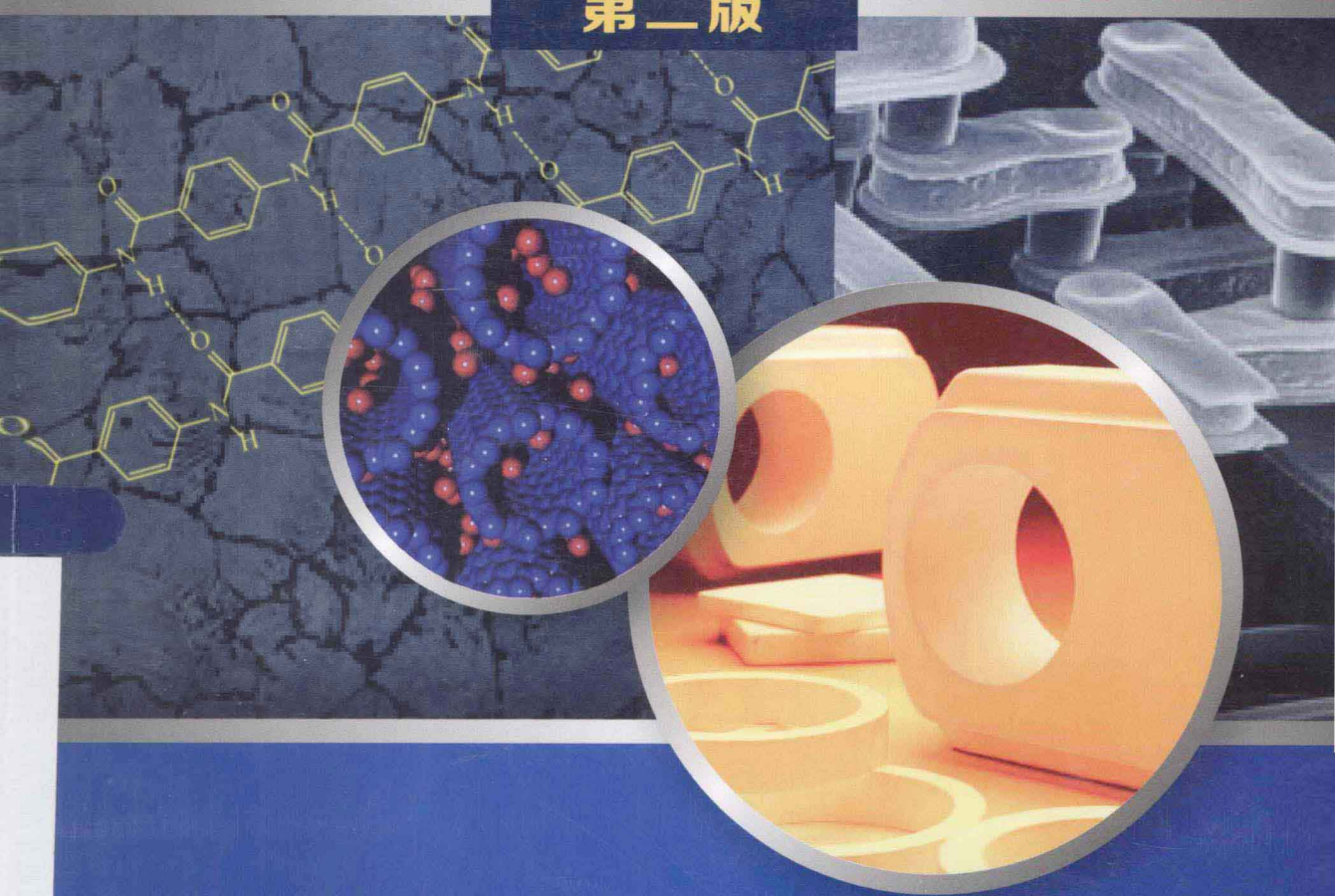


高等学校教材

# 材料化学

曾兆华 杨建文 编著

第二版



化学工业出版社

高等学校教材

# 材 料 化 学

第二版

曾兆华 杨建文 编著



化学工业出版社

· 北 京 ·

本书是《材料化学》的第二版,介绍了材料化学方面的基础知识,具体内容包括绪论、材料的结构、材料的性能、材料化学热力学、材料的制备、电子与微电子材料、光子材料、生物医用材料、高性能复合材料、纳米材料。

本书可供大专院校材料科学与工程专业师生使用,也可供材料专业从业人员参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

材料化学/曾兆华,杨建文编著. —2版. —北京:  
化学工业出版社, 2013.6  
高等学校教材  
ISBN 978-7-122-16957-0

I. ①材… II. ①曾… ②杨… III. ①材料科学-应  
用化学-高等学校-教材 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2013) 第 070730 号

---

责任编辑:陶艳玲  
责任校对:宋 夏

文字编辑:颜克俭  
装帧设计:关 飞

---

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)  
印 装:三河市延冈印装厂  
787mm×1092mm 1/16 印张22 字数576千字 2013年7月北京第2版第1次印刷

---

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899  
网 址: <http://www.cip.com.cn>  
凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

---

定 价:38.00元

版权所有 违者必究

## 第二版前言

本书自 2008 年出版以来,已有 5 年时间。鉴于材料科学领域近年来发展迅速,以及本书使用过程中发现的一些问题,有必要对本书加以修订。

本书第二版的基本架构与第一版相同,但在内容上作了适当调整。整体上仍然分为两部分,第一部分(第 2~5 章)主要包含材料化学的基本内容,涉及材料的结构、性能、制备和材料化学热力学;第二部分(第 6~10 章)具体介绍各类高性能材料或功能材料。其中在第二部分的内容上调整较大。第一版的第二部分按四大类材料(金属材料、无机非金属材料、高分子材料以及高性能复合材料)和纳米材料进行逐章介绍,内容上较系统,但有些宽泛。在第二版中,我们主要是按材料的不同应用领域分章介绍,包括电子与微电子材料、光子材料、生物医用材料这些当今应用广泛和备受关注的新型材料,加上第一版原有的高性能复合材料和纳米材料,共 5 章。此外,第二版中的第一部分的内容进行了相应的调整充实。例如在原版的第 6~8 章中包含有金属材料、无机非金属材料、高分子材料的结构和制备的相关内容,而在第二版中都融合到第一部分相应章节中;考虑到材料界面和表面特性在材料研究和应用中的重要性,在第 4 章“材料化学热力学”中增加了“材料界面热力学”;在第 5 章“材料的制备”中增加了“自组装技术”。这样,第二版的前 5 章在内容上更系统,基本上可以自成一体。对于少课时(36 课时及以下)的材料化学课程来说,可以把前 5 章作为授课主体内容,后 5 章作为扩展阅读材料。对于较多课时的课程来说,可以根据专业特点、授课对象的水平层次以及课时数等实际情况,对后 5 章的内容有选择性地介绍。

