

面向 21 世纪课程教材

T-63  
T-63

# 材料科学导论

## Introduction to Materials Science

主编 冯 端 师昌绪 刘治国



A0963757

化学工业出版社  
教材出版中心  
·北京·

(京) 新登字 039 号

**图书在版编目 (CIP) 数据**

材料科学导论/冯端, 师昌绪, 刘治国主编. —北京:  
化学工业出版社, 2002.5  
面向 21 世纪课程教材  
ISBN 7-5025-3669-8

I. 材… II. ①冯…②师…③刘… III. 材料科学  
IV. TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2002) 第 014241 号

---

面向 21 世纪课程教材

材料科学导论

**Introduction to Materials Science**

主编 冯 端 师昌绪 刘治国

责任编辑: 陈志良

责任校对: 陈 静

封面设计: 蒋艳君

\*

化学工业出版社  
教材出版中心 出版发行

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

发行电话: (010) 64982530

<http://www.cip.com.cn>

\*

新华书店北京发行所经销

北京市彩桥印刷厂印刷

三河市前程装订厂装订

开本 787×960 毫米 1/16 印张 47 $\frac{3}{4}$  彩插 2 字数 856 千字

2002 年 5 月第 1 版 2002 年 5 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-3669-8/G·1008

定 价: 60.00 元

---

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

## 序

材料是人类技术进步的标志。人们习惯用石器时代、青铜时代和铁器时代来表达人类文明史的不同阶段，而我们也亲身经历了从钢铁时代向以硅芯片为代表的电子材料时代的过渡。当今，材料被广泛地应用于各式各样的常规及高精尖技术：诸如机械、运输、建筑、能源、医疗、通信、计算等，发挥了十分关键的作用。而材料本身也品种繁多，五花八门：诸如金属与合金、半导体、电介质、陶瓷、玻璃、塑料、水泥乃至层出不穷的复合材料。材料科学与工程所探讨的是材料的制备、结构、性能与功效之间相互关系，涉及的领域十分宽广，内容丰富多彩，但也头绪纷纭，令人有应接不暇之感。

和人类使用材料的漫长历史相比，科学家研究材料科学的历史比较短暂。它始于 19 世纪中叶，当时关注的问题是钢铁热处理过程的显微组织的变化，研究的工具限于金相显微镜。随后是相平衡的热力学与统计力学的建立，为探讨材料的相平衡与相变提供了理论基础。20 世纪 20 年代，原子结构的阐明，量子力学的建立又为理解材料的根本结构提供了新的理论依据。另一方面 X 射线衍射、电子衍射与电子显微术，乃至多种电子隧道探针技术，又为探测材料的微观结构提供了新的手段。固体物理学（后延拓为凝聚态物理学）与物理化学为全面理解材料结构与性能关系提供了理论基础。合成化学的发展又为合成层出不穷的新材料提供了手段。到 20 世纪 50 年代，金属学（包括化学冶金与物理冶金）业已初具规模。随后半导体技术的发展又对材料的纯度和完整性提出了苛刻的要求，促使材料的研究向纵深发展。另一方面，金属学的理论与实验手段也向陶瓷学的领域延伸。到 1960 年左右，“材料科学”的名称问世，迄今已有 40 余年的历史。随后非晶材料科学、液晶材料科学和高分子材料科学又相继问世，丰富了材料科学的内涵。在 20 世纪末，软物质科学蓬勃发展，将液晶、高分子、胶体等领域的研究贯通起来，和传统硬物质科学形成鲜明的对照，软硬兼顾，相得益彰，从而将无机材料科学和有机材料科学辩证地融合起来。

材料科学的基本原理根植于凝聚态物理学、物理化学与合成化学。但由于各种材料的分支学科的学术背景不尽相同，诸分支学科的汇总融合也有一个历史过程，不能一蹴而就。传统的材料科学教科书也反映了这一历史情

况，流于分门罗列、兼容并蓄，而未能熔铸成一整体。读过之后，难免使人有支离破碎，杂乱无章之感。因此，迄今为止，在全世界范围之内，尚欠缺一本能够概括材料科学的众多侧面，而又井然有序、条理清楚的人门教科书。值此世纪之交，学科的交叉融合正在加速进行，这就为将材料科学融贯成为一门成熟的学科提供了必要的基础。这就是我们撰写这本书的时代背景和面临的挑战。

