共价晶体的塑性变形能力很差，只有破坏共价键才能使物体产生永久变形。由于相邻原子所共有的电子不能自由运动，因此共价晶体的导电能力也很差。

### 3. 金属键和金属晶体

金属键结合的基本特点是价电子的“公有化”。

位于周期表左边的金属元素在满壳层外有 1、2 或 3 个价电子，原子核对价电子的吸引力不大，所以原子很容易丢失其价电子而成为正离子。同离子键或共价键不同，这些离开原子的价电子将为全体原子所公有。这些公有化的电子叫做自由电子，它们在正离子之间自由运动，形成电子云。由于正离子和电子云之间产生的静电吸引力，而使全部离子结合起来，这种结合力称为金属键。由金属键结合起来的晶体为金属晶体。

在金属晶体中，所有的金属离子皆处在相同的环境之中，所以金属键不具有饱和性和方向性。金属晶体一般按密堆积的方式排列，原子愈紧凑，电子云和正离子实之间相互作用的库仑能愈低。由于以上原因，很多金属元素采取面心立方或密排六方结构，它们都是排列最密集的晶体结构；或者采取排列较紧密的体心立方结构。

金属的结合仍是比较牢固的，因而金属晶体有较高的硬度和较高的熔点。由于金属键不像共价键那样具有方向性，变形时只使金属键改变方向，而不使金属键破坏，因而金属具有很好的塑性。在外加电场作用下，自由电子很容易运动，因而金属具有良好的导电性。

### 4. 分子键（范德瓦尔斯 van der Waals 力）和分子晶体

已经形成稳定电子结构的惰性元素原子在低温下可结合为固体， $\text{Cl}_2$ 、 $\text{Br}_2$  等的双原子分子也能结合成晶体。这种存在于中性原子或分子之间的结合力叫做分子键或范德瓦尔斯力，本质上是一种物理键。在形成分子键时，价电子的分布几乎不发生变化。

范德瓦尔斯力实际上是一种分子偶极矩之间的作用力。分子可以分为极性分子和非极性分子两大类。平均而言，非极性分子没有偶极矩，电子云所形成的负电荷中心与原子核所具

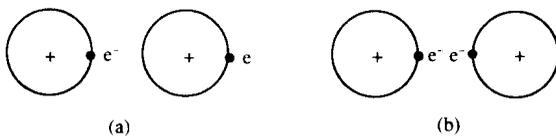


图 1.1.3 分子间的瞬时偶极矩

有的正电荷中心是重合的。但实际上在每一瞬时，分子（或原子）中电子云分布是不均匀的，正负电荷中心并不重合，因而形成瞬时偶极矩。偶极矩与偶极矩之间相互作用，形成的静电引力就是范德瓦尔斯力。图 11.3(a)表示两个偶极矩相互吸引的

瞬时状态；图 11.3(b)表示两个偶极矩相互排斥的瞬时状态。在有极性分子存在的情况下，范德瓦尔斯力为非极性分子间的瞬时偶极矩，极性分子间的永久偶极矩以及非极性分子受极性分子影响而产生的诱导偶极矩等之间的作用力的总和。

依靠范德瓦尔斯力结合起来的晶体为分子晶体。由于范德瓦尔斯力很弱，所以分子晶体的结合力很小，熔点很低。

## 5. 氢键和氢键晶体

通常情况下，一个氢原子只和另一个原子形成一个共价键。但在一定条件下，一个氢原子可以同时和两个电子亲合能大的、半径较小的原子（F、O、N 等）相结合，这种结合力叫氢键（所谓电子亲合能是指 298K 温度下，一个中性原子获得一个电子成为负离子所放出的能量，它反映得失电子的难易程度）。

当氢原子与某一原子形成共价键时，共有电子向这个原子强烈偏移，使氢原子几乎变成一半径很小的带正电荷的核，因此这个氢原子还可以和另一个原子相吸引，形成一个附加键，即氢键。所以氢键是一种特殊的，有方向性的范德瓦尔斯键。它比一般范德瓦尔斯键强，但比离子键和共价键弱。

图 1.1.4 表示由氢键结合形成的冰的晶体结构。在冰的晶体中，部分 H 原子同时与两个 O 原子结合，但与一个 O 原子的结合较强，用 O—H 表示，与另一个 O 原子结合较弱，用 H···O 表示。在一般情况下，当一个 H 原子同时与 A 和 B 原子相结合，且与 A 结合较强，而与 B 结合较弱时，其氢键可用符号 A—H···B 表示。

