

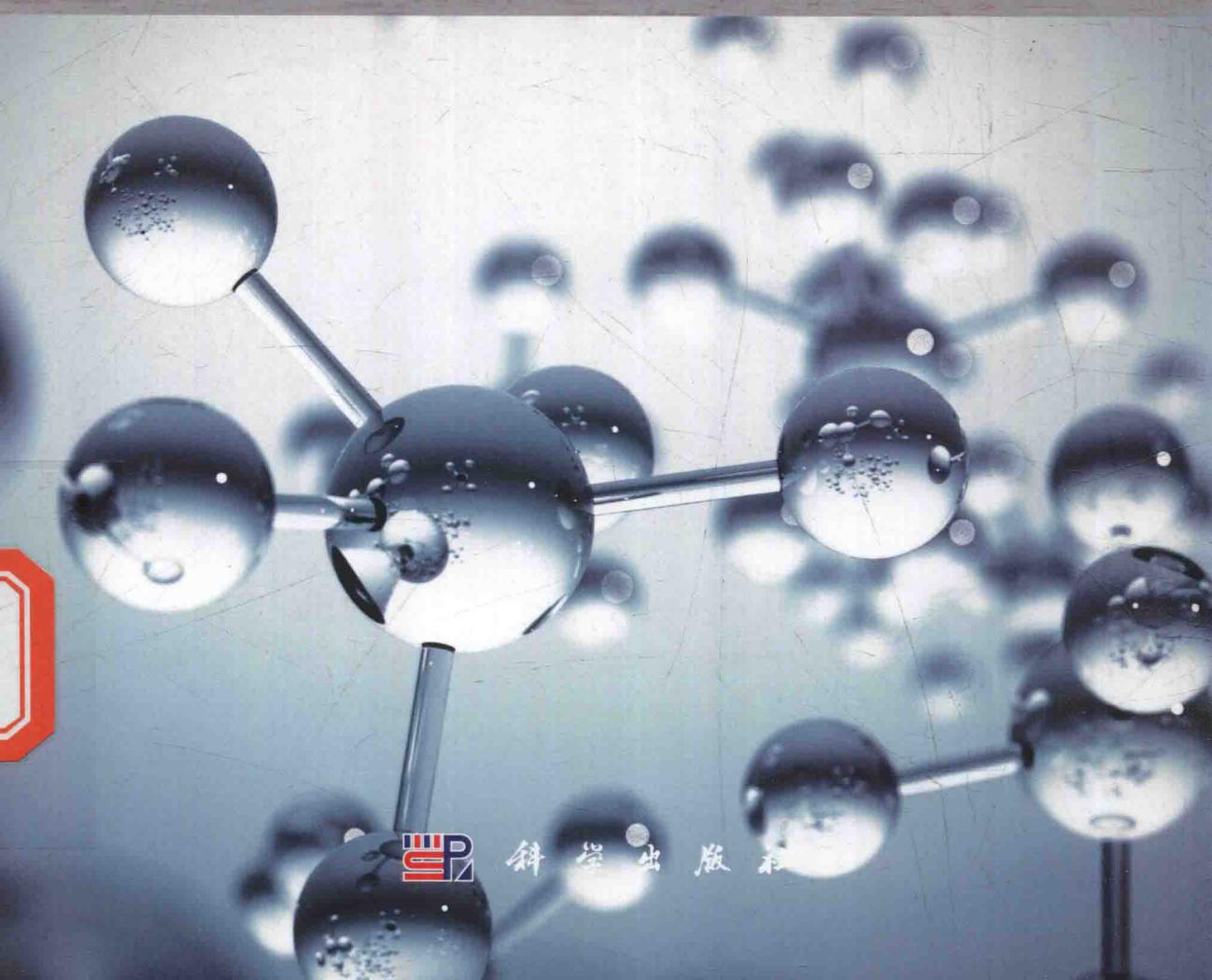
AR教材

普通高等学校材料类新形态规划教材

# 材料概论

主编 刘伟

副主编 秦庆东 何杰军



清华大学出版社

普通高等学校材料类新形态规划教材

# 材 料 概 论

主 编 刘 伟

副主编 秦庆东 何杰军



科 学 出 版 社

北 京

## 内 容 简 介

本书共 10 个章节，分别是材料的结构、金属材料、高分子材料、无机非金属材料、材料的成型与加工技术、材料焊接技术、功能材料、新能源材料、纳米材料、生物材料。本书从材料的结构到材料的特性，再到材料的制备，深入浅出地介绍材料学。本书结合 AR 技术，便于教师讲解及学生理解一些较为复杂的结构模型，同时配套相应的微课视频资源，便于教师实施翻转教学或学生自学。

本书可作为材料科学与工程等工科专业的教材，也可作为与材料学相近专业的研究生或本科生的教材或参考书，同时也为材料工程的相关工作人员与工程技术人员提供参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

材料概论 / 刘伟主编. —北京：科学出版社，2018.6

普通高等学校材料类新形态规划教材

ISBN 978-7-03-057520-3

I. ①材… II. ①刘… III. ①材料科学—高等学校—教材 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2018) 第 107036 号

责任编辑：任俊 / 责任校对：郭瑞芝

责任印制：吴兆东 / 封面设计：迷底书装

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码：100717

<http://www.sciencep.com>

北京建宏印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2018 年 6 月第 一 版 开本：787×1092 1/16