本书力图超越传统的处理方法，引入连贯统一的理论框架来概括不同类型材料丰富多彩的特征，希望能够做到既充分反映了材料的多样性，又体现了科学在概念上的统一性。为了本书主体鲜明，纲举目张，就不得不删除枝节，突出主干。因而本书的重点就放在材料本身的规律性上，对表征材料的实验技术和制备材料的具体工艺只是略有涉及，未作详论。我们并不低估这些问题的重要性，而是认为这部分内容放在其他课程中学习为宜。另外，本书也和固体物理学做了适当的分工，以免相互重复。本书既可以作为高等院校讲授材料科学的人门教科书，也可供从事这方面的研究工作者参考，还可以视为在一定程度上体现了我们对于材料科学整体化观点的一本著作。由于我们才疏学浅，编写过程十分仓促，尚希各位专家学者给予批评指正。

本书的编撰得到国内材料科学界许多专家学者的参与和支持。其中包括中科院金属所的叶恒强院士，中南工业大学金展鹏教授及刘立斌博士，清华大学熊家炯教授及朱嘉麟教授，南京工业大学曾燕伟教授；南京大学的翟宏如教授，李齐教授，袁仁宽教授，丁世英教授，王牧教授，王慧田教授，张荣教授，马余强教授，陈延峰教授，韩民副教授，吴迪博士，濮林博士，杨斌博士等。特别值得注意的是，本书既凝聚了不少老中年专家的心血、学识和智慧，也发挥了许多杰出青年科学家（其中有4位长江计划特聘教授）的探索精神与创新思维。我们特别感谢北京科技大学柯俊院士对本书的编写给予的关怀和支持，他在百忙之中还对书稿中涉及材料发展史方面的内容予以审阅；我们也感谢中国科技大学侯建国教授提供的图片。我们还感谢参加2000年夏在南京召开的《材料科学导论》研讨会专家们对编写本书所提出的宝贵意见和热情鼓励。国内材料科学界还有许多科学家对本书的编写提出了建议及提供图片资料，使我们获益匪浅。

国家教育部面向21世纪教学内容和体系改革项目，南京大学教务处，南京大学材料科学与工程系和南京大学物理系对作为本书重要基础的前期教学研究工作曾给予长期支持。南京大学材料科学与工程系，南京大学物理系，南京大学固体微结构实验室的同事们对本书提出了许多有益的建议。南京大学相关科研组的研究生在书稿的资料收集、文字加工、绘图等方面做了

大量工作：特别是殷春荣、周岚、杨颖三位同学更为此付出了辛勤的劳动；吕鹏工程师也参加了绘图等工作；杨颖同学还绘制了彩图。编者对这些单位和个人无私帮助与深情厚谊表示衷心的感谢。

南京大学百年校庆在即，正是南京大学良好的学术环境为本书完成提供了重要条件。我们谨以此书作为微薄的礼物献给南京大学百年校庆。

冯 端 师昌绪 刘治国

2002年元月

# 目 录

综览	1
----	---

## 第 1 篇 材料的结构

<b>第 1 章 结构问题的不同侧面</b>	17
1.1 键合	17
1.1.1 原子结构和周期表	17
1.1.2 离子键	20
1.1.3 共价键	23
1.1.4 分子	25
1.1.5 金属键	27
1.1.6 弱键	28
1.2 对称性	29
1.2.1 对称操作	29
1.2.2 对称与不对称	30
1.2.3 对称元素的组合	31
1.3 对称破缺——无序与有序	34
1.3.1 概念的引入	34
1.3.2 从概念到现实——有序-无序转变的实例	35
1.3.3 能与熵的角逐——有序-无序转变的物理根源	38
1.3.4 实际结构——有序相中的缺陷	40
1.4 结构与信息	41
1.4.1 信息	41
1.4.2 遗传信息的载体——DNA 分子	42
1.4.3 蛋白质分子	44
参考文献	46
<b>第 2 章 晶态</b>	47
2.1 周期结构和点阵	47
2.1.1 点阵	48
2.1.2 点阵与点群的类型	49
2.1.3 点阵的几何关系	53

