

材料物理学概论

Materials Physics Introduction

■ 李言荣 恽正中 编著

2



清华大学出版社
<http://www.tup.tsinghua.edu.cn>

材料物理学概论

李言荣 恽正中 编著

清华大学出版社

(京)新登字 158 号

内 容 简 介

本书以功能材料为中心,以材料的结构与性能为主线,从凝聚态材料物理出发,介绍了材料中的表面与界面和材料中的非线性现象,详细分析了有机材料中的电子输运过程,深入系统地讨论了高温超导材料的结构与性能的关系及多元氧化物薄膜的制备技术。

本书内容丰富,涉及面宽,吸收了当代材料科学的若干成果,适合材料科学与工程专业博士生教学使用,也可供微电子学与固体电子学、光电子学与物理电子学、化工、冶金、物理等专业研究生和相关工程技术人员参考使用。

书 名: 材料物理学概论

作 者: 李言荣 恽正中 编著

出版者: 清华大学出版社(北京清华大学学研大厦,邮编 100084)

<http://www.tup.tsinghua.edu.cn>

印刷者: 北京市清华园胶印厂

发行者: 新华书店总店北京发行所

开 本: 787×1092 1/16 **印张:** 20.25 **字数:** 465 千字

版 次: 2001 年 5 月第 1 版 2001 年 5 月第 1 次印刷

书 号: ISBN-7-302-04461-9/TB·33

印 数: 0001~4000

定 价: 32.00 元

前言

新材料的发展日新月异,材料科学与技术的内容也在不断深入和更新,随着材料研究方法和手段的进步,材料中的基本物理模型、结构与性能的关系也正不断凸显出来,越来越接近事物的本质特征。在新世纪来临之际,我们深感有必要对这些重要问题作一较为系统的总结和介绍。

我们以当前重要功能材料中的物理问题为中心,充分考虑到工科学生的特点,结合信息技术和生物技术的发展潮流,着重从物理和化学的角度来阐明和讨论材料的结构与性质(性能),特别是电学性质,避免不必要的数学推导,并注意到材料性能与工艺间的关系,尽量使本书具有“博”、“专”、“快”、“新”的特色。

全书由绪论、第1章凝聚态材料概论、第2章材料的表面界面结构与性能、第3章高温超导材料的结构与性能、第4章有机材料中的电子过程和第5章材料中的非线性现象等六部分组成。

绪论中讨论了材料的发展及在国民经济中的地位、材料分类、材料结构与性能的关系和当前材料的发展前沿等内容。第1章讨论了晶体、非晶体、准晶体和液晶等凝聚态材料的基本特征,重点介绍了纳米材料、超晶格、多孔硅、复合材料和梯度功能材料等先进材料的特性与发展动态。第2章讨论了材料的表面界面处组成、原子结构和电子结构的特殊性,表面界面对材料性质的影响,表面改性和现代表面界面分析技术。第3章、第4章分别是超导材料与功能有机高分子材料等两类先进材料的电学特性专论。第5章简要介绍了当前材料科学中正在迅速发展的混沌理论、耗散结构理论、分形、相变临界现象和逾渗理论等非线性现象,以便让学生能更快地跟踪这方面的动向。

材料科学的领域非常宽广,它涉及物理、化学、冶金、电子信息、航空航天、生物医学等多种学科的综合研究;就材料本身来说,品种繁多,涉及面广,知识

密集。采用本书的方式来讨论材料物理学,是一种新的尝试。书中主要内容选自我们为博士生已讲授过六次的“材料的结构与性能”和“固体中的电输运”两门专业基础课的讲义。

本书适合作为电子材料与元器件、半导体与微电子学、光电子与物理电子学和材料、冶金、化工、物理等专业研究生教材和相关工程技术人员参考使用。

我们深深感谢曲喜新先生阅读了部分内容后所提出的建设性意见,同时也感谢和我们长期合作的同事和博士生们的无私帮助。限于篇幅我们未能将所有参考资料作者一一列出,对他们有价值的文章也一并致谢。

