



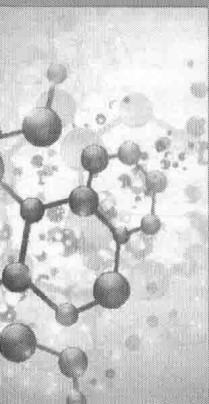
材料科学基础

Fundamentals of Materials Science

徐时清 王焕平 主编



上海交通大学出版社
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY PRESS



材料科学基础

Fundamentals of Materials Science

徐时清 王焕平 主编



上海交通大学出版社
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY PRESS

内容提要

本书共分为五章。第一章对材料科学进行了简单概述,介绍了原子结构以及原子间的键合方式;第二章介绍了晶体结构学的相关知识和概念,以及金属晶体、离子晶体、共价晶体等材料的结构和规律,并讨论了非晶态、高分子材料以及准晶的结构和特征;第三章介绍了不完整晶体结构中存在的各类缺陷及其对材料性能的影响;第四章介绍了相平衡以及各类相图的表示、测定方法以及应用;第五章介绍了纯晶体、二元合金、玻璃和陶瓷等材料的相关制备方法,从凝固、气相沉积、烧结三方面详细介绍了材料制备的相关过程及其机理。

本书可用作高等学校材料院系各专业本科生及研究生的材料科学课程教材,也可作为其他院系材料类专业学生教材及广大材料工作者的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学基础/徐时清,王焕平主编. —上海:
上海交通大学出版社,2015
ISBN 978-7-313-14248-1

I. ①材… II. ①徐… ②王… III. ①材料科学
IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 309131 号

材料科学基础

主 编:徐时清 王焕平

出版发行:上海交通大学出版社

邮政编码:200030

出 版 人:韩建民

印 刷:杭州印校印务有限公司

开 本:787mm×1092mm 1/16

字 数:360千字

版 次:2015年12月第1版

书 号:ISBN 978-7-313-14248-1/D

定 价:35.00元

地 址:上海市番禺路 951 号

电 话:021-64071208

经 销:全国新华书店

印 张:16.5

印 次:2015年12月第1次印刷

版权所有 侵权必究

告读者:如发现本书有印装质量问题请与印刷厂质量科联系

联系电话:0571-88294389

前 言

材料是人类社会文明与科学技术发展的基石，历史上每一次重大科学技术的飞跃都离不开材料的革新。在现代社会，材料科学、能源科学与信息科学一并被列为现代科学技术的三大支柱，材料科学的发展水平已成为一个国家综合国力的主要标志之一。

伴随着现代科学技术的日新月异，各个领域对材料的性能提出了更高的要求，原有材料性能不断得到提高与改善，新效能材料陆续被研发以满足各种使用需求。在对新材料和新技术需求的推动下，人们必须在更深层次上认识材料，从理论上阐明其本质，掌握其共性规律，以指导实际研究开发，因此“材料科学与工程”这一新的学科应运而生。从20世纪60年代以来，国内外的大学相继成立了这方面的学院或专业，开设了材料科学与工程方面的课程。

“材料科学与工程”的任务是研究材料的成分、组织结构、制备工艺与性能应用四者之间关系的科学。《材料科学基础》作为材料科学专业的基础理论课程，其主要任务就是研究材料的结构、性能及两者之间的关系。《材料科学基础》综合了多门学科的知识，包括晶体学基础、晶体缺陷理论、固体材料热力学和相图、固体材料的制备工艺、金属学、陶瓷学、高分子物理等内容。目前国内外《材料科学基础》课程的内容并未完全定型，相关书籍内容也不尽相同。有的书籍偏重于金属材料，有的偏重于无机非金属材料，有的则偏重于高分子材料。本书在内容上着重于材料的基本概念与基础理论，尽量让理论知识结合实践来讲述金属材料、无机非金属材料以及有机高分子材料的结构、性能、应用及其制备工艺，使读者能在掌握相应理论知识的基础上，具备应用理论知识解决实际材料问题的能力。