2018 年 6 月第一次印刷 印张：17

字数：412 000

定价：59.80 元

(如有印装质量问题，我社负责调换)

## 前　　言

材料学是一门领域宽广的学科，它的发展可以说是人类社会进步的标尺。材料在身边无处不在，提起“材料”，人们常常局限于“钢铁”“塑料”“水泥”等概念。实际上，对大部分刚进入大学的学生来说也是如此。如果将材料学比喻为一棵树，那么这棵树无疑是一棵枝繁叶茂的“大树”。依靠一本书来完全观透“整棵大树”的全部面貌，对编者和读者来说都不是容易的事。所以本书在编写上适当定位修剪内容，去掉材料学中复杂的公式和专业概念，力图为读者展现材料学这棵“大树”的大致面貌，为读者未来深入学习材料学打下基础。此外，本书编写于发展和建设“新工科”的背景下，材料学作为多学科交叉融合的学科，被更多学科的读者所认识。因此，更好地面向更多的工科领域读者，也是本书编写的一个出发点。

本书作为教材，侧重于基础知识和启发性。在每章之后附有思考与练习，对于读者理解本书内容和参阅一些课外读物具有促进作用。更为重要的是，本书尝试将章节内容结合AR技术和微课视频，便于学生生动、直观地理解材料学中一些较为复杂的模型或定义。

本书的编写思路是：首先介绍材料共同的结构和性能特征；然后依次介绍金属材料、高分子材料和无机非金属材料这三大门类材料；随后介绍这些材料加工成型的过程；最后介绍功能材料、新能源材料、纳米材料和生物材料等功能性的材料。全书共10章，具体编写分工如下：第1章材料的结构及第2章金属材料由何杰军编写；第3章高分子材料及第10章生物材料由刘伟编写；第4章无机非金属材料和第8章新能源材料由蔺锡柱编写；第5章材料的成型与加工技术由秦庆东编写；第6章材料焊接技术由张英哲编写；第7章功能材料由朱阮利编写；第9章纳米材料由马春平编写。刘伟担任主编。

本书的出版得到贵州理工学院省级本科高校一流课程“神奇的材料世界”建设项目的资助，并获得材料与冶金工程学院的大力支持，同时在编写与出版过程中吸纳了很多教师同行及科学出版社任俊编辑提出的宝贵意见，在此一并表示衷心感谢。本书的编写人员来自不同的专业背景，但共同的特点是，都是“年轻”教师。编者在材料学中的知识储备有限，书中难免有不妥之处，还望读者不吝赐教。

编　　者

2018年春

## AR 教材使用说明

1. 扫描右侧二维码，下载“爱一课”APP（根据机型选择 iPhone 版或 Android 版）。
2. 打开“爱一课”APP，根据提示进行注册、登录。
3. 登录后，点击右上角的放大镜图标，输入本书书名进行搜索，搜到本书后下载课本，点击进入，将摄像头对准本书中有“爱一课”标志的页面，即可观察到对应图片的三维模型。三维模型可缩放、旋转。



注册、  
登录页面

输入书名  
进行搜索

# 目 录

<b>第1章 材料的结构</b> .....	1
1.1 材料的组成 .....	1
1.1.1 物质组成 .....	1
1.1.2 原子的结构 .....	2
1.1.3 原子的电子结构 .....	2
1.1.4 元素周期表 .....	3
1.2 原子间的键合 .....	5
1.2.1 金属键 .....	5
1.2.2 离子键 .....	6
1.2.3 共价键 .....	7
1.2.4 范德瓦耳斯力 .....	8
1.2.5 氢键 .....	8
1.3 高分子链结构 .....	8
1.3.1 近程结构 .....	9
1.3.2 远程结构 .....	10
1.4 材料的晶体结构 .....	10
1.4.1 空间点阵和晶胞 .....	10
1.4.2 晶向指数和晶面指数 .....	12
1.4.3 三种典型的晶体结构 .....	14
1.4.4 晶体的原子堆垛方式和 间隙 .....	16
1.4.5 多晶型结构 .....	18
1.4.6 合金相结构 .....	18
1.4.7 离子晶体结构 .....	20
1.4.8 硅酸盐的晶体结构 .....	22
1.4.9 聚合物的晶体结构 .....	23
1.4.10 非晶体结构 .....	24
思考与练习 .....	24
<b>第2章 金属材料</b> .....	26
2.1 金属材料及其分类 .....	26
2.2 金属的晶体结构 .....	26
2.2.1 纯金属的晶体结构 .....	26
2.2.2 合金的晶体结构 .....	28
2.3 金属的晶体缺陷 .....	31
2.4 金属及合金的组织 .....	33
2.4.1 铁素体 .....	33
2.4.2 奥氏体 .....	34
2.4.3 渗碳体 .....	35
2.4.4 珠光体 .....	35
2.4.5 莱氏体 .....	36
2.5 金属的结晶过程 .....	36
2.5.1 液态金属的结构 .....	36
2.5.2 金属的结晶过程 .....	37
2.6 常见的金属材料 .....	39
2.6.1 钢铁 .....	39
2.6.2 铝合金 .....	42
2.6.3 钛合金 .....	42
2.6.4 镁合金 .....	44
思考与练习 .....	46
<b>第3章 高分子材料</b> .....	47
3.1 基本概念 .....	47
3.1.1 概述 .....	47
3.1.2 发展史 .....	47
3.1.3 高分子的定义 .....	49
3.1.4 高分子的特点 .....	49
3.1.5 高分子的命名 .....	50
3.1.6 高分子的分类 .....	51
3.2 结构 .....	52
3.2.1 高分子的结构概述 .....	52
3.2.2 高分子链的近程结构—— 一级结构 .....	53
3.2.3 高分子链的远程结构—— 二级结构 .....	55
3.2.4 高分子的凝聚态结构—— 三级结构 .....	56

