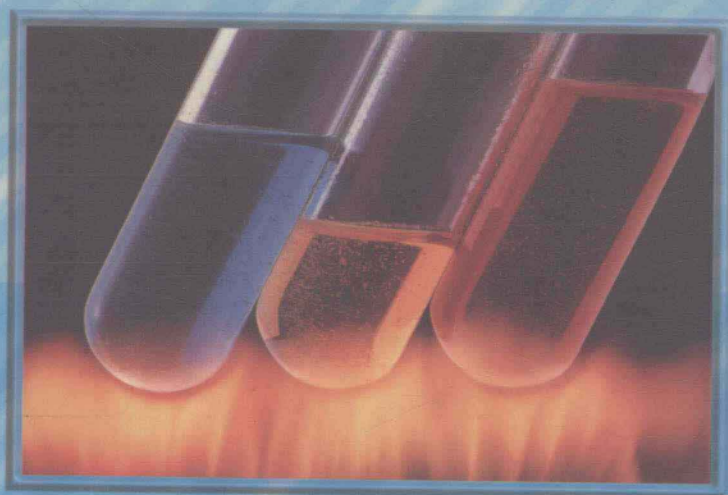


无机材料学基础

刘应亮 编著



暨南大学出版社

无机材料学基础

刘应亮 编著

暨南大学出版社

广东·广州

图书在版编目(CIP)数据

无机材料学基础/刘应亮编著. - 广州:暨南大学出版社, 1999.8

ISBN 7-81029-885-2

I. 无… II. 刘… III. 无机材料 IV. TB321

中国版本图书馆 CIP 数据核字(1999)第 60798 号

内容提要

本书主要从化学的角度介绍无机材料的基本原理及其应用。内容包括:绪论、固体材料结晶学、固体材料中的化学键、固体材料结构化学、相图和相变、无机材料缺陷化学、无机材料制备化学、无机材料化学物理性能和无机材料研究技术。本书将材料组成、结构和性能结合起来;并着重从化学的角度讨论无机材料科学中的问题;特别介绍了无机材料中的缺陷种类及其对材料性能的影响,对各种无机材料的制备方法有较详尽的描述;另外注意及时反映无机材料科学中的新成就、新进展。

本书可供应用化学、化学、化工、材料科学、冶金、物理等专业本科生、研究生作为教材或参考书,也可供有关专业教师和工程技术人员参考。

暨南大学出版社出版发行

(广州·石牌)

广东工业大学印刷厂印刷

新华书店经销

开本:787×1092 1/16 印张:22.875 字数:571 千

1999 年 8 月第 1 版 1999 年 8 月第 1 次印刷

印数:1-1000 册

定价:38.00 元

前 言

材料、信息和能源称为现代文明的三大支柱。材料是一切科学技术的物质基础,材料科学是当前科学研究的前沿。材料科学在每次产业革命中无不起到举足轻重的先导作用。从历史上看,它可以引起一次产业革命,也可以在一次产业革命中起到关键的核心作用。新型无机材料的发明、应用和开发往往是人类社会文明发展进程的里程碑。例如,焦炭和钢铁的生产开始了资本主义的工业革命,半导体材料的出现开辟了人类信息时代,近年来发现的高温超导材料、 C_{60} 材料及碳纳米管,掀起了一个又一个材料科学研究的高潮,并对固体物理、化学、生物及医学注入了新的活力,这些新材料的发现一方面可能引起新的产业革命,另一方面将使自然科学的不同学科之间甚至自然科学与人文科学之间更加走向交叉和融合。

鉴于无机材料科学在化学和材料科学中的重要作用,作为沟通化学与其他学科之间的应用化学,涉及到材料和与材料有关的问题日益增多,这就要求应用化学专业的学员对材料科学有更好的了解。据此,我们在应用化学专业开设《无机材料学》及《无机材料实验》课程已有多年,为了适应时代和材料科学技术的发展要求,最近我们把这门课程改为《材料化学与物理》和《无机新材料及应用》两门课程,在本科高年级学生和研究生中开设。根据我们长期在无机材料和金属功能材料方面开展的研究工作及教学资料的积累以及目前已出版的有关教材,编写了这本《无机材料学基础》,由作者编著的作为系列教材的《无机新材料及应用》也即将出版。本教材力求做到将组成、结构和性能结合起来,将化学与材料科学结合起来,将基础与应用结合起来,以适应应用化学专业的特点和材料科学发展的趋势。

