

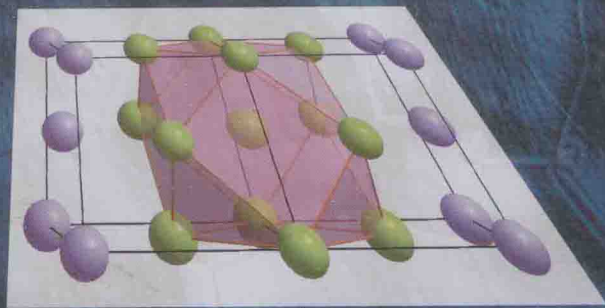
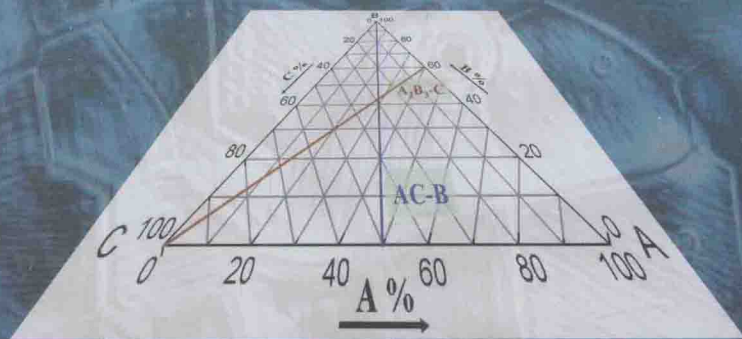
高等学校理工科材料类规划教材

# 材料科学基础 (双语版)

FUNDAMENTALS OF MATERIALS SCIENCE

赵 杰/主编

(第二版)



大连理工大学出版社  
DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY PRESS

高等学校理工科材料类规划教材

# 材料科学基础 (双语版)

FUNDAMENTALS OF MATERIALS SCIENCE

(第二版)

主编 赵 杰

编者 赵 杰 叶 飞 王 清



大连理工大学出版社  
DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY PRESS

## 图书在版编目(CIP)数据

材料科学基础：双语版 / 赵杰主编. —2 版. —大连：  
大连理工大学出版社，2015. 1  
ISBN 978-7-5611-9639-7

I. ①材… II. ①赵… III. ①材料科学—双语教学—  
高等学校—教材 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 284411 号

大连理工大学出版社出版

地址：大连市软件园路 80 号 邮政编码：116023

发行：0411-84708842 传真：0411-84701466 邮购：0411-84703636

E-mail: dutp@dutp. cn URL: <http://www.dutp. cn>

大连理工印刷有限公司印刷

大连理工大学出版社发行

幅面尺寸：185mm×260mm  
2010 年 3 月第 1 版

印张：21

字数：481 千字  
2015 年 1 月第 2 版

2015 年 1 月第 1 次印刷

责任编辑：刘新彦 于建辉

责任校对：周 欢

封面设计：姜春媛

ISBN 978-7-5611-9639-7

定价：38.00 元

# 前言

材料的制造已有上万年的历史,材料的发展一直是人类文明与社会进步的物质基础与先导。“材料科学”作为一个科学概念,出现在 20 世纪 50 年代。材料科学一经出现,一方面大大促进了材料学科的研究及发展,另一方面则是扩大了大学的教学领域及内容。现在材料科学已成为世界重大科技基础学科之一,是最为活跃的研究领域之一。

材料科学与工程主要是研究材料的结构(structure)、制备(processing)、性能(property)以及使役行为(performance)四者之间相互关系和变化规律的一门应用基础学科。这一关系常用图 1 中的四面体来表示。我国材料科学家师昌绪认为,成分(composition)是与结构同样重要的变量,制备(processing)和合成(synthesis)可以相关联,同时将“材料理论与制备设计”也列为材料科学与工程的要素之一,从而提出了材料科学与工程六要素图(图 2)。国际著名材料学家 Robert W. Cahn 提出,原子与晶体学、相平衡和显微组织研究是鼎立材料科学的三个主要部分。本书的封面则基于这一思想构图,力图表现晶体学、相图及相变、组织结构的分析是材料科学基础最为重要的基石。

