

严 群 冯庆芬 编著

材料科学基础



国防工业出版社

National Defense Industry Press

材料科学基础

严群 冯庆芬 编著

国防工业出版社

· 北京 ·

内 容 简 介

本书系统地介绍了材料科学的基础理论,探讨材料的共性和普遍规律。主要包括材料的结构,材料的凝固与相图,扩散,材料中的缺陷,塑性变形、回复与再结晶等。

本书可作为高等院校材料类和机械类专业的学生及研究生的教科书和参考书,也可以为相关专业的学生及从事材料工作的科技工作者和工程技术人员提供参考。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学基础/严群,冯庆芬编著. —北京:国防工业出版社,2009.6

ISBN 978-7-118-06279-3

I. 材... II. ①严... ②冯... III. 材料科学 IV. TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 045304 号

※

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号 邮政编码 100048)

涿中印刷厂印刷

新华书店经售

*

开本 787 × 1092 1/16 印张 16 字数 368 千字

2009 年 6 月第 1 版第 1 次印刷 印数 1—4000 册 定价 30.00 元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

国防书店:(010)68428422

发行邮购:(010)68414474

发行传真:(010)68411535

发行业务:(010)68472764

前 言

能源、信息和材料是当代文明的三大支柱,而材料又是前两者的基础。材料科学是以材料为研究对象,探讨材料的分子或原子结构、微观组织以及加工制造工艺和性能之间的关系,研究材料共同规律的学科,对于材料的生产、使用和发展都具有非常重要的指导意义。

本书着重介绍材料科学的基础理论,探讨材料的共性和普遍规律。本书的主要内容包括:材料的结构,材料的凝固与相图,扩散,材料的缺陷,塑性变形、回复与再结晶等。

本书可以作为材料类和机械类专业的学生及研究生的教科书,也可以为从事材料工作的科技工作者提供参考。

本书是编者在长期从事金属学、金属学及热处理、粉末冶金等课程教学及相关科研工作的基础上编写而成。其中,第1、2、4、5、6、7章由严群编写,第3、8、9章由冯庆芬编写,第10、11章由黄庆编写。

由于编者学识有限,难免有疏漏和不妥之处,敬请读者批评指正。

编者
2009年1月

目 录

绪论	1
第1章 固体材料结构的基本知识	8
1.1 原子间的键合	8
1.1.1 一次键	8
1.1.2 二次键	10
1.1.3 混合键	12
1.1.4 结合能	12
1.1.5 结合键与性能	13
1.2 原子排列方式	14
1.3 晶体材料的组织	15
1.4 材料的稳态结构与亚稳态结构	16
第2章 材料的晶体结构	17
2.1 晶体学基础	17
2.1.1 空间点阵和晶胞	17
2.1.2 晶系与布拉菲晶格	18
2.1.3 晶向指标和晶面指标	19
2.2 金属的晶体结构	23
2.2.1 典型的金属晶体结构	23
2.2.2 晶体结构中的原子堆垛	26
2.2.3 晶体中原子间的间隙	27
2.2.4 同素异晶转变	29
2.3 陶瓷材料的晶体结构	29
2.3.1 离子晶体结构	29
2.3.2 共价晶体结构	34
2.3.3 硅酸盐的晶体结构	35
第3章 高分子材料	41
3.1 概述	41
3.1.1 高分子材料的基本	

概念	41
3.1.2 高分子材料的合成	43
3.1.3 高分子材料的分类	44
3.2 高分子材料的结构	44
3.2.1 高分子链的结构	44
3.2.2 高分子的聚集态结构	47
第4章 合金相结构	48
4.1 固溶体	48
4.1.1 置换固溶体	48
4.1.2 间隙固溶体	51
4.1.3 固溶体的微观不均匀性	52
4.1.4 固溶体的性质	53
4.2 金属化合物	54
4.2.1 正常价化合物	54
4.2.2 电子化合物	54
4.2.3 间隙型化合物	55
4.2.4 金属化合物的性质和应用	55
第5章 纯金属的凝固	57
5.1 金属结晶的现象	57
5.1.1 液态金属的结构	57
5.1.2 过冷现象	57
5.1.3 形核与长大过程	58
5.2 金属凝固的热力学条件	59
5.3 形核	59
5.3.1 均匀形核	60
5.3.2 非均匀形核	62
5.4 长大	64
5.4.1 液—固界面处的温度梯度	64
5.4.2 液—固界面的微观	

