

材料科学与工程专业系列教材

材料科学基础

靳正国 郭瑞松 师春生 侯信 郭新权 编

Fundamentals of
Materials Science



天津大学出版社
TIANJIN UNIVERSITY PRESS

材料科学与工程专业系列教材

材料科学基础

Fundamentals of Materials Science

靳正国 郭瑞松 师春生 侯信 郭新权 编



内容提要

本书体现了加强基础、拓宽专业、注重能力与素质培养的教改目标。书中主要包括结晶学基础；相关金属、无机非金属和聚合物三大固体材料的晶态结构、非晶态结构以及结构缺陷；表面与界面；固体中的扩散、凝聚态相平衡和相图以及相变过程的基础理论。全书共设9章，每章后附有习题。

本书为高等理工科院校材料科学与工程专业本科公共基础理论课教材，同时也适用于本专业研究生的教学与科研。本书还可供从事固体材料研究、应用和生产的专业技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学基础/靳正国等编. —天津:天津大学出版社, 2005.8
ISBN 7-5618-2183-2

I . 材... II . 靳... III . 材料科学 IV . TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 092882 号

出版发行 天津大学出版社
出版人 杨欢
地址 天津市卫津路 92 号天津大学内(邮编:300072)
电话 发行部:022-27403647 邮购部:022-27402742
网址 www.tjup.com
印刷 天津市宝坻区第二印刷厂
经销 全国各地新华书店
开本 185mm × 260mm
印张 20.75
字数 521 千
版次 2005 年 8 月第 1 版
印次 2005 年 8 月第 1 次
印数 1 - 3 000
定价 32.00 元

前　　言

材料科学确立于 20 世纪 50 年代末,是以研究固体材料基本属性及规律为主要内容的一门科学。其涉及领域覆盖金属、无机非金属、有机高分子等材料的成分设计、制备加工、结构特征、物理化学性质与材料使用性能及应用之间的相互关系等。进入 21 世纪,现代材料工业和科学技术的发展正推动着各类材料从多样化、单一化走向一体化和复合化,学科内容的交叉融合日趋明显。因而,培养既掌握材料科学与工程基本原理,又通晓各类材料制备与加工、组成与结构、性能与应用等系统基础知识的大材料专业人才,成为新世纪人才培养的主要出发点。

按照材料科学的知识范畴,本书侧重了材料科学与工程学科的基本知识与原理的介绍,力求较全面地阐述各种材料的共性特点,同时还对金属材料、无机非金属材料和有机高分子材料的个性特征给予了较为系统的概述。授课内容主要以固体材料结构为基础,从微观、宏观、物质内部、表面及界面、静态、动态等不同层面角度,阐述了与固体材料性能密切相关的质点间结合方式及相互作用,质点的空间排列特点及规律,各类固体聚集态结构,结构缺陷类型及运动规律,表面与界面相关的理论和现象以及凝聚态材料的相平衡与相图、物质扩散和相变等基础知识。通过本课程的学习,旨在使学生既对各类材料组成与物质结构间的内在联系有系统的了解,同时又掌握各类材料物理化学的基本属性及与过程相关的行为规律,为今后从事材料的设计与制造、新材料的研究与开发以及继续从事专业学习打下扎实的宽专业基础理论知识。

本课程的教学大纲是以强化基础理论、突出共性和拓宽专业为主要目的。课程面向材料科学与工程一级学科教学示范专业及下设相关专业开设。编写过程中重点参考了天津大学材料科学与工程学院各专业设置的《材料学概论》、《金属学》、《金属物理》、《陶瓷材料物理化学》、《无机固体材料结构基础》、《高分子物理》、《高分子化学》等课程的教学内容。本书第 1 章、第 2 章、第 6 章由靳正国编写;第 3 章、第 4 章由郭瑞松、侯信、郭新权合编;第 7 章由师春生、郭新权合编;第 5 章、第 8 章、第 9 章由郭瑞松、师春生、郭新权合编。

材料科学与工程所涉及的内容和应用领域十分广泛,由于编者的专业知识范围和理论水平所限,书中难免存在错误和不当之处,祈望读者指正,以便今后修改。在此,编者对所有支持、帮助和关心本课程建设和教材编写工作的专家、同仁表示衷心的感谢。

