

仪表电器材料学

傅仁利 王寅岗 主编

YIBIAO DIANQI CAILIAOXUE



国防工业出版社

National Defense Industry Press

仪 表 电 器 材 料 学

傅仁利 王寅岗 主编

· 北京 ·

图书在版编目(CIP)数据

仪表电器材料学 / 傅仁利, 王寅岗主编. —北京: 国防工业出版社, 2004. 6

ISBN 7-118-03556-3

I. 仪... II. ①傅... ②王... III. 仪表-电器-材料学 IV. G253.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 099802 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 100044)

北京奥鑫印刷厂印刷

新华书店经售

*

开本 787 × 1092 1/16 印张 22.4 字数 457 千字

2004 年 6 月第 1 版第 1 次印刷 印数 1—4000 册 定价 29.00 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

众所周知,仪器仪表是工业的耳目,而仪表电器材料则是仪器仪表发展的基础。仪表电器材料以功能材料为主体,由于它在科技与社会进步中地位重要,普遍受到政府、企业和科研机构的重视。投入了巨大的人力和资金,取得了重大发展。仪表电器材料品种浩繁,规格众多,工艺复杂,性能特殊,决定了各国在行业、企业和产品等方面具有各自的特点。

仪表电器材料不仅应用于航空、航天和航海等国防尖端工业领域,还广泛用于民用工业和日常生活方面,如通信和家庭电子类消费产品,以满足人们日益增长的对信息、娱乐和医疗保健等的需求。它已成为衡量一个国家科学技术水平乃至综合国力的重要指标之一。我国仪表电器材料研究及其产业的发展虽然较快,但整体水平同世界发达国家相比仍有很大差距。因此,亟待普及仪表电器材料的有关知识和加强相关专业技术及管理人才的培养。

南京航空航天大学自 1984 年开始为测控技术与仪器的本科生开设“仪表电器材料学”课程,但一直没有适合本专业学生使用的正式出版的教材。原有自编的“仪表电器材料”讲义,一方面部分内容因仪表电器材料的飞速发展而显老化,另一方面,内容安排上不够合理,结构材料方面的内容偏多,且部分内容衔接上有问题。为适应测控技术与仪器本科专业学生培养的要求,满足教学改革的需要,编写一本仪表电器材料方面的新教材乃是当务之急。

本讲义是对原讲义“仪表电器材料”(朱正吼编)进行全面的修改、调整和补充之后重新编撰而成,力求贯彻“加强基础、拓宽专业面”的原则。全书讲述了仪表电器材料基础、仪表电器用金属材料和电子功能材料三大部分内容,内容涵盖了膨胀合金、弹性合金、非晶态合金、电阻合金、导电金属与合金、介电材料、半导体材料、超导材料、光电子材料、压电晶体材料和磁性材料等典型仪表电器材料的相关知识。各章均以材料发展概况、材料的分类和特性、制备工艺及其应用为线索,同时提供必要的基础知识,并力求反映新近代表性的研究成果。

全书分为三篇 13 章,第 1,2,3,4,5,6,7,8 和 10 章由傅仁利编写,第 9,11,12,13 章由王寅岗编写,全书由傅仁利统稿定稿。

由于学识和经验所限,书中错误和不妥之处在所难免,恳请读者批评指正。

编著者
2004 年 9 月
于南京航空航天大学

目 录

绪 论	1
0.1 仪表电器材料的界定和分类	1
0.2 技术进步与仪表电器材料	3
0.3 仪表电器材料的学习内容	3
第一篇 仪表电器材料基础	5
第一章 材料的晶体学基础	5
1.1 原子结构与固体材料中原子结合键	5
1.1.1 组成物质的原子结构	5
1.1.2 原子和原子的结合	8
1.1.3 结合键与性能	11
1.2 固体材料中原子排列方式	13
1.2.1 晶体与非晶体	13
1.2.2 原子排列的研究方法	15
1.3 固体材料中的晶体结构	16
1.3.1 晶体学基础	16
1.3.2 纯金属的晶体结构	21
1.3.3 离子晶体的结构	25
1.3.4 共价晶体的结构	29
小 结	31
第二章 固体材料的结构与性能	32
2.1 晶体缺陷形式与固体材料的力学性能	32
2.1.1 晶体缺陷形式	32
2.1.2 固体材料的力学性能	34
2.2 固体材料中的电子结构与物理性能	41
2.2.1 固体材料中的电子结构和能带理论	41
2.2.2 超导电性	43
2.2.3 介电性	44
2.2.4 压电性和电致伸缩现象	47
2.2.5 铁电性	48
2.2.6 热电效应	49
2.2.7 磁性能	49
2.2.8 热性能	51
2.2.9 光学性能	53
小 结	54
第三章 材料的相结构与相图	55