在本书的编写过程中,得到了马敏庄教授和冯德雄教授的大力支持,马敏庄教授还亲自编写了第四章,并提供了一些宝贵资料;在文字编辑、图表加工和校对修订过程中,本科生陈文新、雷炳富,研究生唐晓鸣付出了艰辛的劳动;本书的编写还得到郭书好教授的关切与鼓励;另外,书中引用了一些著作者的资料。

值本书出版之际,谨对上述诸位同志一并致以衷心的感谢。

限于编者水平,及时间之仓促,缺点和错漏在所难免,敬请批评指正。

编 者

1999年8月于暨南大学

目 录

绪论	(1)
第1章 固体材料结晶学基础	(8)
1.1 固体物质的分类	(8)
1.2 晶体结构和点阵	(9)
1.2.1 晶体结构和点阵的关系	(9)
1.2.2 晶胞、晶系和空间点阵型式	(11)
1.2.3 点阵几何元素的表示方法	(12)
1.3 晶体的对称性	(19)
1.3.1 宏观对称操作和点群	(20)
1.3.2 微观对称操作和空间群	(24)
第2章 固体材料中的化学键	(28)
2.1 固体的化学键类型和特性	(28)
2.2 离子键	(29)
2.2.1 离子键的一般概述	(29)
2.2.2 离子晶格能	(30)
2.3 共价键	(38)
2.3.1 价键理论	(38)
2.3.2 分子轨道理论	(41)
2.4 金属键	(43)
2.4.1 “自由电子”模型	(43)
2.4.2 固体能带模型	(44)
2.5 分子之间的作用力	(45)
2.5.1 范德华力	(46)
2.5.2 氢键	(48)
2.6 键型变异和中间型键	(49)
2.7 化学键键参数	(51)
2.7.1 键能、键长和键角	(51)
2.7.2 化学键中的离子、原子半径	(54)
2.7.3 电负性	(57)
第3章 固体材料结构化学	(59)
3.1 晶体结构基本规则	(59)
3.1.1 球体紧密堆积原理	(59)
3.1.2 配位多面体规则	(63)
3.1.3 哥希密德结晶化学定律	(65)
3.1.4 鲍林规则	(65)
3.1.5 晶体场理论	(67)
3.2 常见固体材料晶体结构	(72)

3.2.1 单质材料结构	(72)
3.2.2 二元化合物材料结构	(81)
3.2.3 多元化合物材料结构	(88)
3.3 非晶态固体结构	(95)
3.3.1 非晶态固体结构特性	(96)
3.3.2 非晶态材料的性能和应用	(98)
3.3.3 非晶态材料的稳定性	(100)
3.4 多晶材料显微结构	(101)
3.4.1 陶瓷中的玻璃相和气孔	(101)
3.4.2 晶粒	(102)
3.4.3 晶界	(103)
3.5 晶体结构与材料性能的关系	(104)
3.5.1 固体离子导体结构与性能	(104)
3.5.2 沸石分子筛的结构与性能	(106)
3.5.3 碳纳米管结构与性能	(111)
第4章 相图和相变	(113)
4.1 相图和相律	(113)
4.2 二元体系状态图	(114)
4.2.1 二元低共熔类型	(114)
4.2.2 固溶体类型	(115)
4.2.3 生成化合物的二元体系	(118)
4.2.4 组分有多晶转变及固态下有变化的二元相图	(119)
4.3 三元体系相图	(123)
4.3.1 三元低共熔类型投影图	(123)
4.3.2 熔体冷却过程	(123)
4.3.3 有化合物生成的三元体系	(125)
4.4 相图实例及应用	(127)
4.4.1 $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{SiO}_2$ 系相图	(127)
4.4.2 $\text{MgO} - \text{Al}_2\text{O}_3$ 系统相图	(128)
4.4.3 $\text{CeCl}_3 - \text{KCl}$ 熔盐体系	(128)
4.4.4 $\text{NaNbO}_3 - \text{SrNb}_2\text{O}_6$ 体系相图	(128)
4.4.5 $\text{Li}_2\text{O} - \text{Nb}_2\text{O}_5$ 系相图	(129)
4.4.6 $\text{Fe} - \text{C}$ 体系	(130)
4.4.7 $\text{Ti} - \text{Ni}$ 系相图	(131)
4.4.8 $\text{Mg} - \text{Ni}$ 系相图	(131)
4.4.9 $\text{La} - \text{Ni}$ 系相图	(131)
4.5 相变	(132)
4.5.1 相变的热力学分类	(132)
4.5.2 相变种类	(133)
第5章 无机材料缺陷化学	(144)
5.1 传统化学理论的局限性	(144)

