

天津市高等学校精品课程教材
材料科学与工程专业系列教材

Fundamentals of Materials Science

材料科学基础

(第2版)

靳正国 郭瑞松 侯 信 师春生 编



天津大学出版社
TIANJIN UNIVERSITY PRESS

天津市高等学校精品课程教材

材料科学与工程专业系列教材

材料科学基础

Fundamentals of Materials Science

(第2版)

靳正国 郭瑞松 侯 信 师春生 编



天津大学出版社

TIANJIN UNIVERSITY PRESS

内容提要

本书重点介绍了材料科学基础中有关固体材料结构的基础理论知识,主要包括:原子及原子间的结合,几何结晶学基础,金属材料、无机非金属材料、高聚物材料的结构基础,晶态结构、非晶结构以及结构中的缺陷,材料的表面与界面基础知识等内容。全书共有7章,每章后附有习题。

本书为材料科学与工程专业本科公共基础课教材,同时可用作材料科学与工程专业研究生的教学与研究参考用书,也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.—2版.—天津:天津大学出版社,2015.2

天津市高等学校精品课程教材 材料科学与工程专业系列教材

ISBN 978-7-5618-5262-0

I. ①材… II. ①靳… III. ①材料科学—高等学校—教材 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 031809 号

出版发行 天津大学出版社

出版人 张树俊

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

网址 publish.tju.edu.cn

印刷 天津泰宇印务有限公司

经销 全国各地新华书店

开本 185mm×260mm

印张 16.25

字数 406千

版次 2015年3月第1版

印次 2015年3月第1次

定价 30.00元

凡购本书,如有缺页、倒页、脱页等质量问题,烦请向我社发行部门联系调换

版权所有 侵权必究

前言

材料科学是 20 世纪 50 年代确立、以研究固体材料基本属性及过程行为规律为核心内容的一门科学,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。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,已成为新世纪人才培养思路的主要出发点。

本书是在材料科学与工程专业本科教学提倡加强理论基础、拓宽专业知识、注重能力与素质培养的教改目标下,尝试编写的一部高等理工科院校材料科学与工程专业(即大材料专业)本科用专业公共基础课教材。全书侧重于材料科学与工程学科的相关基础知识与原理的介绍,力求尽可能全面地概括三类固体材料中的共性基础知识,同时使金属材料、无机非金属材料 and 有机高分子材料的特征属性得到适度的体现。授课内容以固体材料结构基础为重点,从微观、宏观、物质内部、表面及界面、静态、动态等不同层面,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、典型固体聚集态结构、结构缺陷及运动规律、表面与界面相关的理论和现象等。

本书是天津市高等学校精品课程“材料科学基础”使用教材。编写过程重点参考了天津大学出版社 2005 年和 2008 年出版的《材料科学基础》教材。该课程制定的教学目标是加强材料专业基础理论,贯通共性与映衬特征属性及拓宽专业知识面为主要目的,面向材料科学与工程一级学科专业及下设专业的本科生开设。通过本教材的学习,旨在使学生对各类材料组成与物质结构间的内在联系有较深入的理解,为今后继续从事专业学习以及从事材料的设计与制造、新材料的研究与开发打下扎实的宽专业基础。

本书绪论、第 1 章、第 2 章、第 5 章由靳正国编写;第 3 章、第 4 章由郭瑞松、师春生编写并由郭瑞松统稿;第 6 章、第 7 章由侯信编写。

材料科学与工程所涉及的知识范畴和应用领域十分广泛,学科交叉内容丰

2014 年 10 月

目 录

绪论	(1)
0.1 材料与社会文明发展	(1)
0.2 材料科学的建立与内涵	(3)
0.3 材料的基本分类与特征	(4)
第1章 原子与原子间结合	(8)
1.1 原子中的电子	(8)
1.1.1 电子的量子数	(8)
1.1.2 电子的排列规则	(9)
1.2 原子的性质	(9)
1.2.1 原子轨道能级	(9)
1.2.2 周期表的元素分区	(10)
1.2.3 原子半径及电子得失	(11)
1.3 原子间的结合	(15)
1.3.1 键合力与能量	(15)
1.3.2 杂化轨道理论	(16)
1.3.3 分子轨道理论	(18)
1.3.4 原子间基本键型	(19)
1.4 弱作用键	(22)
1.5 晶体场和配位场理论	(24)
1.5.1 晶体场的基本概念	(24)
1.5.2 d 轨道的晶体场分裂	(25)
1.5.3 晶体场稳定化能	(26)
1.5.4 八面体择位能	(27)
1.5.5 姜-泰勒效应	(28)
1.5.6 过渡元素离子有效半径的晶体场效应	(29)
1.5.7 配位场理论的基本概念	(29)
习题	(31)
第2章 结晶学基础	(32)
2.1 晶体的周期结构	(32)
2.1.1 晶体的概念	(32)
2.1.2 等同点及空间格子	(32)
2.1.3 布拉维法则和面角守恒定律	(34)
2.1.4 晶体的基本性质	(35)

