

国家“九五”重点图书

二十一世纪新材料丛书

宋健 二〇〇〇 秒

主编 熊家炯

材料 设计

Materials
Design
21世纪

天津大学出版社

国家“九五”重点图书
21世纪新材料丛书

材 料 设 计

主编 熊家炯

天 津 大 学 出 版 社

内 容 提 要

本书是我社出版的《21 世纪新材料丛书》之一, 由包括四位院士在内的 10 余名专家共同编撰而成。全书共 11 章, 分别讲述材料设计综述、探索非线性光学晶体的分子设计学方法、原子相互作用势及材料性能预测、聚合物材料的设计研究、材料科学中的界面问题、金属缺陷及电子结构与材料设计、数据信息采集与材料设计的半经验方法、半导体应用中的材料设计问题、原子团簇及其组装材料的计算设计、量子点特性的理论分析与预测、量子化学与材料设计等。本书内容反映了当前国内外本领域最新研究成果。

本书可供科技工作者阅读, 也可作研究生、大学生教材。

图书在版编目 (CIP) 数据

材料设计/熊家炯主编. —天津: 天津大学出版社,
2000.12

(21 世纪新材料丛书/石力开主编)

ISBN 7-5618-1059-8

I. 材… II. 熊… III. 材料—设计 IV. TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2000) 第 88157 号

出 版 天津大学出版社
出版人 杨风和
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
印 刷 河北新华印刷一厂
发 行 新华书店天津发行所
开 本 880mm×1230mm 1/32
印 张 13.125 插页 1
字 数 391 千
版 次 2000 年 12 月第 1 版
印 次 2000 年 12 月第 1 次
印 数 1~2 300
定 价 26.00 元



新材料是高技术
产业的先导

宋健



二〇〇〇年杪

21 世纪新材料丛书顾问委员会

主 任 师昌绪
委 员 (以姓氏笔画为序)
师昌绪 严东生 李恒德 肖纪美
林兰英 柯 俊 徐 偃 颜鸣皋

21 世纪新材料丛书编辑委员会

主 任 石力开
副 主 任 干福熹 吴人洁 左铁镛
委 员 (以姓氏笔画为序)
干福熹 王天民 王震西 王占国
王 焱 左铁镛 石力开 叶恒强
刘治国 杨大智 吴 锋 吴人洁
陈难先 陈皓明 欧阳世翕
郑敏政 金亿鑫 俞耀庭 姚康德
袁新泉 顾觉生 益小苏 黄伯云
雷永泉 熊家炯

丛书策划 胡文华

21 世纪新材料丛书
《材料设计》分册编委会

主编 熊家炯
编委 陈难先 杨小震 夏建白
黄孝瑛

序 言

材料是人类一切生产和生活水平提高的物质基础，是人类进步的里程碑。材料对于国民经济建设和国防建设起着重要的作用。新材料是高新技术的基础和先导；本身也能形成很大的高技术产业。所以信息、生物技术和新材料已成为21世纪最重要、最有发展潜力的领域。我国历来对新材料的研究与开发都十分重视，在“十五”规划中新材料是高新技术研究和产业化的重点之一。

1986年我国开始实施国家高新技术研究发展计划（“863”计划），新材料是七个优先发展的领域之一。通过“863”计划的实施，使我国的新材料研究水平有了很大提高，支持了国防和相应的高新技术领域的发展和进步，在新材料的产业化方面也起到了促进和推动作用。通过计划的实施，组织并形成了我国新材料研究与开发的骨干力量，培养出了一大批高水平的年轻科学家和管理专家，形成了一系列有自己特点的研究基地和研究群体。这些成果为保持我国新材料的持续发展打下了坚实的基础。

根据我国高技术新材料领域所取得的成就和国际发展现状，国家高技术新材料领域专家委员会组织编写了一套《21世纪新材料丛书》。丛书对当今新材料领域的几个发展前沿进行了介绍，并展示了材料科学技术发展中的新概念、新理论、新技术、新成果和新产品。这对于规划我国新材料今后

