



“十二五”国家重点图书出版规划项目
材料科学研究与工程技术系列

原子论在材料科学中的应用

Application of Atomism in Material Science

● 李莉 王香 山本悟 著



哈尔滨工业大学出版社
HARBIN INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

“十二五”国家重点图书出版规划项目
材料科学研究与工程技术系列

原子论在材料 科学中的应用

李 莉 王 香 山本悟 著



哈尔滨工业大学出版社

内容提要

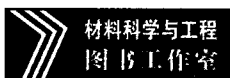
贯穿本书的基本概念是 Demokritos 思想,也即原子在空穴中处于运动状态。本书由 6 部分构成。第 1 章结合 Demokritos 思想及现代量子力学概念,提出 2 个定义,10 个公理,10 个定理。第 2 章介绍对于材料理解的一种具体手段,分子轨道法的一种改进的 Hückel 算法。第 3 章通过电子与光子的相互作用,展开对材料结合、结构、物性及反应的基础理论的讨论。第 4 章根据基本理论,讨论实际应用材料的一些问题。具体以铝合金、镁合金、铁合金为例,对其结合、结构、物性及反应中的加工硬化、加工软化、时效硬化、时效软化等问题展开讨论。

图书在版编目(CIP)数据

原子论在材料科学中的应用/李莉,王香,山本悟著. —哈尔滨:
哈尔滨工业大学出版社,2012. 12
ISBN 978-7-5603-3705-0

I. ①原… II. ①李… ②王… ③山… III. ①原子论—应用
材料科学 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 182835 号



责任编辑 范业婷
封面设计 卞秉利
出版发行 哈尔滨工业大学出版社
社 址 哈尔滨市南岗区复华四道街 10 号 邮编 150006
传 真 0451-86414749
网 址 <http://hitpress.hit.edu.cn>
印 刷 黑龙江省委党校印刷厂
开 本 787mm×1092mm 1/16 印张 13 字数 222 千字
版 次 2012 年 12 月第 1 版 2012 年 12 月第 1 次印刷
书 号 ISBN 978-7-5603-3705-0
定 价 36.00 元

(如因印装质量问题影响阅读,我社负责调换)

前 言

材料科学已经成为经典力学,电磁学,量子力学,相对论等基础物理学的边缘学科。编者认为,材料学和基础物理学相结合将成为科学发展的方向。材料学将由理论认识向应用技术方向发展。

那么材料技术和材料科学之间的关系如何呢?技术是经验的积累,受到时间和空间的制约。科学是超越制约的一种普遍性和必然性的认识体系。我们每个人都在为科学做着自己的贡献。认识具有层次性、历史性和抽象性三个方面。认识的对象是材料的结合、结构、物性和反应。作者把材料科学定义为“材料科学是不同历史阶段的物理概念和数学理论的再构造”。那么满足材料科学的具体条件是什么?材料的结合、结构、物性和反应都是有一定层次性的。这种层次表现为,基本粒子是电子和光子,历史性表现为电子和光子是变化运动的。并且抽象的量子力学基本概念在解释它们时很重要。那么在指导材料的结合、结构、物性和反应方面,电子和光子的变化运动规律的基本概念是什么?其基本理论就是 Demokritos 的空穴思想。电子和光子的运动即是电子和光子占据空穴,也是存在空穴电子和光子才可以运动。电子和光子的运动性,决定着结合、结构、物性和反应的特点。对于结合而言,如果存在空穴,则为金属结合,否则为共价或离子结合。对于物质结构而言,存在空穴,则物质为非局限的等方结构,否则为局限的异方结构。对于物性而言,存在空穴,则对应着电子和光子可动的物性,否则对应着电子和光子不可动的物性。对于反应而言,存在空穴则物质不稳定,反应速度快。这是《Demokritos 原子论与材料学》一书的主要思想。

贯穿本书的基本概念是 Demokritos 思想,也即原子在空穴中处于运动状态。本书由6部分构成。第1章结合 Demokritos 思想及现代量子力学概念,提出2个定义,10个公理,10个定理。第2章介绍对于材料理解的一种具体手段,分子轨道法的一种改进的 Hückel 算法。第3章通过电子与光子的相互作用,展开对材料结合、结构、物性及反应的基础理论的讨论。第4章根据基本理论,讨论实际应用材料的一些问题。具体以铝合金、镁合金、铁合金为例,对其结合、结构、物性及反应中的加工硬化、加工软化、时效硬化、时效软化等问题展开讨论。第5章和第6章讨论吸氢材料及磁性材料的一些问题。