5.2 晶体中的缺陷	(145)
5.2.1 缺陷的分类	(145)
5.2.2 缺陷化学基础	(150)
5.2.3 材料缺陷的化学处理方法	(152)
5.2.4 材料缺陷的研究和测试方法	(154)
5.3 非化学计量化合物	(157)
5.4 固溶体	(161)
5.4.1 固溶体的概念	(162)
5.4.2 固溶体的分类	(162)
5.4.3 置换固溶体	(164)
5.4.4 间隙固溶体	(172)
5.4.5 固溶体的性质和应用	(172)
5.4.6 固溶体的研究方法	(176)
5.5 有序-无序转变	(178)
5.6 缺陷对材料性能的影响	(181)
5.6.1 缺陷对材料电学性能的影响	(182)
5.6.2 缺陷对材料光学性质的影响	(185)
 第6章 无机材料制备化学	 (189)
6.1 固相反应	(189)
6.1.1 固相反应概述	(189)
6.1.2 无机化合物的分解反应	(192)
6.1.3 无机化合物的化合和置换反应	(196)
6.1.4 室温固相反应	(199)
6.1.5 微波固相反应	(201)
6.1.6 熔盐合成法	(205)
6.1.7 离子交换合成法	(206)
6.2 烧结反应	(208)
6.2.1 烧结的概念	(209)
6.2.2 晶粒生长与二次再结晶	(210)
6.2.3 烧结过程的推动力	(212)
6.2.4 影响烧结的因素	(213)
6.2.5 几种烧结方法简介	(216)
6.3 插入反应	(219)
6.4 粉体制备技术	(221)
6.4.1 固相法	(222)
6.4.2 液相法	(223)
6.4.3 气相法	(237)
6.4.4 其他方法	(238)
6.5 单晶生长技术	(240)
6.5.1 气相生长	(241)
6.5.2 溶液生长	(243)
6.5.3 熔体生长	(244)

6.5.4 固相生长	(245)
6.6 薄膜制备技术	(245)
6.6.1 化学和电化学方法	(245)
6.6.2 化学气相沉积	(246)
6.6.3 物理气相沉积	(249)
6.6.4 等离子体化学气相沉积	(250)
6.7 纤维制备技术	(251)
6.7.1 玻璃纤维	(252)
6.7.2 碳纤维	(253)
6.7.3 特种陶瓷纤维	(256)
6.8 复合材料制备技术	(263)
6.9 非晶体材料制备技术	(264)
6.10 表面处理技术	(267)
第7章 无机材料化学物理性能	(270)
7.1 无机材料的化学性能	(270)
7.2 无机材料的物理性能	(271)
7.2.1 无机材料的力学性能	(271)
7.2.2 无机材料的热学性能	(276)
7.2.3 无机材料的电学性能	(282)
7.2.4 无机材料的磁学性能	(297)
7.2.5 无机材料的光学性能	(303)
7.3 无机材料的功能转换	(311)
7.3.1 压磁效应与压磁材料	(311)
7.3.2 磁光效应与磁光材料	(312)
7.3.3 电光效应和电光材料	(312)
7.3.4 声光效应和声光材料	(313)
7.3.5 铁磁铁电材料	(313)
第8章 无机材料研究技术	(314)
8.1 物质的提纯	(314)
8.2 热分析技术	(315)
8.2.1 热分析方法分类	(315)
8.2.2 差热分析	(317)
8.2.3 差示扫描量热法	(323)
8.2.4 热重法	(327)
8.3 电子显微分析	(330)
8.3.1 电子与固体的相互作用	(330)
8.3.2 透射电子显微分析	(332)
8.3.3 扫描电子显微分析	(334)
8.3.4 电子探针X射线显微分析	(336)
8.3.5 离子探针显微分析	(337)
8.4 X射线衍射	(338)

8.4.1 基本原理	(338)
8.4.2 X 射线衍射仪的基本构造	(338)
8.4.3 定性相分析	(339)
8.4.4 定量相分析	(340)
8.5 X 射线光电子能谱、俄歇电子能谱与低能电子衍射	(342)
8.5.1 X 光电子能谱	(342)
8.5.2 俄歇电子能谱	(343)
8.5.3 低能电子衍射	(344)
8.6 波谱分析简介	(345)
参考文献	(348)