2.2 晶体的宏观对称	(35)
2.2.1 对称操作和对称要素	(35)
2.2.2 对称要素的组合	(38)
2.2.3 对称型及其推导	(39)
2.2.4 晶体的分类	(41)
2.3 晶体的理想形态	(42)
2.3.1 单形	(43)
2.3.2 聚形	(46)
2.4 晶体定向和结晶符号	(46)
2.4.1 晶体定向	(46)
2.4.2 晶体的整数定律(有理指数定律)	(48)
2.4.3 结晶符号	(48)
2.5 晶体点阵的几何理论	(50)
2.5.1 布拉维格子	(51)
2.5.2 晶胞的概念	(54)
2.5.3 晶体的微观对称要素	(54)
2.5.4 空间群	(58)
2.5.5 点群和空间群的符号	(59)
2.5.6 等效点系的概念	(62)
2.6 晶体的堆积	(63)
2.6.1 有效半径的概念	(63)
2.6.2 球体紧密堆积原理	(63)
习题	(65)
第3章 金属和无机材料的结构	(67)
3.1 金属的晶体结构	(67)
3.1.1 晶胞中的原子数	(67)
3.1.2 点阵常数与原子半径	(68)
3.1.3 配位数与致密度	(69)
3.1.4 晶体的原子堆垛和间隙	(70)
3.2 非晶态合金	(72)
3.2.1 非晶态的形成	(73)
3.2.2 非晶态结构的表征	(74)
3.2.3 非晶态合金的结构模型	(75)
3.2.4 非晶合金的特性	(76)
3.3 无机材料的晶体结构	(77)
3.3.1 离子晶体	(77)
3.3.2 典型晶体的结构	(83)
3.3.3 硅酸盐晶体结构	(95)
3.4 无机熔体与玻璃	(100)
3.4.1 熔体的结构	(100)

3.4.2 熔体的性质	(102)
3.4.3 玻璃的通性	(104)
3.4.4 玻璃的形成	(106)
3.4.5 玻璃的结构与结构参数	(110)
习题	(112)
第4章 结构缺陷及固溶体	(114)
4.1 缺陷分类	(114)
4.2 点缺陷	(115)
4.2.1 点缺陷类型	(115)
4.2.2 缺陷化学反应表示法	(118)
4.2.3 热缺陷浓度计算公式	(121)
4.3 位错	(124)
4.3.1 位错的基本类型	(124)
4.3.2 位错的运动	(128)
4.3.3 位错的弹性性质	(130)
4.3.4 位错的来源和位错的增殖	(134)
4.4 面缺陷	(136)
4.4.1 表面缺陷	(136)
4.4.2 界面与亚界面	(136)
4.5 固溶体	(139)
4.5.1 固溶体的类型	(139)
4.5.2 置换型固溶体及组分缺陷	(141)
4.5.3 间隙型固溶体	(143)
4.5.4 固溶体的研究方法	(144)
4.5.5 固溶体生成热力学	(147)
4.6 非化学计量化合物缺陷	(150)
4.7 有序和有序固溶体	(154)
习题	(156)
第5章 表面与界面基础	(158)
5.1 固体的表面	(158)
5.1.1 表面的弛豫、重构及双电层	(158)
5.1.2 表面能及几种近似计算	(160)
5.1.3 表面能与晶体平衡形状	(163)
5.2 表面行为	(164)
5.2.1 表面吸附	(164)
5.2.2 弯曲表面效应	(166)
5.2.3 润湿	(167)
5.3 界面结构	(169)
5.3.1 小角晶界	(170)
5.3.2 大角晶界	(172)