本书第二版的第 1~5 章以及第 8 章、第 10 章由曾兆华编写,第 6 章、第 7 章和第 9 章由杨建文编写。希望本书对材料化学的教学及材料领域相关工作有所帮助,也恳请教师和读者对本书出现的不足和错误给予指正。特别是对于一直使用本书第一版作为授课教材的各校教师,如果对改版后本书在内容和结构上的改变有不同看法,希望大家给予意见及建议。正是大家对本书(第一版)的认可和采用,并给予了宝贵建议,使我们有动力投入时间和精力对本书进行了较系统和细致的修订。

编 者  
2013 年春于中山大学

# 第一版前言

能源、信息和材料被认为是当今社会发展的三大支柱，其中材料更是科学技术发展的物质基础，没有先进的材料，就没有先进的工业、农业和科学技术。从世界科技发展史看，重大的技术革新往往起始于材料的革新，而近代新技术（如原子能、计算机、集成电路、航天工业等）的发展又促进了新材料的研制。因此，近年来材料科学技术受到人们的普遍重视并获得迅猛发展。

材料化学伴随着材料科学的发展而诞生和成长，它是材料科学的重要组成部分，又是化学学科的一个分支。材料化学从分子水平到宏观尺度认识结构与性能的相互关系，从而调节改良材料的组成、结构和合成技术及相关的分析技术，并发展出新型的具有优异性质与性能的先进材料。

目前很多高等学校的化学类专业开设了材料化学这门课程。我们基于几年来对这门课程的教学体会，并吸取了国内外同类教材及相关专业述著的精华，编写了这本《材料化学》。

本书的第2~5章涉及材料的结构、性能、制备等材料化学的基本内容；第6~9章则以四大类材料（金属材料、无机非金属材料、高分子材料和复合材料）为主线，对不同种类的材料进行介绍，其中涉及各种现代先进材料如高性能金属材料、功能陶瓷、电子信息材料、生物医用材料、航空航天材料、能源材料、感光材料等，叙述各种材料的性能和行为与其成分及内部组织结构之间的关系。另外，纳米材料从组成来看，可以是四大类材料（金属材料、无机非金属材料、高分子材料和复合材料）中的一种，但其尺度和特性却与传统材料有着明显的差异，因此本书最后另辟一章（第10章）专门介绍纳米材料。

本书可作为高等学校材料化学课程的教材，也可作为材料科学工作者的参考书。本书第1~5章、第10章由曾兆华编写，第6~9章由杨建文编写。希望本书对材料化学的教学及材料相关工作能有所帮助，也恳请大家对本书出现的错误给予指正。

编者  
2008年1月



# 目 录

## 第 1 章 绪论

|                        |   |                     |   |
|------------------------|---|---------------------|---|
| 1.1 材料与化学 .....        | 1 | 1.4.3 环境和能源领域 ..... | 5 |
| 1.2 材料的分类 .....        | 3 | 1.4.4 结构材料领域 .....  | 6 |
| 1.3 材料化学的特点 .....      | 4 | 1.5 材料化学的主要内容 ..... | 6 |
| 1.4 材料化学在各个领域的应用 ..... | 5 | 参考文献 .....          | 7 |
| 1.4.1 生物医药领域 .....     | 5 | 思考题 .....           | 7 |
| 1.4.2 电子信息领域 .....     | 5 |                     |   |

## 第 2 章 材料的结构

|                         |    |                           |    |
|-------------------------|----|---------------------------|----|
| 2.1 元素和化学键 .....        | 8  | 2.4.1 金属晶体 .....          | 27 |
| 2.1.1 元素及其性质 .....      | 8  | 2.4.2 多晶结构 .....          | 30 |
| 2.1.2 原子间的键合 .....      | 9  | 2.4.3 固溶体 .....           | 30 |
| 2.1.3 原子间的相互作用与键能 ..... | 12 | 2.5 无机非金属材料结构 .....       | 33 |
| 2.2 晶体学基本概念 .....       | 14 | 2.5.1 离子晶体 .....          | 34 |
| 2.2.1 晶体和非晶体 .....      | 14 | 2.5.2 硅酸盐结构 .....         | 42 |
| 2.2.2 晶格、晶胞和晶格参数 .....  | 15 | 2.5.3 共价晶体 .....          | 47 |
| 2.2.3 晶向指数和晶面指数 .....   | 15 | 2.6 高分子材料的结构 .....        | 47 |
| 2.2.4 晶面间距 .....        | 17 | 2.6.1 高分子链结构单元的化学组成 ..... | 48 |
| 2.2.5 晶系 .....          | 17 | 2.6.2 高分子链结构单元的链接方式 ..... | 48 |
| 2.3 晶体缺陷 .....          | 19 | 2.6.3 高分子链的几何形态 .....     | 49 |
| 2.3.1 点缺陷 .....         | 19 | 2.6.4 高分子链的构型 .....       | 50 |
| 2.3.2 线缺陷和位错 .....      | 22 | 2.6.5 高分子链的柔顺性 .....      | 51 |
| 2.3.3 面缺陷 .....         | 25 | 2.6.6 聚合物的晶态结构 .....      | 52 |
| 2.3.4 体缺陷 .....         | 27 | 参考文献 .....                | 53 |
| 2.4 金属材料的结构 .....       | 27 | 思考题 .....                 | 53 |

## 第 3 章 材料的性能

|                    |    |                     |    |
|--------------------|----|---------------------|----|
| 3.1 化学性能 .....     | 55 | 3.3.2 热膨胀 .....     | 63 |
| 3.1.1 抗氧化性 .....   | 55 | 3.3.3 热传导 .....     | 64 |
| 3.1.2 耐酸碱性 .....   | 56 | 3.4 电性能 .....       | 65 |
| 3.1.3 耐有机溶剂性 ..... | 57 | 3.4.1 导电性能 .....    | 66 |
| 3.1.4 耐老化性 .....   | 57 | 3.4.2 介电性能 .....    | 67 |
| 3.2 力学性能 .....     | 58 | 3.4.3 铁电性与压电性 ..... | 69 |
| 3.2.1 材料的强度 .....  | 59 | 3.5 磁性 .....        | 69 |
| 3.2.2 材料的硬度 .....  | 60 | 3.5.1 磁性基本概念 .....  | 69 |
| 3.2.3 疲劳性能 .....   | 61 | 3.5.2 磁性的种类 .....   | 70 |
| 3.3 热性能 .....      | 62 | 3.5.3 磁畴和磁化曲线 ..... | 71 |
| 3.3.1 热容 .....     | 62 | 3.6 光学性能 .....      | 72 |

|                           |    |            |    |
|---------------------------|----|------------|----|
| 3.6.1 光的基本性质 .....        | 72 | 参考文献 ..... | 82 |
| 3.6.2 光与物质相互作用的基本原理 ..... | 73 | 思考题 .....  | 83 |
| 3.6.3 材料的光学性能 .....       | 74 |            |    |