书中第1~3章由日本京都大学山本悟、哈尔滨工程大学张旭茗共同编写,第4~6

章由哈尔滨工程大学李莉、王香共同编写。本书在编写过程中,哈尔滨工程大学相关科研组的研究生在书稿的资料收集、文字加工等方面做了大量工作;特别是应国兵和盖鹏涛为此付出了辛勤的劳动。编者对他们无私的帮助与深情厚谊表示衷心的感谢。感谢哈尔滨工程大学研究生教材建设资金的资助。

由于《原子论在材料科学中的应用》一书是综合材料科学、原子物理和量子力学等学科的知识,有一定的理论深度,给编写工作带来了一些难度。编者才疏学浅,书中难免有不少缺憾,敬请各位专家学者给予批评指正,以利我们今后改进。

作 者

2011 年 8 月

目 录

第 1 章 材料学基本理论	1
第 2 章 改进的 Hückel 算法	8
2.1 改进的 Hückel 法	8
2.2 改进的 Hückel 半经验分子轨道算法	8
2.3 两个稳定性量度的计算	9
第 3 章 电子、光子的行为及材料的结合、结构、物性、反应	11
3.1 电流和电负性	11
3.2 物质的结合	19
3.2.1 物质的结合及电子的行为	19
3.2.2 化学结合的种类	19
3.2.3 Mulliken 的数目法对各种结合性的判定	20
3.2.4 结合性和元素周期表	21
3.3 物质的结构	23
3.3.1 物质的结构概述	23
3.3.2 物质的结合性与结构	24
3.3.3 物质的稳定性与结构	34
3.4 物 性	36
3.4.1 物质的结合性与物性	36
3.4.2 物质的稳定性与物性	46
3.4.3 材料的物性	52
3.5 物质的反应	52
3.5.1 物质的结合性与反应	52
3.5.2 物质的稳定性与反应	55
3.5.3 反应速度表达式	65
3.5.4 反应	69
第 4 章 合金论	71
4.1 合金的固溶、不溶和化合物形成性	71
4.2 铝合金论	80
4.3 铁合金论	101
4.4 镁合金论	118
4.5 加工硬化、加工软化和时效硬化、时效软化	130

4.5.1	加工软化的实验事实	130
4.5.2	加工硬化,加工软化行为的理论分析.....	139
4.5.3	加工软化、时效软化的总结.....	142
4.6	非晶态	144
4.6.1	合金的非晶态化	144
4.6.2	非晶态合金的性质	145
4.7	合金的分类	149
4.7.1	固溶、不溶、化合物形成	149
4.7.2	固溶体硬化型合金	149
4.7.3	加工硬化型合金	154
4.7.4	加工软化型合金	154
4.7.5	利用相转变、析出、石墨化等反应强化的合金	154
4.7.6	铸造型合金	156
4.7.7	耐腐蚀性合金	156
4.7.8	耐热性合金	157
4.8	材料的物性	160
第5章	吸氢材料	163
5.1	吸氢量	163
5.2	吸氢速度	172
5.3	可逆性	174
第6章	磁性材料	177
6.1	磁性的来源	177
6.2	原子的磁性	180
6.3	分子、化合物、晶体的磁性	181
6.4	物质的磁性	183
6.5	永久磁石材料的开发历史	189
6.6	稀土元素对磁性的影响	192
参考文献		197
术语索引		200

第 1 章 材料科学基本理论

材料科学是由层级的、历史变化的物理概念和数学方法组成的。下面讨论由定义、公理和定理构成的理论体系,这是对材料科学理解的整体理论,各分论以后详述。

宇宙中物质是变化运动的。自然科学是 Demokritos 思想在这一认识过程的发展。宇宙中的物质由基本粒子组成,基本粒子的变化运动导致宇宙的变化,并且宇宙的物质运动具有阶层性和历史性两个方面。