结构	65	7.4 包晶相图	93
5.4.3 晶核长大机制	65	7.4.1 相图分析	93
5.4.4 纯金属凝固时的生长		7.4.2 典型合金的平衡凝固过程	
形态	66	分析	93
5.5 凝固理论的应用	67	7.4.3 不平衡凝固	95
5.5.1 细化晶粒	67	5.5 二元相图的分析及应用	95
5.5.2 定向凝固技术	69	7.5.1 复杂二元相图的分析	
5.5.3 单晶体的制备	69	方法	95
5.5.4 非晶态合金的制备	70	7.5.2 相图的应用	97
第6章 固体中的扩散	72	7.6 铁碳合金相图	99
6.1 扩散定律	72	7.6.1 铁碳合金的组元	99
6.1.1 菲克第一定律	72	7.6.2 Fe-Fe ₃ C 相图分析	100
6.1.2 菲克第二定律	72	7.6.3 典型铁碳合金的平衡	
6.1.3 扩散方程在工程中的应用		凝固	102
举例	74	7.6.4 含碳量对铁碳合金的组织与	
6.2 扩散的本质	76	性能的影响	110
6.3 扩散的驱动力及上坡扩散	77	7.7 二元合金的凝固理论	113
6.4 扩散机制	77	7.7.1 合金凝固时溶质的	
6.4.1 间隙扩散机制	78	分布	113
6.4.2 空位扩散机制	78	7.7.2 成分过冷	118
6.4.3 换位扩散机制	79	7.7.3 共晶组织的形态	121
6.5 影响扩散的因素	79	7.7.4 合金铸件的组织与	
6.6 反应扩散	80	缺陷	122
第7章 二元相图及合金的凝固	82	第8章 三元相图	128
7.1 二元相图概论	82	8.1 三元相图的成分表示方法	128
7.1.1 相律	82	8.1.1 等边三角形成分表	
7.1.2 相图的表示方法	83	示法	128
7.1.3 相图的建立	83	8.1.2 等腰三角形成分表	
7.1.4 杠杆定律	83	示法	129
7.2 匀晶相图	84	8.1.3 直角坐标成分表示法	129
7.2.1 相图分析	84	8.1.4 局部图形表示法	130
7.2.2 合金的平衡凝固	85	8.2 三元平衡系统转变的定量	
7.2.3 合金的不平衡凝固	86	法则	130
7.2.4 枝晶偏析	87	8.2.1 直线法则与杠杆定律	130
7.3 共晶相图	88	8.2.2 重心定律	130
7.3.1 相图分析	88	8.3 组元在液态及固态均无限	
7.3.2 典型合金的平衡凝固过程		溶解的相图	131
分析	88	8.3.1 相图分析	131
7.3.3 不平衡凝固	92	8.3.2 匀晶相图的水平截面图和	
		投影图	132
		8.3.3 匀晶相图的平衡结晶过程	

分析	134	9.3 面缺陷	205
8.3.4 匀晶相图的变温截		9.3.1 外表面	205
面图	134	9.3.2 晶界和亚晶界	205
8.4 固态互不溶解的三元共晶		9.3.3 孪晶界	210
相图	135	9.3.4 相界	211
8.4.1 相图分析	135		
8.4.2 截面图	137	第10章 材料的塑性变形	213
8.4.3 投影图	138	10.1 金属变形的三个阶段	213
8.4.4 相区接触法则	140	10.2 单晶体的塑性变形	214
8.5 固态有限互溶的三元共晶		10.2.1 滑移	214
相图	140	10.2.2 孪生	217
8.5.1 相图分析	140	10.3 多晶体的塑性变形	219
8.5.2 投影图	141	10.3.1 多晶体塑性变形的	
8.5.3 截面图	143	特点	219
8.6 其他三元合金相图	146	10.3.2 细晶强化	219
8.6.1 具有四相平衡包共晶反应的		10.4 合金的塑性变形	220
三元相图	146	10.4.1 单相固溶体合金的塑性	
8.6.2 具有四相平衡包晶反应的三		变形	220
元相图	149	10.4.2 多相合金的塑性	
8.6.3 形成稳定化合物的三元系		变形	223
相图	151	10.5 塑性变形对材料组织和性	
8.7 三元合金相图应用举例	152	能的影响	225
8.8 三元相图小结	156	10.5.1 塑性变形对材料组织结构	
8.8.1 单相状态	156	的影响	225
8.8.2 两相状态	156	10.5.2 塑性变形对材料性能的	
8.8.3 三相平衡	156	影响	226
8.8.4 四相平衡	157	10.5.3 残余应力	227
第9章 晶体中的缺陷	160		
9.1 点缺陷	160	第11章 回复和再结晶	228
9.1.1 点缺陷的形成	161	11.1 冷变形金属在加热时的	
9.1.2 点缺陷的平衡浓度	162	变化	228
9.1.3 点缺陷的运动	163	11.1.1 显微组织的变化	228
9.2 位错	164	11.1.2 性能和能量变化	228
9.2.1 位错的基本类型和		11.2 回复	229
特征	165	11.3 再结晶	230
9.2.2 位错的柏氏矢量	168	11.3.1 再结晶过程	231
9.2.3 位错的运动	171	11.3.2 再结晶动力学	234
9.2.4 位错的密度	179	11.3.3 再结晶温度及其影响	
9.2.5 位错的弹性性质	180	因素	235
9.2.6 位错的生成和增殖	190	11.3.4 再结晶后的晶粒	
9.2.7 实际晶体中的位错	193	大小	237