## 第4章 材料化学热力学

|                            |    |                     |     |
|----------------------------|----|---------------------|-----|
| 4.1 化学热力学基础及应用 .....       | 84 | 4.2.4 固体表面的吸附 ..... | 100 |
| 4.1.1 化学热力学回顾 .....        | 84 | 4.3 相图及其应用 .....    | 101 |
| 4.1.2 化学热力学在材料研究中的应用 ..... | 86 | 4.3.1 相平衡与相律 .....  | 101 |
| 4.2 材料界面热力学 .....          | 91 | 4.3.2 相图 .....      | 102 |
| 4.2.1 表面张力和表面能 .....       | 91 | 参考文献 .....          | 112 |
| 4.2.2 润湿和接触角 .....         | 94 | 思考题 .....           | 113 |
| 4.2.3 弯曲表面热力学 .....        | 97 |                     |     |

## 第5章 材料的制备

|                          |     |                              |     |
|--------------------------|-----|------------------------------|-----|
| 5.1 金属材料的制备 .....        | 115 | 5.7 液相沉淀法 .....              | 148 |
| 5.1.1 冶金工艺 .....         | 115 | 5.7.1 直接沉淀法 .....            | 148 |
| 5.1.2 金属材料热处理 .....      | 117 | 5.7.2 共沉淀法 .....             | 148 |
| 5.1.3 非晶金属材料的制备 .....    | 118 | 5.7.3 均匀沉淀法 .....            | 148 |
| 5.2 陶瓷工艺 .....           | 119 | 5.8 固相反应 .....               | 149 |
| 5.2.1 原材料 .....          | 119 | 5.8.1 固相反应分类 .....           | 149 |
| 5.2.2 陶瓷粉体的制备 .....      | 122 | 5.8.2 固相反应的特点 .....          | 149 |
| 5.2.3 陶瓷的烧结 .....        | 122 | 5.8.3 固相反应的过程和机理 .....       | 149 |
| 5.3 高分子材料制备 .....        | 124 | 5.8.4 影响固相反应的因素 .....        | 150 |
| 5.3.1 自由基聚合反应 .....      | 124 | 5.8.5 固相反应实例 .....           | 152 |
| 5.3.2 离子型聚合反应 .....      | 125 | 5.9 插层法和反插层法 .....           | 152 |
| 5.3.3 缩合聚合 .....         | 127 | 5.10 自蔓延高温合成法 .....          | 153 |
| 5.3.4 聚合实施方法 .....       | 129 | 5.10.1 自蔓延高温合成法机理 .....      | 154 |
| 5.4 晶体生长技术 .....         | 131 | 5.10.2 自蔓延高温合成法的化学反应类型 ..... | 155 |
| 5.4.1 熔体生长法 .....        | 131 | 5.10.3 自蔓延高温合成技术类型 .....     | 156 |
| 5.4.2 溶液生长法 .....        | 134 | 5.11 自组装技术 .....             | 157 |
| 5.5 气相沉积法 .....          | 135 | 5.11.1 自组装的种类 .....          | 158 |
| 5.5.1 物理气相沉积法 .....      | 135 | 5.11.2 自组装膜 .....            | 158 |
| 5.5.2 化学气相沉积法 .....      | 138 | 5.11.3 自组装胶体晶体 .....         | 159 |
| 5.6 溶胶-凝胶法 .....         | 144 | 参考文献 .....                   | 161 |
| 5.6.1 溶胶-凝胶法的基本原理 .....  | 145 | 思考题 .....                    | 161 |
| 5.6.2 溶胶-凝胶法的应用 .....    | 146 |                              |     |
| 5.6.3 溶胶-凝胶法的优点和弱点 ..... | 147 |                              |     |

## 第6章 电子与微电子材料

|                     |     |                      |     |
|---------------------|-----|----------------------|-----|
| 6.1 导电材料 .....      | 162 | 6.1.4 电阻材料 .....     | 171 |
| 6.1.1 金属导电材料 .....  | 162 | 6.2 介电材料 .....       | 172 |
| 6.1.2 快离子导体 .....   | 164 | 6.2.1 材料的介电性特征 ..... | 172 |
| 6.1.3 聚合物导电材料 ..... | 168 | 6.2.2 压电材料 .....     | 177 |

|                       |     |                           |     |
|-----------------------|-----|---------------------------|-----|
| 6.2.3 热释电材料 .....     | 179 | 6.3.6 半导体材料的应用 .....      | 190 |
| 6.2.4 铁电材料 .....      | 180 | 6.4 微电子材料与芯片 .....        | 192 |
| 6.3 半导体材料 .....       | 181 | 6.4.1 微电子芯片发展概况 .....     | 192 |
| 6.3.1 半导体材料概述 .....   | 181 | 6.4.2 IC制造一般构造与技术过程 ..... | 193 |
| 6.3.2 半导体分类及特点 .....  | 182 | 6.4.3 微电子主要材料 .....       | 196 |
| 6.3.3 PN结 .....       | 185 | 参考文献 .....                | 204 |
| 6.3.4 单质硅半导体材料 .....  | 185 | 思考题 .....                 | 204 |
| 6.3.5 重要的化合物半导体 ..... | 187 |                           |     |

## 第7章 光子材料

|                       |     |                        |     |
|-----------------------|-----|------------------------|-----|
| 7.1 概述 .....          | 205 | 7.6.1 无机非线性光学材料 .....  | 234 |
| 7.2 光纤 .....          | 205 | 7.6.2 有机非线性光学材料 .....  | 234 |
| 7.2.1 光纤的基本构造 .....   | 206 | 7.6.3 聚合物非线性光学材料 ..... | 235 |
| 7.2.2 光纤分类 .....      | 207 | 7.6.4 其他非线性光学材料 .....  | 236 |
| 7.2.3 光纤传输特性 .....    | 210 | 7.7 发光材料 .....         | 236 |
| 7.2.4 石英光纤制作 .....    | 212 | 7.7.1 发光材料光度学指标 .....  | 237 |
| 7.2.5 掺铒光纤放大器 .....   | 213 | 7.7.2 材料发光原理和特征 .....  | 238 |
| 7.3 光子晶体 .....        | 214 | 7.7.3 光致发光 .....       | 242 |
| 7.3.1 光子晶体概念与特性 ..... | 214 | 7.7.4 阴极射线发光材料 .....   | 249 |
| 7.3.2 光子晶体材料与制作 ..... | 217 | 7.7.5 电致发光材料 .....     | 250 |
| 7.3.3 光子晶体应用 .....    | 219 | 7.8 激光材料 .....         | 256 |
| 7.4 液晶材料 .....        | 220 | 7.8.1 激光晶体的发光原理 .....  | 256 |
| 7.4.1 液晶分类 .....      | 220 | 7.8.2 激光材料分类 .....     | 257 |
| 7.4.2 液晶材料特性 .....    | 223 | 7.8.3 固体激光器材料 .....    | 257 |
| 7.4.3 液晶材料应用 .....    | 225 | 7.8.4 气体激光器材料 .....    | 258 |
| 7.5 光学透明导电材料 .....    | 227 | 7.8.5 染料激光 .....       | 260 |
| 7.5.1 金属透明导电薄膜 .....  | 227 | 7.8.6 半导体激光 .....      | 260 |
| 7.5.2 金属氧化透明导电膜 ..... | 228 | 7.9 光伏材料 .....         | 261 |
| 7.5.3 石墨烯 .....       | 231 | 参考文献 .....             | 265 |
| 7.5.4 透明导电膜应用 .....   | 232 | 思考题 .....              | 265 |
| 7.6 非线性光学材料 .....     | 233 |                        |     |