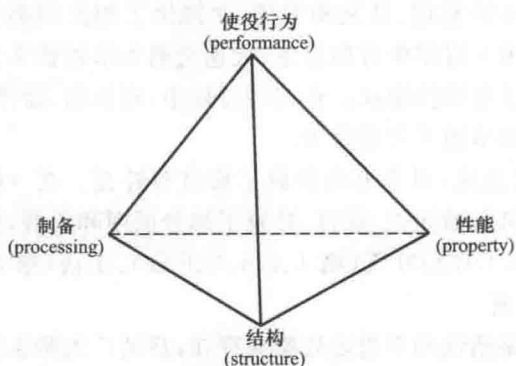


图 1 材料科学与工程四要素示意图

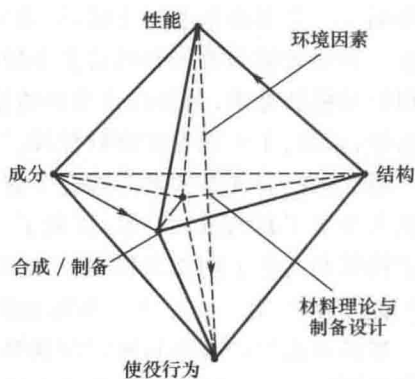


图 2 材料科学与工程六要素示意图

在构成材料科学与工程的诸多要素中,结构与性能是最基本的关系,因此,材料科学基础这门课的主要任务就是提供材料结构与性能关系的基础知识。本书将这些知识分类为三个部分,即**晶体学基础**、**形变及强化基础**、**相图及相变基础**。在“晶体学基础”中介绍了原子结构与结合键、晶体结构、晶体缺陷的基础知识,并扩充了非晶体和准晶体结构的内容;在“形变及强化基础”中介绍了与材料形变直接相关的位错基础知识及其与材料形变、强化机理之间的关系,并介绍了变形材料加热过程中的回复与再结晶;在“相图及相变基础”中介绍了二元相图、三元相图的基础知识以及有关材料的凝固和固态扩散的相关内容。由于材料科学的迅速发展,基础理论显得日益重要,因此本书在重点介绍材料和性能

之外,也在一些部分偏重介绍了基础理论,希望对学生在今后的工作中有益。

为了适应教育国际化趋势的发展需要,培养具有国际合作意识、国际交流与竞争能力的人才,我国的许多高校开始在课程教学中实施双语教学。由于英语已经成为最重要的国际通用语言,国际上重要的科学技术成果大多首先以英文出版,因此,加强在专业课程中的英语学习,对于较快地学习和掌握发达国家的先进科学知识和科学技术,适应学生走向国际化的进程是必要的。由于学生外语水平参差不齐,环境配套设施、教材以及师资等因素的不同,对如何实施双语教学一直有各种观点。我们认为学生对专业知识的掌握和理解是第一位的,不能一味强调英语授课的比重,这可能最终以降低或损伤学科教学质量为代价。作为双语教学诸多方法中一个层次的尝试,本书力求在专业知识的介绍中穿插英文的内容,除了提供大部分专业词汇的英文名称外,书中一些例题采用英文形式,在一些章的后面,提供了与相关章节内容紧密相关的英文短文,这些短文都是在权威书刊上精选的内容,使学生在熟悉专业词汇、科技英语表达方式的同时,对所学知识也能进行补充和强化。通过营造英语的氛围,使程度高的同学能借助这一平台达到更高的水平,而程度较差的同学也能通过这一过程感受到外语的环境,感受到外语在专业中的重要性,提高外语学习的主动性和积极性。在相关章节给出了材料科学重要人物等的英文介绍,希望学生在提高英文阅读水平的基础上,对于材料人文有更多的了解,并借此为进入材料科学的广阔空间打开一扇窗户。

本书第一版中,第1章由董星龙和王清合写,第2、3章由王清编写,第4章由王伟强编写,第5、6章由张俊善编写,第7章由丁晓非编写,第8、9章由张贵峰编写,其余章节由赵杰编写。全书由赵杰任主编,负责全书内容的整理、补充和编排,并提供了相关的英文内容。石油大学高万夫教授对全书校核,提出了许多中肯的意见;大连交通大学刘德义老师担任书稿的复审,为提高本书的质量提出了宝贵的建议。在编写过程中,程从前、徐洋、王丽华、张帅、王中奇等在资料整理、校对等环节做了大量努力。

第二版结合教学实践并综合了各方面的意见,对本书内容做了修订和补充。在一些定义上参照了新的国家标准,补充了一些学科前沿知识,修订、补充了部分插图和内容,修改了符号和文字上的印刷错误。本书第二版工作由叶飞(第1、2、4、5、6章)、王清(第3、8、9章)、赵杰(第7、10、11章及其余部分)完成。

虽然在编写过程中付出时间和努力,但是错误和不当之处难免存在,恳请广大师生和读者批评指正。编写过程中参阅了国内外出版的有关资料,在此对全部文献的作者表示诚挚敬意和衷心感谢!