3.1	材料的相结构.....	55
3.1.1	固溶体.....	55
3.1.2	中间相.....	59
3.2	二元相图及其类型.....	61
3.2.1	相图的基本知识.....	61
3.2.2	匀晶相图.....	63
3.2.3	二元共晶相图.....	65
3.2.4	二元包晶相图.....	69
3.3	复杂相图及分析.....	71
3.3.1	具有其他恒温转变的相图.....	71
3.3.2	形成稳定中间相的相图.....	72
3.3.3	铁碳相图.....	73
3.4	相图与性能的关系.....	78
3.4.1	根据相图判断材料的力学性能和物理性能.....	78
3.4.2	根据相图判断合金的工艺性能.....	79
第四章 材料制备方法简介.....		80
4.1	用凝固法材料的制备技术.....	80
4.1.1	区域熔炼.....	80
4.1.2	制备单晶.....	81
4.1.3	用快速冷凝法制备金属玻璃.....	82
4.1.4	定向凝固.....	83
4.2	气相沉积法的材料制备技术.....	84
4.2.1	硅芯片的外延生长.....	84
4.2.2	用化学气相沉积制取 B 纤维和 SiC 纤维.....	85
4.2.3	用惰性气体凝结法制取纳米材料.....	86
第二篇 仪表电器用金属材料.....		88
第五章 膨胀合金.....		88
5.1	热膨胀的物理本质及影响因素.....	88
5.1.1	金属与合金的热膨胀特性.....	88
5.1.2	正常热膨胀的双原子模型.....	89
5.1.3	反常热膨胀现象.....	90
5.2	低膨胀合金.....	91
5.2.1	FeNi36 因瓦合金.....	91
5.2.2	Fe-Ni-Co 系超因瓦合金.....	93
5.2.3	其他低膨胀合金.....	93
5.3	定膨胀合金.....	94
5.3.1	Fe-Ni-Co 系定膨胀合金.....	94
5.3.2	其他定膨胀合金.....	95
5.4	热双金属.....	95

5.4.1	热双金属的主要特性参数	96
5.4.2	热双金属材料的组成	97
5.4.3	热双金属分类	98
5.4.4	热双金属的生产工艺	98
第六章 弹性合金		100
6.1	金属与合金的弹性	100
6.1.1	弹性模量	100
6.1.2	弹性模量温度系数	101
6.1.3	频率温度系数	101
6.1.4	铁磁材料的弹性反常	101
6.1.5	金属与合金的滞弹性	102
6.2	高弹性合金	103
6.2.1	铁基高弹性合金	103
6.2.2	其它高弹性合金	106
6.3	恒弹性合金	108
6.3.1	铁磁性恒弹性合金	108
6.3.2	无磁恒弹性合金	113
6.3.3	特殊性能的恒弹性合金	114
第七章 导电金属材料		115
7.1	金属与合金的导电性	115
7.1.1	金属导电的物理本质及影响因素	115
7.1.2	导电金属材料的特性	116
7.2	电阻用金属与合金	117
7.2.1	精密电阻合金	117
7.2.2	金属膜电阻材料	119
7.2.3	特种金属电阻材料与合金	120
7.3	电热合金	123
7.4	导电金属材料	124
7.4.1	导电金属及其合金	124
7.4.2	金属膜导电材料	128
7.4.3	金属超导材料	129
7.4.4	电触头材料	130
第八章 非晶态精密合金		131
8.1	非晶态合金的结构特性	131
8.1.1	非晶态金属的结构	131
8.1.2	非晶体金属的结构模型	133
8.2	非晶态合金的制造工艺	133
8.2.1	非晶态金属的形成	133
8.2.2	非晶体金属制备方法	134