的发展，推动技术创新都有一定的指导和参考价值，也为从事新材料研究开发的人员提供了一本很好的参考书，是一件很有意义的工作。

朱功昂

前 言

1986 年我国开始组织实施国家高技术研究发展计划（“863”计划），新材料是七个优先发展的领域之一。“863”计划的实施，为我国新材料的研究和发展起到了导向和推动作用，使我国的新材料研究水平有了很大的提高，支持了国防和相应的高新技术领域的发展和进步，促进了产业化进程，培养了一大批高水平的年轻科学家，形成了一系列有自己特点的研究基地和研究群体。这些成果为保持我国新材料的持续发展打下了坚实的基础。

国家高技术(863)新材料领域专家委员会在组织实施过程中，积极组织了各种学术交流活动，编辑出版了多种会议论文集，并支持出版了大量有关新材料方面的专著和工具书。专家委员会于 1992 年组织编写出版了《高技术新材料要览》一书，还积极支持和参与了《材料科学技术大百科全书》《材料大词典》《材料商品手册》等书的编写出版工作。这些书籍的出版，为我国材料科学技术界准备了比较完整配套的参考书籍，对于提高我国的新材料研究发展水平和产业化进程必将产生深远的影响。

为了迎接 21 世纪新材料的蓬勃发展，新材料领域专家委员会又组织撰写了《21 世纪新材料丛书》（国家“九五”重点图书）。这套丛书包括了新材料当今几个主要的研究热点，如信息材料、复合材料、新能源材料、生物医用材料、智能材料与智能系统、生态环境材料和材料设计，以期能引起大家对新材料的关注。应该说明，这套丛书受篇幅的限制并没有能包括新材料的全部内容。金属材料、精密陶瓷材料、高分子材料没有单独列册，但仍然是目前工业应用材料的主体。随着研究工作的深入和先进制备技术的应用，新材料在不断出现，传统材料的性能也不断地得到改进和提高。纳米科学技术的发展为新材料的发展开拓了一条全新的途径。这些方面的工作留待今后进

行补充。

这套丛书反映了当今材料领域国际前沿的研究水平,体现了前瞻性,展示了21世纪新材料领域的新概念、新理论、新技术和正在开拓中的新研究领域,同时也展示了已经形成的或正在进入产业化的新成果、新产品。这套丛书不仅综合了国外的最新文献资料,而且注意反映了国内的工作成果,特别是“863”计划有关课题的研究开发成果。丛书没有刻意追求学科的完整性和系统性,采取了专题论述的形式,但每本书仍能给出该学科的概貌,具有很大的参考价值。丛书虽然定为专著,但力求做到简明扼要、深入浅出,使具有大专水平的读者(包括管理人员)能阅读,又对相关专业的研究人员有所启发。

丛书各分册的主要内容如下。

《信息材料》分册主要包括:微电子及集成半导体材料、光电子材料、光电子有机材料、信息功能陶瓷材料、信息传感材料、光电子显示材料、光纤通信材料、磁性和磁光存贮材料、高密度光存贮材料、铁电压电材料、非线性光学材料和固体激光材料等。

《复合材料》分册的重点是展示新型复合材料,如仿生复合材料、纳米复合材料、功能复合材料等,还阐述了复合材料新的设计、制备方法和复合技术,如原位复合、自蔓延技术、梯度复合等,并探讨了复合材料的回收再生与资源、环境的协调问题。