3.2.5 高分子的相态结构—— 四级结构	57	第 5 章 材料的成型与加工技术	102
3.3 塑料、橡胶与纤维	58	5.1 金属材料的成形技术	102
3.3.1 塑料的基本概念	58	5.1.1 铸造成形	102
3.3.2 橡胶的基本概念	61	5.1.2 塑性成形	112
3.3.3 纤维的基本概念	64	5.1.3 粉末冶金成形	124
3.4 涂料与胶黏剂	67	5.1.4 其他成形技术	124
3.4.1 涂料的基本概念	67	5.2 高分子材料的成型	125
3.4.2 胶黏剂的基本概念	69	5.2.1 压制定型	125
3.5 高分子复合材料	71	5.2.2 挤出成型	128
3.5.1 基本概念	71	5.2.3 注射成型	130
3.5.2 基体相	72	5.2.4 压延成型	132
3.5.3 增强相	73	5.3 无机材料的制备与成型	133
3.5.4 制备方法	75	5.3.1 水泥制备	133
3.6 功能高分子材料	77	5.3.2 玻璃成型	134
3.6.1 光电高分子材料	77	5.3.3 陶瓷成型	137
3.6.2 电活性高分子	79	5.3.4 耐火材料制备	139
3.6.3 其他功能高分子	80	思考与练习	140
思考与练习	84		
<b>第 4 章 无机非金属材料</b>	<b>85</b>	<b>第 6 章 材料焊接技术</b>	<b>141</b>
4.1 概述	85	6.1 概述	141
4.2 陶瓷	87	6.1.1 焊接技术的发展	141
4.2.1 陶瓷的概念	87	6.1.2 焊接技术的简介	142
4.2.2 陶瓷的发展	89	6.1.3 常见的焊接技术及特点	143
4.3 玻璃	89	6.1.4 焊接技术的发展趋势	152
4.3.1 玻璃的概念和发展	89	6.2 焊接方式	152
4.3.2 玻璃的组成与性质	91	6.2.1 合金结构钢焊接	152
4.4 水泥	93	6.2.2 不锈钢及耐热钢焊接	153
4.4.1 水泥的概念和发展	93	6.2.3 有色金属的焊接	154
4.4.2 水泥的水化和硬化	93	6.2.4 铸铁焊接	155
4.5 耐火材料	96	6.3 焊接冶金原理	156
4.5.1 硅质耐火材料	97	6.3.1 焊接热过程	156
4.5.2 镁质耐火材料	98	6.3.2 焊接化学冶金	158
4.5.3 硅酸铝质耐火材料	98	6.4 焊接质量检测	159
4.5.4 碳质耐火材料	100	思考与练习	160
4.5.5 不定形耐火材料	100		
4.5.6 轻质耐火材料	101		
思考与练习	101		
<b>第 7 章 功能材料</b>	<b>161</b>		
7.1 概述	161		
7.2 光学材料	161		
7.2.1 概述	161		

7.2.2 激光材料	162	8.2 锂离子电池材料	200
7.2.3 电光材料	163	8.2.1 锂离子电池工作原理	200
7.2.4 声光材料	164	8.2.2 锂离子电池正极材料	201
7.2.5 磁光材料	165	8.2.3 锂离子电池负极材料	203
7.2.6 光纤材料	166	8.2.4 锂离子电池电解质	204
<b>7.3 磁性材料</b>	<b>168</b>	8.2.5 锂离子电池隔膜材料	205
7.3.1 磁学基本原理	168	<b>8.3 超级电容器材料</b>	<b>205</b>
7.3.2 磁性材料的分类	169	8.3.1 超级电容器发展历史	205
7.3.3 典型的磁性材料	170	8.3.2 超级电容器分类	206
<b>7.4 电性材料</b>	<b>172</b>	8.3.3 超级电容器电极材料	207
7.4.1 导体材料	173	8.3.4 超级电容器电解质	208
7.4.2 电阻材料	174	<b>8.4 储氢材料</b>	<b>209</b>
7.4.3 超导材料	175	8.4.1 机械式储氢	210
<b>7.5 非晶合金</b>	<b>178</b>	8.4.2 物理吸附储氢	210
7.5.1 非晶合金的特点	179	8.4.3 化学储氢	211
7.5.2 非晶合金的制备	180	<b>思考与练习</b>	<b>214</b>
7.5.3 非晶合金的应用	181		
<b>7.6 精细功能陶瓷材料</b>	<b>182</b>	<b>第9章 纳米材料</b>	<b>215</b>
7.6.1 电功能陶瓷	183	<b>9.1 概念</b>	<b>215</b>
7.6.2 其他功能陶瓷	186	<b>9.2 制备</b>	<b>218</b>
<b>7.7 形状记忆合金</b>	<b>190</b>	9.2.1 物理制备方法	218
7.7.1 形状记忆合金的原理	190	9.2.2 化学制备方法	221
7.7.2 形状记忆合金的特性	191	<b>9.3 表征</b>	<b>226</b>
7.7.3 形状记忆合金材料及 其应用	192	9.3.1 成分分析	227
<b>7.8 储氢合金</b>	<b>193</b>	9.3.2 粒度分析	227
7.8.1 储氢材料	193	9.3.3 结构分析	228
7.8.2 储氢的原理	194	9.3.4 形貌分析	229
7.8.3 储氢材料的应用	194	<b>9.4 特性</b>	<b>230</b>
<b>思考与练习</b>	<b>195</b>	9.4.1 纳米效应	230
<b>第8章 新能源材料</b>	<b>197</b>	9.4.2 力学性能	231
<b>8.1 太阳能材料</b>	<b>197</b>	9.4.3 热学性能	232
8.1.1 硅材料	198	9.4.4 光学性能	232
8.1.2 多元化合物材料	198	9.4.5 电学性能	233
8.1.3 有机聚合物材料	199	9.4.6 动力学特性	234
8.1.4 染料敏化太阳能电池 材料	200	9.4.7 催化性能	234
		9.4.8 生物性能	235
		<b>9.5 应用</b>	<b>235</b>
		9.5.1 纳米电子应用	236