编　　者
2005 年 6 月

目 录

第1章 绪论	(1)
1.1 材料科学与工程概述	(1)
1.1.1 材料科学的内涵	(1)
1.1.2 材料科学的确立与作用	(3)
1.1.3 材料科学与材料工程的关系	(5)
1.2 材料的分类及基本特征	(6)
1.2.1 金属材料	(6)
1.2.2 无机非金属材料	(7)
1.2.3 高分子材料	(8)
第2章 几何结晶学基础	(9)
2.1 晶体及其基本性质	(9)
2.1.1 晶体	(9)
2.1.2 等同点及空间格子	(9)
2.1.3 布拉维法则和面角守恒定律	(11)
2.1.4 晶体的基本性质	(11)
2.2 晶体的宏观对称	(12)
2.2.1 对称操作和对称要素	(12)
2.2.2 晶体的投影	(15)
2.2.3 对称要素的组合	(18)
2.2.4 对称型及其推导	(19)
2.2.5 晶体的分类	(21)
2.3 晶体的理想形态	(22)
2.3.1 单形	(22)
2.3.2 聚形	(25)
2.4 晶体定向和结晶符号	(26)
2.4.1 晶体定向	(26)
2.4.2 晶体的整数定律(有理指数定律)	(28)
2.4.3 结晶符号及面间距	(28)
2.5 晶体构造的几何理论	(30)
2.5.1 布拉维格子	(30)
2.5.2 晶胞的概念	(34)
2.5.3 晶体的微观对称要素	(34)
2.5.4 空间群	(38)
2.5.5 点群和空间群的符号	(38)

2.5.6 等效点系的概念	(42)
2.6 晶体的堆积方式	(43)
2.6.1 原子半径和离子半径	(43)
2.6.2 球体紧密堆积原理	(43)
习题	(45)
第3章 材料的晶态结构及有序化	(47)
3.1 结合键	(47)
3.1.1 离子键	(47)
3.1.2 共价键	(48)
3.1.3 金属键	(50)
3.1.4 范德华力	(50)
3.1.5 氢键	(51)
3.2 晶体化学基本原理	(52)
3.2.1 配位数和配位多面体	(52)
3.2.2 离子极化	(53)
3.2.3 电负性	(55)
3.2.4 结晶化学定律	(56)
3.2.5 Pauling 规则	(56)
3.3 晶体场理论和配位场理论	(58)
3.3.1 晶体场理论的基本概念	(58)
3.3.2 d 轨道的晶体场分裂	(59)
3.3.3 晶体场稳定化能	(60)
3.3.4 八面体择势能	(63)
3.3.5 姜-泰勒效应	(63)
3.3.6 过渡元素离子有效半径的晶体场效应	(63)
3.3.7 配位场理论的基本概念	(65)
3.4 典型金属的晶体结构	(66)
3.4.1 晶胞中的原子数	(67)
3.4.2 点阵常数与原子半径	(68)
3.4.3 配位数与致密度	(68)
3.4.4 晶体的原子堆砌和间隙	(69)
3.5 无机非金属材料组成与晶体结构	(72)
3.5.1 典型结构类型	(72)
3.5.2 硅酸盐晶体结构	(81)
3.6 高分子材料晶态结构	(87)
3.6.1 高分子链在晶体中的构象	(87)
3.6.2 高分子材料晶态结构模型	(89)
3.6.3 高分子材料结晶形态	(91)
3.6.4 结晶度及其测定方法	(94)
3.7 高分子的液晶态	(95)

3.7.1 基本概念	(95)
3.7.2 高分子液晶分子结构特征与分类	(95)
3.7.3 液晶的物理结构	(96)
习题	(97)
第4章 高聚物及非晶态结构	(99)
4.1 高分子的结构	(99)
4.1.1 高分子链的结构	(100)
4.1.2 高分子的聚集态结构	(109)
4.2 高聚物的热运动和力学状态	(115)
4.2.1 高分子热运动的主要特点	(115)
4.2.2 高聚物的力学状态和热转变	(116)
4.3 无机熔体与玻璃	(121)
4.3.1 一般概念	(121)
4.3.2 无机熔体的结构	(121)
4.3.3 熔体的性质	(123)
4.3.4 玻璃的通性	(125)
4.3.5 玻璃的形成	(127)
4.3.6 玻璃的结构	(131)
4.3.7 玻璃结构参数	(132)
4.3.8 硼酸盐玻璃及硼反常现象	(133)
4.4 非晶态合金材料	(134)
4.4.1 非晶态的形成	(135)
4.4.2 非晶态合金的结构模型	(136)
4.4.3 非晶合金的特性	(137)
习题	(138)
第5章 结构缺陷及固溶体	(139)
5.1 缺陷类型与特征	(139)
5.2 点缺陷	(140)
5.2.1 分类	(140)
5.2.2 缺陷化学反应表示法	(143)
5.2.3 点缺陷的化学平衡	(146)
5.2.4 热缺陷浓度计算公式	(147)
5.2.5 点缺陷的运动和作用	(149)
5.2.6 过饱和点缺陷	(150)
5.3 位错	(150)
5.3.1 位错的基本类型	(150)
5.3.2 位错的运动	(154)
5.3.3 位错的弹性性质	(156)
5.3.4 位错的来源和位错的增殖	(160)
5.4 面缺陷	(162)