8.2.3	影响非晶态合金形成的几个因素	135
8.3	非晶态金属性能特点及应用	136
8.3.1	非晶态金属的性能特点	136
8.3.2	非晶态精密合金的应用前景	137
第九章 半导体材料		140
9.1	半导体材料的结构与特性	140
9.1.1	半导体材料的电子结构	140
9.1.2	半导体材料的特性	148
9.2	半导体材料的分类与应用	152
9.2.1	半导体材料的分类	152
9.2.2	半导体材料的应用与发展	153
9.3	元素半导体材料	154
9.3.1	硅材料	154
9.3.2	其它元素半导体材料	157
9.4	化合物半导体材料	159
9.4.1	III-V 族化合物半导体材料	159
9.4.2	II-VI 族化合物半导体材料	161
9.4.3	IV-IV 族化合物半导体材料	161
9.4.4	氧化物半导体材料	161
9.4.5	化合物半导体材料的发展趋势	162
9.5	非晶态半导体材料	163
9.5.1	非晶态半导体的能带结构和导电性	163
9.5.2	非晶态硅薄膜	165
9.5.3	非晶态硫系半导体	166
9.6	外延半导体材料	167
9.6.1	硅外延材料	167
9.6.2	砷化镓气相外延材料	167
9.6.3	碳化硅薄膜材料	168
9.6.4	金刚石薄膜	169
9.7	半导体微结构材料	171
9.7.1	“能带工程”与半导体微结构材料的设计	172
9.7.2	半导体微结构材料的分类	175
9.7.3	半导体微结构材料的生长方法	176
9.7.4	半导体微结构材料的应用	178
第十章 电子陶瓷材料		180
10.1	电子陶瓷的基本概念	180
10.2	精密绝缘陶瓷和介电陶瓷材料	180
10.2.1	介电常数和介质损耗	181
10.2.2	精密绝缘陶瓷材料及其应用	182
10.2.3	介电陶瓷材料及其应用	182

10.3	铁电陶瓷.....	184
10.3.1	铁电体的自发极化和电滞回线.....	184
10.3.2	离介电常数电容器用铁电陶瓷材料.....	185
10.3.3	电致伸缩铁电陶瓷材料.....	186
10.3.4	反铁电陶瓷材料及其应用.....	186
10.4	热释电陶瓷.....	187
10.4.1	陶瓷的热释电效应.....	187
10.4.2	热释电陶瓷材料及其应用.....	188
10.5	压电陶瓷.....	188
10.5.1	压电效应与压电陶瓷的性能参数.....	188
10.5.2	压电陶瓷材料及其应用.....	190
10.6	半导体陶瓷.....	191
10.6.1	热敏半导体陶瓷.....	191
10.6.2	气敏半导体陶瓷.....	192
10.6.3	湿敏半导体陶瓷.....	193
10.6.4	压敏半导体陶瓷.....	194
10.7	快离子导体.....	196
10.7.1	快离子导体的传导特性和晶体结构.....	196
10.7.2	快离子导体材料.....	196
10.7.3	快离子导体的应用.....	197
第十一章 光电子材料.....		199
11.1	概述.....	199
11.1.1	什么是光电子材料.....	199
11.1.2	光电子材料的分类.....	200
11.2	固体激光材料.....	202
11.2.1	激光晶体.....	202
11.2.2	激光玻璃.....	205
11.2.3	半导体激光材料.....	206
11.3	非线性光学材料.....	207
11.3.1	非线性光学基础.....	207
11.3.2	二阶非线性光学晶体材料.....	209
11.3.3	三阶非线性光学材料*.....	211
11.3.4	有机和聚合物非线性光学材料*.....	212
11.4	光功能材料.....	215
11.4.1	电光功能材料.....	215
11.4.2	声光功能材料.....	219
11.4.3	磁光材料.....	222
11.5	红外光学材料.....	225
11.5.1	红外透过材料.....	225
11.5.2	红外探测器材料.....	227
11.6	光纤材料.....	231