2.1.4	对称性对物性常量的制约	54
2.2	空间群	55
2.2.1	晶体的微观对称性	55
2.2.2	空间群	56
2.2.3	空间群的国际符号	57
2.2.4	晶体结构的描述	58
2.3	若干晶体结构的实例	60
2.3.1	堆积结构	60
2.3.2	键联结构	62
2.3.3	钙钛矿结构及其家族	65
2.4	超出空间群的结构	67
2.4.1	色群和磁结构	67
2.4.2	无公度调制结构	67
2.4.3	准晶和 Penrose 拼砌	68
	参考文献	70
<b>第 3 章</b>	<b>非晶态与液晶态</b>	<b>71</b>
3.1	导向非晶态	71
3.1.1	熔化	71
3.1.2	玻璃化转变	73
3.1.3	位置无序的统计描述	75
3.2	无机玻璃	78
3.2.1	无规密堆模型	78
3.2.2	无规网络模型	79
3.2.3	硫系玻璃	81
3.3	聚合物	82
3.3.1	聚合物的结构和构型	82
3.3.2	无规行走的线团模型	84
3.3.3	溶胀的线团	85
3.3.4	交联	87
3.4	液晶态	88
3.4.1	概述	88
3.4.2	向列相和胆甾相	91
3.4.3	近晶相和柱状相	91
3.4.4	溶致液晶 (自组装膜的有序结构)	92
3.4.5	聚合物的有序结构	94

参考文献 .....	96
<b>第 4 章 点缺陷 .....</b>	<b>97</b>
4.1 空位与填隙原子 .....	97
4.1.1 热平衡态的点缺陷浓度 .....	97
4.1.2 点缺陷的形成能 .....	98
4.1.3 点缺陷的迁移激活能 .....	99
4.2 点缺陷的产生 .....	100
4.3 离子晶体中的点缺陷与色心 .....	103
4.3.1 离子晶体中的点缺陷 .....	103
4.3.2 离子导电和超离子导电现象 .....	104
4.3.3 色心 .....	105
4.4 杂质原子 .....	108
参考文献 .....	110
<b>第 5 章 位错与向错 .....</b>	<b>111</b>
5.1 晶体中位错的几何特征 .....	112
5.2 位错的弹性性质 .....	116
5.3 位错核心结构 .....	118
5.4 位错与其他缺陷之间的交互作用 .....	121
5.4.1 位错间的交互作用 .....	122
5.4.2 位错与溶质原子间的交互作用 .....	123
5.4.3 位错与自由表面的交互作用 .....	124
5.5 位错的产生和增殖 .....	126
5.5.1 位错的产生 .....	126
5.5.2 位错的增殖 .....	128
5.6 向错 .....	131
参考文献 .....	134
<b>第 6 章 表面与界面 .....</b>	<b>135</b>
6.1 晶体的表面 .....	135
6.1.1 晶体外形与表面微观形貌 .....	135
6.1.2 表面弛豫与重构 .....	138
6.1.3 技术晶体的表面 .....	141
6.1.4 纳米粒子的表面 .....	142
6.2 平移界面 .....	143
6.2.1 堆垛层错 .....	143
6.2.2 反相畴界 .....	147



6.2.3	晶体学切变面 .....	150
6.3	孪晶界面 .....	152
6.3.1	反映孪晶界面 .....	152
6.3.2	旋转孪晶界面 .....	155
6.3.3	铁电畴界 .....	155
6.4	晶界 .....	158
6.4.1	小角度晶界 .....	158
6.4.2	大角度晶界 .....	162
6.5	相界 .....	164
	参考文献 .....	166
<b>第7章</b>	<b>多层次与非均质材料</b> .....	<b>168</b>
7.1	非均质材料 .....	168
7.1.1	概述 .....	168
7.1.2	非均质材料的微结构特征 .....	169
7.1.3	有效媒质近似——二相合金微结构与物性 关联问题处理实例 .....	173
7.1.4	非均质介观结构实例 .....	174
7.2	结构的几何相变：逾渗 .....	183
7.2.1	逾渗的概念 .....	183
7.2.2	逾渗的若干实例 .....	185
7.3	无规结构：分形几何 .....	186
7.3.1	支离破碎世界的描述 .....	186
7.3.2	物质结构中的分形 .....	188
	参考文献 .....	190

## 第2篇 材料的物性

<b>第8章</b>	<b>理解物性的基本概念</b> .....	<b>191</b>
8.1	量子特征 .....	191
8.1.1	波粒二象性 .....	191
8.1.2	经典统计与量子统计 .....	193
8.2	固态电子理论 .....	198
8.2.1	金属自由电子理论 .....	198
8.2.2	能带概念的引入 .....	199
8.2.3	布里渊区与能态密度 .....	202
8.3	晶格振动理论 .....	205