5.3.3 共格界面理论	(173)
5.3.4 晶界结构模型	(175)
5.4 界面特性	(179)
5.4.1 晶界偏析	(179)
5.4.2 晶界迁移	(180)
5.4.3 晶界应力	(183)
5.4.4 晶界电荷与静电势	(184)
5.5 晶界能与显微结构	(185)
习题	(188)
第6章 高分子材料概述	(190)
6.1 高分子材料的基本概念	(190)
6.1.1 高分子的定义	(190)
6.1.2 分子量	(191)
6.1.3 高分子材料	(192)
6.2 高分子材料的分类	(192)
6.2.1 按高分子主链结构分类	(192)
6.2.2 按高分子材料来源分类	(192)
6.2.3 按高分子材料性能和应用分类	(192)
6.3 高分子的命名	(193)
6.3.1 习惯命名法	(193)
6.3.2 结构系统命名法	(194)
6.4 高分子合成的基本方式	(195)
6.4.1 按单体-聚合物在结构上的变化分类	(195)
6.4.2 按聚合反应的机理分类	(196)
习题	(197)
第7章 高分子材料的结构基础	(198)
7.1 高分子的结构	(198)
7.1.1 高分子的链结构	(199)
7.1.2 高分子的聚集态结构	(208)
7.2 高分子材料的晶态结构	(214)
7.2.1 高分子链在晶体中的构象	(215)
7.2.2 高分子材料晶态结构模型	(217)
7.2.3 高分子材料结晶形态	(219)
7.2.4 影响高分子材料结晶能力的因素	(222)
7.2.5 高分子材料的结晶过程	(223)
7.2.6 结晶度及其测定方法	(228)
7.3 高分子的液晶态	(230)
7.3.1 基本概念	(230)
7.3.2 高分子液晶的分子结构特征与分类	(230)
7.3.3 高分子液晶的物理结构	(231)

7.3.4 高分子液晶的应用与液晶纺丝	(231)
7.4 高分子材料的热运动和力学状态	(233)
7.4.1 高分子热运动的主要特点	(233)
7.4.2 高聚物的力学状态和热转变	(234)
习题	(241)
附录	(242)
附录1 单位换算	(242)
附录2 国际单位制(SI)中的基本常数值	(242)
附录3 有效离子半径	(243)
参考文献	(248)

明史已是按石器时代、青铜器时代、铁器时代来划分,这是以材料的先进性代表那个时代的生产能力、生活水平以及文明程度。现代的物质和信息技术也与两个著名的化学元素铀元素和镭元素的开发研究有着密切的联系。20世纪70年代人们把信息、材料和能源誉为当代文明的三大支柱。80年代以高新技术为代表的新技术革命,又把新材料、信息技术和生物技术并列为新技术革命的重要标志。材料特别是新型材料的开发、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的地位来发展。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。

0.1 材料与社会文明发展

早在一百万年以前,人类开始使用石头工具而进入了历史上记载的旧石器时代。大约一万年以前,开始对石头进行加工,人类又进入了新石器时代。在新石器时代,人类还发明了用黏土做原料烧制陶器。那时的陶器不但用于器皿,而且也是装饰品,这对人类文明无疑是一大推进。在新石器时代,人类还发现了自然铜和天然金,但由于数量有限、分散细小,没有对人类社会产生明显影响。但人们在烧制陶器过程中,却发现了在还原下被还原的金属铜和锡,随后又发明了色泽鲜艳、能浇铸成型的青铜,由此人类进入了青铜器时代。中国使用青铜器至今约有3 000年的历史,其鼎盛时期是在商周时代,如河南安阳出土的833 kg的妇好青铜鼎、湖北随县(今随州市)的编钟、西安青铜车马都充分反映了当时冶金技术的高超水平。公元前14—前13世纪前,人类开始使用铁,3 000年前铁器的使用量超过了青铜器,人类又进入了铁器时代。中国古代春秋(公元前770—前476年)末期,生铁技术出现了较大的突破,如发明了退火法制造韧性铸铁及生铁炼钢技术,这对当时战国和秦汉农业、水利和军事的发展都起到了重要的作用。