绪 论

一、材料发展历史

材料一直是人类进化的重要里程碑。如历史上的石器时代、青铜器时代、铁器时代都是以材料作为时代的主要标志的。

石器的使用历史最长,达二、三百万年之久,四五十万年前的北京猿人群居洞穴,狩猎使用的工具是石器和骨器,制作粗糙,当时生产力低下,生活艰难,甚至彼此弱肉强食。在 18000 年前山顶洞人洞穴里发现了穿孔的石珠和兽牙,说明他们掌握了磨制和钻乳技术并能用骨针把兽皮缝成衣服。然而,从材料角度看,几十万年中没有什么突破。

陶瓷的出现是材料史上的第一次飞跃,在西安发现的六千多年前原始社会半坡遗址中,出土的文物有各种式样的陶器。

在 3500 年前的商代遗址中,出土了大量的青铜器,包括青铜乐器和青铜兵器,此外还有镀锡的铜器和锡、铅、金器。

2700~2400 年前的春秋时代,我国人民已掌握了冶铁技术,比欧洲早 1800 年左右,其后 200 年间的战国时代,铸铁技术已广泛应用,铁模铸造的农具,白口铁,展性铸铁,麻口铁等品种相继出现,当时亦已掌握了初步炼铜技术。

闻名世界的越王勾践青铜剑就是春秋战国时代铸成,这把世界上最古老的青铜宝剑,在 1965 年出土时已有二千多年历史,据说仍锋利无比,经鉴定,这口剑是由不同成分的锡青铜铸造,剑脊和剑刃含锡量分别为 10% 和 20%,还含有少量的铝、镍和硫,这说明我国古代的冶金师已掌握了高度的冶炼技巧。

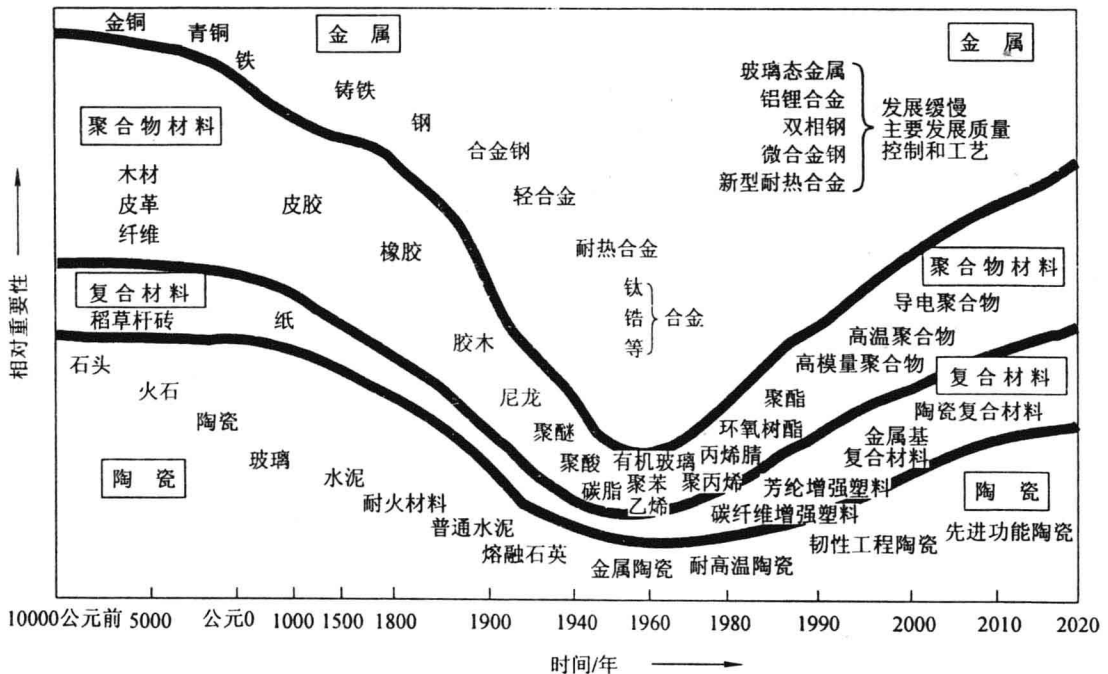


图 1 人类使用材料的发展史

从人类历史的足迹看,原始的农业、手工业和文字是青铜器时代的特征,而发达的农业和大规模的工业只能出现在铁器时代。

公元前 1200 年左右,人类进入铁器时代,开始使用的是铸铁,尔后钢铁工业迅速发展,成为 18 世纪产业革命的重要内容和物质基础。人类社会进入 20 世纪以后,科学技术突飞猛进,作为科学技术基础的新材料研制更是异常活跃,出现了称之为高分子材料时代、半导体时代、先进陶瓷时代和复合材料时代等种种提法。未来的人类社会进入的将是智能材料时代。图 1 表示人类使用材料的发展历史。