本书的第1章对材料科学进行了简单概述，介绍了原子结构以及原子间的键合方式。第2章介绍了晶体结构学的相关知识和概念，以及金属晶体、离子晶体、共价晶体等材料的结构和规律，并讨论了非晶态、高分子材料以及准晶的结构和特征。第3章介绍了不完整晶体结构中存在的各类缺陷及其对材料性能的影响。第4章介绍了相平衡以及各类相图的表示、测定方法以及应用。第5章介绍了纯晶体、二元合金、玻璃和陶瓷等材料的相关制备方法，从凝固、气相沉积、烧结三方面详细介绍了材料制备的相关过程及其机理。

本书由中国计量学院材料科学与工程学院四位老师共同编写。具体编写分工如下：第1章由徐时清教授编写；第4、5章由王焕平教授编写；第2、3章由雷若姗、唐高副教授编写；全书由徐时清教授校核。

作者学识水平有限，经验不多，书中的不妥和错误之处难免存在，恳请读者给予批评指正。

编者

目 录

第1章 绪 论	1
1.1 材料科学概述	3
1.1.1 材料在人类生活中的重要地位	3
1.1.2 材料的分类与特征	5
1.1.3 材料科学的主要研究内容	7
1.2 原子结构及键合	8
1.2.1 原子的结构	8
1.2.2 元素周期表	12
1.2.3 原子间的键合	13
1.2.4 原子键合与材料性能	18
第2章 固体结构	21
2.1 晶体学基础	23
2.1.1 晶体结构的特征	23
2.1.2 空间点阵、原胞与晶胞	23
2.1.3 晶向指数和晶面指数	28
2.2 金属的晶体结构	32
2.2.1 纯金属的晶体结构	32
2.2.2 合金的相结构	39
2.3 无机非金属的晶体结构	47
2.3.1 离子晶体结构	48
2.3.2 共价晶体结构	53
2.4 非晶态结构	54
2.4.1 非晶态的形成	55
2.4.2 玻璃化转变	56
2.4.3 非晶态结构的描述	57
2.4.4 非晶态结构的模型	59
2.5 高分子结构	61
2.5.1 高分子链的近程结构	62
2.5.2 高分子链的远程结构	66
2.5.3 高分子的聚集态结构	68

2.5.4	高分子的晶体形态	70
2.6	准晶	73
第3章	晶体缺陷	79
3.1	点缺陷	81
3.1.1	点缺陷类型	81
3.1.2	点缺陷的符号表示	82
3.1.3	点缺陷反应的表示	84
3.1.4	点缺陷的形成及其平衡浓度	85
3.1.5	点缺陷对材料性能的影响	87
3.2	线缺陷	88
3.2.1	位错概念的引入	88
3.2.2	位错的几何性质	89
3.2.3	位错的运动	95
3.2.4	位错的弹性性质	101
3.2.5	实际晶体中的位错	113
3.2.6	位错的观察	118
3.3	面缺陷	118
3.3.1	表面	119
3.3.2	晶界与亚晶界	122
3.3.3	相界	128
3.3.4	晶界和相界的平衡形貌	129
第4章	相平衡与相图	137
4.1	相平衡与吉布斯相律	139
4.1.1	相平衡的基本概念	139
4.1.2	吉布斯相律	140
4.2	单元系相图	140
4.2.1	单元系相图的表示和实验测定方法	140
4.2.2	典型单元系相图分析	141
4.3	二元系相图	143
4.3.1	二元相图概述	143
4.3.2	二元匀晶相图	146
4.3.3	二元共晶相图	150
4.3.4	二元包晶相图	155
4.3.5	其他类型的二元相图	158
4.3.6	二元系相图分析方法及相图与性能	161
4.3.7	铁碳相图	163
4.3.8	相图热力学	171