5.4.1 外表面	(162)
5.4.2 晶界与亚晶界	(162)
5.5 固溶体	(164)
5.5.1 概述	(164)
5.5.2 固溶体的分类	(165)
5.5.3 置换型固溶体	(166)
5.5.4 置换型固溶体中的“组分缺陷”	(168)
5.5.5 间隙型固溶体	(169)
5.5.6 固溶体的研究方法	(170)
5.6 非化学计量化合物缺陷	(173)
5.7 固溶体生成热力学	(175)
5.7.1 混合熵	(176)
5.7.2 内能	(176)
5.8 有序固溶体和无序固溶体	(179)
习题	(182)
第6章 表面与界面	(184)
6.1 固体表面的基本特征	(184)
6.1.1 固体表面的不均一性	(184)
6.1.2 固体表面力场	(185)
6.1.3 表面能和表面张力	(185)
6.2 固体的表面	(186)
6.2.1 表面的弛豫、重构及双电层	(186)
6.2.2 固体的表面能	(188)
6.2.3 表面行为	(192)
6.3 界面结构	(197)
6.3.1 界面的空间表示	(198)
6.3.2 小角晶界及界面能	(198)
6.3.3 大角晶界及界面能	(200)
6.3.4 共格界面理论	(201)
6.3.5 晶界结构模型	(204)
6.4 界面特性	(209)
6.4.1 晶界偏析	(209)
6.4.2 晶界迁移	(210)
6.4.3 晶界应力	(212)
6.4.4 晶界电荷与静电势	(214)
6.5 晶界能与显微结构	(215)
习题	(220)
第7章 固体材料中的扩散	(222)
7.1 扩散定律	(222)
7.1.1 菲克第一定律(Fick's First Law)	(222)

7.1.2 菲克第二定律 (Fick's Second Law)	(223)
7.1.3 扩散方程的求解	(223)
7.1.4 扩散的驱动力及上坡扩散	(225)
7.2 扩散的微观机制	(226)
7.2.1 间隙扩散	(226)
7.2.2 置换扩散	(227)
7.3 扩散系数	(228)
7.3.1 原子跳跃频率和扩散系数	(228)
7.3.2 扩散激活能	(229)
7.3.3 影响扩散的因素	(231)
7.4 反应扩散	(233)
7.5 离子晶体中的扩散	(233)
习题	(234)
第8章 相平衡与相图	(235)
8.1 相与相平衡	(235)
8.2 单元系相图	(236)
8.3 二元系相图	(237)
8.3.1 二元系相图的建立	(237)
8.3.2 杠杆规则	(237)
8.3.3 二元相图的基本类型	(238)
8.3.4 二元相图的分析方法	(255)
8.4 三元系相图简介	(256)
8.4.1 三元相图概述	(256)
8.4.2 三元系统基本原理	(258)
8.4.3 三元相图的基本类型	(262)
8.5 相图热力学基本原理	(271)
8.5.1 相平衡的化学势	(271)
8.5.2 多相系统中自由能和组成的关系	(274)
8.5.3 自由能—组成曲线相互关系的确定	(278)
8.5.4 从自由能—组成曲线推导相图举例	(279)
习题	(282)
第9章 相变	(285)
9.1 相变的分类	(285)
9.2 液相—固相转变	(286)
9.2.1 相变过程的不平衡态与亚稳区	(286)
9.2.2 相变过程热力学	(287)
9.2.3 晶核形成条件	(288)
9.2.4 液—固相变过程动力学	(291)
9.2.5 晶体生长过程动力学	(292)
9.2.6 总的结晶速率	(294)

9.3 固态相变	(297)
9.3.1 固态相变的特点	(297)
9.3.2 固态相变时的成核	(299)
9.3.3 晶核长大	(301)
9.3.4 固态相变的基本结构特征	(303)
9.4 液相—液相转变与失稳分解	(307)
9.4.1 液相不混溶现象(玻璃分相)	(308)
9.4.2 成核生长和失稳分解过程	(309)
习题	(312)
附录	(314)
附录 1	(314)
附录 2	(314)
附录 3	(315)
参考文献	(320)

第1章 絮 论

当今,人们通常把信息科学、能源科学、材料科学并列为现代科技的三大支柱,其中材料科学作为基础尤为重要。材料是人类进化的标志,也是社会现代化的物质基础与先导。材料特别是新型材料的研究、开发与应用不仅直接反映一个国家的科学技术与工业水平,而且还关系到国家的综合国力与安全,因此世界各国无不把材料放在重要地位来发展。1978年,我国科学大会将材料科学技术列为8个新兴的综合性科学技术领域之一,此后各个五年计划中,始终把材料科学技术作为重点发展的领域之一。