11.6.1	光纤工作原理	231
11.6.2	光纤材料的特征值	235
11.6.3	光纤材料的种类	236
11.6.4	光纤材料的应用	241
11.7	液晶显示材料	241
11.7.1	什么是液晶	241
11.7.2	液晶显示原理	243
11.7.3	显示用液晶材料的类型与特性	244
11.8	光致变色材料	246
11.8.1	光致变色	246
11.8.2	光致变色物质	247
11.8.3	光致变色材料	247
第十二章 压电材料		249
12.1	概述	249
12.1.1	介电材料及其特征值	249
12.1.2	介电材料的种类	252
12.2	压电晶体材料	253
12.2.1	压电效应的机理	254
12.2.2	压电材料的特征值	255
12.2.3	压电晶体材料	259
12.2.4	压电晶体材料的应用	259
12.3	热释电晶体材料	262
12.3.1	晶体的热释电效应	262
12.3.2	热释电材料的特征值	264
12.3.3	热释电晶体材料	264
12.3.4	热释电晶体材料的应用	265
12.4	铁电晶体材料	267
12.4.1	铁电性与铁电体	267
12.4.2	铁电晶体材料的特性	267
12.4.3	铁电晶体材料分类	270
12.4.4	反铁电晶体材料	272
12.4.5	铁电晶体材料的应用	274
第十三章 磁性材料		275
13.1	材料的磁性	276
13.1.1	材料磁性的起因	276
13.1.2	磁场及其特征参量	279
13.1.3	磁性的分类与磁性材料的磁化特性	281
13.1.4	磁性材料的分类	283
13.2	软磁材料	285
13.2.1	金属软磁材料	285

13.2.2	铁氧体软磁材料.....	288
13.3	永磁材料.....	291
13.3.1	永磁材料概述.....	291
13.3.2	永磁铁氧体材料.....	294
13.3.3	金属永磁合金.....	295
13.3.4	稀土永磁材料.....	295
13.4	磁记录材料.....	297
13.4.1	磁记录及其对材料的要求.....	298
13.4.2	记录介质.....	300
13.4.3	记录头.....	308
13.5	压磁材料与旋磁材料.....	312
13.5.1	压磁材料.....	312
13.5.2	旋磁材料.....	313
13.6	其它磁性材料.....	314
13.6.1	有机高分子磁性材料.....	314
13.6.2	磁性液体.....	314
13.6.3	纳米磁性材料.....	315
13.6.4	磁性微波吸收材料.....	316
13.6.5	多功能磁性材料.....	317
13.6.6	智能磁性材料.....	318

绪 论

本章主要介绍仪表电器材料的概念和分类，以仪器仪表用金属材料、电子功能材料为代表回顾了仪表电器材料与工艺技术的发展历程，总结了仪表电器材料的特点，并展望了仪表电器材料与技术的未来。

0.1 仪表电器材料的界定和分类

传统的材料分类法基本上可以归结为三种：(1) 基于材料的物质性的分类，即按材料化学键、化学成分分类；(2) 基于材料的功能性分类，即按材料的力学、物理、化学、生物学及其相互转换等特性功能来分类；(3) 按材料服役的技术领域分类。仪表电器材料则是在考虑其功能特性的基础上，按上述最后一种分类法划分的一类材料。

所谓仪表电器材料，是以发挥其物理性能（如电、磁、光、声、热等）或物理与物理性能之间、力学与物理性能之间、化学与物理性能之间相互转换的特性为主而用于仪表电器工业的材料。对照功能材料的定义（凡具有优良的物理性能、化学和生物学功能及其相互转换特性，而被用于非单纯结构目的的材料，即功能材料），不难断定，仪表电器材料属于功能材料的范畴。因此，判别给定材料是否属于仪表电器材料时要注意两个方面，即首先要看其所利用的功能是否指单纯力学、单纯化学和生物学特性以外的功能。此外，还应注意其应用的指向性，即仪表电器工业。

另外，根据仪表电器材料在器件中所起的作用，还可将其定义为：凡具有能量与信息的发射、吸收、转换、传输、存储、控制与处理功能特性之一或者是直接参与保障这些功能特性顺利发挥而用于仪表电器工业的材料。

现在的仪表电器材料有多种多样，例如，导电材料的金属和超导材料、半导体材料、绝缘与介电材料以及磁性材料等。

从形态上分，有固体、液体、气体；从结晶形态上分，有多晶、单晶、非晶；从成分上分则包括金属、非金属、单质、化合物，而化合物又分无机和有机化合物等。下面就是根据目前工作中惯用的一些概念进行的分类：

- (1) 半导体材料；
- (2) 混合集成电路用材料；
- (3) 电容器材料；
- (4) 光电材料；
- (5) 磁性及记录材料；
- (6) 钎焊材料；
- (7) 高纯物质；
- (8) 封装引线材料；
- (9) 电阻材料；
- (10) 敏感材料；
- (11) 触点材料；
- (12) 电子级化学试剂气；