9.5.2 微纳机电系统	237
9.5.3 纳米传感器	237
9.5.4 纳米催化剂	238
思考与练习	238
<b>第 10 章 生物材料</b>	<b>239</b>
10.1 金属生物材料	240
10.1.1 通用金属生物材料	240
10.1.2 形状记忆金属材料	242
10.1.3 金属生物材料的表面改性	244
10.2 高分子生物材料	246
10.2.1 不接触体液的高分子生物材料	246
10.2.2 长期接触体液的高分子生物材料	247
10.2.3 短期接触体液的高分子生物材料	254
10.3 无机生物材料	259
10.3.1 惰性陶瓷生物材料	259
10.3.2 活性陶瓷生物材料	261
思考与练习	262
<b>参考文献</b>	<b>263</b>

# 第1章 材料的结构

材料是由原子或分子等基本粒子构成的。在实际生产和生活中，大多数材料是固态的。由于大多数固体材料是晶态材料，一般地，固态指的是“结晶态”，也就是各种各样晶体所具有的状态。与非晶态材料不同，晶态材料的原子或分子在三维空间中的排列是规则的。最常见的晶体如食盐，有着规则的外形。如果拿一粒粗制食盐观察，可以看到它由许多立方体晶体构成。地质博物馆还可以看到许多颜色、形状各异的规则晶体，十分漂亮。结晶态物质的突出特征是：有一定的体积和几何形状；在不同方向上物理性质可以不同；有固定的熔点。在晶态材料中，分子或原子有规则地周期性排列着，就像学生全体做操时，人与人之间都等距离地排列。每个人在一定位置上运动，就像每个分子或原子在各自固定的位置上做振动。在材料科学与工程中，掌握材料的微观结构是非常重要的，是进行材料研究和材料生产必备的基础知识。

材料研究和实践已经表明，决定材料性能最根本的因素是组成材料各元素的原子结构、原子间的相互作用与相互结合、原子或分子在空间的排列分布和运动规律以及原子集合体的形貌特征等。为此，需要了解材料的微观构造，即其内部结构和组织状态，以便从其内部的矛盾性找出改善和发展材料的途径。

## 1.1 材料的组成

### 1.1.1 物质组成

一切材料都是由无数微粒按一定的方式聚集而成的。宏观上来说，材料是由某一种或某几种元素聚集而成的。如果是单一的元素，则称为单质；如果是由几种元素化合而成的，则称为化合物。从微观上来说，所有的材料都是由最基本的微观粒子，可能是原子，也可能是分子和粒子，按照一定的方式聚集而成，如图 1-1 所示。无论是分子还是离子，都是由原子演化而来的。宏观物质内部的微观粒子要聚集在一起，必定需要一定的结合力。原子结构直接影响了原子间的结合方式。

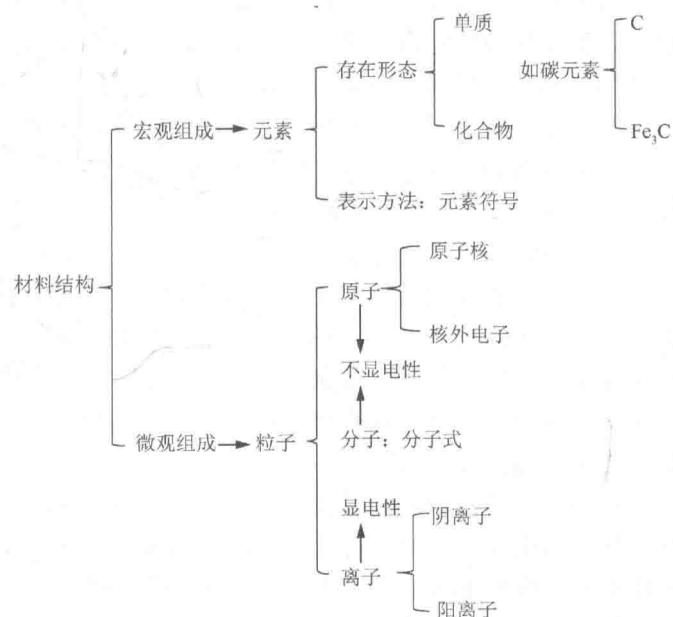


图 1-1 材料结构示意图

### 1.1.2 原子的结构

原子结构，也称为原子模型，是指原子的组成以及部分的搭配和安排。原子非常小，以碳原子为例，其直径约为 $140\text{pm}$ ( $1\text{pm}=10^{-12}\text{m}$ )，但通常以半径记录；在以毫米为单位的情况下，碳原子的直径为 $1.4\times10^{-7}\text{mm}$ ，是由位于原子中心的原子核和一些微小的电子组成，这些电子绕着原子核的中心运动，就像太阳系的行星绕着太阳运行。