材料是人类文明进步的里程碑,时代的发展需要材料,而材料又推动时代的进步。历史上,人类文明阶段是按石器时代、陶器时代、青铜器时代、铁器时代来划分的,这反映了材料对于人类文明发展的重要作用。史前以来,人类的生存与材料资源就有着密切的关联。例如,石器、青铜器及铁器的使用代表着不同历史时期的生产能力与生活水平;现在的核和信息技术则与两个著名的化学元素铀和硅的研究开发有着密切的联系。即使是现代材料,也仍然能够部分地保留着古代材料的印记和影响,它们共同对人类文明进步史做出了贡献。

人类物质文明的发展史也可以认为是人类利用材料资源和挖掘材料资源的历史。人类最早使用的石器就是一种天然材料。大约在公元前5000年,人类用黏土烧制各种陶器,同时在烧陶过程中发现了金属铜和锡的还原,创造了炼铜技术,从而进入了青铜器时代。现在被认为是材料研究的一个重要发展方向——复合材料,其概念早在很久以前就已经出现。人类在距今6000年前就会使用稻草和泥巴混合筑墙,这是早期具有人工制备意义的复合材料。我国出土的越王剑采用金属包层结构,韧性和耐腐蚀性优异,在地下埋藏几千年,出土时仍然很锐利。人类曾利用火烧煮食物、烧制陶器瓷器、还原铜矿石和铁矿石、制造金属器具,而现在正在进行对核能及太阳能等的开发利用。人类曾使用石片、龟甲、竹板等材料去作知识和信息的记录,而现在对知识和信息的传播及存储方式不胜枚举,计算机与互联网已全球普及。

1.1 材料科学与工程概述

1.1.1 材料科学的内涵

无论是为制造某种产品而选择材料,选择最佳的加工工艺或正确地使用它,还是改善现有材料或者研制新材料,都需要我们了解材料内部结构与性能的关系,都需要材料科学的基础知识作理论指导。材料科学就是从事对材料本质的发现、分析认识、设计及控制等方面研究的一门科学。其目的在于揭示材料的行为,给予材料结构的统一描绘或建立模型,以及解

释结构与性能之间的内在关系。材料科学的内涵可以认为是由五大要素组成,它们之间的关联可以用一个多面体来描述(图 1-1)。其中,使用效能是材料性能在工作状态(受力、气氛、温度)下的表现,材料性能可以视为材料的固有性能,而使用效能则随工作环境不同而异,但它与材料的固有性能密切相关。理论及材料与工艺设计位于多面体的中心,它直接与其他 5 个要素相连,表明它在材料科学中的特殊地位。

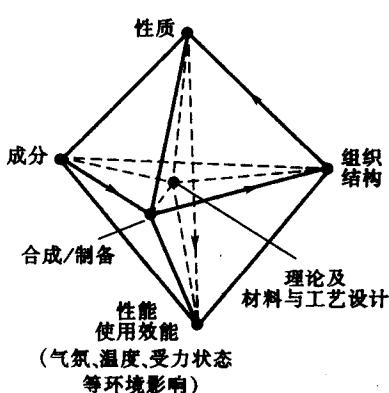


图 1-1 材料科学与工程的内涵

材料科学的核心内容是结构与性能。为了深入理解和有效控制性能和结构,人们常常需要了解各种过程的现象,如屈服过程、断裂过程、导电过程、磁化过程、相变过程等。材料中各种结构的形成都涉及能量的变化,因此外界条件的改变也将会引起结构的改变,从而导致性能的改变。因此可以说,过程是理解性能和结构的重要环节,结构是深入理解性能的核心,外界条件控制着结构的形成和过程的进行。

材料的性能是由材料的内部结构决定的,材料的结构反映了材料的组成基元及其排列和运动的方式。材料的组成基元一般为原子、离子和分子等,材料的排列方式在很大程度上受组元间结合类型的影响,如

金属键、离子键、共价键、分子力等。组元在结构中不是静止的,而是处在不断的运动之中,如电子的运动、原子的热运动等。描述材料的结构可以有不同层次,包括原子结构、原子的排列、相结构、显微结构、结构缺陷等,每个层次的结构特征都以不同的方式决定着材料的性能。

物质结构是理解和控制性能的中心环节。组成材料的原子结构,电子围绕着原子核的运动情况对材料的物理性能有重要影响,尤其是原子的电子结构会影响原子的键合,使材料表现出金属、无机非金属或高分子的固有属性。金属、无机非金属和某些高分子材料在空间均具有规则的原子排列,或者说具有晶体的格子构造。晶体结构会影响到材料的诸多物理性能,如强度、塑性、韧性等。石墨和金刚石都是由碳原子组成,但二者原子排列方式不同,导致强度、硬度及其他物理性能差别明显。当材料处于非晶态时,与晶体材料相比,性能差别也很大,如玻璃态的聚乙烯是透明的,而晶态的聚乙烯是半透明的。又如某些非晶态金属比晶态金属具有更高的强度和耐蚀性能。此外,在晶体材料中存在的某些排列的不完整性,即存在结构缺陷,也对材料性能产生重要影响。