二、材料的分类和材料科学体系

现代科学和工业中使用的材料品种繁多,70 年代登记的材料达 25 万种,80 年代已超过 30 万种,要把它们严格分类很困难,可以从不同的角度进行分类,如表 1 和表 2。

表 1 材料分类

学 科 状 态				物 理 性 能				功 能 性 用				途							
复合材料	金属材料	有机非金属材料	有机高分子材料	单晶材料	多晶材料	非晶态材料	复合材料	高强度材料	超硬材料	压电材料	铁电材料	光电材料	热电材料	电压材料	铁电材料	研磨材料	耐磨材料	耐火材料	结构材料
								导电材料	声光材料	电光材料	激光材料	磁光材料	声光材料	电光材料	激光材料	电子材料	电工材料	感光材料	光学材料

通常是按化学分类即把材料分为金属、无机、有机三大类。近年来出现材料三大领域的提法,指金属材料、有机高分子材料和无机非金属材料,但还应该把一类重要的新材料即复合材料包括在内。

表 2 从化学组成的角度列出了四大材料体系所包含的一些具体内容。

材料科学是在 60 年代发展起来的一门新兴的科学领域。材料科学的目的是根据化学结构和组成来说明材料具有的各种性质,从而开发具有新性质和功能的新型材料。材料科学的内容,一是从化学角度出发,研究材料的化学组成、键性、结构和性能的关系;二是从物理学角度出发,阐述材料的组成原子和它们的运动状态及与各种物性之间的关系;三是在此基础上为材料的合成和应用提供科学依据,设计具有特定功能的新材料。

材料科学是一门多学科的综合应用基础科学,它不仅有化学与物理学的科学性问题,还有制备材料的工艺方法和材料的性能测试以及材料的应用等技术性问题。材料科学的体系如表 3 所示。

材料科学体系的构成还可以用一个四面体或六面体来表达,如图 2 所示。这样的多面体模型可以简明地表达材料科学与工程地构成要素及其相互关系,较好地描述了材料科学技术作为一个体系的内涵与特点。

表 2
四大材料体系

金属材料	黑色金属	生铁(灰口铸铁、球墨铸铁、可锻铸铁等) 碳钢(低碳钢、中碳钢、高碳钢、超高碳钢等) 合金钢(合金工具钢、不锈钢、耐热钢及合金等)
	有色金属	轻金属(铝、镁等) 重金属(汞、铜、铅、锌、镍、钴、锡、镉、铋、锑等) 贵金属(金、银、铂、铑、钯、铱、钌、铇等) 稀有金属(锂、铍、钛、钨、钼、钒、铌、钽、铷、铯、锶、锆、铪、镓、铟、铊、锗、稀土金属) 半金属(硒、碲、砷、硅等)
	有机高分子材料	合成纤维:锦纶(聚酰胺),晴纶(聚丙烯腈),涤纶(聚酯),维纶(聚乙烯醇),丙纶(聚丙烯),氯纶(聚氯乙烯),芳纶(芳香族聚酰胺) 合成橡胶:丁苯、氯丁、丁基、丁腈、聚胺酯、聚硫、氟橡胶、硅橡胶 合成塑料:聚乙烯、聚丙烯、聚氯乙烯、聚苯乙烯、酚醛、氨基、聚碳酸酯、尼龙、聚甲醛、ABS、聚砜、聚苯醚等 合成胶粘剂和涂料:聚氨酯、环氧、环氧—丁腈、酚醛—缩醛等 部分液晶:近晶型、向外型、胆留型
	无机非金属材料	陶瓷:传统陶瓷 玻璃:普通玻璃、石英玻璃、硼玻璃、铅玻璃等 水泥 耐火材料:氧化铝、氧化硅、氧化镁 精陶瓷:氧化物、碳化物、氮化物、硅化物等
复合材料	非金属基复合材料	玻璃纤维/树脂,碳纤维/树脂,硼纤维/树脂等
	金属基复合材料	硼/铝、碳/铝、高熔点金属/高温合金
	树脂基复合材料	树脂基复合材料
复合材料	碳基复合材料	碳/碳复合材料
	功能复合材料	功能复合材料