鉴于作者水平,疏漏和错误在所难免,恳请读者批评指正。

李言荣 恽正中

于电子科技大学

1999.10

目 录

目 录

目 录

绪论	1
----	---

第 1 章 凝聚态材料	10
-------------	----

§ 1.1 晶体、非晶体、准晶体与液晶	10
---------------------	----

1.1.1 晶体状态	10
------------	----

1.1.2 非晶态	15
-----------	----

1.1.3 准晶态	20
-----------	----

1.1.4 液晶	26
----------	----

§ 1.2 纳米材料	32
------------	----

1.2.1 纳米材料科学和超微颗粒	32
-------------------	----

1.2.2 纳米材料的结构特征	34
-----------------	----

1.2.3 纳米材料中的特殊效应	39
------------------	----

1.2.4 纳米材料的一般性质	44
-----------------	----

§ 1.3 超晶格材料与低维材料	50
------------------	----

1.3.1 超晶格材料及其电子状态	50
-------------------	----

1.3.2 低维材料	60
------------	----

1.3.3 多孔硅	62
-----------	----

1.3.4 纳米晶硅	67
------------	----

§ 1.4 复合材料与梯度功能材料	68
-------------------	----

1.4.1 复合材料概述	68
--------------	----

1.4.2 复合效应	71
------------	----

1.4.3 复合材料的结构参数	73
-----------------	----

1.4.4 复合材料的界面	75
---------------	----

1.4.5 纳米复合材料	77
--------------	----

1.4.6 梯度功能材料	80
--------------	----

参考文献	87
------	----

第2章 材料的表面与界面	88
§ 2.1 材料的表面	88
2.1.1 表面的定义	88
2.1.2 清洁表面的原子排布	89
2.1.3 实际表面	92
2.1.4 工业表面	96
2.1.5 表面改性	97
§ 2.2 材料的界面	100
2.2.1 界面的定义和种类	100
2.2.2 晶粒间界	100
2.2.3 相界	105
2.2.4 分界面	106
§ 2.3 多晶材料中的晶界	108
2.3.1 多晶材料中外来相的分布	108
2.3.2 多晶材料中晶界的性质	109
2.3.3 金属与合金中的晶界	111
2.3.4 陶瓷的晶界	112
§ 2.4 表面界面研究方法简介	114
2.4.1 研究表面原子排列和形貌的主要方法	115
2.4.2 扫描探针技术	118
2.4.3 研究表面成分和化合态的方法	125
2.4.4 表面分析的一些实例	128
参考文献	132
 第3章 高温超导材料的结构与性能	 133
§ 3.1 引言	133
§ 3.2 高温超导材料研究现状	135
3.2.1 新的高 T_c 材料	135
3.2.2 材料应用基础研究	139
3.2.3 高温超导机理	140
§ 3.3 高温超导材料的结构特征	141
3.3.1 钙钛矿结构	141
3.3.2 高温超导中的钙钛矿结构	142
3.3.3 功能材料中的钙钛矿结构	144
3.3.4 高 T_c 氧化物超导材料的晶体结构	147
3.3.5 高温铜酸盐超导体的晶场配位	150

3.3.6	高温超导材料的电子结构	154
3.3.7	铜酸盐超导体中的缺陷	155
3.3.8	高温超导体结构共性	157
§ 3.4	高温超导材料的基本物性与 BCS 理论	159
3.4.1	临界温度(T_c)	159
3.4.2	临界磁场(H_c)	161
3.4.3	穿透深度	161
3.4.4	相干长度	163
3.4.5	临界电流密度(J_c)	164
3.4.6	BCS 理论	167
§ 3.5	高温超导薄膜材料及应用	170
3.5.1	概述	170
3.5.2	基片的选择与隔离层	171
3.5.3	阻挡层技术	174
3.5.4	高温超导薄膜制备工艺	174
3.5.5	YBCO 薄膜举例	180
3.5.6	HTSC 薄膜的微波性质	184
3.5.7	HTSC 薄膜微波无源器件	187
	参考文献	189