8.3.1	简谐近似 .....	205
8.3.2	爱因斯坦模型与德拜模型 .....	206
8.3.3	格波与晶格振动模 .....	208
8.4	相互作用的电子体系 .....	210
8.4.1	准粒子体系 .....	210
8.4.2	强磁性 with 超导电性 .....	211
8.4.3	强关联电子体系 .....	214
	参考文献 .....	216
<b>第 9 章</b>	<b>输运性质</b> .....	<b>217</b>
9.1	金属与合金的输运性质 .....	217
9.1.1	经典电导理论 .....	218
9.1.2	量子电导理论简介 .....	219
9.1.3	电导的实验研究 .....	221
9.1.4	热电效应 .....	223
9.2	半导体的输运性质 .....	224
9.2.1	半导体的能带 .....	225
9.2.2	载流子和费米能级 .....	226
9.2.3	迁移率和散射 .....	230
9.2.4	霍尔效应 .....	231
9.2.5	p-n 结 .....	233
9.2.6	金属与半导体接触 .....	235
9.2.7	光电导与光伏效应 (太阳能电池) .....	238
9.2.8	晶体管 .....	239
9.2.9	量子半导体器件 .....	242
9.3	聚合物、非晶态材料等的输运性质 .....	244
9.3.1	导电聚合物 .....	244
9.3.2	非晶态半导体 .....	248
9.3.3	离子晶体 .....	251
	参考文献 .....	253
<b>第 10 章</b>	<b>磁学性质</b> .....	<b>254</b>
10.1	材料磁性来源与分类 .....	255
10.1.1	原子磁矩 .....	255
10.1.2	材料磁性概述和分类 .....	258
10.2	磁有序与交换作用 .....	264
10.2.1	铁磁有序 .....	264

10.2.2	反铁磁和亚铁磁性	268
10.2.3	交换作用	272
10.2.4	强磁材料的本征性能	277
10.3	强磁材料的磁畴与磁化	280
10.3.1	影响磁畴结构的能量	280
10.3.2	强磁体中的磁畴结构	283
10.3.3	磁化曲线与磁滞回线	285
10.4	磁化动力学与铁磁共振	290
10.4.1	磁化进动及转动	290
10.4.2	张量磁化率和铁磁共振	291
10.4.3	自旋波共振	292
10.4.4	磁化与反磁化的动态过程	293
10.5	强磁材料及应用	295
10.5.1	强磁材料按组成与结构的分类	295
10.5.2	强磁材料的应用	296
10.6	巨磁电阻效应和磁电子学	303
10.6.1	磁电阻和巨磁电阻	303
10.6.2	自旋相关导电	304
10.6.3	磁电子学和巨磁电阻的应用	308
	参考文献	310
<b>第 11 章</b>	<b>铁电性质</b>	<b>311</b>
11.1	电介质的极化与铁电性	311
11.1.1	电介质的极化	311
11.1.2	自发极化与铁电性	314
11.2	压电性与热释电性	323
11.2.1	压电性与压电材料	323
11.2.2	热释电性与热释电材料	330
	参考文献	332
<b>第 12 章</b>	<b>超导电性质</b>	<b>333</b>
12.1	引言	333
12.2	超导电性的基本特征	334
12.2.1	零电阻效应	334
12.2.2	迈斯纳效应	336
12.2.3	超导体临界参数	337
12.3	超导体的热力学性质	338

12.3.1	自由能	338
12.3.2	熵	340
12.3.3	潜热	340
12.3.4	比热容	340
12.3.5	超导能隙	341
12.4	迈斯纳态的电磁性质	341
12.4.1	二流体模型	341
12.4.2	London 理论	342
12.4.3	G-L 理论	344
12.4.4	相干长度	345
12.4.5	表面能	346
12.4.6	磁通量子化	347
12.5	第二类超导体	348
12.6	超导隧道效应	350
12.7	超导电性的微观图像	352
12.7.1	实验和理论的启示	353
12.7.2	电子-声子机制	355
12.7.3	Cooper 对	355
12.7.4	BCS 理论图像	356
12.8	超导材料	357
12.8.1	强磁场超导材料	357
12.8.2	超导电子材料	358
12.8.3	高温超导材料	359
	参考文献	362
<b>第 13 章</b>	<b>光学性质</b>	<b>363</b>
13.1	光波在线性介质中的传播	363
13.1.1	光波在均匀的各向同性电介质中的传播	364
13.1.2	光波在导体中的传播	365
13.1.3	光波在各向异性介质中的传播	365
13.1.4	光波在平面介质薄膜波导中的传播	370
13.1.5	光波在光纤中的传播	372
13.1.6	光波在光子晶体中的传播	374
13.2	光发射	376
13.2.1	光的自发辐射和受激跃迁	377
13.2.2	激光产生的原理	379