11.4	晶粒长大	238	11.5.3	退火孪晶	242
11.4.1	晶粒的正常长大	238	11.6	热加工	243
11.4.2	晶粒的异常长大(二次再 结晶)	240	11.6.1	动态回复与动态再 结晶	243
11.5	再结晶退火后的组织	241	11.6.2	热加工后的组织与 性能	246
11.5.1	再结晶退火后的晶粒 大小	241	参考文献		248
11.5.2	再结晶织构	241			

绪 论

在人类发展的历史长河中,人类对材料的应用一直对社会文明进程的发展起着举足轻重的作用。从某种意义上来说,人类文明发展史就是人类对材料占有、认识、制造、使用和发展的历史。古代的石器、青铜器、铁器等兴起和广泛利用,极大地改变了人们的生活和生活方式,对社会进步起到了关键性的推动作用,这些具体材料的使用(石器、青铜器、铁器)被历史学家作为划分某一个时代的重要标志,如石器时代、青铜器时代、铁器时代等。20 世纪下半叶开始,历史进入新技术革命时代,人们把能源、信息和材料誉为现代物质文明的三大支柱。材料的发展创新已是很多高新技术领域发展的突破口,新型材料的研制在很大程度上决定新兴产业的进程,不仅是现代社会经济的先导、现代工业和现代农业发展的基础,也是国防现代化的保证,深刻地影响着世界经济、军事和社会的发展。材料科学的发展不仅是科技进步、社会发展的物质基础,同时也改变着人们在社会活动中的实践方式和思维方式,由此极大地推动社会进步。材料科学技术的发展作为新技术革命的先锋,对经济、科技、国防以及综合国力的增强都具有特别重要的作用。

1. 人类进化与文明的标志——材料发展简史

材料是人类一切生产和生活活动的物质基础,历来是生产力的标志,被看成是人类社会进步的里程碑。因为对材料的认识和利用的能力,决定着社会的形态和人类生活的质量,所以历史学家往往以制造工具的原材料作为历史分期的标志。一部人类文明史,从某种意义上说,也可以称之为世界材料发展史。只要考察一下从石器时代、青铜器时代、铁器时代,直到目前的信息时代的历史发展轨迹,就可以明显地看出材料在社会进步中的巨大作用。为什么石器时代绵延数十万年之久?因为人类当时只能利用岩石、木材、兽皮、骨骼等天然材料并进行粗糙的加工,生产工具极其落后,所以社会发展极其缓慢。青铜器曾经显赫一时,但又很快被铁器所取代,原因是跟铜相比,铁这种材料的性能更优越,资源更丰富,加工制造更容易。19 世纪发展起来的现代钢铁材料,推动了机器制造工业的飞速发展,为 20 世纪的物质文明奠定了基础。半个多世纪以来,合成橡胶、合成塑料、合成纤维和各种各样的合成高分子材料,如雨后春笋般地涌现出来,曾经“在历史上起过革命性作用的”(恩格斯语)钢铁,已经远远无法满足人类日益增长的物质和文化生活的需要。20 世纪 50 年代以锗、硅单晶材料为基础的半导体器件和集成电路技术的突破,使人类跨入了现代信息时代,材料对社会生产力的提高,起到了不可估量的推动作用。由此可见,每一种新材料的发现,每一项新材料技术的应用,都会给社会生产和人类的生活带来巨大改变,把人类文明推向前进。

材料工业始终是世界经济的重要基础和支柱,随着社会的进步,材料的内容正在发生重大变化,一些新型材料和相应技术正在不断替代或局部替代传统材料。材料既古老又

年轻,既普通又深奥。称其“古老”,是因为它的历史和人类社会的历史同样悠久;称其“年轻”,是因为时至今日,它依然保持着蓬勃发展的生机;称其“普通”,是因为它与每一个人的衣食住行息息相关;称其“深奥”,是因为它包含着许多让人充满希望但又充满困惑的难解之谜。可以毫不夸张地说,世界上的万事万物,就其和人类社会生存与发展关系密切的程度而言,没有任何东西堪与“材料”相比。