我们在研究晶体结构与性能的关系时,除考虑其内部原子排列的规则性外,还需要考虑其尺寸的效应。从聚集的角度看,三维方向尺寸都很大的材料称为块体材料,在一维、二维或三维方向上尺寸很小的材料叫做低维材料。低维材料可能具有块体材料所不具备的性质,如零维的纳米粒子(尺寸小于 100 nm)具有很强的表面效应、尺寸效应和量子效应等,使其具有独特的物理、化学性能。纳米金属颗粒是电的绝缘体和吸光的黑体。以纳米微粒组成的陶瓷具有很高的韧性和超塑性。纳米金属铝的硬度为普通铝的 8 倍。具有高强度特征的一维材料的有机纤维、光导纤维,作为二维材料的金刚石薄膜、超导薄膜等都具有特殊的物理性能。

1.1.2 材料科学的确立与作用

1. 材料科学的提出

“材料”是早已存在的名词,但“材料科学”的明确提出要追溯到20世纪50年代末。1957年10月4日前苏联发射了第一颗人造卫星,质量为80 kg;11月3日发射了第二颗人造卫星,质量为500 kg。美国于1958年1月31日发射的“探测者1号”人造卫星仅8 kg,质量比前苏联的卫星轻得多。对此美国有关部门联合向总统提出报告,认为在科技竞争中美国之所以落后于前苏联,关键在先进材料的研究方面。1958年3月18日总统通过科学顾问委员会发布“全国材料规划”,决定在12所大学成立材料研究实验室,随后又扩大到17所。从那时起出现了包括多领域的综合性学科——材料科学与工程学科。

2. 材料科学的形成

材料科学的形成主要归功于如下五个方面的基础发展。

首先,各类材料大规模的应用发展是材料科学形成的重要基础之一。18世纪蒸汽机的发明和19世纪电动机的发明,使材料在新品种开发和规模生产等方面发生了飞跃,如1856年和1864年先后发明了转炉和平炉炼钢,使世界钢的产量从1850年的6万吨突增到1900年的2 800万吨,大大促进了机械制造、铁路交通的发展。随后不同类型的特殊钢种也相继出现,如1887年高锰钢、1903年硅钢及1910年镍铬不锈钢等。与此同时,铜、铅、锌也得到大量应用,随后铝、镁、钛和稀有金属相继被发现。20世纪初,人工合成高分子材料问世,如1909年的酚醛树脂(胶木)、1925年的聚苯乙烯、1931年的聚氯乙烯以及1941年的尼龙等,发展十分迅速,如今世界年产量在1亿吨以上,按体积产量已超过了钢。无机非金属材料门类较多,一直占有特殊的地位,其中一些传统材料资源丰富,性能价格比在所有材料中最有竞争能力。20世纪中后期,通过合成原料和特殊制备方法,制造出一系列具有不可替代作用的功能材料和先进结构材料。如电子陶瓷、铁氧体、光学玻璃、透明陶瓷、敏感及光电功能薄膜材料等。先进结构陶瓷由于高硬度、耐高温、耐腐蚀、耐磨损及质量轻等特点,在能源、信息等领域具有广泛的应用,成为近三四十年来研究工作的热点,且用途还在不断扩大。

其次,基础学科发展为材料科学理论体系的形成打下了坚实的基础。量子力学、固体物理、断裂力学、无机化学、有机化学、物理化学等学科的发展,以及现代分析测试技术和设备的更新,使人类对物质结构和物理化学性质有了更深层次的理解。同时,冶金学、金属学、陶瓷学、高分子科学等的发展也使对材料本身的研究大大加强和系统化,从而对材料的组成、制备、结构与性能,以及它们之间的相互关系的研究也越来越深入、系统。

再次,学科理论的交叉融合日益突出。在材料科学学科确立以前,金属材料、无机非金属材料与高分子材料等都已自成体系。但人们在长期研究中发现,它们在制备和使用过程中许多概念、现象和变化都存在着颇多相似之处。例如相变理论中,马氏体相变最初是金属学家所建立,广泛用来作为钢的热处理理论。后来在氧化锆增韧陶瓷中也发现了马氏体相变现象,并作为陶瓷增韧的一种有效方法。又如缺陷理论、平衡热力学、扩散、塑性变形和断裂机理、表面与界面、晶态和非晶态结构、电子的迁移与束缚、原子聚集体的统计力学等的概念,常常可以用来解释不同类型材料的行为。