## 第8章 生物医用材料

|                         |     |                            |     |
|-------------------------|-----|----------------------------|-----|
| 8.1 生物医用材料概述 .....      | 267 | 8.3.1 生物医用金属材料性能要求 .....   | 271 |
| 8.1.1 生物医用材料的内涵 .....   | 267 | 8.3.2 常用生物医用金属材料 .....     | 272 |
| 8.1.2 生物医用材料的分类 .....   | 267 | 8.4 生物陶瓷 .....             | 275 |
| 8.1.3 生物医用材料的基本要求 ..... | 268 | 8.4.1 生物陶瓷的种类特点 .....      | 275 |
| 8.2 生物医用材料表面改性 .....    | 269 | 8.4.2 生物陶瓷的制备 .....        | 277 |
| 8.2.1 材料表面形貌控制 .....    | 269 | 8.5 生物医用高分子材料 .....        | 280 |
| 8.2.2 生物医用材料的表面修饰 ..... | 269 | 8.5.1 生物医用高分子材料的种类 .....   | 280 |
| 8.2.3 等离子体表面处理 .....    | 270 | 8.5.2 生物医用高分子材料的要求 .....   | 281 |
| 8.2.4 离子注入表面改性 .....    | 271 | 8.5.3 生物可降解高分子材料及其应用 ..... | 282 |
| 8.2.5 自组装单分子层 .....     | 271 | 8.5.4 医药高分子 .....          | 285 |
| 8.3 生物医用金属材料 .....      | 271 | 8.6 纳米生物材料 .....           | 290 |



|                       |     |                          |     |
|-----------------------|-----|--------------------------|-----|
| 8.6.1 纳米生物材料的分类 ..... | 290 | 8.6.5 纳米抗菌药及创伤敷料 .....   | 294 |
| 8.6.2 纳米载体 .....      | 291 | 8.6.6 组织工程中的纳米生物材料 ..... | 294 |
| 8.6.3 纳米细胞分离技术 .....  | 293 | 参考文献 .....               | 295 |
| 8.6.4 染色纳米材料 .....    | 294 | 思考题 .....                | 295 |

## 第9章 高性能复合材料

|                         |     |                       |     |
|-------------------------|-----|-----------------------|-----|
| 9.1 复合材料概述 .....        | 296 | 9.4.2 晶须增强体 .....     | 307 |
| 9.2 复合材料的命名与分类 .....    | 297 | 9.4.3 颗粒增强体 .....     | 309 |
| 9.3 复合材料的基体材料 .....     | 297 | 9.5 复合材料主要性能与制造 ..... | 309 |
| 9.3.1 金属基体材料 .....      | 298 | 9.5.1 聚合物基复合材料 .....  | 309 |
| 9.3.2 无机非金属材料(陶瓷) ..... | 299 | 9.5.2 金属基复合材料 .....   | 312 |
| 9.3.3 聚合物基体材料 .....     | 300 | 9.5.3 陶瓷基复合材料 .....   | 315 |
| 9.4 复合材料的增强相 .....      | 302 | 参考文献 .....            | 316 |
| 9.4.1 纤维增强体 .....       | 302 | 思考题 .....             | 317 |

## 第10章 纳米材料

|                        |     |                         |     |
|------------------------|-----|-------------------------|-----|
| 10.1 纳米材料的种类 .....     | 318 | 10.3.3 纳米体的分散及稳定化 ..... | 336 |
| 10.1.1 零维纳米材料 .....    | 319 | 10.4 纳米材料的应用 .....      | 338 |
| 10.1.2 一维纳米材料 .....    | 320 | 10.4.1 结构材料领域 .....     | 338 |
| 10.1.3 二维纳米材料 .....    | 321 | 10.4.2 光学特性材料领域 .....   | 338 |
| 10.1.4 纳米固体材料 .....    | 322 | 10.4.3 生物医学领域 .....     | 339 |
| 10.1.5 纳米复合材料 .....    | 323 | 10.4.4 磁性材料领域 .....     | 339 |
| 10.2 纳米材料的特性 .....     | 324 | 10.4.5 催化方面的应用 .....    | 340 |
| 10.2.1 纳米效应 .....      | 324 | 10.4.6 涂料领域的应用 .....    | 340 |
| 10.2.2 纳米材料的特殊性质 ..... | 325 | 10.4.7 其他精细化工中的应用 ..... | 340 |
| 10.3 纳米材料的制备 .....     | 327 | 参考文献 .....              | 341 |
| 10.3.1 物理方法 .....      | 327 | 思考题 .....               | 341 |
| 10.3.2 化学方法 .....      | 330 |                         |     |

# 第 1 章 绪论

## 1.1 材料与化学

材料化学 (materials chemistry) 从字面上理解, 应该是与材料相关的化学学科的一个分支。材料 (materials) 是具有使其能够用于机械、结构、设备和产品的性质的物质。具体来说, 材料首先是一种物质, 这种物质具有一定的性能 (performance) 或功能 (function), 从而为人们所使用。材料与化学试剂 (chemicals) 不同, 后者在使用过程中通常被消耗并转化成别的物质, 而材料则一般可重复、持续使用, 除了正常损耗, 它不会不可逆地转变成别的物质。另外, 化学的研究对象就是物质, 化学是关于物质的组成、结构和性质以及物质相互转变的学科。把材料学与化学结合起来, 可以从分子水平到宏观尺度认识结构与性能的相互关系, 从而调节改良材料的组成、结构和合成技术及相关的分析技术, 并发展出新型的具有优异性质与性能的先进行材料。实际上, 材料领域中有很多方面涉及化学问题, 包括材料的化学组成及结构, 材料的性能或功能, 材料的制备加工以及一些与材料应用相关的化学问题。因此, 可以把材料化学简单描述为关于材料的结构、性能、制备和应用的化学。