13.2.3	典型的三能级和四能级激光系统	381
13.2.4	Nd:YVO <sub>4</sub> 和半导体激光器	382
13.2.5	一种新的激光发射机理与材料——纳米硅发光	386
13.3	激光频率变换	387
13.3.1	非线性极化	387
13.3.2	块状晶体中的光频变换	389
13.3.3	光学超晶格中的光频变换	393
13.4	非线性折射率与非线性吸收	397
13.4.1	非线性折射率	397
13.4.2	非线性吸收	403
	参考文献	407
<b>第 14 章</b>	<b>力学性质</b>	<b>409</b>
14.1	弹性与广义弹性	410
14.1.1	弹性参量	410
14.1.2	常规弹性的物理本质	413
14.1.3	高弹性的物理本质	415
14.1.4	粘弹性	417
14.2	塑性形变与粘性流变	419
14.2.1	晶体的理论屈服强度	419
14.2.2	晶体塑性形变的几何学与结晶学关系	423
14.2.3	塑性流变——从低温到高温	426
14.2.4	高聚物粘性流变	430
14.3	断裂	437
14.3.1	理论断裂强度	437
14.3.2	格里菲斯裂纹理论	438
14.3.3	脆性与韧性	441
14.4	材料的强化和增韧	442
14.4.1	金属材料的强化	442
14.4.2	陶瓷材料的增韧	449
14.4.3	复合材料	453
	参考文献	455

### 第 3 篇 材料制备的科学基础

<b>第 15 章</b>	<b>材料制备的概述</b>	<b>457</b>
15.1	材料合成与加工的意义和内涵	457

15.2	基于液相-固相转变的材料制备 .....	458
15.2.1	从熔体制备单晶材料 .....	458
15.2.2	从熔体制备非晶材料 .....	459
15.2.3	溶液法材料制备 .....	460
15.2.4	溶胶-凝胶法 .....	461
15.3	基于固相-固相转变的材料制备 .....	463
15.3.1	固相反应法制备粉末 .....	463
15.3.2	陶瓷成型和烧结 .....	464
15.3.3	固相外延 .....	465
15.3.4	高压制备 .....	465
15.4	基于气相-固相转变的材料制备 .....	466
15.4.1	真空蒸发镀膜 .....	466
15.4.2	溅射和激光脉冲沉积 .....	467
15.4.3	化学气相沉积 .....	469
15.4.4	分子束外延 .....	470
	参考文献 .....	475
<b>第 16 章</b>	<b>相图原理 .....</b>	<b>476</b>
16.1	吉布斯相律 .....	477
16.2	杠杆定律 .....	478
16.3	单元体系的温度-压力图 ( $p$ - $T$ 图) .....	479
16.4	二元相图 .....	480
16.4.1	匀晶相图 .....	480
16.4.2	共晶相图与包晶相图 .....	482
16.4.3	具有中间化合物的相图 .....	484
16.4.4	偏晶相图与综晶相图 .....	486
16.5	三元相图 .....	487
16.5.1	三元相图的表示法 .....	487
16.5.2	三元相图的分类 .....	493
	参考文献 .....	499
<b>第 17 章</b>	<b>固体中的扩散、化学反应与烧结 .....</b>	<b>502</b>
17.1	固体中的扩散 .....	502
17.1.1	扩散的基本特点与唯象理论 .....	502
17.1.2	质点迁移的微观机构与扩散系数 .....	509
17.1.3	扩散的热力学理论 .....	514
17.1.4	短路扩散与非平衡态下点缺陷的扩散 .....	517