综观材料的近代发展历程也可以看到,自19世纪中叶现代炼钢技术出现以后,金属材料的重要性急剧增加。一直到20世纪中叶,人工合成有机材料、陶瓷材料及先进复合材料迅速发展,极大地推动了科学技术的发展,使材料的应用更趋多样性和先进性。我们可以用几个具体的例子来说明材料在科技进步中的影响。图0-1示出了材料比强度随年代的变化。显然现代材料具有更高的强度同时还具有质轻的特征,其直接的先进意义能够明显地体现在设计飞机的设计与制造上。图0-2示出的是刀具材料切削速度随年代的变化。从工

绪论

材料一般是指人们用于制造有特定功能的装置、仪器、仪表、器件、构件、组件以及机械或其他产品所需要的那些物质。实际上,材料始终伴随着人类文明进步的发展,例如人类文明史已经按石器时代、青铜器时代、铁器时代来划分,这是以材料的先进性代表那个时代的生产能力、生活水平以及文明程度。现代的核和信息技术也与两个著名的化学元素铀元素和硅元素的开发研究有着密切的联系。20 世纪 70 年代人们把信息、材料和能源誉为当代文明的三大支柱。80 年代以高技术群为代表的新技术革命,又把新材料、信息技术和生物技术并列为新技术革命的重要标志。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的地位来发展。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。

0.1 材料与社会文明发展

早在一百万年以前,人类开始使用石头工具而进入了历史上记载的旧石器时代。大约一万年以前,开始对石头进行加工,人类又进入了新石器时代。在新石器时代,人类还发明了用黏土做原料烧制陶器。那时的陶器不但用于器皿,而且也是装饰品,这对人类文明无疑是一大推进。在新石器时代,人类还发现了自然铜和天然金,但由于数量有限、分散细小,没有对人类社会产生明显影响。但人们在烧制陶器过程中,却发现了在高温下被炭还原的金属铜和锡,随后又发明了色泽鲜艳、能浇铸成型的青铜,由此人类进入了青铜器时代。中国使用青铜器至今约有 5 000 年的历史,其鼎盛时期是在商周时代,如河南安阳出土的 833 kg 的后母戊鼎、湖北随县(今随州市)的编钟、西安青铜车马都充分反映了当时冶金技术的高超水平。公元前 14—前 13 世纪前,人类开始使用铁,3 000 年前铁器的使用量超过了青铜器,人类又进入了铁器时代。中国古代春秋(公元前 770—前 476 年)末期,生铁技术出现了较大的突破,如发明了退火法制造韧性铸铁及生铁炼钢技术,这对当时战国和秦汉农业、水利和军事的发展都起到了重要的作用。

综观材料的近代发展历程也可以看到,自 19 世纪中叶现代炼钢技术出现以后,金属材料的重要性急剧增加。一直到 20 世纪中叶,人工合成有机材料、陶瓷材料及先进复合材料迅速发展,极大地推动了科学技术的发展,使材料的应用更趋多样性和先进性。我们可以用几个具体的例子来说明材料在科技进步中的影响。图 0-1 示出了材料比强度随年代的变化。显然现代材料具有更高的强度同时还具有质轻的特征,其直接的先进意义能够明显地体现在现代飞机的设计与制造上。图 0-2 示出的是刀具材料切削速度随年代的变化。从工

具钢的使用到金刚石刀具的使用,切削速度几乎增长了100倍,其直接的影响是导致了加工效率的迅速提高和制造工艺的低成本化。图0-3显示的是集成电路自1958年问世以来的发展趋势,可以看出,到90年代中期,器件缩小为100万分之一,单价也下降到100万分之一,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。