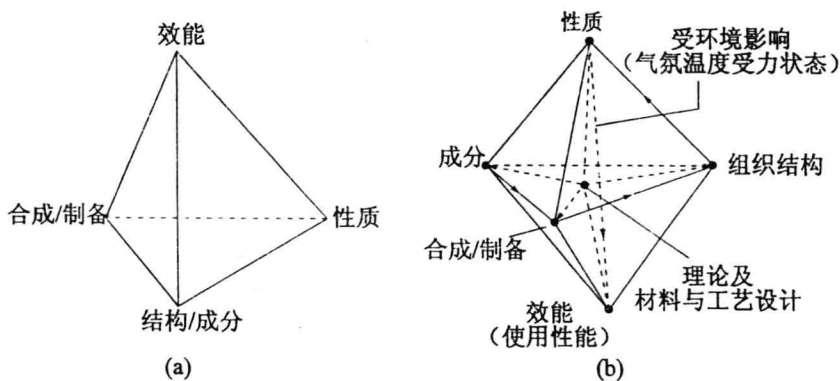


图 2 材料科学构成要素及相互关系

表 3 材料科学体系

问题	科学性问题			技术性问题		
过程	现象描述	物质合成	物质表征	材料制备	物性测试	应用
内容	宏观现象 微观现象 迁移现象	反应过程 相关系键	组成结构 缺陷	单晶体 多晶体 非晶体 复合物	本征物性 效应物性 缺陷物性	后处理 技术测试 应用试验
学科与技术	结晶学 物理学 晶体物理 固体物理 核物理	化学 热力学 物理化学 结晶学 量子化学	表面观察 显微观察 成分分析 结构分析	晶体生长 烧结 熔融 聚合 分离 加工与处理	力学 光学 热学 电磁学 声学 化学	加工成形 器件工艺 材料力学 化学 模拟

三、无机材料

无机材料是无机非金属材料的简称。传统的无机材料主要是指由硅酸盐化合物为主要成分制成的材料,包括日用陶瓷、普通工业用陶瓷、一般玻璃、水泥、耐火材料等。所谓先进无机材料或新型无机材料,则是用氧化物、氮化物、硅化物以至各种无机非金属化合物经特殊的先进工艺制成的材料。从结晶程度上来区分,可以是多晶体的陶瓷,也可以是单晶体,还可以是无定形体或玻璃体;从形态上来说,不仅包括块体材料,还有纤维材料和薄膜材料;从应用上看,不仅深入到人们日常生活和各个工业领域,而且与高技术的发展紧紧地联系在一起。

新型无机材料包括先进陶瓷(或精细陶瓷)、先进玻璃材料、人工晶体和无机涂层等。它们在高技术领域和日常生活中得到广泛应用。

陶瓷的发展经历了由传统陶瓷到先进陶瓷再到现在的纳米陶瓷三个阶段。目前陶瓷研究的发展趋势一是纳米陶瓷,二是多相复合陶瓷,三是陶瓷材料的设计。先进陶瓷从性能上可分为结构陶瓷和功能陶瓷两大类。结构陶瓷是以力学机械性能为主的一大类陶瓷。特别适用高温下应用的则称之为高温结构陶瓷。如氮化硅、氮化铝、氮化硼、碳化硅、碳化硼、氧化锆等就是一类新型高温结构陶瓷。功能陶瓷则主要利用材料的电、磁、光、声、热和力等性能及其耦合效应,如铁电、压电陶瓷、正(或负)温度系数陶瓷(PTC 或 NTC)、敏感陶瓷、快离子导体陶瓷等等,以及主要从电性能上考虑有绝缘陶瓷、介电陶瓷、半导体陶瓷、导电陶瓷以及高温超导陶瓷。此外,由于某些陶瓷材料的强度、耐磨性,特别是对生物体的相容性和活性,使它们非常适

合作人工牙齿、牙根、人工骨等而被称为生物陶瓷。

玻璃材料的发展经历了类似于陶瓷材料发展的历程,已经从体材料发展到纤维材料和薄膜材料。除人们熟知的玻璃纤维增强塑料——玻璃钢外,以超纯石英为主的光学纤维的研究成功,使光纤通讯成为现实。非晶态薄膜材料独特的记忆、存储功能在光电子领域中受到人们的重视。利用相变的可逆性,使它成为可擦除重写的光盘材料。

以微晶玻璃为基体,用碳纤维或其他无机纤维或晶须作为补强剂,形成了一类纤维或晶须补强玻璃复合材料。利用微晶玻璃较高的强度和断裂韧性,可以在较高温度下用作结构材料。又由于微晶玻璃热膨胀系数的可调节特性,为这类复合材料的研究,无论从学科上和实际应用上提供了广阔的前景。