※材料的分类

材料科学技术领域历来十分活跃,理论上的新概念、技术上的新构思、工艺上的新方法不断出现,材料科学理论和技术近年来都取得了重大进展,这些进展反映了材料科学发展的趋势,将会对今后相当长一段时间内新材料的研究方向产生很大影响。当今世界材料五花八门,分类也不尽相同。依据人们的要求,可以采用不同的标准,将材料划分为若干类。例如,可以依据材料的来源将材料分为天然材料和人造材料两类。目前大量使用的天然材料只有石料、木材、橡胶等,并且用量也在减少,因为用于生产木材、橡胶、棉花等的土地,可用于生产更多的粮食。因此,铁道上的枕木已逐渐为钢筋水泥的轨枕代替,人造橡胶代替天然橡胶,化学纤维代替棉纤维等。也可以按照逻辑上的“有无”、“是非”来划分材料。除了逻辑的划分规则外也可根据实用的重要性将材料进行破类划分。

对于工程材料可以根据其用途、化学性质、物理性质、状态和物理效应等进行分类。

1) 根据化学性质分类

这是一种最常用的分类方法,将工程材料分为金属材料、非金属材料、复合材料等。金属材料是迄今为止最广泛使用的工程材料,但由于工程条件的愈加恶化,许多情况下金属材料已经不能担当重任,因此非金属材料与复合材料在工程材料中的角色越来越重要。按此法分类,如图 0-1 所示。

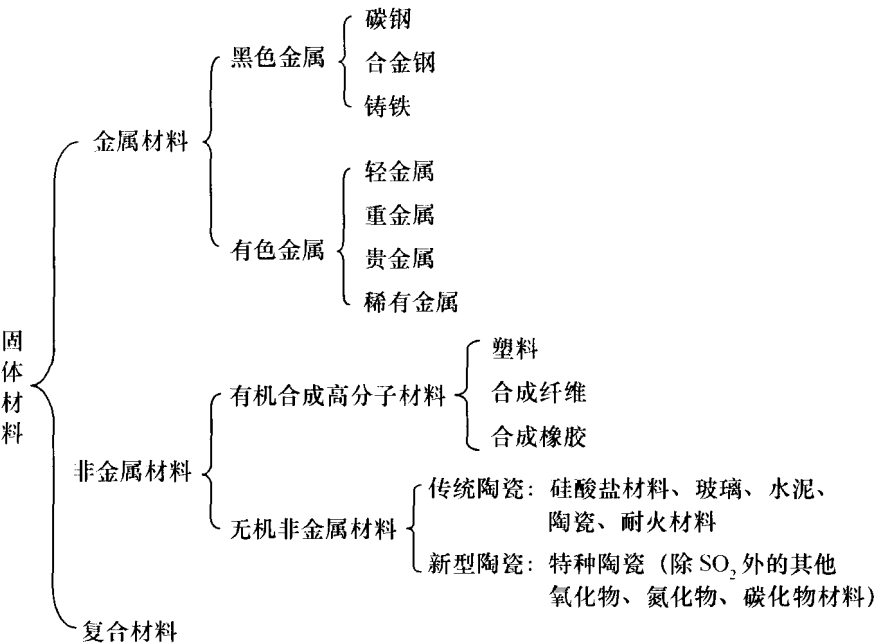


图 0-1 根据化学性质分类

2) 根据用途分类

可分为结构材料和功能材料。**结构材料**是指工程上要求强度、韧性、塑性等力学性能的材料,例如机械结构材料、工程结构材料等。**功能材料**是指主要利用电、光、声、磁、热等效应和功能材料,例如电工材料、电子材料、光学材料、声光材料等。

3) 根据状态分类

可分为晶质材料与非晶质材料。晶质材料又分为单晶质材料与多晶质材料。

4) 根据物理性质分类

可分为高强度材料、绝缘材料、高温材料、低温材料、磁性材料、超硬材料、透光材料、导电材料、半导体材料等。

5) 根据物理效应分类

可分为压电材料、光电材料、热电材料、声光材料、铁电材料、磁光材料、电光材料、激光材料、记忆材料等。

2. 新材料——当代新技术革命的先锋

纵观人类发展史,科学和技术始终是促进社会变革的重要因素。早在一百多年前马克思就曾说过,科学是“最高意义上的革命力量”,他还指出“社会的劳动生产力,首先是科学的力量”。近代科技史表明,每一次重大科学的发现、技术的创新,都使人们对客观世界的认识产生飞跃;每一次新技术革命浪潮的兴起,都使人们改造自然的能力和推动社会发展的力量,提高到一个崭新的水平。