材料在人类发展历史中占有重要地位, 早期人类文明划分为石器时代 (Stone Age)、青铜器时代 (Bronze Age)、铁器时代 (Steel Age), 正是以各时期所使用的有代表性的材料为标志。石器时代分为旧石器时代 (Old Stone Age or Paleolithic) 和新石器时代 (New Stone Age or Neolithic)。旧石器时代历时 100 年以上, 这期间地球上的气候、环境发生较大变化, 人类在体质演化上经历了直立人阶段、早期智人阶段和晚期智人阶段, 体态由猿人向现代人逐渐进化, 脑容量不断增加。整个旧石器时代都以打制石器作为标志。打制石器由简单、粗大, 向规整、细小发展, 石器的种类不断增多。旧石器时代晚期还发明了骨器磨光技术和骨、石器钻孔技术。新石器时代处于约 1 万年~4 千年前, 其标志为陶器和农业的出现。新石器时代人类开始定居下来, 从事原始农业生产, 并把一些野生动物驯化成家畜, 从而有了比较稳定的食物来源。人类还改进渔猎手段, 从事制陶、纺织、木作等手工生产。

青铜时代是以使用青铜器为标志的人类物质文化发展阶段。青铜是古代人类有意识地将铜与锡或铅配合而熔铸成的合金, 硬度较纯铜高, 含锡 10% 的青铜, 硬度为红铜的 4.7 倍。熔化的青铜在冷凝时的体积略有胀大, 所以填充性较好, 气孔也少, 再加上其熔点 (700~900℃) 比红铜的熔点 (1083℃) 低, 所以容易融化和铸造成型。这都使青铜在应用上具有更广泛的适应性, 所以青铜的生产发展很快。中国的青铜时代为夏、商、西周和春秋战国时代。在商代的手工业中, 青铜工具如斧、锯、凿、锥等已广泛使用, 青铜兵器也日益增多。青铜工具在生产中的效用, 使青铜冶铸技术日益重要, 因而能获得飞速的发展。

铁器时代约开始于公元前 1500~公元前 1000 年, 以能够冶铁和制造铁器为标志。人们最早知道的铁是陨石中的铁, 地球上的天然铁是少见的, 所以铁的冶炼和铁器的制造经历了一个很长的时期。当人们在冶炼青铜的基础上逐渐掌握了冶炼铁的技术之后, 铁器时代就来了。铁器坚硬、韧性高、锋利, 胜过石器和青铜器。

在这几个时代中, 人类先是使用天然材料 (石头、骨), 然后对天然材料进行加工 (打制、磨光、钻孔等), 进而人工合成材料 (制陶、炼铜、炼铁)。炼铁技术的出现使材料的制

备与应用进入了一个全新的领域。现在我们可以从矿石中通过一定的化学过程提炼出金属，但在此之前，金属是相当稀有的。即使在青铜时代出现了从铜矿石提炼纯铜或青铜的技术，但这些矿石本身也不是随处可得，这显著地限制了这类金属的大范围使用。直到炼铁技术的出现，才得以在实际应用中广泛采用金属作为材料，这得益于铁矿石的储量丰富和分布广泛。显然，早期文明的发展中，金属是最有影响力的材料，而化学则与这些材料的生产密切相关，尽管当时还没有化学这个概念。从铁的冶炼中，我们可以体会化学在材料生产中所起的作用。不同于金和铜，在自然界中很难获得单质的铁，而必须通过化学方法从铁矿石（氧化铁）中提炼得到。把赤铁矿（ $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ）与碳一起加热，发生如下反应：



$\text{Fe}_3\text{C}$  称为渗碳铁（cementite），质硬而脆，纯铁则是较软且有延展性。这两者形成复合材料，也就是所谓碳钢，也简称钢。当碳的浓度太高时，复合物中渗碳铁比例过高，所得产品太脆，因而用处不大。通过反复的加热、锻打，可以除去部分碳以及硅酸盐（炉渣），同时铁表面形成黑色的氧化物  $\text{FeO}$ ，该氧化物又可以与碳化铁反应生成铁：



所得的单质铁与原来的渗碳铁复合，形成性能良好的碳钢。

早期人类当然不知道这些反应过程的存在，其所基于的基本概念也远远超出当时人们的想象。像所有早期的材料那样，钢的生产纯粹凭经验工艺。随着人们对基本化学原理的逐渐理解，并且认识到热和物理处理对物质微结构的影响关系，出现了各种钢制品精炼工艺技术，由此生产出性能优良而价值更高的碳钢和合金钢。化学的发展往往导致材料技术的实质性进步。在新材料的研发和材料工艺的发展中，化学一直担当着关键的角色。20 世纪初出现的合成高分子就是最好的例子。

作为天然有机聚合物，木材和其他植物纤维是人类最早使用的材料之一。木材作为结构材料一直使用至今，不过现在是常常把木材与合成有机聚合物复合，以改善性能、降低价格以及减轻对绿化的破坏。古代中国发明了造纸，使木材有了另一重要用途。化学对实用合成高分子材料发展的首次重要影响出现在 1839 年，当时美国人查尔斯·古德伊尔（Charles Goodyear）发现把天然橡胶与硫黄一起加热，可改善其弹性，减小黏结性。在该项成果发展成为商业产品的过程中，出现了另一种从天然材料通过化学处理而成的产品——硝酸纤维素，它可以用来制造火药棉（gun cotton）和赛璐玢（cellophane，也称玻璃纸）薄膜。这些材料衍生于天然高分子，可以归类为半合成材料。首个商业化的全合成高分子出现在 20 世纪初，美籍比利时裔化学家里奥·贝克兰（Leo Baekeland）利用苯酚与甲醛反应制备得到酚醛塑料，这是一种热固性高分子，俗称电木（Bakelite）。对高分子的研究始于 19 世纪 20 年代的赫尔曼·施陶丁格（Hermann Staudinger）的工作，直到 50 年代，其间包括赫尔曼·马克（Herman Mark）、库尔特·迈耶（Kurt Meyer）、华莱士·卡罗瑟斯（Wallace Carothers）和保罗·弗洛里（Paul Flory）等的工作，对高分子的结构、键合和反应逐渐产生了科学认识，这时才产生合成高分子产品的实用工艺。这是合成材料的一次革命，其标志是尼龙、人造纤维、特氟隆（teflon，聚四氟乙烯）和莱克桑（lexan，聚碳酸酯）等商业产品的出现。今天有机高分子已经成为我们日常生活中的一部分。因此有人把这个高分子工业发展时期称为合成材料时代，跟随在铁器时代之后。

纳米结构材料（nanostructural materials）发展自 20 世纪 80 年代中期。纳米级结构材料简称为纳米材料，是指其结构单元的尺寸介于  $1\sim 100\text{nm}$  范围之内。由于它的尺寸已经接近电子的相干长度，它的性质因为强相干所带来的自组织使得性质发生很大变化。并且，其

尺度已接近光的波长,加上其具有大表面的特殊效应,因此其所表现的特性,例如熔点、磁性、光学、导热、导电特性等,往往不同于该物质在整体状态时所表现的性质。化学在纳米材料发展中起着关键作用,层出不穷的纳米结构材料如纳米半导体薄膜、纳米线、纳米管、纳米陶瓷、纳米瓷性材料和纳米生物医学材料等,得益于分子设计和化学合成技术的创新和进步。