4.4	三元系相图	175
4.4.1	三元相图基础	176
4.4.2	三元匀晶相图	179
4.4.3	三元共晶相图	182
第5章	材料的制备工艺	191
5.1	材料的液—固转变	193
5.1.1	液态结构	193
5.1.2	晶体凝固的热力学条件	194
5.1.3	纯晶体的凝固	194
5.1.4	二元合金的凝固	202
5.1.5	玻璃的凝固	210
5.1.6	高分子材料的凝固	213
5.2	材料的气—固转变	214
5.2.1	蒸发	215
5.2.2	凝聚	216
5.2.3	气相沉积法的材料制备技术	216
5.3	材料的固—固转变	220
5.3.1	材料的烧结	220
5.3.2	陶瓷材料的烧结制备	234
5.3.3	粉末冶金	249

第1章 绪 论

材料是人类社会赖以生存的物质基础，也是现代科学技术发展的先导，它是用于制造物品、器件、构件、机器或其他产品的那些物质。材料是物质，但是并不是所有的物质都称为材料。材料是经济而实用的物质，它是经过某些加工，具有一定组分、结构和性能，并具有一定用途的物质。

本章主要论述了材料从古到今悠久的发展史和应用史，随着人们对材料的要求不断增加和提高，从开始由天然材料到进行加工制作，再发展为研制合成。尤其是在近代科学技术的推动下，材料的品种日益增多，原有材料的性能也得到改善和提高，力求满足各种使用要求，不同效能的新材料不断涌现。在当今社会，新材料的研制与开发成为各国提高国家实力的手段，对推动人类社会的发展和进步占据愈来愈重要的地位。

工程材料按属性可分为三类：金属材料、无机非金属材料 and 有机高分子材料。也可由此三类相互组合而成复合材料。按使用性能分类，则可分为主要利用其力学性能的结构材料和主要利用其功能特性的功能材料。

为了改善材料的质量、提高其性能、扩大品种、研究开发新型材料，人们必须加深对材料的认识，从理论上阐明其本质，掌握其规律，以此指导实践。随着显微镜的出现，打开了对材料微观世界的探索，揭示了决定材料性能的本质所在。通过研究和实践表明：决定材料性能的最根本因素是组成材料的各元素的原子结构，原子间的相互作用力、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。为此本章重点学习原子结构和原子间的键合，前者包括原子核的结构、核外电子的结构、核外电子的排布规则、元素周期表，后者包括五大结合键，金属键、离子键、共价键、范德瓦尔斯键、氢键的特征。以及原子结构与材料性能的关系和原子键合与材料性能的关系。

1.1 材料科学概述

材料是人类赖以生存和发展的物质基础。材料科学是研究材料成分、组织结构、制备工艺与材料性能和应用之间相互关系的一门基础性科学，它将金属、陶瓷、高分子等不同材料的微观特性和宏观规律建立在共同的理论基础上，对认识、生产、使用及发展材料具有重要的指导意义。

1.1.1 材料在人类生活中的重要地位

1. 材料是人类社会发展的里程碑

材料是人类生存和生活不可或缺的部分，是人类文明的物质基础和先导，是直接推动社会发展的动力。材料的发展及其应用是人类社会文明和社会进步的重要里程碑。没有材料科学的发展，就不会有人类社会的进步和经济的繁荣。

自人类诞生以来，人类就开始用树叶遮蔽身体，摘食野果维生，人类最初仅是单纯的利用天然材料，这是人类利用材料的最原始阶段。经过一定时间的发展，在100万年以前，人类以石头为工具，开始了利用天然材料获得材料的时代，称之为旧石器时代。1万年以前，人类通过对石头进行加工，使之成为更精致的器皿和工具，人类社会进入新石器时代。在新石器时代，人类还发明了用粘土成型，再火烧固化而制成陶器。同时，人类开始用毛皮取代树叶遮身；中国在8000年前就开始用蚕丝做衣服；印度人在4500年前开始种植棉花。以上材料在被人类利用的同时，也为人类社会文明奠定了重要的物质基础。