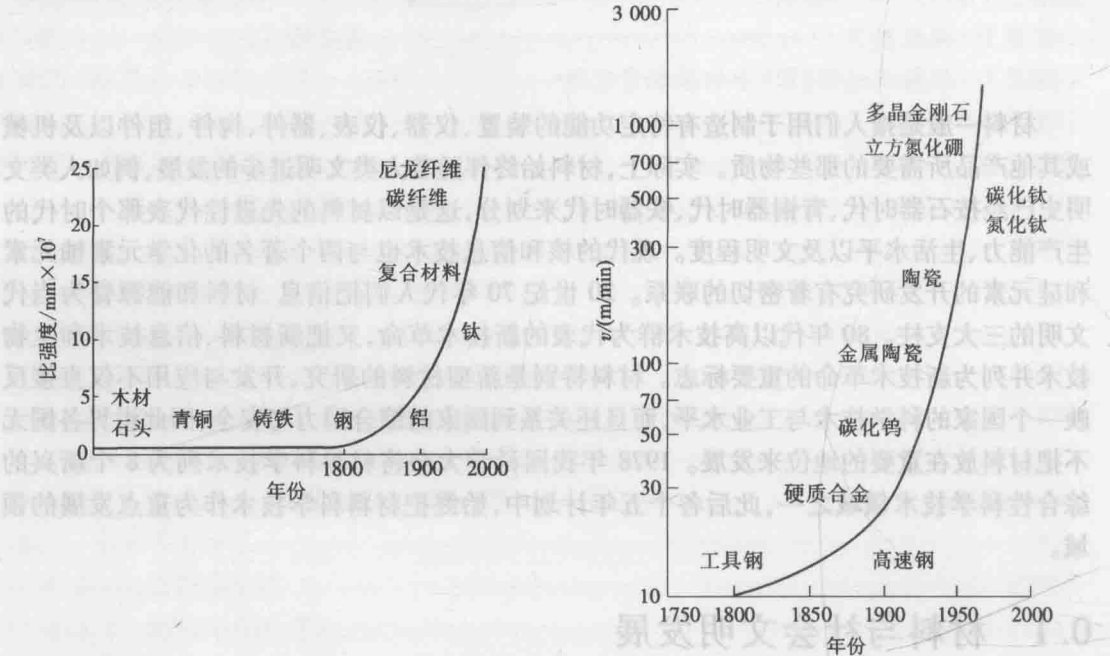


图 0-1 材料比强度的历史发展

图 0-2 刀具材料切削速度的历史发展

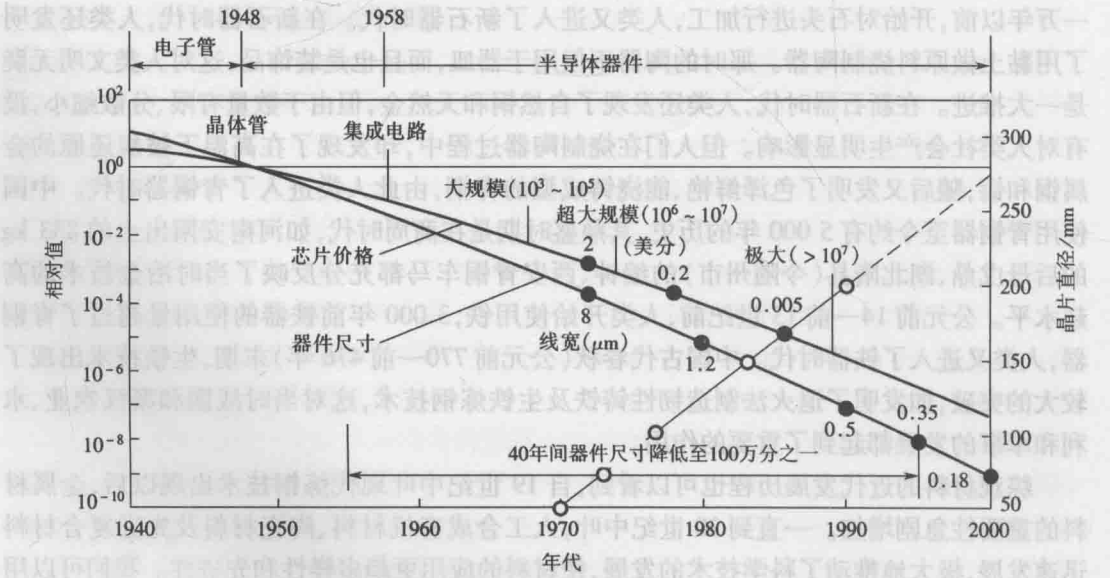


图 0-3 集成电路发展历程

人类物质文明的发展可以认为是人类利用材料资源和挖掘材料资源的历史。当今现代科学技术发展正推动着信息科学、生命科学和材料科学的发展,这将导致一系列高性能材料

的诞生,如信息功能材料中的光电子材料,非线性光学材料,光波导纤维、薄膜与器件等。人类对核能和太阳能等的开发利用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。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内燃机,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,将以先进信息技术、生物技术、能源技术及材料技术等四大学科为中心,通过其相互交叉和相互影响,为人类创造出前所未有的物质环境。同时,未来的材料将与自然具有很好的适应性、相容性和环境友好性。