## 1.2 材料的分类

材料一般按其化学组成、结构进行分类。通常,基本固态材料可分为金属、无机非金属、聚合物。复合材料(Composites)是由两种或多种基本材料相结合而构成的,其组成、结构和性能特点有别于上述三类基本材料,因此应独立作为一类材料考虑。这样,可把材料分成金属材料、无机非金属材料、聚合物材料和复合材料四大类。若按照材料使用时对性能的侧重点不同,则可分为结构材料和功能材料。结构材料主要用作产品、设备、工程等的结构部件,因而关注其强度、韧性、抗疲劳等力学性质;功能材料则着重考虑其光、电、磁等性能,用于制作具有特定功能的产品、设备、器件等。此外,随着材料科学的迅猛发展,各种不同功能和用途的新材料层出不穷,在不同的场合,人们可能更关注材料的功能或用途,因此材料也可以按功能或用途划分为导电材料、绝缘材料、生物医用材料、航空航天材料、能源材料、电子信息材料、感光材料等。

(1) 金属材料(Metallic materials) 金属材料通常由一种或多种金属元素组成,其特征是存在大量的离域电子,也就是说,这些电子并不键合在特定原子上。金属的很多特性都可归因于这些离域电子,例如良好的导电导热性、抛光表面的反光性、金属光泽、延展性、塑性等。除汞外,所有金属在常温下都是固体。青铜和铁作为金属材料已有数千年的使用历史。今天,钢材在建筑、桥梁、设备等广泛用作结构材料,铜材则常常作为导电材料使用。材料科学的发展赋予金属材料各种新特性,形成各种各样的新型金属材料,如超塑性合金、形状记忆合金、储氢合金等。

(2) 无机非金属材料(Inorganic non-metallic materials) 无机非金属材料包括陶瓷、玻璃、水泥等化合物材料,以及一些由无机元素组成的单质材料如单晶硅、金刚石、石墨。其中陶瓷占了很大一部分。国外很多材料科学教科书在材料分类中都以陶瓷(ceramics)代替无机非金属材料,ceramics这个词在意义上几乎等同无机非金属材料,而把半导体材料单独作为一类。陶瓷是由金属与非金属之间组成的化合物,例如氧化物、硫化物、氮化物、碳化物以及硅酸盐、碳酸盐等。此类材料通常是电和热的不良导体,材质通常硬而脆。可用作结构材料、光学材料、电子材料等。传统陶瓷一般以天然原料通过煅烧等手段进行加工制造而成,其制品如卫生洁具、器皿等在日常生活中应用广泛。而现在的材料研究及应用侧重于以精制的高纯天然无机物或人工合成无机化合物为原料,采用特殊工艺烧结制造,这样的陶瓷可称为精细陶瓷。精细陶瓷具有各种优异性能或功能,主要用于工业技术,特别是高新技术方面。

半导体材料有单质(如单晶硅)和化合物(如砷化镓、磷化铟、磷化镓等)。半导体的电性质介于导体和绝缘体之间,微量杂质或晶体缺陷的存在对这种材料的电性质往往产生巨大影响,这种特性成了半导体材料应用的关键。半导体材料是制造大规模集成电路的关键材料,此外,还用于制造固态激光器、发光二极管、晶体管等。

(3) 高分子材料(Polymeric materials) 高分子是由碳、氢、氧、硅、硫等元素组成的分子量足够高的有机化合物。常用高分子材料的分子量在几千到几百万之间,一般为长链

结构,以碳链居多。高分子材料由很多这样的长分子链构成,分子链有的相对独立,链间没有通过化学键相接,这样的高分子材料一般可通过加热融熔融,称为热塑性高分子;有的分子链之间存在化学键链接,也就是交联,当交联密度足够大时,这样的高分子材料在加热时不会熔融,在溶剂中只能溶胀,称为热固性高分子。热塑性高分子材料一般有较好的延展性,易于加工;热固性高分子材料通常较坚硬而脆。

高分子材料包括天然高分子材料和合成高分子材料。木材、天然橡胶、棉花、动物皮毛等属于天然高分子。合成高分子则分成塑料、合成橡胶和合成纤维三大类。涂料和胶黏剂的主体组分通常是高分子,因而也归于高分子材料行列。高分子材料正朝着高性能化、功能化的方向发展,从而衍生出各种各样具有特殊性能或功能的高分子材料,如工程塑料、导电高分子、高分子半导体、光导电高分子、磁性高分子、光功能高分子、液晶高分子、高分子信息材料、生物医用高分子材料、反应性高分子、离子交换树脂、高分子分离膜、高分子催化剂及高分子试剂等。

(4) 复合材料 (Composites) 复合材料是由两种或多种不同材料组合而成的材料。通常一种材料为连续相,作为基体;其他材料为分散相,作为增强体。各种材料在性能上互相取长补短,产生协同效应,使复合材料既保留原组分材料的特性,又具有原单一组分材料所无法获得的或更优异的特性。金属材料、无机非金属材料和高分子材料相互之间或同种材料之间均可复合形成复合材料,一般可按照基体材料的种类分为聚合物基复合材料、金属基复合材料和陶瓷基(包括玻璃和水泥)复合材料。也可按其结构特点分为纤维复合材料、夹层复合材料、细粒复合材料和混杂复合材料。

复合材料在自然界也普遍存在,例如树木和竹子为纤维素和木质素的复合体;动物骨骼则是由无机磷酸盐和蛋白质胶原复合而成。复合材料使用的历史可以追溯到古代,例如稻草增强黏土以及漆器(麻纤维和土漆复合而成)。而建筑上广泛使用的钢筋混凝土也有上百年历史。复合材料这一名词源于20世纪40年代发展起来的玻璃纤维增强塑料(也就是玻璃钢)。现在,复合材料广泛应用在航空航天领域、汽车工业、化工、纺织和机械制造领域、医学领域和建筑工程领域等。

## 1.3 材料化学的特点

材料化学本身是学科交叉的产物。化学工作者利用化学反应和物理方法合成加工各种各样的材料;利用化学理论和方法可以从分子水平构筑材料,并能自主调节材料功能,这使化学与材料科学的界限越来越模糊,进而形成材料化学这一新学科。

材料化学既是化学学科的一个次级学科,又是材料科学的一个分支。材料化学的内容涉及化学的所有其他次级学科,如无机化学、有机化学、物理化学、分析化学、结构化学,它是这些学科在材料研究中的具体运用。我们在材料化学中同样关心形成分子的各种化学键,如同无机化学那样,但我们所关注的是这些化学键的特性会给材料带来怎样的性质或功能。