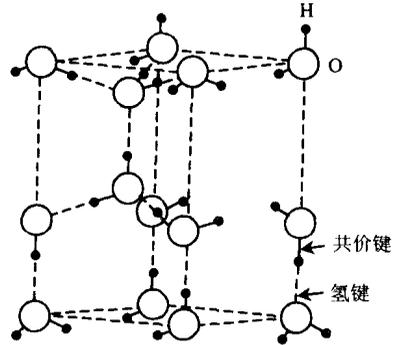


图 1.1.4 冰的晶体（氢键）结构

有时氢键专指 H···B 的结合。

由氢键结合起来的晶体为氢键晶体。

## 6. 混合键型晶体

大多数晶体并不单纯由前述四种基本类型键（离子键、共价键、金属键和分子键）结合，很多晶体存在着混合键。例如，与金刚石一样也是由碳元素组成的石墨晶体（图 1.1.5），每个原子的三个价电子与周围的三个原子以共价键方式结合，三个价电子差不多分布在同一平面上而使晶体呈层状，第四个价电子则较自由地在整个层内活动，使石墨具有金属的性质，而层与层间则以范德瓦尔斯力相结合。所以，石墨晶体具有复杂的混合键，它兼有共价键、金属键和范德瓦尔斯键的性质。

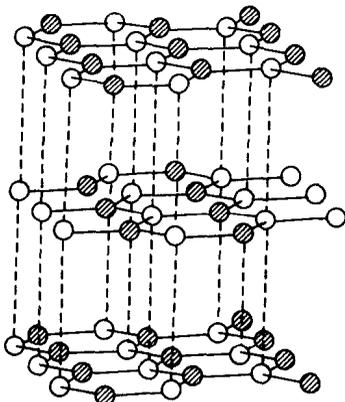


图 1.1.5 石墨晶体结构

## 1.1.3 各类材料的结合键特点

### 1. 金属材料

金属材料包括纯金属和以金属为主的合金。金属元素又可分为简单金属和过渡族金属两种。简单金属元素的内电子壳层是完全填满或完全空着的；过渡族金属元素的内电子壳层则是未完全填满的。简单金属的结合键完全为金属键，过渡金属的结合键则为金属键和共价键的混合，但以金属键为主。因此金属材料的结合键基本上为金属键。

### 2. 陶瓷材料

陶瓷材料是由金属元素和非金属元素形成的无机化合物粉料，经过成型和高温烧结制成

的多相固体材料。利用天然硅酸盐矿物为原料制成的陶瓷称为传统陶瓷；用氧化物、氮化物、碳化物、硅化物、硼化物等制成的陶瓷称为特种陶瓷或现代陶瓷。在陶瓷的晶体结构中，离子键和共价键是主要的结合键，但仅由一种键组成的陶瓷不多见，大多数陶瓷晶体的结合键是离子键和共价键的混合键。

### 3. 高分子材料

高分子是分子量特别大的有机化合物的总称，有时也称为聚合物或高聚物。它由许多分子量很大的大分子组成，每个大分子又是由一种或几种简单的低分子化合物通过共价键重复连接而成的大分子链。有机物质[有机物是含碳化合物（一氧化碳、二氧化碳、碳酸盐等少数简单含碳化合物除外）或碳氢化合物及其衍生物的总称]都含有碳元素作为其主要的结构组成。大分子内的原子之间由很强的化学键（共价键）结合，大分子与大分子之间的结合力则为物理键（范德瓦尔斯力）。由于大分子链很长，分子之间的接触面比较大，特别当分子链交缠时，分子与分子之间的结合比一般范德瓦尔斯力大得多。

### 4. 复合材料

复合材料是由两种或两种以上不同性质的原材料用某种工艺方法组成的多相材料。它一般由高模量、高强度的增强相和模量较低、韧性较好的基体相组成，各组成相之间取长补短，可获得它的组成材料所不具备的优良性能。复合材料可以由各种材料复合组成，因此结合键非常复杂。

## 1.2 材料力学性能概述

固体材料的力学性能通常是指材料的弹性、塑性和强度。弹性是指材料在外力作用下产生可逆变形，如果外力不超过某个限度，在外力去除后能够恢复固有形状和尺寸的性能。塑性是材料在外力作用下发生不可逆永久变形但不破坏的能力。强度则是材料对塑性变形和断裂的抗力。现代高科技对工程材料提出了日益苛刻的要求。工程材料在服役过程中可能承受长期静载、变动载荷或高速作用于物体的冲击载荷，环境腐蚀和辐射等，因此，材料的力学性能还应当包括材料在外力长期作用下的蠕变和应力松弛，在外力重复作用下的疲劳，以及在冲击载荷作用下材料处于  $10^2\text{s}^{-1}\sim 10^4\text{s}^{-1}$  甚至更高应变率情况下的动态力学性能。此外，材料在特殊环境条件下（高温，低温，高压，辐射，腐蚀等）的力学性能也是重要的研究内容。

## 1.3 研究内容

全书分为三大部分，分别介绍金属材料（包括纯金属和合金）、非金属材料（包括高聚物、陶瓷和复合材料）和纳米材料的微细观结构和宏观力学性能，以及力学性能的微观机理。

### 1. 金属材料的研究内容

金属的结构（晶体结构及原子的电子结构）在很大程度上决定了晶体的性质。晶体的某

些物理特性参量可以根据晶体结构计算出来(例如杨氏模量、体积弹性模量等)。因此,了解晶体结构的一般特征及描述方法是有必要的。在第2章中,将扼要介绍晶体学的基础知识以及三种常见的金属晶体结构。