0.2 材料科学的建立与内涵

“材料科学”的明确提出可追溯到 20 世纪 50 年代末。1957 年 10 月 4 日前苏联发射了第一颗重 80 kg 的人造卫星;11 月 3 日发射了第二颗重达 500 kg 的人造卫星。而美国于 1958 年 1 月 31 日发射的“探险者 1 号”人造卫星仅约 14 kg,重量比前苏联的卫星轻得多,反映了当时美国航天技术明显落后于前苏联。对此美国有关部门开展调查并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苏联,关键在先进材料的研究方面。于是 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。

事实上,材料科学与工程学科的出现是时代发展的需要,这主要归功于如下五个方面的奠基:①各类材料大规模应用奠定了材料科学学科建立的重要基础;②基础学科的发展为材料科学理论体系的形成打下了坚实的基础;③学科理论的不完善与创新以及固体材料理论的交叉融合日益突出;④各类材料的研究分析手段与生产设备颇具共同之处;⑤以应用为目的的材料设计打破了不同材料间的界限,其中复合材料就是典型的一大类型。

材料科学与工程的内涵十分丰富。无论是为制造某种产品而选择材料,确定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,都需要了解材料内部的结构及其固有的性能,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在使用过程中的行为,给予材料结构的正确描绘以及解释结构与性能之间的内在联系,以助于对材料的形成过程给予科学的控制。材料科学的内涵可以认为是由五大要素组成的,它们之间的关联可用一个多面体来描述(图 0-4),其中使用效能是指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,它直接和其他 5 个要素相连,表明它在材料科学中具有特殊的地位。

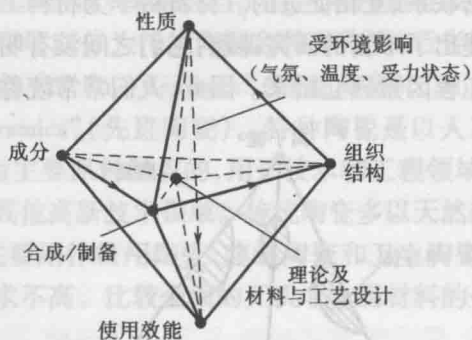


图 0-4 材料科学与工程的内涵

材料科学的核心内容是结构与性能的关联,认识物质结构是理解和控制材料性能的关键环节。组成材料的原子结构、电子绕核运动的情况对材料的性能都有重要影响,例如电子

结构会影响原子的键合,使材料表现出金属、非金属或聚合物的固有属性。结晶态材料在空间均具有规则的原子排列,特定格子构造的晶体结构会影响材料的物理性能,如石墨和金刚石都是由碳原子组成,但二者原子周期排列不同,导致强度、硬度及其他物理性能差别很大。同一种材料晶态与非晶态相比,性能差别也很大,如玻璃态的聚乙烯透明,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,在固体材料中存在的某些排列的不完整性,即结构缺陷,也对材料性能产生重要影响。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律外,还需要考虑其尺寸的效应。从聚集态的角度,低维材料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黑体,纳米金属铝的硬度为普通铝的 8 倍;纳米结构的陶瓷具有很高的韧性和超塑性。此外,有机纤维、光导纤维,金刚石薄膜、超导薄膜等都具有特殊的物理性能。

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。如组成材料的结构单元可以是原子、离子或分子等;质点的空间排列在很大程度上受限于组元间键结合的类型,如离子键、共价键、金属键或分子键等。组元在结构中也是处于不断的运动中,如电子运动、原子热运动等。此外,为了深入理解结构和有效控制性能,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,研究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最终性能的表现。

材料科学的核心问题是结构与性能的关系,这里科学是属于研究“为什么”的范畴。材料科学理论体系的建立,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、发挥材料的潜力以及发展新材料等提供理论基础;还能够提高可靠性、提高质量、降低成本和能耗、减少对环境的污染等。而材料工程是属于解决“怎样做”的范畴,其目的在于经济而又能为社会所接受地获取材料的结构、性能和形状。材料工程需要对材料进行 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。材料科学为材料工程提供了必要的理论依据,材料工程又为材料科学提出了丰富的研究课题,它们之间没有明显的界线,在解决实际问题时,很难将科学因素和工程因素独立出来。因此,人们常常统称为“材料科学与工程”。