人工晶体具有压电、热释电、电光、声光、受激辐射、闪烁效应以及非线性光学效应和光折变效应等,使它们在激光技术、光电子技术、电子技术、超导技术、高能技术以及医疗技术上都有着极其广泛的应用,即使在日常生活中,如电视机、手表、音响设备中都有人工晶体的功劳。

无机涂层是指在某种底材的表面加涂一层物质以抵御外部环境对底材的伤害从而提高它的使用效能或延长它的使用寿命,并具有隔热或有新的光、电等性能的一类材料。无机涂层包括金属氧化物、金属间化合物、难熔化合物等无机化合物及金属的粉末等。按组成可分为玻璃质涂层、陶瓷涂层、金属陶瓷涂层、金属间化合物涂层、无机胶粘剂粘结涂层以及复合涂层。按工艺可分为高温熔烧涂层、高温喷涂涂层、热扩散涂层、低温烘烤涂层以及热解沉积涂层等。无机涂层在航空航天、化工、冶金、机械等领域得到广泛应用。

四、无机材料的发展趋势

材料科学正向着高性能化、高功能化、仿生化、智能化、轻量化、复合化、低维化、极限化、设计化和综合化方向发展。就无机材料来说下面几个方面是未来极有发展前途的方向。

1. 信息功能材料

这是信息行业(包括计算机、通讯和控制)信息获取、传输、存储、显示和处理等的材料基础。包括:

(1) 集成电路材料

关键在于半导体材料和封装材料与技术。

(2) 记录材料

记录材料多种多样,分为磁、磁光与光记录材料几大类。磁记录材料发展最早,目前仍占重要位置,种类也很多。磁光存储密度高、寿命长、保真好,并可擦除,发展很快,光存储的密度极高,而且价格低廉,但不能代替磁存储而只能是补充。

(3) 敏感材料与敏感元件

计算机用于控制主要靠敏感元件,它决定着控制的精度。很多敏感材料属于氧化物陶瓷,金属敏感材料中最有名的是形状记忆合金。

(4) 光导纤维

光导纤维的特点在于容量大、保密性强、不受干扰、节约资源、中继线网络距离长,是信息高速公路的关键技术。

2. 结构新材料

正向高比强度、高比刚度、耐高温、耐腐蚀、耐磨损方向发展。

(1) 金属材料

金属材料仍在不断发展。新金属材料的改进重点在于开发新的制备工艺,如快冷技术或控制微量元素含量以减少偏析,成为均质合金。

(2) 工程陶瓷

工程陶瓷有广阔前景。工程陶瓷分功能陶瓷与结构陶瓷,工程陶瓷的应用范围很广,除了集成电路的封装及其他功能材料以外,用作刀具和模具材料,已经成熟。

3. 复合材料

天然生物体绝大部分以复合形式存在,如动物皮层、牙齿、竹和木材等,可见复合材料是最合理的结构形式。先进复合材料包括:

(1) 树脂基复合材料

(2) 金属基复合材料

(3) 陶瓷基复合材料

(4) 碳/碳复合材料

(5) 表面涂层与表面改性

4. 能源材料

这是一个非常广阔的领域,它包括:

(1) 新能源材料

如快中子增殖堆、燃煤磁流体发电、受控热核聚变反应堆、太阳能的利用、风能、潮汐、地热和海水温差能源等。

(2) 节能材料

节能材料多种多样,如保温材料、建筑材料等不胜枚举。如金属玻璃、超导材料、高性能磁性材料、分离膜等。

(3) 储能材料与燃料电池

储能材料例如高密度蓄电池和储氢材料。储氢材料除了作为镍氢电池的电极以外,也可作为未来燃料氢的储存载体。

电也可通过电化学对燃料的氧化而产生,这称为燃料电池。

5. 生物材料

随着人类文明的进步,人造生物材料愈来愈重要,人造生物材料包括三种类型:生物医用材料、仿生材料和生物体系模拟材料。

6. 环境材料

所谓环境材料就是指与环境相适应的材料。首先是节约资源和能源,因为地球资源日益枯竭;其次是减少污染、减少温室效应与臭氧层的破坏;第三是容易回收和再利用。

7. 纳米材料

当物质颗粒小到纳米量级时,在催化、吸光、医药、磁性等方面出现很多特性,利用这些特性可有很多用途。

8. 智能材料

智能材料就是能感知环境的变化并作出相应反应的材料,如压电陶瓷 $[(\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3)]$ 和形状记忆合金(NiTi)。反应的信号通过传输系统到执行系统(如驱动器、显示或报警),进而对其进行控制,从而形成智能系统。这种智能系统已得到广泛应用,如卫星太阳能帆板、机翼