《新能源材料》分册主要介绍了当今国际上的研究开发热点,如新型二次电池材料、燃料电池材料、太阳能电池材料和核能材料。

《生物医用材料》分册介绍了组织工程和人工器官材料,包括硬组织修复与重建材料、软组织修复与重建材料,此外还介绍了生物智能材料、可降解与吸收材料、控制释放材料等。

《智能材料与智能系统》分册在综述材料智能化、智能材料与系统发展及应用前景的基础上,阐述了智能材料的仿生构思、智能材料中的光纤传感系统、形状记忆合金、压电/铁电材料、无机非金属材料、电磁流变液、超磁致伸缩材料与智能高分子材料及智能结构等的应用。

《生态环境材料》分册阐述了生态环境材料与可持续发展的关系

及协调性评价等问题，介绍了金属类生态环境材料、无机非金属类和高分子类生态环境材料以及生物环境材料等。

《材料设计》分册综述了材料设计的发展概况、材料设计的主要途径、主要计算方法以及国外的研究动态与展望等。本书也充分反映了我国科学家近年来在材料设计方面的研究成果和取得的进展。

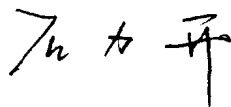
参加撰写这套丛书的有全国百余位在材料领域有造诣的专家和教授，其中包括十多位院士。他们长期工作在材料科研和教学的第一线，知识渊博，经验丰富，与国际科学界有着广泛的联系。这样的作者群体保证了这套丛书的质量和水平。

丛书顾问委员会对本书的出版给与了全面的指导和关怀，从丛书的定位和特色、各分册的选题和主编的聘任，一直到每个分册的主要内容等都进行了具体的指导。这也是这套丛书能顺利编辑出版的一个重要的保证。

这套丛书已列入国家“九五”重点图书出版规划。天津大学出版社负责丛书的编辑和出版工作，为此做了大量认真细致的工作。他们和编委会及作者密切配合，严格把关，工作精益求精，为保证这套丛书在文字、版面及印刷等方面的高质量而作出了很大努力。

国家高技术(863)新材料领域专家委员会

首席科学家



主 编 简 介



熊家炯 1933 年生。清华大学教授，博士生导师。1960 年毕业于前苏联列宁格勒工学院工程物理系，80 年代中期在美国麻省理工学院(MIT)物理系访问。曾任清华大学物理系主任、清华大学理学院常务副院长、清华大学先进材料国家教委开放实验室主任等职。1987~1994 年任国家高技术(863)新材料领域专家委员会常委，1987~1991 年任国家超导技术专家委员会委员，在正电子湮没理论研究、半导体超晶格电子结构、材料设计研究、低维量子结构特性与计算设计等方面，先后获教育部(国家教委)科技进步奖 4 次、国家自然科学奖二等奖 1 次。

主要作者简介（按章序排名）

陈创天(男,1937—) 中国科学院北京人工晶体研究发展中心主任,研究员,博士生导师。1962年毕业于北京大学物理系,1990年当选第三世界科学院院士。主要从事非线性光学晶体结构与性能关系及新型非线性光学晶体探索的研究工作。曾在国内外发表重要论文86篇,在国外发表专著1部,持有国内外专利8项,2000年获ISI光学、力学领域最具影响力的High Impact Paper论文奖,并获中国科学院科技进步特等奖一项及国家发明奖多项。

陈难先(男,1937—) 中国科学院院士,清华大学教授,博士生导师。1962年毕业于北京大学物理系,1984年在美国获博士学位。曾任国家高技术新材料专家委员会常务委员、功能材料专家组组长,现任北京科技大学应用物理研究所所长、国家科技部材料模拟设计实验室主任。在国际上明确提出凝聚态物理和应用物理中玻色、费米及晶格三大类逆问题,并发展了独特而系统的方法,得到了一系列新结果。在晶格比热逆问题研究中发展并统一了爱因斯坦与德拜的经典工作。在原子相互作用势库研究中提出了由晶体结合能到对势的严格简捷公式并发展了EAM多体势,为复杂材料性能预测和材料设计建立了良好基础。1993年获国家自然科学奖二等奖。