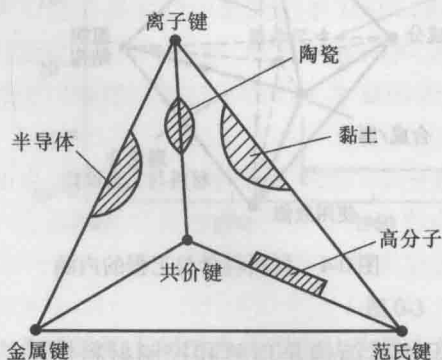


图 0-5 价键四面体

0.3 材料的基本分类与特征

目前世界范围已注册的材料有几十万种,由于其多样性,分类方法也就没有一个统一的标准,但图 0-5 所示的价键四面体却比较本质地反映了各类材料之间的区别。另外,从物理化学属性来分,可分为金属材料、无机非金属材料、高分子材料以及由不同类型材料组成的复合材料。从用途划分,又分为电子材料、航空航天材料、核材料、建

筑材料、能源材料、生物材料等。更常见的分类方法则是分为结构材料与功能材料,传统材料与新型材料。结构材料是以力学应用为主,同时对其他物理或化学性能也有一定的要求,如光泽、热导、抗辐照、抗腐蚀、抗氧化等。功能材料则主要是利用特有的物理、化学或生物功能等而形成的一类材料。传统材料是指那些已经成熟并在工业中已批量生产和大量应用的材料,如钢铁、水泥、塑料等。这类材料由于用量大、产值高、应用面广,所以又称为基础材料。新型材料(也称先进材料)是指那些正在发展且具有优异性能和应用前景的一类材料。下面仅就金属材料、无机非金属材料、高分子材料的基本属性做一简要概括。

1. 金属材料

金属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。有色金属是指铁以外的其他金属及其合金。这些金属有 80 余种,分为轻金属、重金属、贵金属、类金属和稀有金属五类。工程上最重要的有色金属是 Al、Cu、Zn、Sn、Pb、Mg、Ni、Ti 及其合金。有色金属具有独特的导电、导热性,同时相对密度小、化学性质稳定、耐热、耐腐蚀,它们在工程上占有重要地位。

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金属范性大,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。

2. 无机非金属材料

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称为“Ceramics”(直译为陶瓷)。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。无机非金属材料按照生产工艺和用途可以分为陶瓷、玻璃、水泥和耐火材料等。按照性能和应用可以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)。特种陶瓷是以人工合成化合物(氧化物、氮化物、碳化物、硼化物等)为主要原料制成的,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。传统陶瓷要求烧结后不变形、外观美,但对强度要求不高。比较全面的无机非金属材料的分类可见图 0-6。

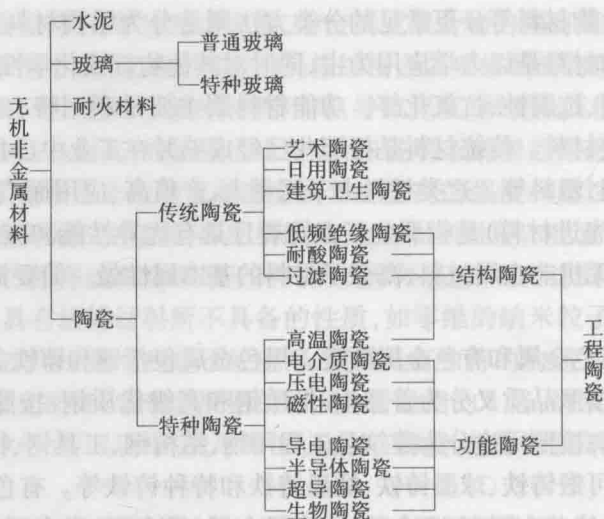


图 0-6 无机非金属材料的分类

无机非金属材料的基本性质：

- ①结合键主要是离子键、共价键以及二者的混合键；
- ②硬而脆，韧性低，抗压而不抗拉，强度高且对缺陷敏感；
- 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。