定义 1 宇宙是指我们生活的世界。

Demokritos 原子论认为,宇宙是不同历史层级运动的物理概念和数学理论方法的再构造。2 400 年前,哲学家 Demokritos(B. C. 460 ~ B. C. 370) 和 Epicurus(B. C. 341 ~ B. C. 270) 提出了原子和空穴的重要思想。这些思想用以下的公理进行表示。

公理 1 宇宙是由物质和空间组成的。

这是对宇宙由物质和空间组成的认识。

公理 2 物质具有阶层性,上一阶层物质由下一阶层物质组成。

这是关于物质由原子组成的阶层性观点。

公理 3 物质在空穴中处于永恒的运动之中。

这是对物质中原子运动和空穴的认识。

公理 1 的物质和空间理论,是量子力学和电磁学的基础。公理 2 的阶层性的观点是对公理 1 的发展。Demokritos、Epicurus 认为物质中不可分的基本粒子是原子,而现在已经证实,原子由原子核和核外电子组成。量子电磁学认为组成物质的基本粒子是电子和光子。所以,由前面的定义和公理可以得出定理 1。

定理 1 宇宙是由电子和光子组成的。

最早提出宇宙变化运动的是 Heraclitus(B. C. 540 ~ B. C. 480),他提出了“万物流转”学说。现在下面的理论已被普遍接受。

公理 4 宇宙是变化运动的。

由公理 4 和定理 1 可以推出以下定理。

定理 2 世界中物质的变化运动是电子和光子相互作用的结果。

但是,很难证明电子和光子是如何相互作用的。公理 5 给出了电子和光子之间基本的相互作用。

公理 5 电子和光子的相互作用为:

作用 1 电子能够从一个位置移动到另一个位置;

作用 2 光子能够从一个位置移动到另一个位置;

作用 3 电子能够吸收或放出光子。

自然科学认为物质在时间和空间内是有限的。

公理 6 物质在时间和空间内是有限的,从而电子和光子也是时空有限的。

量子力学不确定性原理十分重要,将在定理 3 中导出。

定理 3 量子力学中,时间和能量不确定性原理为

$$\Delta t \Delta E = h$$

式中, Δt 为电子在某一状态下的持续时间(存在寿命); ΔE 为电子能量的变化; h 为普朗克常量。

位移和动量不确定性原理为

$$\Delta x \Delta P = h$$

式中, Δx 为电子存在的领域; ΔP 为电子动量的变化。

公理 6 说明电子的存在是在时间和空间内有限的,也即 $\Delta t \neq \infty$, $\Delta x \neq \infty$ 。定理 3 的时间和能量不确定性关系为 $\Delta t \Delta E = h$,从而 $\Delta E \neq 0$,也即能量不确定;位移和动量不确定性关系 $\Delta x \Delta P = h$ 中, $\Delta P \neq 0$,也即动量不确定。

定理 4 某一状态下电子在有限时间范围内能量不确定,在有限空间领域内动量不确定。

定义 2 量子力学中封闭体系纯状态用波动函数表示,开放体系杂化状态用密度函数表示。电子状态用波动函数表示时,电子具有干涉性,用密度函数表示时,电子不具有干涉性。

物质的稳定性是材料领域的重要概念。因而寻求一种稳定性的量度标准非常必要。下面的两个公理就是关于稳定性量度的。

公理 7 电子稳定性用结合能 E 和能量起伏 ΔE 来度量。

电子稳定性量度中能量起伏 ΔE 在定理 4 中已有说明,其与电子持续时间有关,是

电子与光子相互作用产生的。

在计算稳定性量度时,如果是纯状态,采用波动函数计算,但若是杂化状态,则采用密度函数进行计算。

公理 8 两个稳定性量度结合能 E 的大小和能量起伏 ΔE ,同样对于纯状态采用波动函数计算,对于杂化状态采用密度梯度函数计算。

利用 Hückel 半经验法对两个稳定性量度的具体计算,以后详述。

公理 9 一个状态只能被一个电子占据,不能被一个以上的电子占据,这就是 Pauli 不相容原理,也是量子力学中最著名的公理。

Pauli 不相容原理和 Heisenberg 不确定性原理是量子力学最重要的内容。量子力学的其他推论必须满足 Pauli 不相容原理和 Heisenberg 不确定性原理。下面介绍 Pauli 不相容原理在材料的结合、结构、物性及反应上的应用。