您有任何意见或建议,请通过以下方式与大连理工大学出版社联系:

邮箱 jcyj@dutp.cn

电话 0411-84707962 84708947

编者

2014年12月

# 目 录

## 第一部分 晶体学基础

### 第 1 章 原子结构与结合键 Atomic Structure and Interatomic Bonding / 2

- 1.1 原子结构 Atomic Structure / 3
  - 1.1.1 原子的内部结构 Inner Structures of Atoms / 3
  - 1.1.2 元素周期表 The Periodic Table / 3
  - 1.1.3 原子的电离能 Ionization Energy of an Atom / 4
  - 1.1.4 电子亲和能 Electron Affinity Energy / 4
  - 1.1.5 原子的电负性 Electronegativity of Atoms / 5
- 1.2 原子间的结合键 Interatomic Bonding / 5
  - 1.2.1 原子结合键的本质 Nature of Atomic Bonding / 6
  - 1.2.2 离子键 Ionic Bonding / 7
  - 1.2.3 共价键 Covalent Bonding / 8
  - 1.2.4 金属键 Metallic Bonding / 8
  - 1.2.5 范德瓦耳斯键 van der Waals Bonding / 9
  - 1.2.6 氢 键 Hydrogen Bonding / 10

### 第 2 章 晶体结构 Crystal Structures / 11

- 2.1 晶体学基础 Fundamental Concepts / 11
  - 2.1.1 空间点阵和晶胞 Space Lattice and Unit Cell / 11
  - 2.1.2 晶向指数和晶面指数  
Indices of Crystallographic Orientations and Planes / 15
  - 2.1.3 晶体投影 Crystal Projection / 21
  - \* 2.1.4 倒易点阵 Reciprocal Lattice / 23
- 2.2 纯金属的晶体结构 Crystal Structures of Pure Metals / 24
  - 2.2.1 三种典型的金属晶体结构 Three Typical Metallic Crystal Structures / 24
  - 2.2.2 点阵常数与原子半径 Lattice Constant and Atomic Radius / 26
  - 2.2.3 晶体中原子堆垛方式与间隙 Atomic Packing and Interstices / 27
  - 2.2.4 多晶型性 Polymorphism / 31
- 2.3 合金相的晶体结构 Crystal Structures of Alloys / 32
  - 2.3.1 固溶体 Solid Solution / 32

- 2.3.2 中间相 Intermediate Phases / 38
- \* 2.4 离子晶体的结构 Ionic Crystal Structures / 43
  - 2.4.1 离子晶体的结构规则 Structure Rules of Ionic Crystals / 43
  - 2.4.2 典型离子晶体结构 Typical Ionic Crystal Structures / 45
- \* 2.5 共价晶体的结构 Covalent Crystal Structures / 46
- \* 2.6 材料结构的测定 Measurement of Material Structures / 47

### Reading Material 1 Crystal Structures / 50

## 第3章 非晶体和准晶体结构 Amorphous and Quasicrystal Structures / 53

- 3.1 非晶体结构 Amorphous Structure / 53
  - 3.1.1 非晶合金的形成 Formations of Amorphous Alloys / 54
  - 3.1.2 非晶合金的结构 Structures of Amorphous Alloys / 55
  - 3.1.3 非晶体合金的性能 Properties of Amorphous Alloys / 59
- 3.2 准晶体的结构 Quasicrystal Structure / 60
  - 3.2.1 准晶体的结构 Quasicrystal Structure / 60
  - 3.2.2 准晶体的形成与性能 Formations and Properties of Quasicrystals / 63

## 第4章 晶体缺陷 Crystal Defects / 66

- 4.1 引言 Introduction / 66
- 4.2 点缺陷 Point Defects / 66
  - 4.2.1 金属中的点缺陷 Point Defects in Metals / 66
  - \* 4.2.2 陶瓷中的点缺陷 Point Defects in Ceramics / 69
  - \* 4.2.3 聚合物中的点缺陷 Point Defects in Polymers / 72
- 4.3 原子振动 Atomic Vibration / 72
- 4.4 位错 Dislocations / 73
  - 4.4.1 位错的结构特征 Structure of Dislocations / 73
  - 4.4.2 柏氏矢量 Burgers Vector / 75
- 4.5 面缺陷 Planar Defects / 79
  - 4.5.1 外表面 Surface / 79
  - 4.5.2 晶界 Grain Boundary / 79
  - 4.5.3 孪晶界 Twin Boundary / 84
  - 4.5.4 相界 Interface, Phase Boundary / 85
  - 4.5.5 其他面缺陷 Other Planar Defects / 86
- 4.6 体缺陷 Bulk Defects / 86