- (13) 电子用工程塑料;
- (14) 电子用树脂;
- (15) 光刻用材料;
- (16) 电子陶瓷材料

上述列举的仪表电器材料,由于分类标准不一致,相互之间有的仍存在着重叠与交叉。这是由于仪表电器材料本身涉及的范围非常广泛,且材料本身兼有多种功能特性,所以,仪表电器材料无论采用哪种分类标准,各类之间存在相互重叠与交叉是难免的。即使如此,上述惯用的分类法仍显得很凌乱,不利于学习掌握。

根据仪表电器材料的第一种定义方式,可将仪表电器材料按其所依托的基础功能特性划分为四个类别,其中,各个类别的代表性仪表电器材料分别为:

仪表电器材料	(1) 利用物理性能	电—半导体材料、介电材料、超导材料、电阻材料等;
		磁—磁记录材料、磁屏蔽材料等;
		光—光导纤维材料、激光器基质材料、光记录材料等;
		热—热敏材料、高导热性基片材料等;
		其他—触点材料、集成电路基片与衬底材料、微波介质材料等。
	(2) 利用物理 ↔ 物理性能转换特性	— 光电子材料、磁敏材料、压敏材料、热敏材料等。
	(3) 利用力学 ↔ 物理性能转换特性	— 压电材料、力敏材料等。
	(4) 利用化学 ↔ 物理性能转换特性	— 气敏材料、湿敏材料等

根据仪表电器材料的第二种定义方式,可将仪表电器材料分类如下:

- (1) 能量与信息的发射材料 — 热电子发射材料、微波发射材料、激光器基质材料等。
- (2) 能量与信息的吸收材料 — 磁屏蔽材料、微波吸收材料等。
- (3) 能量与信息的转转换材 — 光电显示材料、光电转换材料、压料材料、敏感材料等。
- (4) 能量与信息的传输材料 — 超导材料、光导纤维材料等。
- (5) 能量与信息的存储息 — 电容器介质材料、信息记录与存储材料 (包括磁、铁、电与光记录与存储材料) 等。
- (6) 能量与信息的处理材料 — 半导体微处处理器材料
- (7) 为上述功能特性顺利发挥起辅助性作用的材料 — 电阻材料、触点材料、集成电路基片与衬底材料、电子元器件封装及引线材料等。

另外,根据仪表电器材料所应用的具体场合,还可将其分为电子材料、仪表电器用金属材料 and 仪器仪表用陶瓷材料等。本讲义即是依据材料的功能特性,并结合其具体的应用场合来安排各个章次的 (见目录)。

由于实际中通常根据所应用材料最主要的功能特性来划分类别,而且某些材料本身具有功能多样性,因此,难免导致有些类别的仪表电器材料之间存在重叠,学习时应注意不要受此框框的限制。值得指出的是,随着材料科学与制备加工技术和电子信息技术的飞速发展,一些新型的仪表电器材料还在不断问世,其特性和应用场合可能会与现有仪表电器材料存在很大差别。所以说,仪表电器材料本身是一个开放的体系,其类别的划分也会随之逐步走向完善。

0.2 技术进步与仪表电器材料

近半个世纪,电气、电子技术有了惊人的进步。五十多年前晶体管的发明(1948 年)和其后的半导体集成电路(IC、LSI)技术的发展,对当今电子学领域的飞速发展都起到了重大作用。因此,以新材料、元器件的开发作为技术革新和技术飞速发展后盾的例子很多。不言而喻,不仅对电气电子整机,而且对各种工业产品的高性能化和新产品的开发,都与材料开发的成功有着密切的关系。在这一意义上,即使说制造材料就是开创技术也一点不过分。

下面看一下家电中的电视机。如果打开电视机的后盖,就可以发现它是由很多的电子元器件、印刷线路板和半导体集成电路,以及结构材料构成的。它所使用的材料也是各种各样的,如半导体、金属、高分子材料等等。可以说是各种元器件技术和材料技术的综合产物。如果这些电子元器件和材料中的哪一样是次品,电视机也就成了次品。因此,为了开发高性能的电视机就需要掌握关于电气电子材料和元器件的广泛知识和检测技术。更重要的是要正确掌握这些材料的性能以及选择与开发最适合的材料。