新材料,通常是指对现代化科学技术进步和国民经济发展以及提高综合国力有重大推动作用的最新发展或正在发展的材料。这些材料和传统材料相比具有优异的性能和特定的功能,是发展信息、航天、生物、能源以及海洋开发等高新技术的重要物质基础。事实表明,历史上每一次重大新技术的发现和某种新产品的研制成功,都往往依赖于新型材料的发现和应用。没有新型材料的开发应用,便谈不上新的技术产品和产业进步。新型材料无愧为当代新技术革命的先锋。因此,新型材料又被誉为“发明之母”。从这个意义上说,没有材料科学的发展,就不会有高新技术产品的出现,也就失去了人类社会进步的物质基础。

新材料是当代社会经济的先导,是现代工业和现代农业发展的基础。现代工业不仅是直接生产各种材料、而且也是需要各种材料最多的领域,可以形象地把材料比做现代工业的骨肉。比如原子能工业、电子工业、海洋开发产业的发展,对材料提出了更新、更高的要求——原子能工业需要耐辐射和耐腐蚀材料;电子工业需要超纯、特薄、特细、特均匀的电子材料;海洋开发需要耐腐蚀和耐高压的材料……倘若没有符合要求的高质量的新型材料作基础,便无现代工业可言。工业是如此,农业也是这样。农业的电气化、机械化、化学化、水利化、工厂化等,都离不开新材料的支持。

新材料是国防现代化的保证,国防现代化的关键是武器装备现代化。无论是常规武器还是核武器,都需要性能优异的新型材料。世界各国都把新型材料作为国防高技术发展的物质基础和突破口,谁能更快地开发和应用具有特定性能的新材料,谁就拥有更强大的技术潜力。反之,任何一种新的武器装备系统,离开新材料的支撑都将无法研制出来。这一点,在1991年的海湾战争中明显地表现出来。人们从滚滚烟尘中的隐身飞机、反辐射导弹、精确制导武器、复合装甲坦克等性能优异的高技术武器装备,不难看出正是那些日新月异的

结构材料、不断发展的高温材料、一物多用的复合材料、巧妙神奇的功能材料等构成了这一“现代高技术武器试验场”，也可以说是一次“最新军用材料展览会和竞赛表演”。

新型材料是科技进步的关键，现代技术特别是高技术的每一项新进展，都和新型材料的开发应用有着密切的联系。没有高纯度的半导体材料，就不会有微电子技术；没有耐数千度高温的耐烧蚀材料和涂层材料，人类遨游太空的梦想就无法成为现实；没有低损耗的光导纤维，便不会出现光通信技术……相反，由于某些新材料不过关，有许多新技术的研究功亏一篑，难以实现。如太阳能的利用问题，因目前还没有能够找到一种价格低、寿命长、光电转换效率很高的材料把光能转变为电能，所以只能望“阳”兴叹，任凭这宝贵的能源白白浪费掉。诸如此类的例子，不胜枚举。

材料科学的发展不仅是科技进步、社会发展的物质基础，同时也改变着人类社会的思维方式和实践方式，推动社会进步。如金属复杂氧化物陶瓷超导体的发现，改变了人们对导电物质的传统认识，进而开发出系列超导体，带来科技史上的革命；超微颗粒材料的奇异特性，使人们可以研制出不同性质的功能材料。各种新型特殊材料的发现，使得当今科学和技术的发展，正在向包括超高压、超高温、超低温、超高速、超真空、超净、超纯、超导、超细微、超大规模等在内的自然界的各种“极限”逼近。极限化往往带来一系列在非极限条件下所没有的新效应，出现传统科学原理不再适应的新领域，使人类认识自然、改造自然的活动上升到一个新的水准。人们针对材料环境与性能的改变，通过各种不同外界条件下材料特性与材料结构的相互联系，以运动变化的观点认识新材料、研究新材料、开发新材料，也正是这种辩证逻辑的思维形式使人类在发展材料科学新概念、新构思、新方法的进程中永无止境。产生的新效应反过来又进一步改进人类的这种思维与实践活动，推动科技进步和社会发展。

材料科技水平，新型材料的发展，与一个国家的经济活力、军事实力和科技能力都有着十分密切的关系。因此，各发达国家都把新材料的研究与开发放在突出的地位，竞相制定发展规划，采取各种措施，力争抢占新材料技术“制高点”，以推动本国在各个高技术领域持续稳定地发展。在这方面，日本一马当先，把发展新材料作为“技术立国”的基础，并把新型材料的发展放在与微电子技术同等重要的地位，日本政府已经把新材料看作是走向未来的关键技术。美国政府则把新材料研究的重点放在军事高技术领域，政府各有关部门纷纷制定发展规划和研究课题。为了在军事工业中占优势，并保持在高技术中的领先地位，新型材料的研究与开发已进入“白热化”的程度。在其《国家关键技术》报告中，美国政府列举了六大关键技术领域共 22 项关键技术项目，而新材料技术位居六大关键技术之首。西欧各国意识到新材料开发的重要性，在“尤里卡”计划中，新材料也包括在内。德、法等国都有政府部门制定的“材料科研 10 年规划”、“新材料开发计划”等，耗资巨大。其他各国也都开始对新材料予以充分注意，争相在材料高技术领域中占有一席之地，保持和争夺国家工业和军事优势。