### Reading Material 2 Crystal Defects / 87

#### 习题一 / 90



## 第二部分 形变及强化基础

### 第 5 章 位错基础知识 Fundamentals of Dislocation / 92

- 5.1 位错应力场 Stress Field of Dislocation / 92
  - 5.1.1 刃型位错的应力场 Stress Field of Edge Dislocation / 92
  - 5.1.2 螺型位错的应力场 Stress Field of Screw Dislocation / 93
- 5.2 位错的能量及位错线张力 Strain Energy and Line Tension of Dislocations / 94
- 5.3 位错的运动及所受的力 Dislocation Movement and Force on Dislocation / 95
  - 5.3.1 位错的滑移 Slip of Dislocation / 95
  - 5.3.2 位错的攀移 Climb of Dislocation / 98
  - 5.3.3 位错所受的力 Force on Dislocation / 98
- 5.4 位错间的相互作用 Interaction between Dislocations / 99
  - 5.4.1 平行位错间的弹性相互作用 Elastic Interaction between Parallel Dislocations / 99
  - 5.4.2 相交位错间的相互作用 Interaction between Crossing Dislocations / 101
- 5.5 位错与表面的相互作用 Interaction between Dislocation and Surface / 103
- 5.6 位错的形成和增殖 Formation and Generation of Dislocations / 104
  - 5.6.1 位错的形成 Formation of Dislocations / 104
  - 5.6.2 位错的增殖 Generation of Dislocations / 104
- 5.7 位错的运动速度 Velocity of Dislocation Movement / 106
- 5.8 实际晶体中的位错 Dislocation in Real Crystal / 107
  - 5.8.1 堆垛层错 Stacking Fault / 107
  - 5.8.2 分位错 Partial Dislocation / 109
  - 5.8.3 扩展位错 Extended Dislocation / 111

### 第 6 章 材料的变形 Deformation of Materials / 115

- 6.1 弹性变形 Elastic Deformation / 116
- 6.2 塑性变形 Plastic Deformation / 117
  - 6.2.1 滑移 Slip / 117
  - 6.2.2 孪生 Twinning / 123
  - 6.2.3 扭折 Kink / 125
- 6.3 多晶体塑性变形 Plastic Deformation of Polycrystalline / 125
  - 6.3.1 多晶体塑性变形行为 Plastic Deformation of Polycrystalline / 125
  - 6.3.2 晶粒大小的影响 Effect of Grain Size / 126
- 6.4 固溶体合金的变形 Plastic Deformation of Solid Solution Alloy / 129
- 6.5 多相合金塑性变形 Plastic Deformation of Heterogeneous Alloy / 130
  - 6.5.1 复合型合金的塑性变形 Plastic Deformation of Polyphase Alloy / 131