3. 高分子材料

高分子化合物主要是以 C、H、N、O 等元素为基础，由许多结构相同的小单位（链节）重复连接组成，分子聚合后分子量很大，并可在某一范围内变化。高分子材料的分类方法很多，根据来源可分为天然和人工合成两类；根据使用性质可分为塑料、橡胶、纤维、黏合剂、涂料等类；根据高分子化合物的主链结构可分为碳链、杂链、元素高聚物三类；根据热的性质又可分为热塑性、热固性及热稳定性三类；按照材料的用途又可分为高分子结构材料、高分子电绝缘材料、耐高温高分子材料、导电高分子材料、高分子建筑材料、生物医用高分子材料、高分子催化剂、包装材料等多种品种。

塑料是极重要的一类高分子材料，除树脂外，塑料还含有增塑剂、填料、防老剂、固化剂等各种添加剂。从使用的角度，塑料分为通用塑料和工程塑料。通用塑料是指产量大、用途广、价格低的一类塑料，主要包括六大品种：聚乙烯、聚氯乙烯、聚苯乙烯、聚丙烯、酚醛塑料和氨基塑料。工程塑料一般是指具有高强度、高模量并能在较高温度下长期使用的塑料，如拉伸强度大于 50 MPa，拉伸和弯曲模量超过 2 GPa，并能在一定荷载作用下于 100 ℃ 以上长期使用的塑料。常见的工程塑料有耐冲击的 ABS（丙烯腈—丁二烯—苯乙烯共聚体）、聚酰胺、聚甲醛、聚碳酸酯、聚砜、聚苯硫醚、聚酰亚胺和氟塑料等。

高分子材料的基本性质：

- ①结合键主要为共价键，有部分范德华键；
- ②分子量大，无明显的熔点，有玻璃化转变温度、黏流温度，并有热塑性和热固性两类；
- ③力学状态有玻璃态、高弹态和黏流态，强度较高；

④重量轻; ⑤具有良好的绝缘性;

⑥具有优越的化学稳定性;

⑦耐高温性较差。

⑧重量轻;

⑨具有良好的绝缘性;

⑩具有优越的化学稳定性;

⑪耐高温性较差。

⑫重量轻;

⑬具有良好的绝缘性;

⑭具有优越的化学稳定性;

⑮耐高温性较差。

⑯重量轻;

⑰具有良好的绝缘性;

⑱具有优越的化学稳定性;

⑲耐高温性较差。

⑳重量轻;

㉑具有良好的绝缘性;

㉒具有优越的化学稳定性;

㉓耐高温性较差。

㉔重量轻;

㉕具有良好的绝缘性;

㉖具有优越的化学稳定性;

㉗耐高温性较差。

㉘重量轻;

㉙具有良好的绝缘性;

㉚具有优越的化学稳定性;

㉛耐高温性较差。

㉜重量轻;

㉝具有良好的绝缘性;

㉞具有优越的化学稳定性;

㉟耐高温性较差。

㊱重量轻;

㊲具有良好的绝缘性;

㊳具有优越的化学稳定性;

㊴耐高温性较差。

㊵重量轻;

㊶具有良好的绝缘性;

㊷具有优越的化学稳定性;

㊸耐高温性较差。



图 1-1 s 、 p 和 d 原子轨道量子数主量子数

原子轨道是指原子中电子的运动状态。原子轨道由三个量子数决定：主量子数 n 、角量子数 l 和磁量子数 m 。主量子数 n 决定了轨道的大小和能量， $n=1, 2, 3, \dots$ 。角量子数 l 决定了轨道的形状， $l=0, 1, 2, \dots, n-1$ 。磁量子数 m 决定了轨道在空间中的取向， $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ 。原子轨道的总数为 $2n^2$ 。

原子轨道的命名通常根据主量子数 n 和角量子数 l 来命名。例如， $1s$ 轨道表示 $n=1, l=0$ ； $2p$ 轨道表示 $n=2, l=1$ ； $3d$ 轨道表示 $n=3, l=2$ 。原子轨道的总数为 $2n^2$ 。

原子轨道的分布具有对称性。对于 s 轨道，分布是球对称的；对于 p 轨道，分布是轴对称的；对于 d 轨道，分布是四叶形的。原子轨道的分布可以用波函数的平方来表示。

原子轨道的命名通常根据主量子数 n 和角量子数 l 来命名。例如， $1s$ 轨道表示 $n=1, l=0$ ； $2p$ 轨道表示 $n=2, l=1$ ； $3d$ 轨道表示 $n=3, l=2$ 。原子轨道的总数为 $2n^2$ 。