杨小震(男,1947—) 研究员,博士生导师。毕业于北京大学化学系,现任中国科学院化学研究所高分子物理研究室副主任、高分子计算机模拟组组长,兼任国家科技部虚拟材料实验室副主任、中国化学会计算机化学专业委员会委员及物理化学专业委员会光谱组委员、中国科学院计算机化学开放实验室学术委员会副主任、超分子结构与光谱国家开放实验室学术委员会委员。在分子振动光谱分析方法与分子振动光谱模拟理论方法的发展、原子分子水平上用计算机模拟分子的结构与性能以及高分子材料的分子设计的理论与方法的发展等方面已发表论文80篇,合著学术著作三部。1989年获中国科学院科技进步三等奖,1995年获中国化学高分子基础研究王葆仁奖,1998年获中国科学院自然科学一等奖。

叶成(男,1942—) 中国科学院化学研究所研究员,博士生导师。1964

年毕业于中国科学技术大学高分子系, 1985 年 9 月~1988 年 8 月和 1995 年 5 月~1995 年 8 月在美国西北大学材料研究中心和化学系做访问学者。从事极化聚合物、光折变组合物和光限幅材料与效应的研究, 迄今已取得 4 项(含美国 1 项)专利授权和 1 项专利公开, 发表有机和聚合物非线性光学研究论文近百篇, 出版专著 1 本及合著合译著多本。

万梅香(女, 1940—) 中国科学院化学研究所研究员, 博士生导师。1965 年毕业于中国科学技术大学物理系。曾多次赴美国、日本和法国进修和进行合作研究。近年主要从事导电高聚物和有机铁磁体的基础研究和电磁功能材料在隐身技术上应用的基础研究。发表论文 120 余篇, 合作出版专著多部, 获专利多项, 曾获中国自然科学奖(二等)和中国科学院自然科学奖(一等)、技术进步奖(二、三等)多项。

李永舫(男, 1948—) 中国科学院化学研究所研究员, 博士生导师。1982 年在华东化工学院化学系获硕士学位, 1986 年在复旦大学化学系获博士学位, 后到中国科学院化学所做博士后, 1988 年 10 月~1991 年 4 月到日本进行访问研究, 1997 年 6 月至 1998 年 6 月到美国进行访问研究。1987 年获国家教委科技进步二等奖, 1995 年获国家自然科学基金二等奖。在国内外学术期刊发表论文 99 篇, 出版著作两部。

黄孝瑛(男, 1929—) 教授。毕业于北京钢铁学院金属物理专业。任北京电子显微镜学会主席。长期工作于冶金部钢铁研究总院, 从事材料物理研究工作, 广泛涉及工程材料中的晶体缺陷、相结构及其他微结构与材料力学和物理性能的关系。出版著作五部, 在国内外学术刊物上发表论文近百篇。

王崇愚(男, 1932—) 清华大学、钢铁研究总院教授, 博士生导师, 1954 年毕业于北京钢铁学院。1993 年当选中国科学院院士(学部委员)。专业领域为材料物理, 主要从事材料缺陷体系电子结构与材料设计研究。主要工作是建立和构造复杂缺陷体系理论研究框架, 提出和发展缺陷体系能量学表述及相关处理模式。在金属合金电子结构研究中强调杂质缺陷复合体效应, 提出相关模型, 揭示局域缺陷的微观作用及其可能的宏观效应, 探索微观结构与宏观物性的关联机制。在缺陷体系电子结构及合金材料研究方面获部级科技成果奖及

国家发明奖。1988 年以来,在材料缺陷电子结构方面发表 50 余篇论文,合作出版两本学术专著。

陈念贻(男,1931—) 教授。毕业于清华大学化学系。现任上海大学化学系计算化学研究室主任、上海交通大学图像处理及模式识别研究所兼任研究员。从事计算机化学及材料设计研究,发展的一套复杂数据信息采掘的方法已在国内外推广应用。在国内外学术期刊发表论文 300 余篇,曾获国家自然科学基金、国家科技进步奖等 10 项。