第 4 章 有机材料中的电子过程 190

§ 4.1	有机材料的分类和特征	190
4.1.1	有机材料的分类	190
4.1.2	高分子化合物及其分类	192
4.1.3	高分子的结构特征	193
§ 4.2	分子轨道理论、 σ 电子与 π 电子	196
4.2.1	分子轨道理论	196
4.2.2	分子轨道的分布特点和分类	199
4.2.3	共轭分子中的 π 电子	202
§ 4.3	极化子	203
4.3.1	电子的自陷	203
4.3.2	极化子的类型	204
4.3.3	大极化子	207
4.3.4	小极化子	207
4.3.5	对于极化子的讨论	208
§ 4.4	有机材料的能带与载流子输运机制	209
4.4.1	有机材料的能带特点	209

4.4.2 载流子的隧穿运动	211
4.4.3 载流子跳跃运动	212
§ 4.5 有机材料中的载流子	213
4.5.1 离子性载流子	213
4.5.2 电子性载流子	215
§ 4.6 有机材料的电导	219
4.6.1 电子电导与离子电导	219
4.6.2 直流电导	220
4.6.3 交流电导率	222
4.6.4 有机导电高分子	223
§ 4.7 共轭高聚合物与分子器件简介	225
4.7.1 共轭高聚合物的一般性质	225
4.7.2 共轭高聚合物掺杂	227
4.7.3 共轭高聚合物中的导电机理	230
4.7.4 TCNQ 性能简介	236
4.7.5 分子电子器件简介	237
参考文献	241

第 5 章 材料中的非线性现象

242

§ 5.1 混沌与耗散结构理论简介	242
5.1.1 什么是非线性科学	242
5.1.2 确定性系统中的“无规”运动——混沌	244
5.1.3 远离平衡态的开放系统和自组织结构	248
5.1.4 耗散结构的特点	253
5.1.5 耗散系统中的混沌与奇怪吸引子	254
5.1.6 一些非线性现象	255
5.1.7 非线性现象的普遍性	257
§ 5.2 材料中的分形	257
5.2.1 维数与自相似	257
5.2.2 分形的概念	258
5.2.3 分形维数	259
5.2.4 表面分形	262
5.2.5 分形与材料性能的关系	265
§ 5.3 相变与临界现象	268
5.3.1 相变与突变	268
5.3.2 相变热力学	268
5.3.3 结构相变	272

5.3.4 朗道理论及其应用	277
§ 5.4 相变动力学	283
5.4.1 相变驱动力	283
5.4.2 非均匀相变动力学	284
5.4.3 均匀相变动力学	298
§ 5.5 逾渗和有效媒质理论	301
5.5.1 逾渗理论	301
5.5.2 经典有效媒质理论	308
5.5.3 广义有效媒质理论	309
5.5.4 二元系复合材料电导的各种表示式	311
参考文献	313

绪 论

§ 0.1 材料的发展及其在国民经济中的地位

材料是由一定配比的若干相互作用的元素组成的、具有一定结构层次和确定性质,并能用于制造器件、设备、工具和建筑物等的系统。

人类社会发展的历史证明,材料是社会进步的物质基础与先导。材料的不断发展与进步一直是人类社会前进的重要基础之一;它是人类赖以生存和发展、征服自然的物质基础,同时又是人类社会发展的先导,是人类进步的里程碑。从人类的发展史看,当社会发展向材料提出更新更高的要求时,可以促进新材料的发展;每一种重要的新材料的发现与应用,能使人类支配自然的能力向前跨一大步。

正是因为这种原因,人类的历史曾以使用的主要材料来加以划分,如石器时代、青铜器时代、铁器(钢铁)时代等等。

从材料的发展过程来看,它大致可以分为以下几个阶段。

远古时代,人类最早使用的是竹、木、石、骨之类的原始天然材料,不经或稍许加工即可制成工具和用具,这是材料发展的初始阶段,它的特点是人类单纯选用天然材料。

铜、铁和而后的其他合金的发现及应用,是材料发展的第二阶段。在这个阶段中,金属(主要是铁和钢)确立了工业材料的绝对权威。在人类社会中,这一阶段持续了很长的时间,并发挥了极其重要的作用。这个阶段的特点是人类从自然资源中提取有用材料。

随着科学技术和工业的发展,人类对材料提出了质量轻、功能多、价格低等要求。与此同时,人类已掌握了丰富知识和生产技能,已能人为地制造出一些自然界不存在的材料,来满足社会各种各样的要求,并在材料的研制方面取得更大的自由度和主动性。这是材料发展的第三个阶段,即进入了人工合成时代。塑料、各种高分子材料、精细陶瓷、新型复合材料、超晶格异质结等材料是这一阶段的代表。