## 6.5.2 弥散强化合金的塑性变形

Plastic Deformation of Precipitation Strengthening Alloy / 131

## 6.6 加工硬化 Work Hardening / 134

## 6.7 屈服现象及应变时效 Yielding and Strain Aging / 137

## 6.7.1 屈服现象 Yielding / 137

## 6.7.2 应变时效 Strain Aging / 137

## 6.8 塑性变形中材料组织与性能的变化

Evolution of Microstructure and Property during Plastic Deformation / 138

## 6.8.1 晶粒组织变化 Development of Grains / 138

## 6.8.2 位错亚结构的变化 Development of Sub-Structure / 138

## 6.8.3 变形织构 Deformation Texture / 139

## 6.8.4 残余应力 Residual Stress / 140

**Reading Material 3 Deformation Modes / 142****第7章 回复与再结晶 Recovery and Recrystallization / 145**

## 7.1 概述 Introduction / 145

## 7.1.1 组织的变化 Microstructural Evolution / 145

## 7.1.2 性能的变化 Property Evolution / 146

## 7.2 回复 Recovery / 147

## 7.2.1 回复动力学 Recovery Kinetics / 147

## 7.2.2 回复机理 Recovery Mechanism / 149

## 7.2.3 回复的应用 Application of Recovery Process / 149

## 7.3 再结晶 Recrystallization / 150

## 7.3.1 再结晶的形核及长大

Nucleation and Growth during Recrystallization / 150

## 7.3.2 再结晶动力学 Recrystallization Kinetics / 153

## 7.3.3 再结晶温度 Recrystallization Temperature / 156

## 7.3.4 再结晶后的晶粒大小 Grain Size after Recrystallization / 157

## 7.4 再结晶后的晶粒长大 Grain Growth after Recrystallization / 158

## 7.4.1 正常晶粒长大 Normal Grain Growth / 159

## 7.4.2 异常晶粒长大 Abnormal Grain Growth / 160

## 7.4.3 再结晶图 Recrystallization Graph / 161

## 7.4.4 再结晶织构与退火孪晶

Recrystallization Texture and Annealing Twin / 162

## 7.5 动态回复和再结晶 Dynamic Recovery and Recrystallization / 163

## 7.5.1 动态回复 Dynamic Recovery / 163

## 7.5.2 动态再结晶 Dynamic Recrystallization / 164

## 7.5.3 热加工引起的组织与性能的变化

Evolution of Microstructures and Properties / 165

- 7.5.4 蠕变 Creep / 166
- 7.5.5 超塑性 Superplasticity / 167

**Reading Material 4 Recovery, Recrystallization and Grain Growth / 169**

习题二 / 175

## 第三部分 相图及相变基础

**第 8 章 二元相图 Binary Phase Diagrams / 178**

- 8.1 相图基础知识 Fundamental Concepts of Phase Diagrams / 178
  - 8.1.1 相平衡与相律 Phase Equilibrium and Phase Rule / 178
  - 8.1.2 相图 Phase Diagrams / 180
  - 8.1.3 相图的实验测定方法 Measurement for Phase Diagrams / 182
  - 8.1.4 杠杆定律 Lever Rule / 183
- 8.2 相图的热力学基础 Thermodynamics of Phase Diagrams / 184
  - 8.2.1 固溶体自由能-成分曲线  
Free Energy-Composition Curve of Solid Solution / 184
  - 8.2.2 多相平衡的公切线原理  
Common Tangent Line for Multi-Phase Equilibrium / 185
  - 8.2.3 从自由能-成分曲线推测相图  
Prediction of Phase Diagrams Based on Free Energy-Composition Curve / 186
  - 8.2.4 二元相图的几何规律 Geometric Principles of Phase Diagrams / 187
- 8.3 二元相图 Binary Phase Diagrams / 187
  - 8.3.1 匀晶相图 Isomorphous Phase Diagrams / 188
  - 8.3.2 共晶相图 Eutectic Phase Diagrams / 191
  - 8.3.3 包晶相图 Peritectic Phase Diagrams / 198
  - 8.3.4 复杂二元相图的分析方法 Analysis for Complex Binary Diagrams / 201
- 8.4 二元相图分析实例——铁碳相图 The Iron-Iron Carbide Phase Diagram / 204
  - 8.4.1 铁碳二元合金中的相 The Phases in Fe-C Binary Alloy / 204
  - 8.4.2 铁碳相图 The Iron-Iron Carbide Phase Diagram / 206
- 8.5 相图的应用 Applications of Phase Diagrams / 217

**Reading Material 5 Introduction to Alloy Phase Diagrams / 219**

**第 9 章 三元相图 Ternary Phase Diagrams / 222**

- 9.1 三元相图基础 Fundamentals for Ternary Phase Diagrams / 222
  - 9.1.1 三元相图的特点 Characteristics of Ternary Phase Diagrams / 222
  - 9.1.2 三元相图成分表示方法  
Plotting Compositions on a Ternary Phase Diagram / 223

- 9.1.3 杠杆定律及重心定律 Lever Rule and Gravity-Center Rule / 224
- 9.2 三元匀晶相图 Ternary Isomorphous Phase Diagrams / 226
  - 9.2.1 相图分析 Analysis on Phase Diagrams / 226
  - 9.2.2 固溶体的凝固过程 Solidification of Solid Solutions / 226
- 9.3 三个共晶型二元系构成的三元相图 Ternary Phase Diagrams by Three Eutectic Binary Systems / 229
  - 9.3.1 组元在固态完全不溶 Components Insoluble at Solid State / 229
  - 9.3.2 组元在固态有限溶解 Limited Solubilities of the Components / 233
- 9.4 三元包晶相图 Ternary Peritectic Phase Diagrams / 238
- 9.5 三元相图实例 Examples of Ternary Phase Diagrams / 239
  - 9.5.1 三元相图的分析方法 Specification of Ternary Phase Diagrams / 239
  - 9.5.2 三元相图举例 Examples of Typical Ternary Phase Diagrams / 241
- 第10章 材料的凝固 Solidification of Materials / 246**
  - 10.1 材料凝固的基本规律 Basic Rules of Solidification / 246
    - 10.1.1 液相结构 Structure of Liquid / 246
    - 10.1.2 凝固的热力学条件 Thermodynamics of Solidification / 248
    - 10.1.3 结晶的一般规律 General Rule of Crystallization / 249
    - \* 10.1.4 金属玻璃 Metallic Glasses / 249
  - 10.2 凝固时的形核 Nucleation of Crystals / 250
    - 10.2.1 均匀形核 Homogeneous Nucleation / 250
    - 10.2.2 非均匀形核 Heterogeneous Nucleation / 253
  - 10.3 晶体的长大 Growth of Crystals from the Liquid Phase / 256
    - 10.3.1 晶体生长的动态过冷度 Dynamic Supercooling / 256
    - 10.3.2 固液界面结构 The Nature of the Solid-Liquid Interface / 256
    - 10.3.3 液体中的温度分布及晶体生长方式 Temperature Distribution and Crystal Growth / 257
  - 10.4 固溶体的凝固 Solidification of Solid Solution / 260
    - 10.4.1 固溶体结晶特点 Crystallization in Solid Solution / 260
    - 10.4.2 固溶体的平衡凝固 Equilibrium Freezing in Solid Solution / 262
    - 10.4.3 固溶体的非平衡凝固 Non-Equilibrium Freezing in Solid Solution / 263
    - 10.4.4 区域熔炼 Zone Melting or Zone Refining / 266
    - 10.4.5 成分过冷 Constitutional Supercooling / 268
  - 10.5 共晶体的凝固 Eutectic Freezing / 271
    - 10.5.1 共晶体的形成 Formation of Eutectic Alloy / 271
    - 10.5.2 共晶体的分类及形态 Types of Eutectic Structures / 272
  - 10.6 铸锭组织 Microstructure of Casting Ingot / 274
    - 10.6.1 铸锭的典型组织 Typical Structure of Casting Ingot / 274
    - 10.6.2 铸锭组织的控制 Control of Microstructure in Casting Ingot / 275