除了特殊制备的材料以外,材料的内部都存在缺陷,晶体中的缺陷对材料的屈服、塑性变形、强度和其它力学性能有很大的影响,其中线缺陷位错起着举足轻重的作用。在第3章中介绍晶体的点缺陷、线缺陷位错和面缺陷(晶界、相界等)。

实际使用的金属材料多半是合金。在纯金属中加入适量的合金元素会显著地改变它的性能。采用合金元素来改变金属性能的方法称为合金化。金属经合金化后,其性能由于显微组织改变而发生明显的变化。研究合金各相形成的规律性、合金的组织结构与成分和温度的关系,在实践中有重大意义。在第4章中:介绍合金的相结构、相变及相图;讨论合金组织结构对力学性能的影响;介绍利用不同加热温度和冷却速度来控制或改变金属的组织结构,获得金属不同性能的一种重要方法,即热处理。

在第5章~第9章中讨论金属的力学性能及微观机理,其中第5章专门介绍金属的常规力学性能指标。在第6章和第7章中讨论金属的弹性、塑性以及屈服和破坏的物理过程和微观机理。在第8章中讨论金属在循环载荷作用下疲劳的物理过程和特点。在第9章中讨论金属的高温力学性能和低温力学性能。

## 2. 非金属材料的研究内容

(1) 高分子材料:如前所述,高分子材料由许多分子量特别大的大分子所组成。每个大分子由大量结构相同的单元(链节)相互连接而成。高分子结构的这一特点导致它的分子运动特别复杂,在宏观上则导致高聚物的力学性质和金属完全不同。它的力学性质对温度、时间或频率特别敏感。在低温、短时或高频下,高聚物显示出固体特性,而在高温、长时或低频下,高聚物又可能显示出流体特征。高聚物这种兼有固体和流体性质的特点称为粘弹性。在第10章中研究高聚物的粘弹性性质和高弹性性质,探讨高聚物力学性能的微观机理。

(2) 陶瓷材料:陶瓷具有一系列优良的物理、化学和力学性能,可分为功能陶瓷和结构陶瓷两大类。功能陶瓷由于具有独特的热学、光学、声学、电学和磁学性能或有能量转换功能而受到重视。结构陶瓷则由于具有耐高温,耐腐蚀,硬度高等特点而有广阔的应用前景。本书中只涉及结构陶瓷。在第11章中,讨论结构陶瓷的力学行为及微观机理,探讨陶瓷脆性的原因和陶瓷增韧的可行途径。

(3) 复合材料:由两种或两种以上不同性质的原材料复合而成的复合材料往往既保持了原材料的主要特点,又通过形成复合材料而获得强度、韧性、硬度、重量或寿命等经过改善的性能。由于复合后的性能可通过控制和调节原材料的种类、形态、比例及复合工艺等因素来调整,因此复合材料是一类可以根据使用条件的要求进行设计的新颖材料,也是近几十年人们最感兴趣的材料之一。在第12章中将从宏观和细观两个层次研究复合材料的力学性能(主要是单向连续纤维增强复合材料的力学性能),探讨复合材料内基体和增强相的性能以及体积分数对复合材料力学性能的影响。

## 3. 纳米材料的研究内容和特点

纳米体系是处在宏观物体和微观体系之间的中间领域,其尺度范围通常定在1nm~100nm,纳米材料则是指在三维空间中至少有一维处于纳米尺度范围或由它们作为基本单元构成的材

料。组成纳米材料的基本单元按其尺度范围可以分为三类<sup>[1,3]</sup>：(i) 零维，指在空间三维尺度均为纳米尺度，如纳米微粒、原子团簇等；(ii) 一维，指在空间有两维处于纳米尺度，如纳米丝、纳米棒、纳米管等；(iii) 二维，指在空间中有一维为纳米尺度，如超薄膜等。

纳米微粒具有小尺寸效应、表面和界面效应、量子尺寸效应。由纳米微粒构成的固体具有传统固体不具备的许多特殊性质，例如，由纳米颗粒构成的纳米陶瓷在低温下出现良好的延展性，从而为陶瓷增韧开拓了一条可行的途径。现在纳米体系已成为材料科学，物理学以及化学等学科的研究热点。在第 13 章中，我们将介绍纳米微粒的基本物理效应；纳米固体的分类、构成及力学性能；纳米复合材料的结构和力学性能等。

## 参考文献

- [1.1] R.E.Newnham 著，卢绍芳、吴新涛译. 结构与性能的关系. 北京：科学出版社，1983
- [1.2] 匡震邦，顾海澄，李中华编著. 材料的力学行为，第一章. 北京：高等教育出版社，1998
- [1.3] 张立德，牟季美著. 纳米材料和纳米结构. 北京：科学出版社，2002