对于材料而言,材料性质决定了材料的用途,材料的组织结构又决定了材料的性质,原子的结合状态决定了材料的组织结构。通过原子结合的变化、反应来改变材料的性质。所以,材料的最终问题是结合、结构、物性及反应的问题。以下是关于材料科学方面的一些公理。

公理 10 材料的最终问题是结合、结构、物性及反应的问题。

由定理 2 和公理 10 可以看出,材料的最终问题,结合、结构、物性及反应可以用电子和光子的相互作用来解释。

量子力学在化学结合上得到了极大的应用。

定理 5 原子间通过电子相互作用结合,物质的结合趋势趋于稳定化。

由公理 2 和定理 5 可以得到以下关于物质结构的定理。

定理 6 物质的结构可以归结为原子的配置及其稳定性问题,原子的配置及其稳定性问题又可以归结为电子的结合和稳定性问题。

例如,材料变形(塑性变形),当施加外力时,原子的位置发生变化。由公理 3 可知,必须有空穴存在,原子才可以移动。量子力学中,把原子的移动问题归结为电子的移动问题进行讨论。原子的位置变化是原子间结合的变化,与电子的状态发生变化相对应。根据 Pauli 不相容原理可知,电子从一个状态迁移到另一个状态,那么另一个状态必须没有被电子占据。所以材料能否发生塑性变形,取决于是否有电子空轨道。材料塑性变形的量度就是材料的强度。电子状态能够发生变化,则材料强度就大。导电性

也取决于电子能否占据空穴状态。存在空穴,则电子容易移动,是电的良导体,否则是绝缘体。耐蚀性和耐热性问题也归结为电子能否占据空穴。可以看出材料的诸多性质如塑性变形、强度、导电性、耐蚀性、耐热性都与电子能否移动有关。公理 3 中已经指出,电子能否移动取决于是否有空穴,相当于量子力学中是否有电子占据空轨道状态。下面以定理的形式进行表述。

定理 7 材料的物性(塑性变形、强度、导电性、耐蚀性、耐热性等)由电子能否占据空轨道的状态决定。

定理 7 中,把材料的物性即原子移动问题,转化为电子状态变化问题(公理 5 作用 1)。这里电子能否占据其他状态都以 Pauli 不相容原理为基础。对于材料的稳定性问题,取决于原子间的结合强弱。原子间的结合强弱决定原子移动容易程度。而原子间结合强弱由电子决定。所以,材料的稳定性问题可归结为电子稳定性问题。例如,强度是应力作用下电子的稳定性问题,耐蚀性是腐蚀环境下电子的稳定性问题,耐热性是高温环境下电子的稳定性问题。电子的稳定性问题,可以用公理 7 中的两个稳定性量度来衡量。因而材料的性质可以通过结合能和能量变化来衡量,结合能和能量变化又可以利用分子轨道法进行计算,这样就可以对材料的性质进行评价和设计。

定理 8 可以用电子稳定性量度来衡量材料塑性变形、强度、导电性、耐蚀性、耐热性等性能。

物质的变化运动具有方向性和速度。变化的方向是由不稳定向稳定,变化的速度是不稳定程度越大,变化速度越大。根据定理 1,物质变化的方向和速度问题可以归结为电子的变化方向和速度问题。因而就可以用结合能和能量起伏表示。物质是由能量高(结合能小)的方向,向能量低(结合能大)的方向变化,能量起伏越大,则物质变化的速度越快。

定理 9 材料中对时效、相变的反应方向和速度起作用的是结合能和能量起伏。

热激活是物质和辐射场的相互作用,换言之,是电子和光子的相互作用(公理 5 作用 3)问题。

定理 10 利用热激活可以解释溶解、沸腾、扩散和化学反应的热活化现象。

上述理论是 Demokritos 原子论思想对材料的一些指导理论。特别是公理 3,物质在空穴中处于运动状态是非常重要的概念。Demokritos 空穴概念的定义及基本概念的具体表现形式和评价方法如下:

① 量子力学中,电子的区别在于它们所占据的轨道状态不同;