目前人类正进入信息社会,材料、能源和信息技术是当前国际公认的高新技术革命的三大支柱。一个国家的材料的品种、数量和质量,已成为衡量该

国科学技术、国民经济水平和国防力量的重要标志。

§ 0.2 材料的分类

由于材料种类繁多,用途广泛,世界各国和不同的科学家,对材料的分类方法不尽相同,可以从不同的角度对材料来进行分类。

工程上通常将材料分为金属材料、无机非金属材料、有机高分子材料及复合材料四大类。按状态分,材料可分为单晶、多晶、非晶、准晶和液晶。从化学的角度,材料则可分为无机材料与有机材料。从应用来看,材料可分为信息材料、能源材料、生物材料、建筑材料、航空航天材料等。

目前常根据材料的用途,将材料分为结构材料和功能材料两大类。

结构材料主要利用其力学性质,这类材料是机械制造、工程建设、交通运输、航空航天等各种工业的物质基础。

功能材料是指除强度外还有其他功能的材料。它们对外界环境具有灵敏的反应能力,即对外界的光、热、电、磁、压力、气氛等各种刺激,可以有选择性地作出反应,从而有许多特定的用途。电子、激光、能源、通讯、生物等许多新技术的发展都必须有相应的功能材料。可以认为,没有许多功能材料的出现,就不可能有现代科学技术的发展。

近年又提出一种智能材料的概念,这种材料在功能材料的基础上另具有三种功能,即环境判断功能、自我修复功能和具有时间轴功能。有科学家认为,支持现有科学技术的是功能材料,而在 21 世纪能够成为主要材料的必是智能材料。

传统材料(traditional material)及先进材料(advanced material)则是另外一种对材料的分类方法。传统材料是指已在大量生产、价格一般较低、在工业应用上已有长期使用经验和数据的材料。先进材料则指具有优异的性能的高科技产品、正在努力商业化或研制之中、并具有一定保密性的材料。以上的划分方法有一定的相对性,先进材料解密后,开始商业化及大量生产、并积累了经验之后,就成为传统材料了;也可能一些传统材料采用特殊高科技工艺加工后,具有了新的、更优良的性能,则就成为先进材料了。

§ 0.3 材料的结构与性能的关系

1. 材料的功能与性能

只有人们注意到某种物质所具有的特性,并试图对这些特性加以有效的利用时,该物质才能被看作材料。所以,材料的另一个定义是可以制造有用物件的物质。从工程、技术的角度来看,所谓物质的性质是指材料的功能及性能,一般也称为材料的特性。对于材料的性质(property)、功能(function)和表现(performance)存在以下的区别:

“表现”是指材料对外部刺激(外力、热、电、磁、化学刺激、药品)的反应或抵抗(被动地响应),表现又称“行为”,performance 有时也译作“性能”。“功能”是指物质(材料)对应于某种输入信号时,所发生质或量的变化,或其中有某些变化会产生一定的输出,即能感生出另一种效应。显然,强度、电阻(电导)、耐热性、透明度、耐化学药品均属行为或表现,即性能;而防震、热电效应、压电效应、分离和吸附则属于功能。

实际上我们在讨论性能时,往往将功能也考虑了进去,很多资料上说的性质(property)大都包含 performance 和 function 的意思,故应该称为性质。在本书中所谓的性能,包含了性能与功能的意思,即一般所谓的性质(property)。因为材料的性能是随外界条件而变的,所以并不是什么“本质”的东西;在不同的外界条件下,相同的材料也会有不同的性能。所谓“相同的材料”,是指材料的成分和晶体结构上相同。

2. 材料结构、成分与性能的关系

人们对材料的认识过程是复杂的。最初,每种材料的发展、制造和使用,都是依靠工艺匠人的经验(如听声音、看火候或靠祖传秘方)。后来,随着经验的积累,出现了材料工艺学,这比工匠的经验前进了一大步,但它只记录了一些制造过程的规律,一般还是知其然不知其所以然。自 1863 年光学显微镜第一次被用来研究金属,从而导致了“金相学”的出现,才使人们对材料的观察进入了微观领域。1912 年发现了 X 射线照射晶体时产生的衍射现象,从而开始了对材料的微观结构的测定。1932 年电子显微镜的发明,以及后来出现的各种谱仪,把人们对微观世界的认识带入了更为深入的层次。