在这近半个世纪里,电气电子技术不断进行革新。这对科学和技术的进步作出了贡献。由于电子学和计算机的蓬勃发展,大容量、高速通讯技术等电气电子技术领域的发展,使社会发生了很大的变化,这定会迎来 21 世纪的高度信息化的时代。在这种形势下,人们强烈期待着上述电子学、计算机、信息与通讯领域更进一步得到发展。同时也期待着光电子学、分子电子学和生物电子学等新领域的发展。电气电子材料的高性能化和新、原材料的开发将会越来越受重视。

这对有志于从事仪表电器领域的技术人员来说,为了正确理解解仪表电器材料并顺应新技术的发展进行新产品的开发,掌握开发新材料知识是至关重要的。

0.3 仪表电器材料的学习内容

现在的仪表电器材料有多种多样,例如,导电的金属材料和超导材料、半导体材料、绝缘与介电材料以及磁性材料等。因此要学习的内容也很广泛,与此同时还要接连不断地进行新材料开发。在本书中由于篇幅有限,详细介绍这些全部材料是不可能的。因此,本讲义中不是把重点放在对各种材料的罗列上,而是把重点放在理解仪表电器材料的基础特性上。

最近的材料研究和开发,不仅期望改善现有材料的性能,而且把现有材料进行成功地组合,有效地利用每种材料所具有的性能实现材料高性能化。这就是目前人们所关注的复合材料技术。另外,用原子技术和分子技术设计、创造出材料的高性能,开发出新材料也将成为可能。可以预见,这些将成为 21 世纪材料开发的主流。因此,正确掌握材料所具有的基本特性和其物理结构,理论上正确掌握合理的材料开发的基础知识和常识是非常重要的。

为了充分理解仪表电器材料的基础知识,就需要电磁学、量子力学、固体物理、电气电子电路、半导体技术、电介质与绝缘技术,以及磁性物质等相关领域的知识(图 0.1)。例如,在学习半导体材料时,需要量子力学、固体物理、半导体技术和化学等知识。因篇幅有限,故在本讲义中不能涉及到的知识,请参照相关方面的教材。

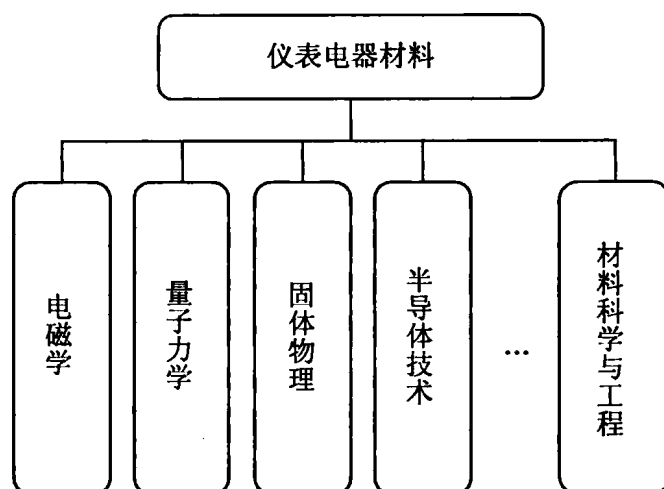


图 0-1 仪表电器材料与其相关的学科

作为本讲义的构成，在第一篇的仪表电器材料基础中说明第二篇以后的有关各种材料共性的材料科学基础。作为各种材料的排列顺序是以材料大类和相关的功能特性进行编写的，即第二篇为仪器仪表用金属材料，介绍膨胀合金、弹性合金、导电金属材料和非晶态精密合金；第三篇为电子功能材料，主要介绍半导体材料、光电子材料、压电与声光晶体材料、电子陶瓷材料和磁性材料等。因为除了这些材料之外受到注视的新材料还很多，所以，感兴趣的读者以本书中介绍的内容为线索自行查阅为好。

第一篇 仪表电器材料基础

组成物质的原子性质与原子结构，即电子的排列情况有关，特别是最外层电子的作用很大。在本篇内容中将介绍原子与原子的结合为什么是可能的？固体中微观的电子、原子及分子之间是怎样的关系？物质为什么分为易通过电流的导体和难通过电流的绝缘体？为什么碳元素（C）即能形成绝缘体又能形成导体？固体中形成电流的是电子，可是电子又从哪里来的？固体中电子又是怎样移动的，以及决定电流大小的原因等等。

第一章 材料的晶体学基础

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有不同的性能，这些都归结为内部的结构不同。深入理解结构的形成以及结构与成分、加工工艺之间的关系是本门课程的重点。作为本门课程的开始，本章先对“结构”的基本知识作一初步介绍。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，现分别介绍如下。