② 电子的状态由波动函数表示,波动函数由四个量子数(主量子数,角量子数,磁量子数和自旋量子数)确定;

③ Pauli 不相容原理规定,1 个电子只能占据一个轨道状态,一个轨道状态只能由一个电子占据,s,p,d,f 轨道最多分别被 2,6,10,14 个电子占据;

④ 本书讨论了电子和光子的行为,公理 3 中说明物质是由电子和光子组成的,空穴就是没有被电子所占据的轨道状态;

⑤ 非活性电子状态是满席状态,也就是说:空穴数 = 非活性电子状态数 - 被电子占据的轨道状态数;

⑥ 从元素周期表上看,空穴数从左到右减少。周期表中的 sd 电子系(过渡元素),sp 电子系(典型元素),sf 电子系(稀土元素)都是左边空穴多,右边接近满席;

⑦ 空穴的概念适用于有限原子、分子的结晶,原子和分子的结晶是波动函数具体的形式;

⑧ 本书在以后将主要讨论空穴状态。

原子的结合是电子迁移、电子状态发生变化的结果,电子能否移动又取决于是否存在空穴,电子移动的趋势是向满席非活性方向移动,因此原子的结合最终生成非活性的物质。原子利用空穴进行结合,对于结合后仍有空轨道的情况,电子可动,则是金属结合,这种情况不能用原子价概念进行解释。如果结合后不存在空轨道,电子不可动,则是共价结合或离子结合,能用原子价概念进行解释。对于材料结构而言,电子可动情况对应配位数大的密排等方结构,电子不可动情况对应配位数小的非密排异方结构(参照 3.3 物质的结构)。对于材料物性而言,电子可动情况对应导电性;导热性及塑性变形,电子不可动情况对应绝缘性、绝热性、脆性、高硬度(强度)、耐蚀性及耐热性。对于材料反应而言,电子可动性越大,反应可能性越大,否则反应可能性越小。那么,如何判断是否存在空穴? Pauli 不相容原理表明,没被电子占据的状态为空穴。非活性对应着所有轨道状态均被电子占满。利用改进的 Hückel 法通过计算 Mulliken 原子个数来计算结合能的大小。如果不存在空穴,则结合能很大,能量起伏很小,电子稳定,电负性大;如果空穴多,则结合能很小,能量起伏大,电子不稳定,电负性小(参照 3.1 电流和电负性)。如果没有空穴,则存在禁带(图 1.1(1)中共价结合的 Si);存在空穴,则不存在禁带,只存在导带(图 1.1(a)中金属键结合的 Al)(还可以参照 4.4 中的镁合金)。图

1.1 为能级图,其中图 1.1(a) 为 55 个 Al 原子能级图,不存在禁带;图 1.1(b) 为 55 个 Cu 原子能级图,存在禁带;图 1.1(c) 为 71 个 Si 原子能级图,存在禁带。表 1.1 为空穴是否存在对材料性能的影响。