在新型材料研究、开发与应用方面，我国也取得了难能可贵的成绩。为了适应国民经济建设、国防建设和高新技术发展对新型材料的日益增长的需要，我国的《高技术研究发展计划》（“863”计划）中，把新材料领域列为七个重点研究发展领域之一，为国家高技术各相关领域提供关键新材料并促进我国材料科技的发展。在国家计委 1997 年制定的《未来十年中国经济发展关键技术》中，材料也被列为十大领域的关键技术之一。除中长期

高技术计划外,我国新材料的研究发展工作还有国家攻关计划、攀登计划、火炬计划、星火计划等。在人工晶体、储能材料、精密陶瓷、金属间化合物、金刚石薄膜、航天隔热系统材料等方面取得了具有国际水平的成就,一批科研成果进入中试和试用阶段,部分新材料已形成产业,产生了较大的经济效益和社会效益,为我国成为世界经济强国创造了条件。

过去,工程材料的主要研究对象是各类机械用材料,因此,金属材料成为该材料系统中的主要材料,但随着传统工程向能源工程、资讯工程和生物工程的发展以及新材料的不断出现,工程材料所包含的材料类别将会越来越多。例如,自 20 世纪 80 年代以来,资讯工程和能源工程的需要促使信息材料和能源材料得到了迅速的发展。随着科学技术的发展,新材料的领域不断扩展,如光电子材料、低维材料、纳米材料、薄膜材料和生物材料不断受到重视。从材料研究手段和方法看,随着计算机技术的发展,预计在不久的将来人们就可以利用计算机从原子、分子的尺度进行材料设计,还有可能实现根据要求设计出符合一定用途的最佳成分和最佳生产工艺的新型材料。

新技术革命所需的极具生命力的新材料包括:

1) 能源材料

引入新能源材料的目的是减少单位能源产出的装置设备成本,也包括作为能源的材料本身。

2) 信息材料

信息的储存和传递装置要求小、轻、快。研究能够进一步增加集成度的新材料,如生物芯片,以及光信息接收、传递和发送的新材料等。

3) 生物材料

人们研制各种新材料,特别是高分子、陶瓷、复合材料来替代人体的各种组织,如血管、心瓣、心脏、血液、骨骼、眼睛、皮肤等,达到延年益寿的目的。除力学因素外,医疗材料的关键问题是人体适应性。

4) 航天材料

减轻重量是航空和航天工具的首要要求,减轻材料重量可以提高燃料效率、降低操作费用。对于航天用结构材料,要求比强度大,有些部件要求耐热。非金属基的复合材料可以替代许多不要求耐热的金属部件;金属基的复合材料在减重的前提下,可提高使用温度。提高燃料效率的另一途径是提高发动机的工作温度。

5) 汽车材料

汽车是方便而有效的地面交通工具,同时汽车产业也是消耗巨大能源和材料的行业。因此,全世界在满足各国环境保护规定的前提下,都在研制轻质而又经济合算的材料。

综上所述,社会的需要是材料研制的推动力,也是材料工业发展的推动力;材料学的进展,使人类有能力满足这种需要,也就是材料研制以及材料工业发展的拉力;一推一拉必将加速新材料的研制和应用的发展过程。

※什么是材料科学?

材料科学是科学技术中的重要学科,是影响国民经济全局的综合科学技术。它主要研究材料的结构与性能之间所存在的关系,即集中了解材料的本质,提出有关的理论和描述,说明材料结构是如何与其成分、性能以及行为相联系的。它以化学、固体物理、力学等为基础,是一门多学科交织在一起的边缘科学。随着工业生产中材料的不断发展,产生了

金属、陶瓷、高分子等独立的材料分支学科。

因此,材料科学是研究各种材料的成分、结构、制备加工工艺与性能之间关系的科学。这一关系可用一个四面体表示,如图 0-2 所示。四面体的各顶点为成分/组织结构、制备合成与加工工艺、材料的固有性能和使用或服役性能。