1.1 原子结构与固体材料中原子结合键

1.1.1 组成物质的原子结构

当在理论上可以解释物质的物性并且物质合成技术已被确立之际，利用分子原子论控制物性，即所谓的分子设计已成为可能。所有的物质都是由原子构成，构成物质的原子有一百多种。这些原子的中心处有原子核，在其周围有若干电子，原子核周围的电子按照一定规则作轨道运动，这使原子有了它的特点。下边以原子结构最简单的氢原子（H）为例加以说明。

氢原子像图 1-1 所示那样，原子核是由位于中心的一个质子和围绕原子核作圆周运动的电子构成。图中 r 为半径， ϵ_0 为真空中的介电常数， m 为电子质量， v 为电子运动速度， q 为电子的电荷。

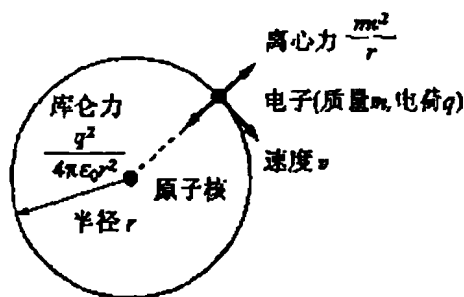


图 1-1 玻尔氢原子模型

这个电子受到原子核和电场力（即库仑力： $q^2/4\pi\epsilon_0 r^2$ ）以及圆周运动的离心力（即 mv^2/r ）三个力的作用，在三个力平衡的位置上作旋转。玻尔（Bohr）在原子波谱的研究中得到电

子轨道不是连续存在，而是像下式给出那样，当把角动量 p 以沿着轨道的路径（即对坐标 x ）进行积分时，其积分值为普朗克常数 h ($=6.626 \times 10^{-34} \text{J}\cdot\text{s}$) 整数倍的轨道。即

$$\oint p dx = nh \quad (n = 1, 2, 3 \dots) \quad (1-1)$$

称上式为玻尔量子化条件。根据这一条件，如果计算电子圆周运动的轨道半径为：

$$r_n = n^2 a_0 \quad (a_0 = 0.0529 \text{ nm}) \quad (1-2)$$

$$E_n = -\frac{E_h}{n^2} \quad (E_h = 13.6 \text{ eV}) \quad (1-3)$$

式中， $n=1, 2, 3, \dots$

把 $n=1$ 时的状态称为基态。如果将 13.6 eV 的能量一给予这个状态的氢原子，处于基态的电子得到这一能量后就被激发出来。也就是说，氢原子分离成氢离子和电子。基态的 s 轨道是圆轨道，但是一般情况下，电子轨道是以原子核为焦点的椭圆轨道。电子的运动状态（轨道）是由 4 个数值决定。将这个数值称为量子数，量子数有主量子数 n ，角量子数 l ，磁量子数 m ，以及自旋量子数 s 。

由这 4 个量子数决定的轨道（状态）上，只能存在一个电子。这是由泡利（Pauli）不相容原理决定的。电子是从能量低的轨道依次排列而形成原子。表 1-1 给出的元素周期表是按这个规则排列核外电子的，并且是从电子少的开始依次排列的。

表 1-1 核外电子的排列

壳层名	K		L			
<i>n</i>	1		2			
<i>l</i>	0		0	1		
电子名	1s		2s	2p		
m	0		0	-1	0	1
s	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
电子数	2		2	6		
元素符号	H He		Li Be	B C	N O	F Ne
原子序数	1 2		3 4	5 6	7 8	9 10

为了表示不同的原子在不同的轨道上拥有的电子排列，使用数字和符号 s 、 p 、 d 等进行表示，如：H: $1s^1$, He: $1s^2$, Li: $1s^2 2s^1$, Be: $1s^2 2s^2$, B: $1s^2 2s^2 2p^1$, C: $1s^2 2s^2 2p^2$ 等，符号前的数字表示的是主量子数，其右上角的数表示电子数，从前往后表示核外电子层从里到外的排列顺序。一般来说，因为外层轨道的电子所具有的能量低，所以容易逸出。

另外，轨道填满电子后，就有稳定的倾向。例如惰性元素的 He、Ar、Ne 等就属于这一情况。与此相对，I 族的碱金属元素 s 轨道的电子容易逸出，VII 族的卤素元素容易接受