材料化学天生是跨学科的。材料化学与其他学科的结合,在20世纪带来了各式各样的合成材料。新材料的发展,往往源于其他科学技术领域的需求,这导致材料化学与物理学、生物学、药理学等众多学科紧密相连。材料合成与加工技术的发展不断地对诸如生物技术、信息技术、纳米技术等新兴技术领域产生巨大影响。通过分子设计和特定的工艺,可以使材料具备各种特殊性质或功能,如高强度、特殊的光性能和电性能等,这些材料在现代技术中起着关键作用。例如,高速计算机芯片和固态激光器是一种复杂的三维复合材料,是通过运用各种合成手段、以纳微米尺度把不同性能的材料组合起来而得到的。随着材料的不断发



展,对化学分辨率的要求将越来越高,人们必须在纳米尺度下对材料进行化学合成、加工和操控。这样,无论对于新材料以及现有材料,都要有更巧妙的制备技术,同时还要考虑成本的控制和对环境的影响。特别是对于纳米技术领域,需要发展出一些新的合成技术,例如气相、液相和固相催化反应。此外,新型自组装方法的出现使由分子组元自下而上(bottom up)合成纳米结构或其他特殊结构的材料成为可能。

材料化学是理论与实践相结合的产物,这是它与固体化学的主要区别所在。材料通过实验室的研究工作而得到深入的了解,从而指导材料的发展和合理使用。高性能、高质量及低成本的材料只有通过工艺的不断改进才能实现,材料变为器件或产品要解决一系列工程技术问题,这都需要理论和实践的结合,一方面用理论指导实践,另一方面通过大量实践使理论得到进一步发展。

## 1.4 材料化学在各个领域的应用

材料化学已渗透到现代科学技术的众多领域,如电子信息、生物医药、环境能源,其发展与这些领域的发展密切相关。

### 1.4.1 生物医药领域

材料化学和医药学多年来协同努力,并取得了巨大的进步。材料可植入人体作为器官或组织的修补或替代品,但材料一经进入体内,就有可能涉及生物过程和反应,引起不良反应。为此,必须从结构和组成上对材料进行改性,使其具备良好的生物相容性。通过材料化学与生物学的配合,研发出特殊用途的金属合金和聚合物涂层,以保护人体组织不与人工骨头置换体或其他植入物相排斥。现在,已经有很多生物医用材料可以植入人体内并保持多年无不良影响。此外,材料化学对于生物应用中的分离技术也产生了显著影响,如人造肾脏、血液氧合器、静脉过滤器以及诊断化验等。生物相容高分子材料已在药物、蛋白质及基因的控制释放方面获得应用。现在,人们正进行大量的研究,以开发用于医学诊断的新材料。将来,材料化学的研究可能会涉及原位药物生成(in situ drug production)、类细胞系统等。可以肯定,得益于材料化学最新进展的新型传感器将会对人类健康产生极大帮助。

### 1.4.2 电子信息领域

先进的计算机、信息和通信技术离不开相关的材料和成型工艺,而化学在其中起了巨大的作用。现代芯片制造设施基本上是一个化学工厂,在这个工厂里面,通过使用化学过程,如光致抗蚀剂、化学气相沉积法、等离子体刻蚀,简单的分子物质转化成具有特定电子功能的复杂三维复合材料。两个令人振奋的未来方向是电子及光学有机材料的相互渗透,以及通过光子晶格对光进行模拟操控,就如我们现在对电子进行操控那样。材料化学将会激活一个新领域的发展,一个可能的例子就是光子电路和光计算的产生。

### 1.4.3 环境和能源领域

基本化学研究创造了基础,使关键技术能够造福于大众的健康和生活水准。为了达到既提高生活质量而环境质量又能同时得到改善,必须通过多方面进行努力,其中包括材料化学。随着世界人口的持续增长和生活水平的提高,发展中国家对环境的关心在不断增长。为了减少对日渐萎缩的资源的使用,一个关键的挑战是开发新的技术,以发展低资源消耗的清洁能源。在发展光伏电池、太阳能电池、燃料电池的过程中,材料化学起了关键的作用。

在日常生活中,塑料制备作为包装或容器被广泛使用,其大量弃置可对环境产生严重破坏。随着对环境的关注,开发新的可回收和可生物降解的材料,也将成为材料化学的一个重



要任务。

物质生产过程需要用到大量材料,也会产生很多废弃物,这对环境的影响不容忽视。减少整个生产过程中过度浪费的工艺过程称为产品全生命周期工程(Life cycle engineering),这个过程中需要发展对环境无害的材料,以及可持续的处理和处置方法。

食品包装材料的一个基本要求是安全无毒,这在今天不难做到。而利用材料化学技术,可以开发新的包装材料,其中植入感应材料以显示食物变坏或储存条件不符合要求,这将为我们的食品安全提供有效的保障。

#### 1.4.4 结构材料领域

结构材料是材料化学涉足最广的领域。材料合成与加工技术的发展使现代的汽车和飞机比以前更安全、轻便和省油。基于材料化学所发展出来的特种涂料,具有防腐、保护、美化或其他用途,可在结构材料上使用。材料设计制造过程中,需要把材料的成分结构与合适的工艺条件有机地结合起来,这要求对其中所蕴含的化学过程有一个深刻的认识。将来,我们会把感觉、反馈甚至自愈功能集成到结构材料个体中,成为一种智能化的结构材料,这种材料将由各种具有不同功能或性能的材料组合而成,而要获得成功,则离不开材料化学与相关学科的协同努力。

### 1.5 材料化学的主要内容

正如前面所述,材料化学是关于材料的结构、性能、制备和应用的化学。材料化学的研究主要是围绕这几方面的内容展开的。

(1) 结构 材料的结构是指组成原子、分子在不同层次上彼此结合的形式、状态和空间分布,包括原子与电子结构、分子结构、晶体结构、相结构、晶粒结构、表面与晶界结构、缺陷结构等;在尺度上则包括纳米以下、纳米、微米、毫米及更宏观的结构层次。所有这些层次都影响产品的最终行为。

最精细的层次是组成材料的单个原子结构。原子核四周电子的排列方式在很大程度上影响材料的电、磁、热和光的行为,并可能影响到原子彼此结合的方式,因而也决定着材料的类型(金属、陶瓷还是聚合物)。

第二个层次是原子的空间排列。根据原子排列的有序性,可以把材料分为晶体和非晶体(无定形或非晶态材料)。晶体结构影响金属的力学性能,如延性、强度和耐冲击性。无定型材料的行为与结晶材料有很大差别。例如,玻璃态的聚乙烯是透明的,而结晶聚乙烯则是半透明的。原子排列中存在缺陷,对这些缺陷进行控制,就能使性能发生显著变化。

在大多数金属、某些陶瓷以及个别的聚合物材料中可以发现晶粒组织。晶粒之间的原子排列的变化,改变它们之间的取向,从而影响材料的性能。在这一结构层次上,颗粒的大小和形状起着关键作用。