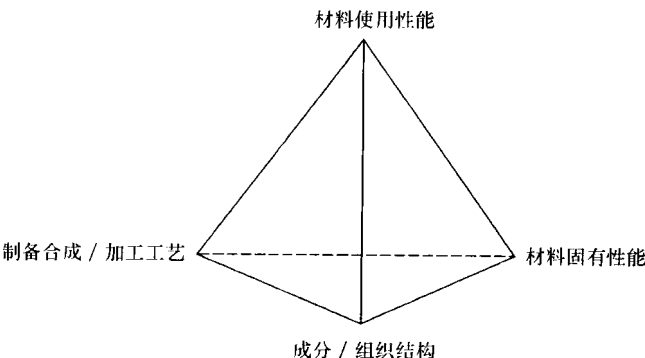


图 0-2 材料科学与工程的四要素

所谓成分/组织结构,是指材料结构所包含的四个层次:原子结构、结合键、原子排列方式(晶体与非晶体)和组织。

材料的制备合成/加工工艺,其方法和对性能的影响随材料种类的不同而不同。

材料的固有性能包括材料本身所具有的物理性能(电、磁、光、热等性能)、化学性能(如抗氧化和抗腐蚀、聚合物的降解等)和力学性能(如强度、塑性、韧性等)。

服役性能或使用性能是把材料的固有性能和产品设计、工程应用能力联系起来,度量材料使用性能的指标是寿命、速度、能量利用率、安全可靠程度和成本等综合因素,在利用物理性能时包括能量转换效率、灵敏度等。

材料科学用这四个要素来表达,说明它不仅着眼于基础理论的研究,也考虑了实际应用。这一关系的表达最早用于金属材料,以后证明它也同样适用于其他材料。在各种材料中,金属使用得最早也最多,金属的基础理论也最成熟,关于研究金属的思路和方法甚至一些理论,也正在移植或渗透到其他学科中去。

在四要素关系中,最基本的是结构和性能的关系,而材料科学这门学科的主要任务就是研究材料的结构、性能及二者间的关系,研究的途径:一是通过实验;二是总结生产实践的经验;三是建立材料基础理论,从理论上预计材料的结构和性能。

材料工作者的任务就是研究这四个要素以及它们之间的相互关系,并在此基础上创造新材料以及挖掘现有材料的潜力,满足社会要求,推动社会发展。

3. 材料科学的基本原则——结构决定性能

如上所述,材料科学所研究的内容最基本的就是材料的结构与性能的关系,即材料的结构决定材料的性能。结构是成分的具体存在形式或形态;而合成、制备与加工是通过改变材料的各种结构从而对性能产生影响的。

下面就举例说明成分、工艺和外界条件是如何改变材料的结构并最终改变材料的性能和使用性能的。

1) 化学组成即成分的影响

含碳量低于 0.2% (质量) 的钢称为低碳钢,如一般的钢板、钢筋。低碳钢的塑性很

好,可以冲压成形或其他加工成形,所以可以方便地通过用钢板冲压制成从日用的洗脸盆到汽车的覆盖件等各种类型的成形件。低碳钢高塑性的原因就是其显微组织基本上是由一种称为铁素体的相(其强度低、塑性高且较软)所构成的。而高碳钢(碳含量达0.8%~1.2%)由于含有较多珠光体(甚至马氏体)组织,能达到高强度、高硬度,所以可用于制造弹簧和加工工具(如锉刀、锯条等)。

2) 工艺的影响

同样材料但不同的状态的高碳钢,其性能会截然不同。退火状态(即一般供货时状态)时比较软,其洛氏硬度为15HRC,而淬火状态(800℃左右加热后水冷)却变得非常硬,洛氏硬度可达62HRC以上,前者很容易被加工,而后者可以作为切削工具使用。原因在于它们的组织结构明显不同,前者为球粒状珠光体,而后者为很硬的马氏体。

3) 外界(使用)环境的影响

钢材高温下强度明显下降(如常温下抗拉强度为420MPa的20低碳钢,在450℃时的短时强度为330MPa),而低温下会变脆、韧性下降。这是由于在高温下材料中原子活动性大大加强并且会发生蠕变等现象,导致材料软化;而在低温下原子活动性大大削弱,影响材料塑性变形的结构(即位错)变得难以运动的缘故。

总之,从微观本质上去认识材料,并掌握它们与外界条件之间的规律性联系,才能合理地使用材料。这就是人们研究材料的主要目的。

第1章 固体材料结构的基本知识

不同的材料具有不同的性能,同一材料经不同加工工艺后也会具有不同的性能,这些都归结于内部的结构不同。材料结构的含义很丰富,大致可分为四个层次:原子结构、原子结合键、材料中原子的排列以及晶体材料的显微组织,这四个层次的结构从不同方面影响着材料的性能。本章主要介绍原子结合键、材料中原子的排列以及晶体材料的显微组织。