的调整,以及桥梁和高层建筑都可通过智能系统进行控制,以减少重量,提高可靠性,减少灾害。

9. 材料设计

随着材料研究的深入与计算机的发展,可以通过计算机模拟来预测材料的结构、性能及其相互关系,从而达到优化材料设计的目的。如从量子 and 原子尺度出发来预测各种物性,从宏观热力学角度出发划出相图,甚至与制造工艺相结合,得出最后产品的使用性能。因此,形成了一门“计算机材料科学”。当然,计算机材料科学必须与实验相配合,否则,难以达到实用的目的。

作为即将跨入 21 世纪的人类社会,面临着人口、粮食、资源、能源与环境的巨大压力和危机,材料和材料科学同在 20 世纪里一样,必将在新的 21 世纪发挥巨大作用。可以预料的是,21 世纪将是材料的世纪。目前,高新科技发展极其迅速,我国国民经济也在稳步高速地发展,各个科技领域以及工农业、环境保护、医疗保健等各个领域对新材料的需求十分迫切,需要众多的研究和开发新材料的科技人才,愿我们各有关的科技工作者,共同努力,为我国的材料科学技术做出应有的贡献。

第 1 章 固体材料结晶学基础

1.1 固体物质的分类

固体材料占了材料中的相当比例。固体物质可从不同的角度进行分类。

1. 从固体的化学组成不同来划分为无机、有机、金属三大类。

2. 按固体中质点(原子、分子、离子)的结合力的本质不同,可分为离子晶体、原子晶体、金属晶体、分子晶体及氢键晶体。

3. 按物质的电导率大小,可将固体物质分为超导体(完全导电性)、导体(电导率 σ 为 $10 - 10^5 \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$)、半导体(σ 为 $10^{-5} - 10^2 \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$)和绝缘体($\sigma < 10^{-12} \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$)。

4. 按固体物质的形状或形态可分为块体、粉体、纤维、薄膜。

5. 按固体中质点(原子、分子、离子)排列的有序程度或几何形状分为晶体和非晶体。

晶体具有一定的几何形状,是原子或离子以三维结构周期性排列所构成的固体。非晶体也叫无定形体,不具有的几何形状,是由不呈周期性的原子或离子所形成的凝聚体。

与非晶体相比较,晶体所具有的通性为:

(1) 宏观上各个部位性质的均匀性;

(2) 物化性能的各向异性;

(3) 自发形成规则几何外形的自限性。晶体在生长过程中自发形成晶面,晶面相交成为晶棱,晶棱会聚成为顶点,从而出现具有多面体外形的特点。晶体在理想环境中生长应长成凸多面体,凸多面体的晶面数(F),晶棱数(E)和顶点数(V)相互间的关系符合下面公式: $F + V = E + 2$ 。

(4) 晶体的对称性——晶体内部结构和理想外形都具有特定的对称性;

(5) 晶体的衍射效应——周期性排列的晶体相当于三维光栅,能使波长相当的 X 射线、电子流和中子流产生衍射效应,成为了解晶体内部结构的重要实验方法。非晶体没有周期性结构,只能产生散射效应,得不到衍射图象;

(6) 晶体有固定的熔点,而非晶体没有固定的熔点。

晶体又分为单晶和多晶。单晶是由一个晶核生长而成的晶体,其特点是其内部各处的晶体学取向可保持一致性,但其外形既可以是规则的多面体,也可以是无规则的任意形状。单晶可显示晶体所固有的各向异性特征。多晶是由两个以上的同种或异种单晶组成的结晶物质,其中各单晶是通过晶界而结合在一起的,各单晶的晶体学取向大多具有任意性,但在特殊条件下,也可具有择优取向。

非晶体也称无定形体或玻璃体,这类固体中的原子、分子及其集合体的点阵排列均没有周期性,是所谓“近程有序,远程无序”结构。应用化学气相沉积(包括等离子体、激光及电离气相沉积等方法)、物理气相沉积(真空蒸发和溅射)、离子注入、冲击波、中子或激光照射等方法获得点阵排列呈远程无序的结构态物质均称为非晶态物质。它们既包括氧化物和非氧化物(硫属化合物及氟化物等)玻璃,还包括非晶态高聚物、干凝胶、非晶态半导体、非晶态金属或合金、