夏建白(男,1939—) 中国科学院半导体研究所研究员,博士生导师。1962 年毕业于北京大学物理系,1965 年北京大学研究生毕业。主要研究领域为半导体和半导体超晶格、微结构理论。在 Phys.Rev.B 等国际、国内刊物上发表 50 余篇论文,合作出版专著一部。曾获 1989 年、1998 年中国科学院自然科学奖一等奖,1993 年国家自然科学基金二等奖。

顾秉林(男,1945—) 中国科学院院士,清华大学教授,博士生导师。1970 年毕业于清华大学工程物理系,1982 年获丹麦 Aarhus 大学博士学位,1985 年赴美国 Notre Dame 大学做访问学者,后赴日本东京大学任客座教授,现任清华大学研究生院院长。他在材料微观设计,特别是功能材料的组分、结构与性能关系的研究上居国际先进水平。他建立了多元半导体合金设计模型,为新材料探索打下了基础;提出原子位形几率波理论,预测复合钙钛矿材料的基态结构,给出弛豫铁电体有序的判据;揭示了量子点、原子团簇及团簇组装材料的某些新特性。

朱嘉麟(男,1941—) 清华大学教授,博士生导师。1965 年毕业于清华大学工程物理系。现为清华大学学报编委会副主任委员。主要从事凝聚态物理和半导体材料学的研究工作,在低维结构量子特性及纳米材料计算设计方面,取得了系统的学术成果。在国内外学术期刊发表论文 80 余篇。以第一、第二完成人四次获部委奖,以第一完成人获 2000 年度国家自然科学基金二等奖。现被日本东北大学聘为客座教授。

黎乐民(男,1935—) 中国科学院院士,北京大学教授,博士生导师。

现任稀土化学研究中心主任、稀土材料化学及应用国家重点实验室主任。近年主要从事应用量子化学和无机物电子结构研究，重点对象是含重元素化合物。与他人合作发表学术论文一百余篇，出版著作五本。曾获得 1987 年国家自然科学奖二等奖一项。

陈志达(男,1942—) 北京大学教授,博士生导师。现任稀土材料化学及应用国家重点实验室副主任。长期从事理论无机化学、应用量子化学、谱学、原子簇化学与分子磁性的研究工作。在过渡金属原子簇化学方面的研究成果集体获国家自然科学奖二等奖、中国科学院自然科学奖一等奖、福建省王丹萍科学奖二等奖各一项。

目 录

第 1 章 材料设计综述	熊家炯 朱嘉麟 (1)
1.1 什么是材料设计	(1)
1.2 材料设计的发展概况	(2)
1.2.1 前期研究的回顾	(2)
1.2.2 当前面临的挑战	(3)
1.3 材料设计的范围与层次	(4)
1.4 材料设计的主要途径	(6)
1.4.1 材料知识库和数据库技术	(6)
1.4.2 材料设计专家系统	(9)
1.4.3 材料设计中的计算机模拟	(10)
1.4.4 基于第一性原理的计算	(12)
1.5 基于第一性原理的主要计算方法	(13)
1.5.1 密度泛函理论	(14)
1.5.2 准粒子方程, GW 近似	(16)
1.5.3 Car-Parrinello 方法	(17)
1.6 国外研究动态与展望	(19)
1.6.1 新材料及其理论方法	(20)
1.6.2 表面与界面的研究概况	(21)
1.6.3 薄膜、复合材料的设计问题	(22)
1.6.4 从理论上预报和设计材料	(23)
1.6.5 当前材料设计的机遇与展望	(24)
1.7 我国“863”计划中材料设计研究进展及本书概貌.....	(25)
参考文献.....	(31)
第 2 章 探索非线性光学晶体的分子设计学方法	陈创天 (33)