在新石器时代，人类已经知道使用天然存在的金和铜作为材料，但因其尺寸较小，在自然界中存在较少，不能成为大量使用的材料。后来人类在寻找石料的过程中发现了矿石，在烧制陶器的过程中还原出了金属铜和锡，创造了炼铜技术，生产出各种青铜器件。中国在商周时期（即公元前17世纪初~前256年）就进入了青铜器鼎盛时期。5000多年前，人类开始使用铁。由于铁比铜更容易制备获得，在公元前10世纪，铁器工具比青铜工具更为普遍，人类由此进入铁器时代，一直延续到现在。

随着科技的发展，特别是18世纪蒸汽机和19世纪电动机的发明，使材料在新品种开发和规模方面发生了飞跃。如1856年和1864年先后发明了转炉和平炉炼钢，世界钢产量从1850年的6万吨突增到1900年的2800万吨，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，人类开始进入钢铁时代。而进入20世纪以来，随着半导体硅材料与高集成芯片的出现和广泛应用，各种复合材料和智能材料发展日新月异，人类由工业发展时代迈向信息和知识经济时代。如硅材料的发展，带动了一个数十亿美元工业的兴起。从助听器、传输电缆，到全球性的遥测技术，信息传输变得十分便利，加上在文化与私人计算机的出现和广泛使用的推动下，人类日常生活发生了翻天覆地的变化。

正如人类社会进步的脚步不会停止一样，未来新材料的研究和开发也将继续。根

据材料及其在各领域的应用,未来新材料的研发可分为以下几个部分:

①与信息获取、传输、存储、显示及处理有关材料,即信息功能材料。

②与宇航事业的发展,地面运输工具的要求相适应的高温、高比刚度和高比强度的工程结构材料,即先进陶瓷材料。

③与能源领域有关的能源结构材料、功能材料与含能材料。

④以纳米材料为代表的低维材料。

⑤与医学、仿生学及生物工程相关的生物材料。

⑥与信息产业相关的智能材料,也称绿色材料。

因此,从人类社会发展历程看,人类社会从远古时代、旧石器时代、新石器时代,再发展到青铜器时代、铁器时代,以及发展到如今的复合材料和智能材料时代。材料的每一段更新和发展历程,也是人类社会发展和进步的历程,材料是人类社会发展的里程碑。

2. 材料是社会现代化的物质基础和先导

材料既是人类社会进步的里程碑,又是社会现代化的物质基础与先导。材料,尤其是新材料的研究、开发与应用反映着一个国家的科学技术与工业水平。

从电子技术的发展史来看,新材料的研制与开发起了举足轻重的作用。1906年发明了电子管,从而出现了无线电技术、电视机、电子计算机;1948年发明了半导体晶体管,导致了电子设备的小型化、轻量化、省能化以及成本的降低、可靠性的提高与寿命的延长;1958年出现了集成电路,使计算机及各种电子设备发生一次飞跃。此后,集成电路的发展十分迅速,这就是以硅为主的半导体材料相应发展的结果。进入20世纪90年代,集成电路的集成度进一步提高,加工技术达到 $0.3\mu\text{m}$ (研究水平已达 $0.1\mu\text{m}$),每位存储器的价格也随之降低。这些都与硅单晶体的生长和硅片的加工技术密切相关,即对单晶纯度与缺陷的要求不断提高,单晶直径不断增加,晶片的加工精度和表面质量提高,从而芯片成品率大为提高,而价格急剧降低。这就是硅材料研究与加工水平提高的直接结果,也是为什么计算机的功能愈来愈好而其价格却不断下降的重要原因。随着计算机速度与容量的增加,以电子作为传输媒介受到限制,因而考虑光传输更为理想,即利用光子而不是电子作为携带信息的载体,于是发展了光电子材料,用光子器件制成的光计算机具有大容量、高速度的优点,而且有助于向智能化方向发展。现代的计算机信息存储手段也在不断革新与进步(一要容量大、密度高,二要易于快速随机存取,三要能擦除和反复使用),这些要求都要靠材料的不断进步来满足。前几年出现的光盘一张可以存储10万幅图像或50万页以上的文字信息,比一般磁盘高几百倍。计算机又是工业自动化的关键设备,但需要精度很高、性能稳定的传感器,才能实现自动控制。因此,开发各种用途的敏感材料便成为重要环节。