再有,各类材料的研究设备与生产手段也具共同之处。虽然不同类型的材料各有其专

用设备与生产装置,但许多方面仍然是相同或相近的,如显微镜、电子显微镜、表面测试设备、物理化学及物理性能测试仪器等。在材料生产中,许多加工装置也有通用之处,如挤压机可以用来对金属材料进行成型或冷加工硬化;而对某些高分子材料,采用挤压成丝工艺以后,可使有机纤维的比强度和比刚度大幅度提高;随着粉末成型技术和热致密化技术的发展,粉末冶金和现代陶瓷制造已经很难找出明显的区别。

最后,以应用为目的的材料设计打破了不同材料间的界限。在长期的研究中人们发现,不同类型的材料相互代替和补充,更能充分发挥各种材料的优越性,达到物尽其用的目的。复合材料在多数情况下是不同类型材料的组合,特别是出现超混杂复合材料以来更为如此。如果对不同类型材料没有一个较全面的认识,对复合材料的设计及性质的理解必然受到影响。

3. 材料科学的作用

从历史回顾的角度,我们可以用具体的几个例子来反映材料科学在科技进步中的作用。图 1-2 和图 1-3 分别表示出了材料比强度和刀具材料加工速度两个方面随年代不同的变化,其直接的影响之一是改进了飞机的设计,使交通工具节能。而切削速度增长了 100 倍已使得高效加工和制造工艺变成低成本。图 1-4 说明了集成电路自 1958 年问世以来的发展趋势。可以看出,到 20 世纪 90 年代中期,器件尺寸缩小为原来的百万分之一,相应的,单价也下降到最初的百万分之一,这主要是由于单晶硅片直径增加、线宽变小、合格率提高的直接结果,由此导致了微电子技术、计算机技术、通信技术等发生了质的飞跃,进而引起了经济、社会的巨大变化。