从尺度上看,材料可以有宏观、微观和介观三个基本层次。介观(mesoscopic system)这一概念,起源于 20 世纪 70 年代末和 80 年代初,是在研究凝聚态物理中的无序体系中电子输运时逐步形成的,研究的尺寸介于宏观与微观之间,是量子力学、统计物理和宏观物理的交叉的研究范围。大量研究表明,从宏观到微观间各层次上的各种结构与缺陷,对材料性质有重要影响。

材料科学的重要研究领域是结构、成分与性能的关系。以往在应用领域,特别是在工业生产中,人们总是不太注意材料结构,而将重点放在了解材料成分对性能的影响上。实际上这是不全面的看法,往往会使材料研究工作走弯路。

通过不断的实践,人们现在已经认识到,即使是同一种材料,当它的结构存在差异时,性质可以有明显的差别,这就是所谓材料的结构敏感性。材料科学在其发展过程中揭示了一条基本物理原理:材料的性质取决于它的结构。这已经成为材料研究中一个依据。

所谓材料的结构(structure),是指材料的组元及其排列和运动方式。它包括形貌、化学成分、相组成、晶体结构和缺陷等内涵。在领域内,人们在

材料科学与工程发展的历程中应用了不同的名词来表示材料的结构,例如成分(或组分)、组织、相结构等。通常采用的名词有:“宏观组织”(macro-structure)、“显微组织”(microstructure)、“晶体结构”、“原子结构”等。原子结构与电子结构是研究材料特性的两个最基本的物质层次。

多晶材料的微观形貌、晶体学结构和取向、晶界、相界、界面相、亚晶界、位错、层错、孪晶、固溶和析出、偏析和夹杂、有序化等均称显微结构。

研究材料的组成、显微结构及其与性能之间的关系和规律是材料科学的实验基础,又是进行材料设计的重要依据。

由于材料的获得、质量的改进和使材料成为人们可用的构件,都离不开工艺和制造技术以及工程知识,所以人们往往把“材料科学”与“工程”相提并论,而称为“材料科学与工程”。所以,材料科学与工程,是关于材料组成、结构、制备工艺与性能及其使用过程间相互关系的知识开发及应用的科学。

§ 0.4 对新一代材料的要求

材料是人类赖以生存和发展的物质基础,人类的进步对材料不断提出新的要求。20 世纪 50 年代之前,金属材料占绝对优势。据预测,到 21 世纪初,金属、陶瓷、聚合物和复合材料将平分秋色。

新材料或先进材料,主要是指最近发展起来或正在发展之中的、具有特殊功能和效用的材料。高技术新材料,是指当今高技术时代发展起来的、具有传统材料无法比拟的完全新的特点功能,或具有明显优异性能的新材料。在工业上使用的化合物都是采用了化学周期表中的 90 多种元素所形成的;目前世界上已发现了 800 多万种化合物,并以每年数万种的速度递增,其中有相当一部分具有发展成为新材料的潜力。当前世界上已有的传统材料共有几十万种,而新材料则以每年 5% 的速度增长(其中 85% 属功能材料)。

当今人类正面临一场新技术革命,需要愈来愈多的品种各异和性能独特的新材料。现代社会对开发研制新一代材料提出了如下的要求:

① 结构与功能相结合 要求材料不仅能作为结构材料使用,而且具有特殊的功能或多种功能,正在开发研制的梯度功能材料和仿生材料即是属于此。

② 智能化 要求材料本身具有感知、自我调节和反馈的能力,即具有敏感和驱动的双重功能。

③ 减少污染 由于人类生产活动的增加和工业污染物的大量排放,已引起生态环境日益恶化。在现代文明社会,人类既期望获得大量高性能或多功能的各种材料,又迫切要求有一个良好的生态环境,以提高人类的生存质量,并使社会持续发展。实际上这两种要求有时很难协调。以往材料工程学的出发点是,力求最大限度地发挥材料的潜在性能和功能,对环境的影响较少考虑(如造纸、制革厂的水污染,聚乙烯覆盖膜对水和耕地的污染