通信一般采用微波、电缆来传输信号。可自从1966年在理论上提出可用光波进行通信后,经过十年研究,1976年出现了国际上第一条试验性光纤通信线路,1988年建成第一条横贯大西洋的海底光缆,其造价只是1956年所建同轴电缆的百分之一。光纤传输信号容量大(如一根 0.01mm 的光纤可传输数以千计的电话,比一般同轴电缆有数量级的提

高),且具有造价低、中继站少、保密性强等特点。因此,光导纤维的研制成功,改变了整个通信体系,为信息的传输做出了重要贡献。除了光导纤维以外,激光技术与电子技术的发展是其重要的促成因素,而这些都与材料密切相关。也正是由于材料和材料科学的发展,使20世纪90年代初期提出来的“信息高速公路”的设想已成为现实。

又如,现代文明的另一标志是航空航天技术的发展。由于战争的需要,20世纪40年代出现了喷气技术,而这种技术的实现是以高温材料及高性能结构材料为依托,特别是高温合金和钛合金的发展,不断提高了歼击机的性能,而且为今天大型客机的安全及有效载荷的提高、持续航行时间的延长及飞机与发动机寿命的延长提供了可能。作为航空航天所用的材料,其比强度、比刚度尤为重要,因为飞机发动机每减重1kg,飞机可减重4kg;航天飞行器每减重1kg,运载火箭可减重500kg,所以对高速飞行器来说,要不惜一切代价来减轻重量。新开发出来的高强度高分子纤维芳纶,其比强度较之高强度钢高出近100倍。有人设想用这种材料制成飞机,飞行速度可达15马赫,从纽约到东京只需2h。比刚度对于飞行器也是十分关键的。高比刚度材料,在相同受力条件下变形量小,从而保证了原设计的气体动力性能。这就是为什么要大力发展纤维增强的树脂基及金属基复合材料的重要原因。另外,热机的工作温度越高,其效率也越高,但是目前所用的金属材料由于熔点及抗氧化能力所限,不能保证更高的使用温度。因此,现代功能陶瓷就成为当前研究的重点。

综上所述,材料特别是新材料与社会现代化和现代文明的关系十分密切,新材料为提高人民生活水平、增加国家安全、提高工业生产率与经济增长提供了物质基础,因此新材料的发展十分重要。据统计,2001年新材料技术产业在世界市场的销售额超过4000亿美元,其中功能材料约占75%~80%。就某些特种功能材料而言,2000年信息功能陶瓷材料及其制品的世界市场销售额已达210亿美元,2010年上升到800亿美元,预计到2015年将超过1000亿美元。我国特种陶瓷产值2010年也达到300亿元人民币,预计在2015年将达到450亿元人民币。而国内LED产业历年的规模增长速度显示了强大的膨胀力:2007年产业规模150亿元,2008年产业规模200亿元,2009年产业规模245亿元,2010年产业规模300亿元,2011已达到355亿元。可见,在全球经济中,新材料无论是要求的规模,还是要求的增长速度,都是相当惊人的。因此,材料是社会现代化的物质基础和先导。

1.1.2 材料的分类与特征

材料品种繁多,数以十万计。为了便于认识和应用,人们按不同角度对材料进行分类。其中按化学成分、生产过程、结构及性能特点分类的方法最为常用,分为三大类,即金属材料、无机非金属材料、有机高分子材料。然而三大材料并非各自独立的,它们又相互交叉、相互融合。由三大材料中任意两种或两种以上复合而成的材料称为复合材料。

现今较为常用的材料分类方法即按材料的使用性能分为结构材料 and 功能材料。结构材料是以力学性能为基础,以制造受力构件所用材料,如建筑工程中常用的钢筋、

水泥、混凝土等；功能材料是指那些具有优良的电学、磁学、光学、热学、声学、力学、化学、生物医学功能，特殊的物理、化学、生物学效应，能完成功能相互转化，主要用来制造各种功能元器件而被广泛应用于各类高科技领域的高新技术材料，如具有光电转换效应的太阳能电池、具有荧光性质的LED、具有零电阻的超导材料等。