10.6.3 铸锭的缺陷 Defects in Casting Ingot / 276

**Reading Material 6 Solidification Structures of Steel / 278**

**第 11 章 固态扩散 Solid Diffusion / 280**

11.1 扩散现象 Diffusion Phenomena / 280

11.2 扩散定律 Diffusion Laws / 281

11.2.1 菲克第一定律 Fick's First Law / 281

11.2.2 菲克第二定律 Fick's Second Law / 283

11.3 扩散定律的应用 Applications of Diffusion Laws / 284

11.3.1 稳态扩散 Steady-State Diffusion / 284

11.3.2 非稳态扩散 Nonsteady-State Diffusion / 285

11.3.3 扩散系数的测定 Measurement of Diffusion Coefficient / 290

11.4 扩散机理和微观理论 Diffusion Mechanisms and Theory / 292

11.4.1 置换型固溶体扩散机制

Diffusion Mechanisms in Substitutional Solid Solution / 292

11.4.2 间隙固溶体扩散机制

Diffusion Mechanisms in Interstitial Solid Solution / 293

11.4.3 原子跳跃与扩散系数 Atom Jump and Diffusion Coefficient / 293

11.4.4 扩散系数与扩散激活能 Diffusion Coefficient and Activation Energy / 294

11.5 柯肯达尔效应和达肯方程 Kirkendall Effect and Darken Equation / 295

11.5.1 柯肯达尔效应 Kirkendall Effect / 295

11.5.2 达肯方程 Darken Equation / 297

11.6 扩散的热力学分析 Thermodynamics of Diffusion / 298

11.7 反应扩散 Reaction Diffusion / 300

11.8 扩散的影响因素 Influence Factors of Diffusion / 301

11.8.1 温 度 Temperature / 301

11.8.2 晶体结构 Crystal Structures / 302

11.8.3 晶体缺陷 Crystal Defects / 302

11.8.4 化学成分 Chemical Composition / 303

11.8.5 外 场 External Fields / 304

**Reading Material 7 Diffusion in Metals and Alloys / 306**

习题三 / 311

附录 / 314

中英文对照表 / 317

参考文献 / 321

# 第一部分

## 晶体学基础

---

Materials science today is an applied science. Its fascination lies in the challenge of using science to give mankind the best materials that the laws of nature and the Earth's natural resources will allow. The most important aspect of any material is its structure, because its properties are closely related to this feature. To be successful, a materials scientist or engineer must have a good understanding of this relationship between structure and properties.

现在使用的金属和非金属材料大多数都是晶体,因此学习材料科学基础知识首先要熟悉晶体的特征及其描述方法。本部分从第1章的原子结构开始,重点在第2章介绍了晶体结构的基础知识。这些内容不仅是学习材料科学课程的基础,也是学习X射线衍射、电子衍射等的基础。

固体材料的原子排列方式除了晶体结构外,还有非晶体结构和准晶体结构。由于非晶体合金特殊的力学、物理和化学性能,目前已成为研究的热点领域之一,而准晶的研究则与超导体一起被列入20世纪80年代凝聚态物理的两大进展之一,并获得2011年的诺贝尔奖。第3章介绍了非晶体和准晶体结构的基础知识,这部分内容可选读。

实际晶体中,由于晶体形成条件、原子热运动及其他条件的影响,往往存在偏离理想晶体结构的区域,即存在晶体缺陷。第4章介绍了晶体中点缺陷、线缺陷和面缺陷的初步知识,其中线缺陷,也就是位错,是与材料变形有关的最重要的概念,更多的介绍将在第二部分中作为形变与强度基础的重要部分进一步介绍。

第一部分由以下四章组成:

第1章 原子结构与结合键

第2章 晶体结构

第3章 非晶体和准晶体结构

第4章 晶体缺陷

# 第 1 章 原子结构与结合键

## Atomic Structure and Interatomic Bonding

物质的成分和结构对材料的性能和行为有深刻的影响,因此,材料的结构是材料科学的核心问题之一。从尺度角度上看,它具有 6 个不同层次的结构概念,依次为:

- (1)宏观结构(macrostructure)
- (2)细观结构(mesoscopic structure)
- (3)微观结构(microstructure)
- (4)纳米结构(nanostructure)
- (5)原子近程排列(short-range atomic arrangements)
- (6)原子结构(atomic structure)

需要指出,这些结构概念的区分没有严格意义上的尺度界限。通常情况下,宏观结构是指尺度在毫米(mm)量级的材料结构,包括孔隙、表面涂层、裂纹等;微观结构是指尺度在纳米(nm)到微米( $\mu\text{m}$ )量级的材料结构,包括平均晶粒尺寸、晶粒尺寸分布、晶粒取向以及与材料缺陷相关的特征等;细观结构是指尺度介于宏观尺度和微观尺度之间的结构,包括二相粒子、微损伤等;纳米结构是指尺度在纳米量级上,主要是 100 nm 以内粒子组成的物质;原子近程结构的尺度通常在几个纳米(nm)的范围内,以原子团簇来表征。原子是构成物质的基本单元,其尺度在  $10^{-1}\text{nm}$  量级,原子结构包括所有原子的内部结构及其排列状况,并由此确定了纳米、微观、宏观等层次上的材料结构。原子的排列状况决定了材料的晶态和非晶态,晶态物质具有原子、分子或离子的近程和长程有序排列特征,而非晶态仅具有近程有序排列特征。

本章介绍与材料结构相关的物理概念,建立材料结构与性能的本质关联,了解原子结构如何影响材料中结合键类型,并使材料结合成富有个性的整体,成为现实世界中可实际应用的材料。

## 1.1 原子结构

### Atomic Structure

#### 1.1.1 原子的内部结构

##### Inner Structures of Atoms

美国物理学家费恩曼(R. Feynman, 1918—1988)曾说过:“假如由于某种大灾难,所有的科学知识都丧失了,只有一句话传给下一代,那么怎样才能用最少的词汇来表达最多的信息呢?我相信这句话是关于原子的假设:所有物质都是由原子构成的,这些原子是一些很小的粒子,它们不停地运动,当彼此略微离开时相互吸引,而过于接近时又相互排斥。只要稍微想一下,你就会发现,在这一句话中包含了大量的有关世界的信息。”今天我们已经清楚地知道,原子只是物质结构的一个层次,原子本身也是有结构的。原子是由位于其中心的带正电荷的原子核以及分布在其周围的带等量负电荷的电子构成。原子核是由带正电荷的质子和不带电荷的中子构成,原子核体现的正电荷量来源于质子的电荷量。每个质子所带正电荷量( $q$ )和每个电子所带的负电荷量相等,其值为 $1.60 \times 10^{-19}$ 库仑。原子的大部分质量集中在原子核的质子和中子上,二者质量相等,每个质子或中子的质量为 $1.67 \times 10^{-24}$ g,而电子的质量为 $9.11 \times 10^{-28}$ g,仅为质子或中子质量的1/1836。

对原子内部结构最为简单的理解是电子绕着原子核运动,如同天体中行星绕着太阳运动一样。电子具有特定的运动规律,这取决于其能量状态。这是原子结构的粗略构图,尽管不准确,但可以从中了解原子的大致构造。原子中原子核外电子的排列和运动方式不仅决定了单个原子的行为,也决定了原子如何与其他原子相结合,即形成什么样的结合键。而这种结合键决定了材料的种类(金属、陶瓷、聚合物),并对材料的某些性能起着决定性的作用。

#### 1.1.2 元素周期表

##### The Periodic Table

1869年,门捷列夫(D. I. Mendeleev, 1834—1907)发现,如果将元素按原子量(即相对原子质量)排列,元素的化学性质和物理性质呈现出周期性变化,从而提出了元素周期表(the periodic table)。元素周期表的规律性是原子内部结构规律性的反映,体现了元素的性质、电离能、亲和能及电负性的差异及其规律性。

在附录1的元素周期表中,横排的各行称为周期,共7个周期;竖排的各列称为族,同一族元素具有相同的外层电子数,周期表两侧的各族I A、II A、III A、…、VII A分别对应于外层电子数1、2、3、…、7的情况。

元素周期表内各元素所表现的行为和性质呈周期性变化,其本质是原子结构即电子的规律性填充方式,而这种原子结构根本上决定了原子间的结合键,从而影响材料的性质。那么,影响原子间结合的定量化物理量是什么呢?我们可以用原子的电离能、亲和能



和电负性来说明原子的结合键。

### 1.1.3 原子的电离能

#### Ionization Energy of an Atom

基态原子失去最外层的一个电子(价电子)所需的能量称为原子的**电离能**( $I^+$ ),用来表征原子对价电子束缚的强弱程度。可用下面的关系表示:



原子电离能的大小与它在元素周期表中的位置密切相关。电离能随原子序数变化关系如图 1-1 所示。

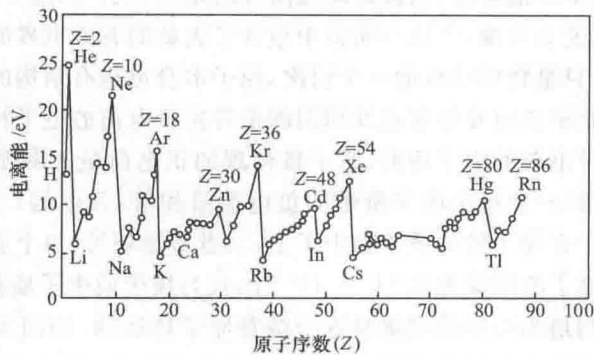


图 1-1 原子的电离能

可以看到,电离能随原子序数呈周期振荡;同一周期中,惰性元素的电离能最大,表示原子很难被激发,而碱金属元素的电离能最小,所以很容易失去价电子。总的趋势是,沿周期表的左下角至右上角,电离能逐渐增大。但是对于具有复杂电子壳层的原子,例如过渡元素(d壳层不满)和稀土元素(f壳层不满)等,电离能表现出复杂性。氢原子核外只有一个电子,电离能就是它的基态能量,约 13.6 eV。

### 1.1.4 电子亲和能

#### Electron Affinity Energy

基态中性原子获得一个电子成为负离子所释放出的能量称为**电子亲和能**( $I^-$ ),用来表征原子俘获外来电子的能力大小。可用下面的关系表示:



各种原子的电子亲和能如图 1-2 所示,可以看到,卤素原子具有较大的电子亲和能,说明它更易于得到电子。在周期表中,无论在同一族或同一周期中,亲和能一般随原子半径减小而增大。可以这样理解:因为原子半径小,原子核对电子的吸引力较强,对应较大的相互作用势(负值),所以,当原子获得一个电子时,释放出较大的能量。

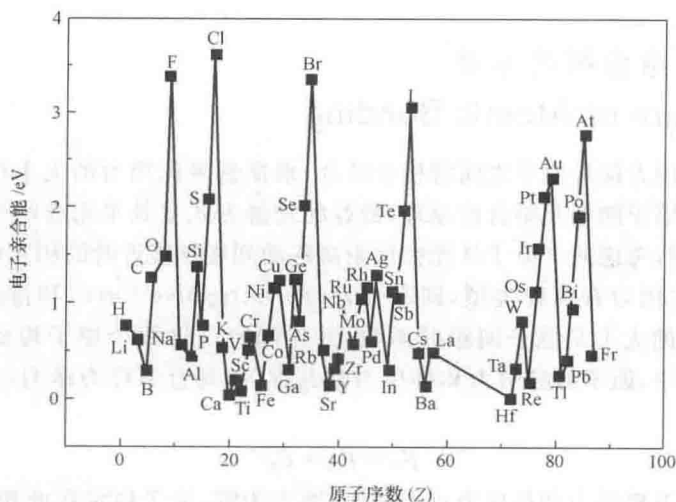


图 1-2 原子的电子亲和能

### 1.1.5 原子的电负性

#### Electronegativity of Atoms

1932年,莱纳斯·鲍林(Linus Pauling)综合考虑了原子的电离能和电子亲和能,提出“电负性”的概念,它以一组数值的相对大小表示原子在分子中对成键电子的吸引能力,称为相对电负性,简称**电负性**。电负性代表原子获得电子的能力,这个电子是元素原子自身以外的电子,而这种能力决定于原子结构。当原子中的电子处在壳层未充满的状态时,其能量状态一定比壳层完全充满时高,因此在与其它原子结合时,原子倾向于失去自身的电子或得到外来电子使其壳层充满,达到低能的状态,而这一过程体现了不同原子吸引电子能力的差异。元素周期表中,同一周期,随着原子序数增加,电负性从小到大;同一主族,随着原子序数增加,电负性从大到小。附录2给出的电负性数据体现了电负性这种周期性变化规律。

## 1.2 原子间的结合键

### Interatomic Bonding

当原子之间相互接近时,它们之间便产生作用力,使原子结合在一起,或者说形成了键。材料的性能很大程度上取决于原子结合键的类型,结合键可分为化学键和物理键两大类。化学键即**主价键(primary bonding)**,也称为**一次键**,包括离子键(ionic bonding)、共价键(covalent bonding)和金属键(metallic bonding);物理键即**次价键(secondary bonding)**,也称为**二次键、分子键,或范德瓦尔斯键(van der Waals bonding)**。此外,还有一种结合键称为**氢键(hydrogen bonding)**,其性质介于化学键和物理键之间。