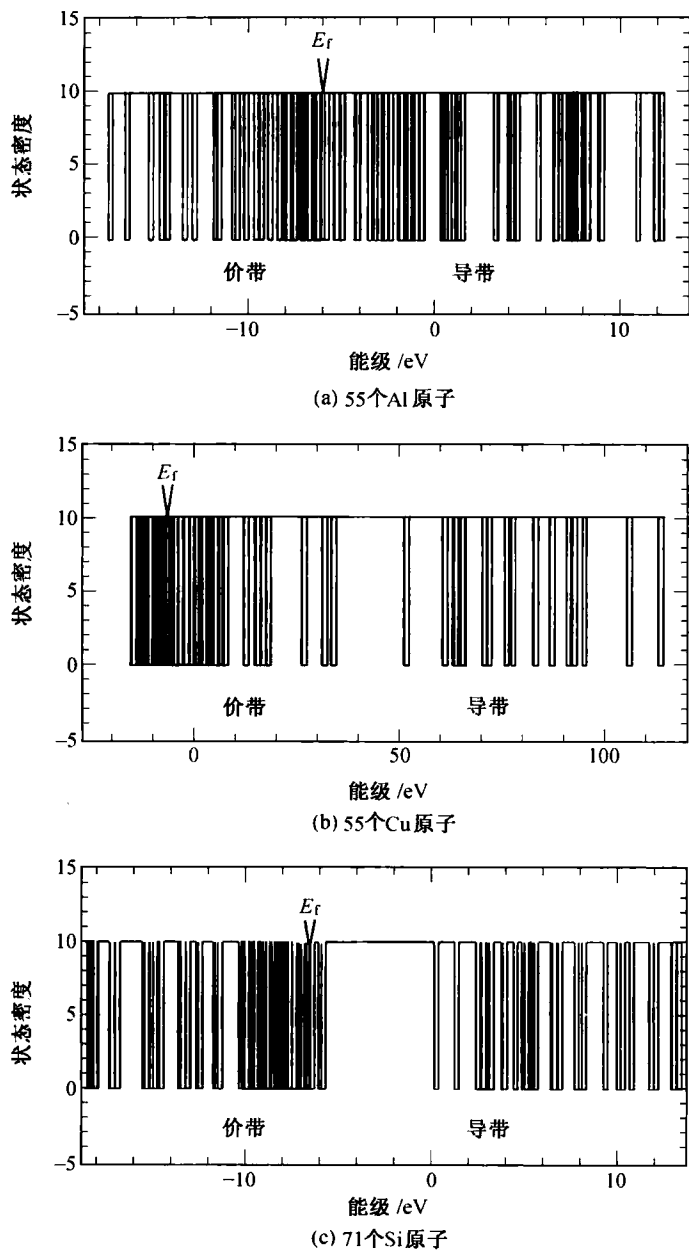


图 1.1 能级图

表 1.1 Demokritos 的空穴思想及材料的结合、结构、物性和反应

		空穴	
		存在	不存在
电子,光子		可动	不可动
电子的稳定性		不稳定	稳定
电子配置		不饱和	饱和
禁带		不存在	存在
结合能		小	大
能量变化		大	小
电负性		小	大
结合		金属键合	共价键合,静电结合
原子价概念		无效	有效
		固溶合金	化合物
结构		非局限,等方构造 配位数小	局限,异方构造 配位数大
物性	可塑性	优	劣
	电导性,导热性	优	劣
	强度	劣	优
	耐蚀性	劣	优
	耐热性	劣	优
反应		快	慢

第 2 章 改进的 Hückel 计算方法

本章主要介绍改进的 Hückel 分子轨道算法。

2.1 改进的 Hückel 法

Hückel 法是一种分子轨道计算方法(MO)。价键理论只考虑成键原子间最外层轨道中未成对的电子在形成化学键时的贡献,但如果考虑成键原子的内层电子在成键时的贡献,显然更符合实际情况。1932 年,由美国化学家 Mulliken 和德国化学家 Hund 提出的共价键理论即分子轨道理论,考虑了分子的整体性,因此能更好地说明多原子分子结构。20 世纪 30 年代,Hückel 运用原子轨道线性组合的分子轨道,经过某些近似,成功地处理了有机共轭分子,此法为 HMO 法。1965 年,美国化学家 Woodward 和 Hoffmann 提出了分子轨道对称守恒原理,在 HMO 基础上进行了改进,形成改进的 Hückel 方法,即 EHMO 方法。EHMO 方法与密度泛函中离散变分法(DV - X α)相比,DV - X α 是基于第一性原理计算的,而 EHMO 法是基于量子力学体系下的一种计算数学的插值方法,是应用实验数据和计算结果拟合来确定有关参数以简化计算的半经验方法,计算量小。

2.2 改进的 Hückel 半经验分子轨道算法

改进的 Hückel 法是分子结合情况下使用的半经验分子轨道法,适用于有机化合物及金属,在这方面已经有很多研究成果。改进的 Hückel 法利用的是原子轨道线性组合的分子轨道,其原子价轨道的线性结合

$$\Psi_i = \sum_{r=1}^n c_{ir} \chi_r \quad (2.1)$$

例如,氢原子为 1s 轨道,碳原子为 2s,2p_x,2p_y,2p_z 四个原子轨道。一个电子 r 原子轨道 Fock 积分为 H_{rr} ,交换积分 $H_{rs}(r \neq s)$ 是如下定义的