从英国化学家和物理学家道尔顿(Dalton)创立原子学说以后，很长时间内，人们都认为原子就像一个小得不能再小的玻璃实心球，里面再也没有什么花样了。1869年，德国科

学家希托夫(Hittorf)发现阴极射线以后，一大批科学家研究了阴极射线，历时20余年。最终，汤姆森(Thomson)发现了电子的存在。通常情况下，原子是不带电的。既然从原子中能跑出是它质量 $1/1700$ 的带负电电子来，就说明原子内部还有结构，也说明原子里还存在带正电的东西，它应和电子所带的负电中和，使原子呈中性。

近代科学实验证明：原子是由质子和中子组成的原子核，以及核外的电子所构成的，如图1-2所示。原子的体积很小，直径为 $10^{-10}\text{m}$ 数量级，其原子核直径更小，为 $10^{-15}\text{m}$ 数量级。然而，原子的质量恰主要集中在原子核内。每个质子和中子的质量大致为 $1.67\times10^{-24}\text{g}$ ，而电子的质量约为 $9.11\times10^{-28}\text{g}$ ，仅为质子的 $1/1836$ 。



图1-2 原子轨道示意图

### 1.1.3 原子的电子结构

人们对物质组成和结构的认识经历了由浅入深、由感性至理性、由片面到整体的发展过程。原子学说早在古希腊时期就提出，到19世纪末，经典物理学已经发展得相当完善，原子学说和元素周期律的提出与流行也促成了量子理论的发展和现代物理学的进步。物理学家和化学家逐步揭示了原子内部组成与结构的秘密以及与元素化学性质紧密相关的原子核外电子排布和变化规律，并构建了一个崭新的以量子理论为基础的微观世界。早期原子模型正是在这个时期相继提出的。

#### (1) Rutherford原子模型

1897年，英国物理学家Thomson通过研究阴极射线的性质发现了电子，确认带负电荷的电子是原子的组成部分。1909年，美国物理学家密立根(Millikan)通过测定油滴的电荷，确定了电子的电荷数，并据此计算出电子的质量大约只占氢原子质量的 $1/2000$ 。那么原子中的质量是如何分布的呢？电荷的正负如何平衡呢？卢瑟福(Rutherford)的 $\alpha$ 粒子散射实验给出了问题的可能答案。

1910年，Rutherford用快速 $\alpha$ 粒子流轰击一张约 $4\times10^{-7}\text{m}$ 厚的金箔，发现尽管绝大部分的粒子都毫无阻碍地通过了金箔，但有极少数 $\alpha$ 粒子发生了较大角度的散射，极个别的 $\alpha$ 粒子甚至被反弹回来。这使他认识到：极个别的 $\alpha$ 粒子被反弹回来，必定是因为它们和金箔原子中某种极小体积的坚硬密实的核心发生了碰撞，这个核心应该带正电，而且集中了原子的大部分质量。这便是著名的原子结构“行星模型”。该模型认为：原子由居于原子

中心体积极小但占原子大部分质量的带正电的原子核和核外绕核高速运动的电子组成，就像行星沿着一定的轨道绕太阳运行。

### (2) Bohr 原子模型

Rutherford 的行星模型虽然解释了  $\alpha$  粒子散射现象，却无法解释原子能够稳定存在的原因。1913 年丹麦的波尔(Bohr)在 Rutherford 的行星模型基础上，借鉴普朗克(Planck)的量子论和爱因斯坦(Einstein)的光子学说的思想，提出了著名的氢原子结构模型假设，成功解释了氢原子结构和氢原子光谱，即 Bohr 理论。其要点如下：电子在一些特定的可能轨道上绕核做圆周运动，离核越远能量越高；可能的轨道由电子的角动量决定，且必须是  $h/2\pi$  的整数倍。

电子是一种基本粒子，目前无法再分解为更小的物质。其直径是质子的  $1/1000$ ，质量为质子的  $1/1836$ 。电子围绕原子核做高速运动。电子通常排列在各个能量层上。当原子互相结合成为分子时，在最外层的电子便会由一原子移至另一原子或成为彼此共享的电子。描述原子中一个电子的空间位置和能量可用四个量子数表示。多电子的原子中，核外电子的排布规律遵循三原则，即能量最低原理、泡利(Pauli)不相容原理和洪德(Hund)规则。

## 1.1.4 元素周期表

化学元素周期表是根据原子序数从小至大排序的化学元素列表。列表大体呈长方形，某些元素周期中留有空格，使特性相近的元素归在同一族中，如卤素、碱金属元素、稀有气体(又称惰性气体或贵族气体)等。这使周期表中形成元素分区且分为七主族、七副族与 0 族、VIII 族。由于周期表能够准确地预测各种元素的特性及其之间的关系，因此它在化学及其他科学范畴中得到广泛使用元素周期表是分析化学行为时十分有用的框架。