此外按原子微观结构，材料可分为晶体、非晶体和准晶体；按物理性质可分为导体、绝缘体、半导体；按物理效应可分为高温材料、高强材料、磁性材料、超导材料、透光材料、光电材料、压电材料、激光材料、热电材料、声光材料、铁光材料、智能材料、磁光材料和非线性光学材料；按用途分类，材料可分为电子材料、研磨材料、电工材料、光学材料、建筑材料、结构材料、感光材料、耐酸碱性材料及包装材料等。

1. 金属材料

金属材料包括两大类：钢铁材料和非铁（有色）金属材料。除钢铁外，其他金属材料一般统称为非铁金属材料，主要有铝、铜、钛、镍及其合金等。铝、铜合金用得最多，钛合金主要用于航空航天等部门。

金属材料一般具有金属光泽，具有良好的导电性、导热性、延展性及塑性；具有良好的强度和韧性，熔点较高。

2. 无机非金属材料

无机非金属材料主要包括陶瓷、水泥、玻璃及非金属矿物材料。陶瓷是应用历史最悠久、应用范围最广泛的非金属材料。传统的陶瓷材料由粘土、石英、长石等组成，主要作为建筑材料使用。新型陶瓷材料主要以 Al_2O_3 、 SiC 、 Si_3N_4 等为主要组分，已用作航空航天领域中航天飞机的热绝缘涂层、发动机的叶片等，还作为先进的功能材料，用于制作电子元件和敏感元件。

无机非金属材料一般具有高熔点，高强度，高硬度；耐腐蚀，耐磨损，抗氧化等，以及宽广的导电性，隔热性，透光性；良好的铁电性，铁磁性，压电性。

3. 有机高分子材料

有机高分子材料又称高分子聚合物，按用途可分为塑料、合成纤维和橡胶三大类。塑料通常又分为通用塑料和工程塑料。通用塑料主要用来制造薄膜、容器和包装用品，聚乙烯（PE）是其代表。工程塑料主要指力学性能较高的聚合物，抗拉强度应大于50MPa，拉伸杨式模量应大于2500MPa，冲击韧度应大于 $5.88J \cdot cm^{-2}$ 。俗称尼龙的聚酰胺（PA）、聚碳酸酯（PC）是这类材料的代表，聚碳酸酯有良好的电绝缘性，常用作计算机、打印机的外壳，电子通信设备中的连结元件、接线板和控制按钮等。合成纤维是将人工合成的、具有适宜分子量并具有可溶（或可熔）性的线型聚合物，经纺丝成形和后处理而制得的化学纤维。通常将这类具有成纤性能的聚合物称为成纤聚合物。与天然纤维和人造纤维相比，合成纤维的原料是由人工合成方法制得的，生产不受自然条件的限制。合成纤维除了具有化学纤维的一般优越性能，如强度高、质轻、易洗快干、弹性好、不怕霉蛀等外，不同品种的合成纤维各具有某些独特性能。橡胶是提取橡胶树、橡胶草等植物的胶乳，加工后制成的具有弹性、绝缘性、不透水和空气的材料。它是高弹性的高分子化合物。分为天然橡胶与合成橡胶二种。天然橡

胶是从橡胶树、橡胶草等植物中提取胶质后加工制成；合成橡胶则由各种单体经聚合反应而得。橡胶制品广泛应用于工业或生活各方面。

最近，功能高分子材料得到了迅速发展，如将取代液晶材料的有机电致发光材料等。有机高分子材料的特点是分子量大，质轻；优良的加工性能，导热系数小，化学稳定性好，电绝缘性好；功能的可塑性好，出色的装饰性，但同时也存在易老化、耐高温性能差等问题。

4. 复合材料

复合材料就是由两种或两种以上不同原材料组成，使原材料的性能得到充分发挥，并通过复合化而得到单一材料所不具备的性能的材料。按基体可分为金属基、有机高分子材料基、无机非金属基复合材料。按强化相可分为颗粒增强和纤维增强复合材料。