最后,大多数材料是多相组成的,每个相有着它自己的、独特的原子排列方式和性能。因而控制材料主体内这些相的类型、大小、分布和数量就成为控制性能的一种辅助方法。

(2) 性能 性能是指材料固有的物理、化学特性,也是确定材料用途的依据。广义地说,性能是材料在一定的条件下对外部作用的反应的定量表述,例如力学性能和各种物理性能。

力学性能描述材料对作用力或应力的响应。最常见的力学性能是材料的强度、延性和刚度。力学性能不仅决定着材料工作的好坏,也决定着是否易于将材料加工成合用的形状。锻造成形的部件必须能够经受快速加载而不致破坏,并且还要有足够的延性才能加工变形成适

用的形状。微小的结构变化往往对材料的力学性能产生很大的影响。

物理性能包括电、磁、光、热等行为。物理性能由材料的结构和制造工艺两方面决定。对于许多半导体金属和陶瓷材料来讲,即使成分稍有改变,也会引起导电性的很大变化。过高的加热温度有可能显著地降低耐火砖的绝热特性。少量的杂质会改变玻璃或聚合物的颜色。

(3) 制备 材料的合成与制备就是将原子、分子聚集起来并最终转变为有用产品的一系列连续过程。合成与制备是提高材料质量、降低生产成本和提高经济效益的关键,也是开发新材料、新器件的中心环节。

在合成与制备中工艺技术固然重要,基础理论也不应忽视。对材料合成与制备的热力学和动力学过程的研究可以揭示工艺过程的本质,为改进制备方法和建立新的制备技术提供科学基础。以晶体材料为例,在晶体生产中如果不了解原料合成与生产各阶段发生的物理化学过程、热量与质量的传输、固液界面的变化和缺陷的生成以及环境参数对这些过程的影响,就不可能建立并掌握生长参数优化的制备方法,生长出具有所需组成、完整性、均匀性和物理性的晶体材料。

(4) 应用 材料的最终目标是应用,而材料实际应用所需具备的性能或功能则取决于材料的组成和结构,后者则归结到材料的合成和制备工艺。可以说,材料化学中,应用、性能、结构和制备总是交织在一起的。一定的制备手段可获得具有特定结构、性能的材料,从而使材料产生某种用途。换个角度看,很多化学理论都是为了解决材料的应用问题而诞生和发展的。

本书的前面章节主要是关于材料的结构、性能和制备。后面五章则对电子材料、光子材料、生物医学材料等几种材料进行较系统的介绍,材料应用方面的问题可以从这些章节中得到体会。

### 参考文献

- [1] 刘光华编著. 现代材料化学. 上海: 上海科学技术出版社, 2000.
- [2] Mitchell B S. An Introduction to Materials Engineering and Science. USA, John Wiley & Sons, 2004.
- [3] William D, Callister J. Materials science and engineering: An introduction. 5th Ed., USA, John Wiley & Sons, 1999.
- [4] Smith W F, Hashemi J. Foundations of materials science and engineering. New York, McGraw-Hill Book Co., 1992.
- [5] Fahlman B D. Materials Chemistry. German, Springer, 2007.
- [6] Hummel R E. Understanding Materials Science-History • Properties • Applications. German, Springer, 2004
- [7] Interrante L V, Hampden-Smith M J. Chemistry of advanced materials. USA, Wiley-VCH, 1998.

### 思考题

1. 什么是材料化学? 其主要特点是什么?
2. 材料与试剂的主要区别是什么?
3. 观察一只灯泡, 列举出制造灯泡所需要的材料。
4. 材料按其组成和结构可以分为哪几类? 如果按功能和用途对材料分类, 请列举 10 种不同功能或用途的材料。
5. 简述材料化学的主要内容。

## 第 2 章 材料的结构

材料的结构按照大小尺度可划分为微观结构、介观结构（也称亚微观结构）和宏观结构。微观结构是指物质的原子、分子层次的结构，一般要借助于电子显微镜、X 射线衍射仪等具有高分辨率的设备进行观察、分析。介观结构一般是指用光学显微镜所能观察到的材料结构，如金属材料品粒的粗细及其金相组织，木材的木纤维、导管、髓线、树脂道等显微组织等。材料内部各种组织的性质各不相同，这些组织的特征、数量、分布以及界面之间的结合情况都对材料的整体性质起着重要的影响作用。材料的宏观结构是指用肉眼或放大镜能够分辨的粗大组织，其尺寸约为毫米级大小，以及更大尺寸的构造情况。材料的孔隙结构（致密或多孔等）、构造形态（散粒结构、纤维状、层状等）即是属于宏观结构。材料的宏观结构往往也影响到材料的用途，例如结构疏松或具有多孔结构的材料，可作为隔热、隔声、过滤材料，以及作为轻质材料用于建筑物的非承重墙间隔。

材料具有某些性能或功能而为人们所使用，而材料具备怎样的性能，则主要是由材料的结构所决定。材料的很多物理性质，如强度、硬度、弹塑性、导热性等都与材料的微观结构密切相关。在本章中，首先介绍材料微观结构相关的一些基础知识，包括元素性质、原子间的键合、晶体学基本概念等。这些知识在化学的一些基础学科如无机化学、物理化学和结构化学等已有详细讲述，这里仅针对材料化学学科的需要进行简单描述。在此基础上，本章将对各种材料的结构特征进行较详细叙述。

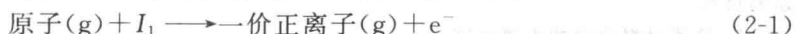
### 2.1 元素和化学键

#### 2.1.1 元素及其性质

宇宙中氢和氦这两种元素占了绝大部分。氢的丰度是排在第 3 位的氧的 750 倍。其余元素只占很少部分。而在地球上，最丰富的是氧和硅，氢元素排在第 10 位。氧元素大量存在于空气、水和矿石中，而硅元素则主要以硅酸盐、二氧化硅等形式存在于地壳中。氦则在地球上非常稀有。

很多元素的单质在常温下是固态，一些单质可直接作为材料使用，如铜、铁、铝、金、银、碳（金刚石、石墨），但很多时候都是由两种或多种不同元素相互结合构成各种各样的化合物材料。元素的原子之间通过化学键结合，不同元素由于其电子结构不同，形成化学键的倾向也不同。元素的这种性质可以用第一电离能、电子亲和势、电负性等物理量进行表征。由于元素电子结构的周期性变化，这些物理量在周期表中也存在相应的变化规律。

(1) 第一电离能 (first ionization energy,  $I_1$ ) 第一电离能有时称为电离势 (ionization potential)，其定义为从气态原子移走一个电子使其成为气态正离子所需的最低能量。所移走的是受原子核束缚最小的电子，通常是最外层电子。该过程如下式所示：



使用由 Bohr 模型和 Schrödinger 方程给出的最外层电子能量可以计算出  $I_1$  值（单位为电子伏特，eV）：

$$I_1 = \frac{13.6Z^2}{n^2} \quad (2-2)$$