现代化学的元素周期律是 1869 年俄国科学家门捷列夫(Mendeleev)首创的，他将当时已知的 63 种元素依相对原子质量并以表的形式排列，把有相似化学性质的元素放在同一列，制成元素周期表的雏形。

原子半径由左到右依次减小，由上到下依次增大。按照元素在周期表中的顺序给元素编号，得到原子序数。原子序数与元素的原子结构有如下关系：

$$\text{质子数} = \text{原子序数} = \text{核外电子数} = \text{核电荷数}$$

利用周期表，Mendeleev 成功地预测当时尚未发现的元素的特性(镓、钪、锗)。1913 年，英国科学家莫色勒利用阴极射线撞击金属产生 X 射线，发现原子序越大，X 射线的频率就越高，因此他认为核的正电荷决定了元素的化学性质，并把元素依照核内正电荷排列。后来又经过多名科学家多年的修订才形成当代的周期表。将元素按照相对原子质量由小到大依次排列，并将化学性质相似的元素放在一个纵列。每一种元素都有一个序号，恰好等于该元素原子的核内质子数，这个序号称为原子序数。在周期表中，元素以元素的原子序排列，最小的排行最前。表中一行称为一个周期，一列称为一个族(8、9、10 列为一个族)。

原子的核外电子排布和性质有明显的规律性，科学家按原子序数递增排列，将电子层数相同的元素放在同一行，将最外层电子数相同的元素放在同一列。

如图 1-3 所示，元素周期表有 7 个周期、16 个族。每行称为一个周期，每列称为一个族。这 7 个周期又可分成短周期(1、2、3)、长周期(4、5、6、7)。16 个族中，又分为 7 个主族(I A、II A、III A、IV A、V A、VI A、VII A)、7 个副族(I B、II B、III B、IV B、V B、VI B、VII B)、一个VIII 族、一个 0 族。

族 周期		I A	II A	III A	IV A	V A	VI A	VII A	II B	III A	IV A	V A	VI A	VII A	0	He	
元素名称	氢	铍	硼	碳	氮	氧	氟	氯	硅	磷	硫	硒	溴	碘	氦		
注*的是人造元素	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	
相对原子质量	1.008	6.941	10.81	12.01	14.01	16.00	19.00	20.18	26.98	28.09	32.06	35.45	39.95	4.003	4.003		
元素符号	H	Be	B	C	N	O	F	Cl	Al	P	S	Br	I	Ar			
元素序数	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	
相对原子质量	1.008	6.941	10.81	12.01	14.01	16.00	19.00	20.18	26.98	28.09	32.06	35.45	39.95	4.003	4.003	2	
外因电子层排布	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
相对原子质量为该放射性元素半衰期最长同位素的质理数)	238.0	282.0	323.0	364.0	404.0	444.0	484.0	524.0	564.0	604.0	644.0	684.0	724.0	764.0	804.0	844.0	
过渡元素		金属		非金属													
III B		IV B		V B		VI B		VII B		VIII		I B		II B		III A	
3		4		5		6		7		8		9		10		11	
4		5		6		7		8		9		10		11		12	
5		6		7		8		9		10		11		12		13	
6		7		8		9		10		11		12		13		14	
7		8		9		10		11		12		13		14		15	
8		9		10		11		12		13		14		15		16	
9		10		11		12		13		14		15		16		17	
10		11		12		13		14		15		16		17		18	
11		12		13		14		15		16		17		18		19	
12		13		14		15		16		17		18		19		20	
13		14		15		16		17		18		19		20		21	
14		15		16		17		18		19		20		21		22	
15		16		17		18		19		20		21		22		23	
16		17		18		19		20		21		22		23		24	
17		18		19		20		21		22		23		24		25	
18		19		20		21		22		23		24		25		26	
19		20		21		22		23		24		25		26		27	
20		21		22		23		24		25		26		27		28	
21		22		23		24		25		26		27		28		29	
22		23		24		25		26		27		28		29		30	
23		24		25		26		27		28		29		30		31	
24		25		26		27		28		29		30		31		32	
25		26		27		28		29		30		31		32		33	
26		27		28		29		30		31		32		33		34	
27		28		29		30		31		32		33		34		35	
28		29		30		31		32		33		34		35		36	
29		30		31		32		33		34		35		36		37	
30		31		32		33		34		35		36		37		38	
31		32		33		34		35		36		37		38		39	
32		33		34		35		36		37		38		39		40	
33		34		35		36		37		38		39		40		41	
34		35		36		37		38		39		40		41		42	
35		36		37		38		39		40		41		42		43	
36		37		38		39		40		41		42		43		44	
37		38		39		40		41		42		43		44		45	
38		39		40		41		42		43		44		45		46	
39		40		41		42		43		44		45		46		47	
40		41		42		43		44		45		46		47		48	
41		42		43		44		45		46		47		48		49	
42		43		44		45		46		47		48		49		50	
43		44		45		46		47		48		49		50		51	
44		45		46		47		48		49		50		51		52	
45		46		47		48		49		50		51		52		53	
46		47		48		49		50		51		52		53		54	
47		48		49		50		51		52		53		54			