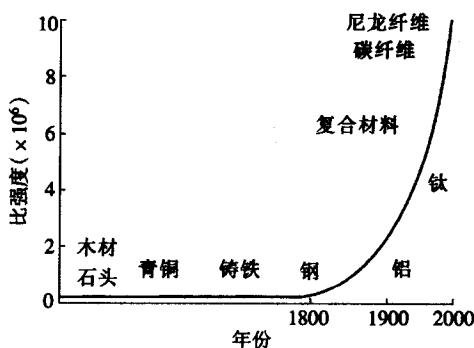


图 1-2 材料比强度方面的发展变化

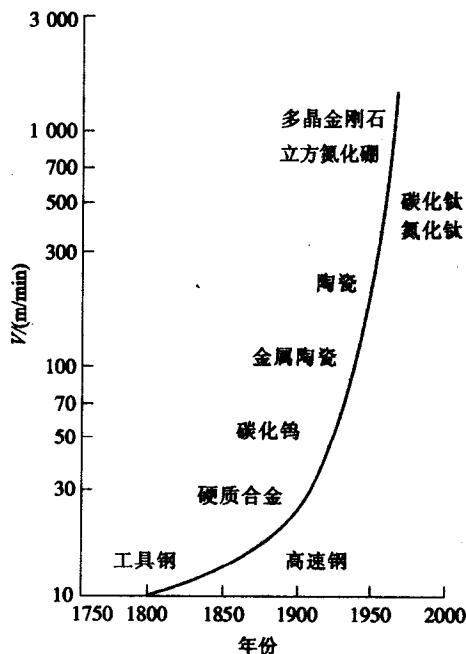


图 1-3 刀具材料切削速度的变化趋势

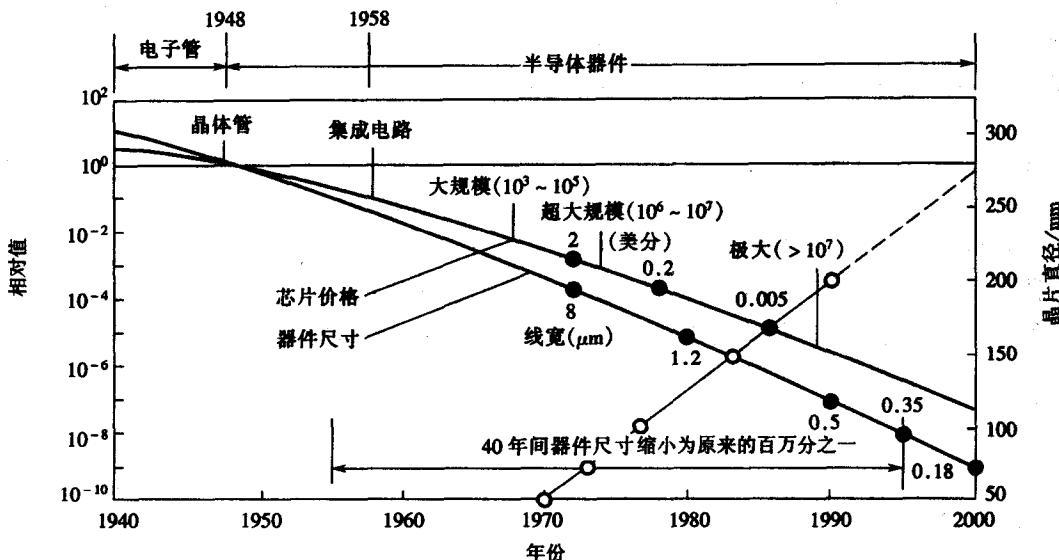


图 1-4 集成电路发展历程

同时,科技进步也促进了材料科学的自身发展。首先是应用需求的牵引作用,这是材料科学发展的最重要的推动力。例如,信息技术的发展,从电子信息处理,到光电子信息处理,以至于光子信息处理,需要一系列材料作基础,这包括光电子材料、非线性光学材料,光波导纤维、薄膜与器件等。又如能源工程技术的发展,要求材料能耐受更高温度、具有更高可靠性以及寿命可预测的性质,以提高效率,改善环境,同时也要求更好的耐磨损性、耐腐蚀性等,这些都为材料科学提出了大量的研究性问题。

材料科学的发展也对多学科交叉起到了推动作用。材料科学本身就具有多学科交叉的特征,包含着丰富的内涵,例如,材料的组分设计与合成,涉及到多种化学学科的分支,包括高温过程的热力学、动力学以至在温和条件下的仿生合成等。当研究材料的微观结构与性能的关系时,要涉及到物理学,特别是凝聚态物理,同时也涉及到非连续介质微观力学等学科。

现代科学技术的发展具有学科间相互渗透、综合交叉的特点,科学和经济之间的相互作用,正推动着当前最活跃的信息科学、生命科学和材料科学的发展,也导致了一系列高新技术和高性能材料的诞生。如信息功能材料是当代能源技术、信息技术、激光技术、计算机技术、空间技术、海洋工程技术、生物工程技术的物质基础,是新技术革命的先导。高温结构材料是人类遨游太空的材料基础。毫米时代人类发明了拖拉机,微米时代人类发明了计算机,以纳米材料为标志的纳米时代,人类将会创造出更大的辉煌。21世纪的人类科学技术,将以先进材料技术、先进能源技术、信息技术和生物技术等四大学科为中心,通过其相互交叉和相互影响,为人类创造出完全不同的物质环境。未来的材料,将是与生物和自然具有很好的适应性、相容性和环境友好的材料。因此,性能不断提高、来源越来越广泛、能满足人类生活和社会日益增长需要的新材料,将会以更快的速度、更高的质量获得发展。

1.1.3 材料科学与材料工程的关系

材料科学的核心问题是结构与性能的关系。一般地,科学是属于研究“为什么”的范畴。

材料科学的基础理论体系,能为材料工程提供必要的设计依据,为更好地选择材料、使用材料、发挥材料的潜力、发展新材料等提供理论基础。可以在节省时间、提高可靠性、提高质量、降低成本和能耗、减少对环境的污染等方面发挥作用。

材料工程是属于工程性质的领域,而工程是属于解决“怎样做”的问题。其目的在于经济地而又能为社会所接受地控制材料的结构、性能和形状。材料工程的研究需要对材料进行5个判据的考虑,即经济判据、质量判据、资源判据、环保判据、能源判据。

材料科学和材料工程是紧密联系、互相促进的。材料工程为材料科学提出了丰富的研究课题,材料工程技术也为材料科学的发展提供了客观的物质基础。材料科学和材料工程间的不同主要在于各自强调的核心问题不同,它们之间并没有明显的分界线,在解决实际问题时,很难将科学因素和工程因素独立考虑。因此,人们常常将二者放在一起,称为“材料科学与工程”。

1.2 材料的分类及基本特征

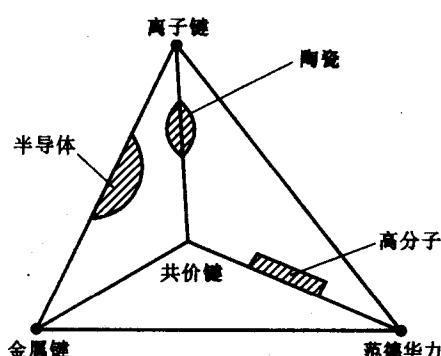


图 1-5 价键四面体

材料可以有多种分类方法,如按化学组成分类,按应用性能分类等。价键四面体(图 1-5)表示了各类材料之间的本质区别和内在联系。按材料组成和结合键的性质,可以把材料分为金属材料、无机非金属材料、高分子材料三大类。金属材料包括各种纯金属及其合金;无机非金属材料主要包括晶体、陶瓷、玻璃、水泥和耐火材料等;塑料、合成橡胶、合成纤维等称为有机高分子材料。此外,人们还发展了一系列将两种以上的材料通过特殊方法结合起来而构成的复合材料。