从广义上讲，复合材料已有悠久的历史。远古先人曾用稻草掺入粘土制作土坯，古代人曾用钢铁层压法制成刀剑。近代的复合材料以1942年制出的玻璃纤维增强塑料为起点。随后，为了提高纤维的弹性，开发了硼纤维、碳纤维、耐热氧化铝纤维等；为了改善树脂的耐热性，对金属基复合材料也开始研究。同时，对陶瓷等无机材料作为复合材料的基体进行了再认识，使其在研究开发的基础上获得了广泛的应用。

复合材料的特点是它既能保留原组分材料的主要特色，又通过复合效应获得原组分所不具有的性能。

1.1.3 材料科学的主要研究内容

材料是早已存在的名词，但材料科学的提出则是在20世纪60年代。1957年，苏联人造地球卫星发射成功之后，美国政府及科技界为之震惊，并认识到先进材料对于高技术发展的重要性，于是在一些大学相继成立了十余个材料科学研究中心，从此，材料科学这一名词开始被人们广泛地引用。材料科学有三重重要属性：一是多学科交叉，即固体物理学、结构化学、量子力学、冶金学、金属学、陶瓷学、统计学及计算机科学等学科相互融合、交叉，如生物医用材料要涉及医学、生物学及现代分子生物学等学科；二是一种与实际使用结合非常紧密的科学，发展材料科学的目的在于发展新材料，提高材料的性能和质量，合理使用材料，同时降低材料成本和减少对环境的污染等；三是一个正在发展中的科学，而非像化学、物理学等已经有很成熟的体系，材料科学将随着各相关学科的发展而得到充实和完善。

材料的成分、组织结构、制备工艺、性能及应用是材料科学的五要素，五者之间的联系如图1.1所示。①人类开发材料并把材料作为一门科学去探讨的目的在于，获得材料的某种性能并为人类所用，去满足人类的某方面需求，即图1.1中的性能和应用；一种材料具有某一性能之后，能否使用还必须考虑具体的使用环境。②结构是核心。在金相显微镜出现之前，人们认为成分和工艺与相应的性能是对应的；但是金相显微镜广泛应用之后，人们发现通过控制成分和工艺可以获得不同的微观组织结构，不同的微观组织结构对应着不同的材料性能，即通过控制材料的结构可以有效控制材料的

性能。③材料结构主要包括组成材料各元素的原子结构，原子之间的相互作用、相互结合，原子、分子的空间排列，运动规律以及原子结构体的相貌特征等。④材料结构是由一定成分，通过一定工艺获得的。

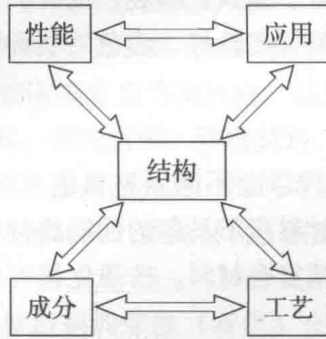


图 1.1 材料科学内涵示意图

材料科学的核心内容是研究材料结构与性能之间的关系，理解和掌握物质结构是利用和发展材料的关键环节。组成材料的原子结构、原子间键合等对材料的性能有重要的影响，如不同的原子键合方式使材料表现出金属、非金属或高分子聚合物的固有属性。金刚石和石墨组成元素同为碳，但由于二者原子在空间中排列的差别，导致前者硬度是后者的 10 倍。同样，同一种材料由于结晶态的不同，性能差别也很大，如玻璃态的聚乙烯是透明的，而结晶态的聚乙烯却是半透明的。

材料科学是从事对材料本质的发现、分析、认识、设计及控制方面的理论体系，其目的在于揭示材料的行为，给予材料属性的描述或建立模型，以及解释组成、结构与性质间的联系。材料科学的核心是研究材料的成分、组织结构、制备工艺与材料性能和应用之间的相互关系。