元素在周期表中的位置不仅反映了元素的原子结构，也显示了元素性质的递变规律和元素之间的内在联系。同一周期内，从左到右，元素核外电子层数相同，最外层电子数依次递增，原子半径递减(0族元素除外)。原子失电子能力逐渐减弱，获电子能力逐渐增强，金属性逐渐减弱，非金属性逐渐增强。元素的最高正氧化数从左到右递增(没有正价的除外)，最低负氧化数从左到右递增(第1周期除外，第2周期的O、F元素除外)。同一族中，由上而下，最外层电子数相同，核外电子层数逐渐增多，原子半径增大，原子序数递增，元素金属性递增，非金属性递减。元素周期表的意义重大，科学家正是用此来寻找新型元素及化合物的。

## 1.2 原子间的键合

原子间的键合指的是相邻的两个或多个原子间的强烈相互作用。原子以“键”的方式连在一起形成分子。所有的键合都与原子中最外层的电子运动有关。

原子可使电子以不同的方式键合。有时原子会带有相同的电子，每一个原子释放出一个电子来形成“键”，这种“键”称为共价键。另一种键则是由正负离子间的静电引力形成的，称为离子键。在金属中，电子绕着所有的原子运动，这称为金属键。不同的原予以各种不同的键合方式结合在一起组成无以计数的物质。

### 1.2.1 金属键

金属中的自由电子和金属正离子相互作用所构成键称为金属键。金属键的基本特点是电子的共有化。金属键是化学键的一种，主要在金属中存在，由自由电子及排列成晶格状的金属离子之间的静电吸引力组合而成。由于电子的自由运动，金属键没有固定的方向，因而是非极性键。金属键有金属的很多特性，例如，一般金属的熔点、沸点随金属键强度的增大而升高。金属键的强弱通常与金属离子的半径负相关，与金属内部自由电子的密度正相关。

图1-4是以金属键结合的材料内部原子核和电子的存在示意图。可以看出，处于凝聚状态的金属原子，将它们的价电子贡献出来，作为整个原子基体的共有电子。金属键本质上与共价键有类似的地方，只是此时其外层电子的共有化程度远大于共价键。这些共有的电子也称为自由电子，自由电子组成电子云或电子气，在点阵的周期场中按量子力学规律运动。而失去了价电子的金属原子成为正离子，镶嵌在电子云中，并依靠与共有的电子的静电作用而相互结合，这种结合方式就称为金属键。例如，铝原子失去它最外层的3个价电子，而成为由原子核和内层电子组成的带有3个正电荷的铝离子。

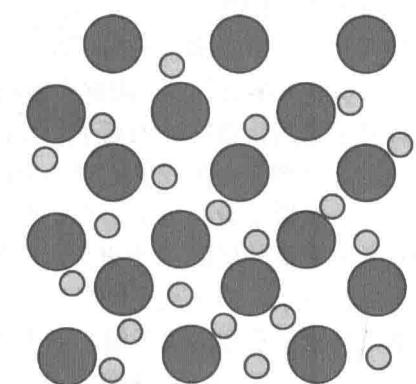


图1-4 金属键示意图(深色代表金属原子，浅色代表自由电子)

由于失去的这些价电子不再固定于某一原子位置，所以以金属键结合的物质具有很好的导电性能。在外加电压作用下，这些价电子就会运动，并在闭合回路中形成电流。

金属键没有方向性，正离子之间改变相对位置并不会破坏电子与正离子间的结合，因而金属具有良好的塑性。同样，金属正离子被另外一种金属正离子取代也不会破坏结合键，这种金属之间溶解的能力也是金属的重要特性。此外，金属导电性、导热性、紧密排列以及金属正的电阻温度系数都直接起因于金属键结合。

在金属晶体中，自由电子做穿梭运动，它不专属于某个金属原子而为整个金属晶体所共有。这些自由电子与全部金属离子相互作用，从而形成某种结合，这种作用称为金属键。由于金属只有少数价电子能用于成键，金属在形成晶体时，倾向于构成极为紧密的结构，使每个原子都有尽可能多的相邻原子，这样，电子能级可以得到尽可能多的重叠，从而形成金属键。

## 1.2.2 离子键

离子键通过两个或多个原子或化学基团失去或获得电子而成为离子后形成。带相反电荷的离子之间存在静电作用，当两个带相反电荷的离子靠近时，表现为相互吸引，而电子和电子、原子核与原子核之间又存在静电排斥作用，当静电吸引与静电排斥作用达到平衡时，便形成离子键。因此，离子键是指阴离子与阳离子间通过静电作用形成的化学键。

离子既可以是单离子，如  $\text{Na}^+$ 、 $\text{Cl}^-$ ；也可以由原子团形成，如  $\text{SO}_4^{2-}$ 、 $\text{NO}_3^-$  等。它往往在金属与非金属间形成。失去电子的往往是金属元素的原子，而获得电子的往往是非金属元素的原子。通常，活泼金属与活泼非金属形成离子键，如钾、钠、钙等金属和氯、溴等非金属化合时，都能形成离子键。且仅当总体的能级下降的时候，反应才会发生。下降越多，形成的键越强。而在现实中，原子间并不形成“纯”离子键，所有的键都或多或少带有共价键的成分。成键原子之间电平均程度越高，离子键成分越低。

离子键的结合力很大，因此离子晶体的硬度高、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，所以离子晶体都是良好的绝缘体。在离子键结合中，由于离子的外层电子束缚得比较牢固，可见光的能量一般不足以使其受激发，因而不吸收可见光，所以典型的离子晶体是无色透明的。 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{MgO}$ 、 $\text{TiO}_2$ 、 $\text{NaCl}$  等化合物都是离子键。大多数的盐、由碱金属或碱土金属形成的化合物、活泼金属氧化物都有离子键。含有离子键的化合物称为离子化合物。离子键与物体的熔沸点和硬度有关。