1.2.1 金属材料

金属材料通常分为黑色金属和有色金属两类。黑色金属包括钢和铸铁。钢按照化学成分分为碳素钢和合金钢;按照品质又分为普通钢、优质钢和高级优质钢;按照冶炼方法可分为平炉钢、转炉钢、电炉钢;按照用途又分为建筑及工程用钢、结构钢、工具钢、特殊钢及专用钢。铸铁通常分为灰铸铁、可锻铸铁、球墨铸铁、蠕墨铸铁和特种铸铁等。钢铁是现代工业中的主要金属材料,在机械产品中占整个用材消耗的一半以上。有色金属是指铁以外的其他金属及其合金,这些金属约有 80 余种。工程上最重要的有色金属是 Al、Cu、Zn、Sn、Pb、Mg、Ni、Ti 及其合金。有色金属的消耗虽然只占金属材料总消耗的很少部分,但是因为它们具有独特的导电、导热性,同时化学性质稳定、耐热、耐腐蚀,因而它们在工程上占有重要的地位。

金属材料的基本性质:

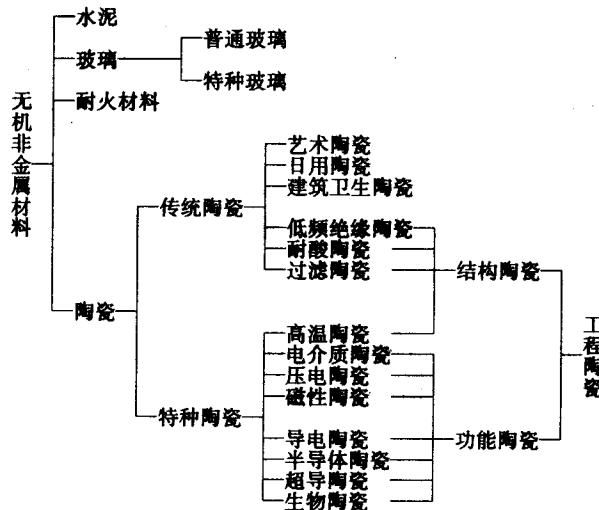
- ①结合键为金属键;
- ②常规方法生产的金属为多晶结构,其中一些熔点较高;
- ③具有金属光泽;
- ④金属延性大,展性、延性也大,可机械加工;

- ⑤强度、韧性较高；
- ⑥金属存在自由电子，导热和导电性好；
- ⑦多数金属在空气中或在高温下易被氧化。

1.2.2 无机非金属材料

无机非金属材料门类较多，按照生产工艺和用途分，主要包括陶瓷、玻璃、水泥和耐火材料等。它们的主要原料一部分是天然的硅酸盐矿物，另外是人工合成的氧化物及其他化合物。它们的生产过程一般需经过原料处理—成型—热加工三个主要环节。陶瓷是最早使用的无机材料，因此无机非金属材料在国外又习惯统称为“Ceramics”（直译为陶瓷）。

按照成分、固体结构和用途，无机非金属材料的分类可见图 1-6。



陶瓷结构一般具有多晶多相的特征（含有玻璃相和气相）。绝大多数陶瓷是一种或几种金属元素与非金属元素组成的化合物。按照性能和用途，陶瓷可分为传统陶瓷和特种陶瓷，后者随着现代技术的发展，又更准确地给予了更多的命名，如“Fine Ceramics”（精细陶瓷）、“High Technical Ceramics”（高技术陶瓷）、“Advanced Ceramics”（先进陶瓷）。特种陶瓷以人工合成化合物（氧化物、氮化物、碳化物、硼化物等）为主要原料制成，使用于技术和工程领域，如信息、能源、机械、化工、动力、生物、航天航空及其他高新技术领域。传统陶瓷多以天然硅酸盐矿物为主要原料，经粉碎、成型和烧结制成，主要用作日用陶瓷、建筑陶瓷和卫生陶瓷，要求烧结后不变形、外观美，但对强度要求不高。

无机非金属材料的基本性质：

- ①结合键主要是离子键、共价键以及它们的混合键；
- ②硬而脆，韧性低，抗压而不抗拉，强度高但对缺陷敏感；
- ③熔点高，具有优良的耐高温和化学稳定性；
- ④自由电子数目少、一般导热性和导电性较小；
- ⑤耐化学腐蚀性好；
- ⑥耐磨损。