1.2 原子结构及键合

材料的结构决定材料的性能，材料的性能决定材料的应用。而材料是由原子组成的，材料中原子的构造及运动是材料千变万化的最根本原因。原子是材料合成和化学变化中的最小微粒。因此，掌握原子的结构及原子间相互作用关系是研究材料的基础，有助于我们从根本上了解材料的物理、化学和力学等特性。

1.2.1 原子的结构

原子是由位于中心的原子核及核外电子所构成的，而原子核又可分为质子和中子，原子结构示意图如图 1.2 所示，其中原子核中带有正电荷的是质子，而不带电荷的是中子。一个质子的正电荷量正好与一个电子的负电荷量相等，等于 $-e$ ($e = 1.6022 \times 10^{-19} \text{ C}$)。通过静电吸引，带负电荷的电子被牢牢地束缚在原子核周围。因为原子中电子和原子核中质子的数目相等，所以原子作为一个整体是电中性的。

原子的体积很小，其直径仅为 10^{-10} m 数量级，而原子核直径更小，仅为 10^{-15} m 数量级。然而，原子的质量大约 99.96% 集中在原子核内。电子的质量为 9.1091×10^{-31} kg，而质子和中子的质量分别是电子的 1836 倍和 1839 倍。

1. 原子核的结构

1912 年英国科学家卢瑟福在 α 粒子轰击金箔的实验中，发现绝大多数 α 粒子仍沿原方向前进，少数 α 粒子由于撞击到了电子发生较大偏转，个别 α 粒子偏转超过了 90° ，有的 α 粒子由于撞上原子核所以偏转方向甚至接近 180° 。进而得出结论：原子内含有一个体积小而质量大的带正电的中心，这就是原子核。原子核简称“核”。原子的核心部分是由质子和中子两种微粒构成。而质子又是由两个上夸克和一个下夸克组成，中子又是由两个下夸克和一个上夸克组成。原子核极小，它的直径在 $10^{-15} \sim 10^{-14}$ m 之间，体积只占原子体积的几千亿分之一，在这极小的原子核里却集中了 99.96% 以上原子的质量。核密度约为 1.0×10^{17} kg/m³，即 1 m³ 的体积如装满原子核，其质量将达到 1.0×10^{14} t。原子核的能量极大。构成原子核的质子和中子之间存在着巨大的吸引力，能克服质子之间所带正电荷的斥力而结合成原子核，使原子在化学中原子核不发生分裂。但当一些原子核发生裂变（原子核分裂为两个或更多的核）或聚变（轻原子核相遇时结合成为重核）时，会释放出巨大的原子核能，即原子能。

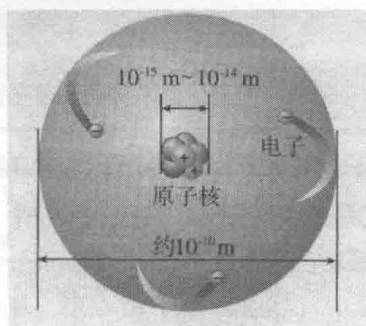


图 1.2 原子结构示意图

2. 核外电子的结构

电子在原子核外空间作高速旋转运动，就好像带负电荷的云雾笼罩在原子核周围，故形象地称为电子云。电子具有波粒二象性，既具有粒子性又具有波动性。电子运动没有固定的轨道，但可根据电子的能量高低，用统计方法判断其在核外空间某一区域内出现的几率的大小。能量低的，通常在离核近的区域（壳层）运动；能量高的，通常在离核远的区域运动。在量子力学中，薛定谔方程成功地解决了电子在核外运动状态的变化规律，其解称为波函数。电子的状态和在某处的出现几率可用波函数来描述，即原子中一个电子的空间位置和能量可用四个量子数来确定：

(1) 主量子数 n 。主量子数 n 是决定原子中电子能量以及离核的平均距离的主要因素。它只能取 1、2、3 等正整数。 n 越大，表示电子离核越远，能量越高。 n 相同的电子处于同一个电子层内。电子层可用一个大写的英文字母表示，如表 1.1 所示。