以钠与氯化合生成氯化钠为例，从原子结构看，钠原子最外电子层上有 1 个电子，容易失去；氯原子最外电子层有 7 个电子，容易得到 1 个电子。当钠原子与氯原子相遇时，钠原子失去最外层的 1 个电子，成为钠离子，带正电，氯原子得到钠失去的电子，成为带负电的氯离子，阴阳离子的异性电荷互相吸引，与原子核之间、电子之间的排斥作用达到平衡，形成了稳定的离子键，如图 1-5 所示。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，即呈现离子导电性。

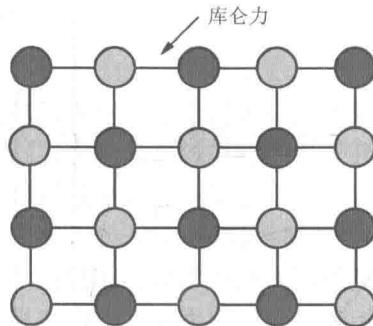


图 1-5 NaCl 离子键的示意图(深色代表带正电的钠离子, 浅色代表带负电的氯离子)

### 1.2.3 共价键

两个或多个原子共同使用它们的外层电子, 在理想情况下达到电子饱和的状态, 由此组成比较稳定的化学结构称为共价键, 或者说共价键是原子间通过共用电子对所形成的相互作用。其本质是原子轨道重叠后, 高概率地出现在两个原子核之间的电子与两个原子核之间的电性作用。

共价键是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。共价键结合的基本特点是核外电子云达到最大的重叠, 形成“共用电子对”, 有确定的方位, 且配位数较小。

在共价键的形成过程中, 每个原子所能提供的未成对电子数是一定的。一个原子的一个未成对电子与其他原子的未成对电子配对后, 就不能再与其他电子配对, 即每个原子能形成的共价键总数是一定的, 这就是共价键的饱和性。共价键的饱和性决定了各种原子形成分子时相互结合的数量关系, 是定比定律的内在原因之一。如图 1-6 所示的  $\text{SiO}_2$  便是固定比值。

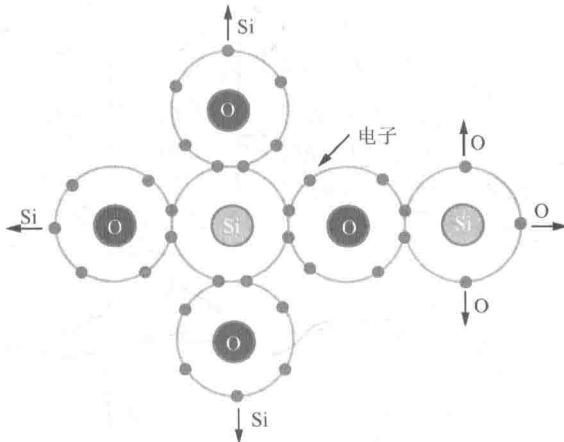


图 1-6  $\text{SiO}_2$  中硅(Si)和氧(O)原子间的共价键示意图

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。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、熔点高、质硬脆等特点。共价形成的材料一般是绝缘体, 其导电性能差。

### 1.2.4 范德瓦耳斯力

对于分子型物质，它们能够从气态转为液态，从液态转为固态，在这些过程中始终保持分子的基本单元不变，说明分子之间存在相互作用力，这种力称为范德瓦耳斯力，也称为分子间作用力。在物质的聚集态中，分子间存在的这种吸引力，作用能一般只有几千焦每摩尔至几十千焦每摩尔，比化学键的键能小1~2个数量级。它由三部分作用力组成：①当极性分子相互接近时，它们的固有偶极将同极相斥而异极相吸，定向排列，产生分子间作用力，称为取向力。偶极矩越大，取向力越大。②当极性分子与非极性分子相互接近时，非极性分子在极性分子固有偶极的作用下发生极化，产生诱导偶极，然后诱导偶极与固有偶极相互吸引而产生分子间作用力，称为诱导力。当然极性分子之间也存在诱导力。③非极性分子之间由于组成分子的正、负微粒不断运动，导致瞬间正、负电荷重心不重合，而出现瞬时偶极，这种瞬时偶极之间的相互作用力，称为色散力。分子质量越大，色散力越大。当然，在极性分子与非极性分子之间或极性分子之间也存在色散力。范德瓦耳斯力是存在于分子间的一种不具有方向性和饱和性、作用范围在几百皮米之间的力。它对物质的沸点、熔点、汽化热、熔化热、溶解度、表面张力、黏度等物理化学性质有决定性的影响。

### 1.2.5 氢键

氢键是一种特殊的分子间作用力。它是由氢原子同时与两个电负性很大而原子半径较小的原子(O、F、N等)相结合而产生的比一般次价键大的键力，具有饱和性和方向性。氢键在高分子材料中特别重要。

## 1.3 高分子链结构

高分子结构包括高分子链结构和聚集态结构两方面。链结构又分近程结构和远程结构。近程结构属于化学结构，又称一级结构。远程结构又称二级结构，是指单个高分子的大小和形态、链的柔顺性及分子在各种环境中所采取的构象。单个高分子的构象有伸展链、折叠链、螺旋链、无规分子链等，如图1-7所示。



图1-7 单个高分子的构象示意图