$$H_{rr} = \int \chi_r h \chi_r d\tau$$

$$H_{rs} = \int \chi_r h \chi_s d\tau \quad (r \neq s) \quad (2.2)$$

由变分法方程式得

$$|H_{rs} - ES_{rs}| = 0 \quad (2.3)$$

其中 S_{rs} 是重积分值,改进的 Hückel 法是单纯分子轨道法,不考虑 S_{rs} 。所以

$$H_{rr} = -I_r$$

$$H_{rs} = \frac{K}{2} S_{rs} (H_{rr} + H_{ss}) \quad (2.4)$$

式中, I_r 是第 r 个原子的价态电离能; K 是常数, Hoffmann 认为 $K = 1.75$ 比较合适。重叠积分 S_{rs} 用于轨道计算。Fock 积分的评价法如下, p_x, p_y, p_z 相等, σ 骨架近似固定, π 电子是孤立电子。变分方程式中忽略重积分。电子密度、价键可以用 Mulliken 提出的布居进行如下定义

原子轨道布居:
$$N_r = 2 \sum_j^{\text{occ}} \sum_s^{\text{occ}} C_{jr} C_{js} C_{rs} = \sum_s N_{rs}/2$$

原子布居:
$$M_x = \sum_r^{\text{onX}} N_r$$

原子轨道结合布居:
$$N_{rs} = 4 \sum_j^{\text{occ}} C_{jr} C_{js}$$

原子键布居:

$$N_{xy} = \sum_r^{\text{onX}} \sum_s^{\text{onY}} N_{rs} \quad (2.5)$$

式中, $\sum_j^{\text{occ}}$ 是被占轨道总和; $\sum_r^{\text{onX}}$ 是 X 元素原子价轨道总和。归一化条件是

$$\sum_r \sum_s C_{jr} C_{js} C_{rs} = 1 \quad (2.6)$$

定义中 M_x 原子总布居考虑了分子中价电子总布居相等。

2.3 两个稳定性量度的计算

第 1 章公理 7 给出了两种评价稳定性的方法,即结合能和能量起伏。在改进的 Hückel 法中,结合能可由总能量和孤立原子能量的差直接求得。孤立原子能量是各电

子电离势的线性叠加。

$$\text{结合能} = \text{总能量} - \text{孤立原子能量和} = E - \sum_p E_p \quad (2.7)$$

其中

$$E_p = \sum_r n I_r \quad (2.8)$$

式中, I_r 是 r 轨道电离势; n 是电子个数。

能量起伏 ΔE 用电子的最高轨道能量与空轨道能量的标准偏差来表征。参照公理 8, 电子分布概率

$$(\Delta E)^2 = \langle (E_n - \langle E_n \rangle)^2 \rangle \quad (2.9)$$

$$\langle E_n \rangle = \frac{\sum_{n=1}^k E_n \exp(-E_n/kT)}{\sum_{n=1}^k \exp(-E_n/kT)} \quad (2.10)$$

结合能与稳定性对应, 能量起伏是由电子激活引起的, 与反应性(活性)对应。结合能的高低和能量起伏的大小是稳定性的量度, 但是它们具有不同的物理意义。结合能的高低是静稳定性量度, 能量起伏是动稳定性(对反应起作用)量度。

以上讨论的两个稳定性量度, 是与公理 3 中描述的运动和必要的空间之间的关系, 下面讨论其与结合、结构、物性及反应之间的关系。

公理 3 中描述的运动是电子的运动, 所以空间是电子的空轨道。由定义式(2.9)和式(2.10)可以看出, 空轨道数越多, 则能量起伏越大, 此时电子状态不稳定, 反应速度快; 空轨道数越少, 则能量起伏越小, 电子状态稳定, 反应速度慢。另一方面, 就结合能而言, 稳定状态对应的结合能大。因此, 结合能和能量变化是电子空轨道存在状态的定量表述。后面将要介绍的空轨道与结合性关系表明, 结合后仍具有空轨道的结合是金属结合, 否则是共价结合或离子结合。对于金属结合的物质, 具有塑性, 具有良好的导电和导热性、低耐蚀性和低耐热性; 而共价结合和离子结合的物质, 具有脆性, 是电和热的不良导体, 具有耐蚀性和耐热性。