等)。现在,为了人类的健康和生存,要求材料的制作和废弃过程中对环境产生的污染尽可能少。

当前国际上在开发、研究先进材料时,除了考虑材料的性能外,同时也注意到环境保护。近年来提出了环境协调材料(ecomaterials)的概念。环境协调材料应是一个指导性的原则,是指导人类今后在开发、发展和应用那些具有良好性能和功能的材料的同时,又要能与环境相协调,也就是说,在研究材料时必须要有环境保护意识。

④ 可再生性 可再生性是指一方面可保护和充分利用自然资源,另一方面又不为地球积存太多的废物,而且能再次利用。如正在研制开发中的自降解塑料,这种材料一方面可减少白色污染,还可再生利用,与环境保护有一定关系。

⑤ 节省能源 制造材料时耗能尽可能少,同时又可利用新开发的能源。

⑥ 长寿命 要求材料能长期保持其基本特性,稳定可靠,用来制造的设备 and 元器件能少维修或不维修。

以上是对新一代材料开发、研制时的总体要求。这是从最佳状态来考虑的,实际上很难能够同时满足。一般总是从尽可能多地满足这些要求出发,采用折衷方案来实施。

§ 0.5 当前新材料发展的几个重点方向

当前材料科学正在迅猛发展,下面我们简要介绍近期内有重大进展的几个主要方向。

1. 纳米材料

纳米材料是指粉体或材料中晶粒为纳米级($10\sim 100\text{nm}$)的材料。由于晶粒尺寸很小,使得界面、表面原子数目的比例增加(可达50%)。表面界面原子具有高度的活性,可使这些材料在烧结、扩散、硬度、强度等物化性能上表现出新的性质。纳米材料的尺寸已达到电子的德布罗意波长,这时材料中电子的运动必须考虑到它的波动性和尺寸效应,因此必然出现新的电、磁、光等性质。

2. 先进多相复合材料

为满足新技术对材料性能的综合要求,不得不放弃从单一材料处理改性的途径,而是采用取长补短用两种或两种以上的单体材料进行有效的复合。这种先进复合材料可以获得有比单体材料更优良的性质或原先材料不具备的性质。因而多相复合材料成为当前材料研究的重要对象,其内涵也非常广泛。目前的先进多相复合材料的研究开发热点有以下几个方面:

- ① 纤维(或晶须)增强或补强复合材料;
- ② 第二相颗粒弥散复合材料;

- ③ 无机和有机功能复合材料;
- ④ 梯度功能复合材料;
- ⑤ 纳米复合材料等。

3. 高温超导材料

液氮温区以上的高温超导材料的出现,大大推动了多元复合氧化物材料的研究和超导技术的发展。因为这类铜酸盐体系具有钙钛矿结构特征和复杂的扩散缺陷问题,如非计量化、交生现象、超结构、 $\text{Cu}_{3d}-\text{O}_{2p}$ 轨道杂化、 Cu_{3d} 的 J-T 效应等材料物理和化学问题。这些微结构变化与电磁性能存在一些对应的关系。而高温超导材料的薄膜化技术,是超导在弱电领域应用的关键,特别是在微波无源器件中的应用,大大提高了器件的灵敏度和降低了插损,已在高灵敏度接收、卫星通信等方面得到了广泛应用。

4. 智能材料

智能材料是具有感知和驱动双重功能的材料。它能对外界环境进行观测(感觉)并作出反应(驱动),从另一个角度来看,这是一种仿生物(生命)系统的材料。

智能材料的一系列功能,它们的英文名字都是以 S 开头:选择性(selectivity)、自调节(self-tuning)、灵敏性(sensitivity)、变形性(shapeability)、自恢复(self-recovery)、简化性(simplicity)、自修复(self-repair)、稳定性与多元稳定性(stability and multistability)、候补现象(stand-by phenomena)、免毁能力(survivability)和开关性(switchability)等。因此,称为“S 行为”材料。以上的一些 S 行为有些比较相近,如自恢复、候补现象、自修复等,所以只要具备几个 S 特性就可以认为是智能材料了。