1.1 原子间的键合

当两个或多个原子形成分子或固体时,它们是依靠什么样的结合力聚集在一起的,这就是原子间的键合问题。原子通过结合键可构成分子,原子之间或分子之间也靠结合键聚结成固体状态。材料的许多性能在很大程度上取决于原子结合键。根据结合力的强弱可把结合键分成两大类:

一次键——结合力较强,包括离子键、共价键和金属键。

二次键——结合力较弱,包括范德华力和氢键。

1.1.1 一次键

1. 离子键

大多数盐类、碱类和金属氧化物主要以离子键的方式结合。这种结合的实质是金属原子将自己最外层的价电子给予非金属原子,使自己成为带正电的正离子,而非金属原子得到价电子后使自己成为带负电的负离子,这样,正负离子依靠它们之间的静电引力结合在一起。因此这种结合的基本特点是以离子而不是以原子为结合单元。离子键要求正负离子作相间排列,并使异号离子之间吸引力达到最大,而同号离子间的斥力为最小,故离子键无方向性和饱和性。因此,决定离子晶体结构的因素就是正负离子的电荷及几何因素。离子晶体中的离子一般都有较高的配位数。

一般离子晶体中正负离子静电引力较强,结合牢固。因此,其熔点和硬度均较高。另外,在离子晶体中很难产生自由运动的电子,因此,它们都是良好的电绝缘体。但当处在高温熔融状态时,正负离子在外电场作用下可以自由运动,此时即呈现离子导电性。

氯化钠是典型的离子键结合,Na 原子和 Cl 原子相近时,Na 原子会把最外侧电子壳的仅有 1 个电子给予 Cl 原子成为阳离子,而 Cl 原子从 Na 原子获取 1 个价电子后,最外侧的电子壳变为 8 个电子的稳定状态而成为阴离子,正负两离子间由于静电力之作用相互吸引而稳定地结合,如图 1-1 和图 1-2 所示。

MgO 是重要的工程陶瓷,也是以离子键结合的,金属镁原子有两个价电子转移至氧

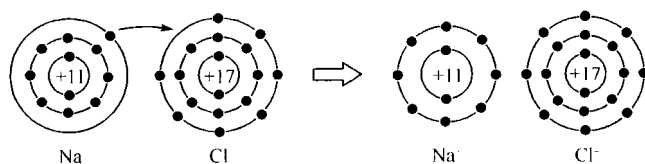


图 1-1 Na 和 Cl 的离子结合

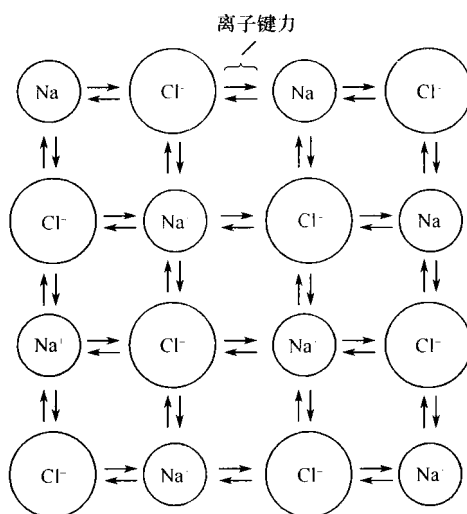


图 1-2 NaCl 的离子键结合示意图

原子上。此外如 Mg_2Si 、 CuO 、 CrO_2 、 MoF_2 等也是以离子键结合为主的。

离子键的结合力很大,所以离子晶体的硬度高、强度大、热膨胀系数小,但脆性大。离子键中很难产生可以自由运动的电子,故离子晶体都是良好的绝缘体。

2. 共价键

共价键是由两个或多个电负性相差不大的原子间通过共用电子对而形成的化学键。根据共用电子对在两成键原子之间是否偏离或偏近某一个原子,共价键又分成非极性键和极性键两种。

氢分子中两个氢原子的结合是最典型的共价键(非极性键)。共价键在亚金属(碳、硅、锡、锗等)、聚合物和无机非金属材料中均占有重要地位。图 1-3 为 SiO_2 中硅和氧原子间的共价键示意图。

共价结合时由于电子对之间的强烈排斥力,使共价键具有明显的方向性。另外,当一个电子和另一个电子配对以后,就不再和第三个电子配对了,成键的共用电子对数目是一定的,这就是共价键的饱和性。

此外,共价键晶体中各个键之间都有确定的方位,配位数比较小,共价键的结合极为牢固,故共价晶体具有结构稳定、强度高、熔点高、质硬脆等特点,受力时要么不变形,要么键被破坏,使材料破坏和断裂。由于束缚在相邻原子间的“共用电子对”不能自由地运动,共价结合形成的材料一般是绝缘体,其导电能力差。