17.1.5	带电质点的扩散行为	520
17.1.6	金属中的电迁移和热迁移	521
17.2	固相化学反应	522
17.2.1	固相反应动力学的基本特征	522
17.2.2	固相反应动力学方程	523
17.2.3	影响固相反应的因素	529
17.3	固态烧结	532
17.3.1	固态烧结的初期动力学	533
17.3.2	固态烧结中、后期动力学模型	536
17.3.3	烧结过程中的晶粒生长与二次再结晶	537
17.3.4	液相烧结和热压烧结	539
	参考文献	540
<b>第 18 章</b>	<b>相变的基本原理</b>	<b>541</b>
18.1	相变的基本结构特征	542
18.1.1	重构型相变和位移型相变	542
18.1.2	马氏体型相变	544
18.1.3	有序-无序相变	545
18.1.4	其他形式相变	546
18.2	相变热力学	548
18.2.1	重要的热力学函数	548
18.2.2	一级相变与高级相变	549
18.2.3	朗道相变理论简介	552
18.2.4	朗道理论的推广	554
18.3	固态相变动力学	555
18.3.1	新相胚核形成过程	555
18.3.2	胚核生长和粗化过程	562
18.3.3	相变动力学速率形式理论	568
18.3.4	成核-生长和失稳分解过程	575
18.3.5	失稳分解的动力学方程	579
18.4	结语	584
	参考文献	586
<b>第 19 章</b>	<b>薄膜的外延生长</b>	<b>587</b>
19.1	外延的基本物理过程	587
19.1.1	基本概念	587
19.1.2	表面成核	589

19.1.3	表面动力学	592
19.1.4	外延界面的结构	593
19.2	同质外延	595
19.2.1	同质外延的生长模式	595
19.2.2	杂质分凝与控制	596
19.2.3	Si 和 GaAs 的同质外延	596
19.3	异质外延	597
19.3.1	异质外延系统的结构与分类	597
19.3.2	应变层的稳定性	600
19.3.3	异质外延的生长模式	601
	参考文献	602
<b>第 20 章</b>	<b>生长界面的稳定性——枝晶生长和分形生长</b>	<b>603</b>
20.1	引言	603
20.2	生长界面的稳定条件	605
20.2.1	温度梯度对界面稳定性的影响	605
20.2.2	浓度梯度对界面稳定性的影响	606
20.2.3	界面能对界面稳定性的影响	608
20.2.4	平界面的失稳条件	608
20.3	枝晶生长	611
20.3.1	控制枝晶生长的几个物理因素	612
20.3.2	枝晶主干的生长——针状晶体的生长	614
20.4	分形的概念和分形聚集	618
20.4.1	分形形态的表征	618
20.4.2	由扩散控制的分形聚集过程	620
20.4.3	界面能对聚集形态的影响	622
	参考文献	623
<b>第 21 章</b>	<b>软物质的自组织</b>	<b>624</b>
21.1	引言	624
21.1.1	什么是软物质	624
21.1.2	软物质怎样表现	627
21.2	自组织的原理和控制	628
21.2.1	自组织趋向有序途径	628
21.2.2	软物质自组织的形式	630
21.2.3	控制和设计自组织形貌的途径	639
21.3	软物质的复相分离	641



21.3.1 软物质复相分离的热力学	641
21.3.2 软物质复相分离的动力学	648
21.4 结语：自组装的基本问题和研究前沿	650
参考文献	653

## 第 4 篇 展 望

<b>第 22 章 材料表征及其进展</b>	654
22.1 性能检测	654
22.2 显微组织分析原理	655
22.2.1 电子与样品相互作用	655
22.2.2 X 射线与物质的相互作用	657
22.2.3 离子束分析	658
22.2.4 中子衍射与小角度中子散射	659
22.3 显微结构表征	660
22.3.1 形貌观察	660
22.3.2 结构测定	660
22.3.3 化学组分分析	662
22.4 从材料出发的综合分析	664
22.5 材料性能与组织表征技术发展展望	665
22.5.1 分析技术的交叉与综合	665
22.5.2 分析结果的定量化与可视化	666
22.5.3 低维材料制备与分析测试结合	667
参考文献	668
<b>第 23 章 材料设计及其进展</b>	669
23.1 什么是材料设计	669
23.2 材料设计的发展概况	670
23.2.1 前期研究的回顾	670
23.2.2 当前面临的挑战	671
23.3 材料设计的范围与层次	672
23.4 材料设计的主要途径	674
23.4.1 材料知识库和数据库技术	674
23.4.2 材料设计专家系统	676
23.4.3 材料设计中的计算机模拟	677
23.4.4 基于第一性原理的计算	679
23.5 基于第一性原理的主要计算方法	680