Smart 和 intelligent 两个词都具有智能的意思,但程度有所不同。smart 是灵巧的意思,目前的智能材料大都是 smart 型材料而不是智能(intelligent)材料。PTC 热敏电阻电压敏电阻、灵巧窗等是大家熟知的 smart 元件;电流变体(一种电场会影响材料粘度的物体,它们随外电场的大小,可发生在固态与液态间的可逆变化)是一种新型的 smart 材料。对于智能材料日本人通常不区分 smart 型和 intelligent 型,而通称 intelligent 材料。

5. 生物医学材料

生物医学材料的目标是对人体组织的矫形、修复、再造、充填以维持其原有功能。它要求材料不仅具有相应的性能(强度、硬度),还必须与人体组织有相容性,以及一定的生物活性。

大家比较熟悉的有活性羟基磷灰石和微晶玻璃,这些是牙根种植体,牙槽矫形,颌骨再造等牙科用的材料;高强度的氧化铝和氧化锆以及带有陶瓷涂层的钛系合金,往往选作承受负荷部位的生物矫形修复材料。聚乳酸与羟基磷灰石、磷酸钙的复合材料,以及加入碳纤维或玻璃纤维组成的复合材料也是矫形固定器、组织再造等的有效材料。此外还基本研制成功了用作人造心瓣膜的碳基复合材料。生物医学材料有广阔的前景,需要材料科学

家和医学界密切配合。

以上简要地介绍了几种当前材料科学中的前沿,除生物医学材料外,本课程中将对其他这些材料作进一步讨论。

§ 0.6 计算机技术与材料科学

在计算机技术发展的今天,设计与模拟正在成为各个研究领域的单独分支。同样地,在材料科学中,除了实验和理论外,计算机辅助设计与模拟正在成为研究材料科学的一个重要组成部分。

计算机材料辅助设计始于 20 世纪 50 年代末到 60 年代初,是从研究有机材料开始的。1975 年 Hachiro Ijuin 等利用相图,分析了 III-V 族合金的液相外延生长机理,并利用计算机进行辅助设计,结果与实验吻合得很好。东京大学 A. Makishima 等利用玻璃材料数据库和知识库,开发出一个玻璃材料计算机辅助设计系统。I. Yasui 等利用回归处理方法,对数据库中数据进行统计分析,总结了氧化物材料的组分与性能之间的关系,并建立了一个专家系统,能预报钙钛矿的生成。京都大学的 Hirao 等采用分子动力学的方法,研究氧化物材料原子结构和性能,从分子层次角度建立了一个专家系统。在国内,学者们也紧跟潮流,清华大学吕允文等将人工神经网络用于陶瓷基复合材料、可伐合金的组分、离子注入材料表面改性及焊接材料酸洗工艺等,进行预测和设计。

计算机模拟是一种根据实际体系设计,在计算机上进行的模型实验。通常将模拟结果与实际体系的实验数据进行比较,就可以检验出模型的准确性,也可以检验由模型导出的解析理论所作的近似是否成功。此外,在模型上获得的微观信息,常常比在实际体系上所作的实验更为详细。特别是在大自由度、低对称性、非线性及复杂相互作用的复杂系统中,计算机模拟所得的结果,往往是在通常实验条件下很难获得的信息。此外,计算机模拟对于理论的发展也有重要的意义,它能为现实模型和实验中无法实现的探索模型作详细的预测,并提供方法。如材料在极端压力或高温下经历相变的四维体系等。

材料分析和建立模型的传统方法大致有三类,它们由所考察材料的性质是在什么尺度上的表征而定。凝聚态物理学家和量子化学家处理的微观尺度范围,属最基本的模型,此时材料的原子结构起显著作用。第二类建立是在唯象的层次上,许多最复杂的分析是在中间的尺度上进行,此时应用连续模型比较合适。最后是宏观尺寸,此时大块材料的性能被用作输入量来研究。历史上,这三种类型层次被不同领域的科学家——应用数学家、物理学家、化学家、冶金学家、陶瓷学家、机械工程师、制造工程师等分别采用。

既然材料性质的研究是在不同尺度上进行的,那么,计算机模拟也应根据对象的尺度范围而划分为若干层次。一般说,可分为电子层次(如电子结