

主要参考书

《无机材料科学基础》

陆佩文主编，武汉工业大学出版社

《无机材料科学基础》

曾燕伟主编，武汉理工大学出版社

第一章 无机材料的化学键与电子结构

1.1 离子键与离子晶体

离子键特征及离子晶体一般特性：

熔点高、硬度大、质脆、延展性差、熔融状态可导电

1.2 共价键与分子轨道理论

熔点高、强度高、硬度高、导电性能差 P_8

化学键是决定材料结构与性能的最基本因素

第二章 晶体结构及常见晶体结构类型

2.1 晶体的周期结构

2.2 晶体的宏观对称性

2.3 点阵结构的微观对称性

2.4 常见的晶体结构

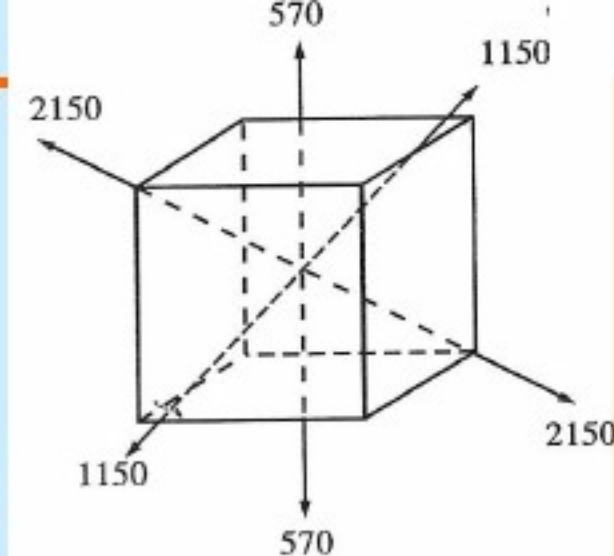
1、晶体的基本特性

质点在**三维**空间成**周期性重复**排列

• **各向异性** 同一晶体在不同方向上的性质差异

anisotropy

抗拉强度

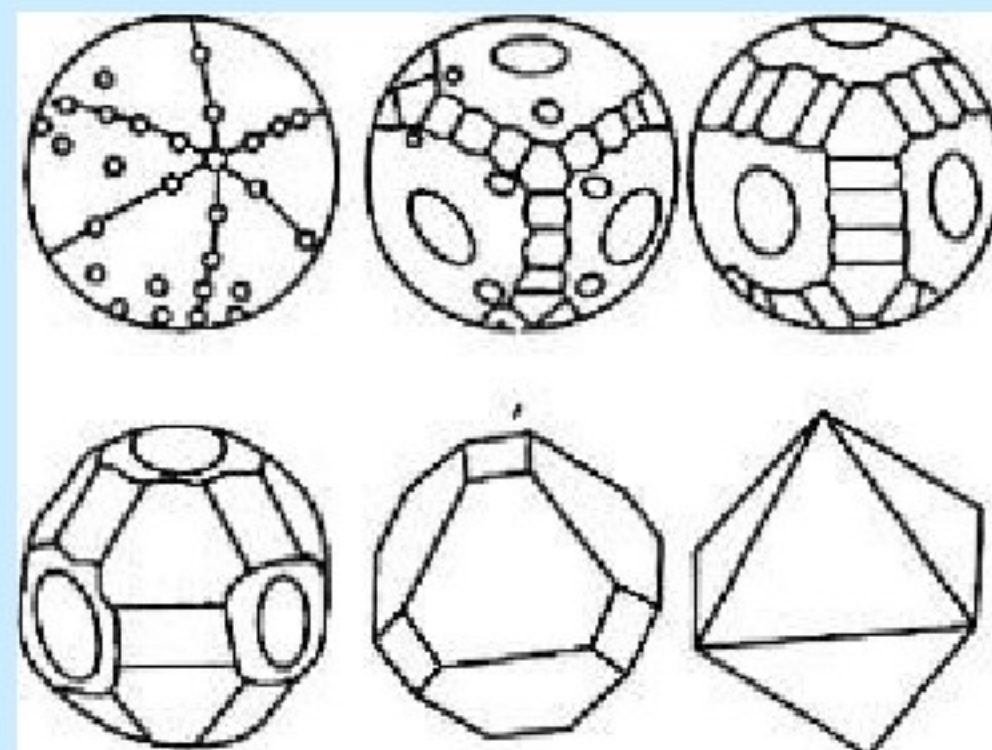


NaCl 晶体的力学性质
(单位: g/mm^2)

• **自范性** 具有自发形成封闭的多面体的性质



• **宏观均匀性** 晶体中任意两个形状、大小、**取向**都相同的微观足够大，宏观足够小的体积元，性质相同。



饱和溶液中球形明矾晶种的生长

• **对称性**

结构基元: 周期重复的最小单元。

2、点阵、格子、元胞与复胞 P_{16-17}

3、晶面(Miller)指数、晶向指数的含义与计算

4、对称: 物体中的相同部分作有规律的重复

宏观对称要素: 对称/反映面

对称中心

对称性 \leftrightarrow **操作不变性** P_{20}

旋转轴 n

(惯用符号: L^1 、 L^2 、 L^3 、 L^4 、 L^6 、**C**、P)

旋转反轴 4次倒转轴不能被其他的对称要素及其组合取代 P_{23}

对称操作: 使对称图形中相同部分重复的操作

对称要素的组合必须满足晶体的整体对称要求, 不是无限的

5、对称型 (点群)



晶体形态中，全部对称要素的组合，称为该晶体形态的**对称型**或**点群**。

一般来说，当强调对称要素时称对称型，强调对称操作时称点群。

为什么叫点群？ 因为对称型中所有对称操作可构成一个群，符合数学中群的概念，并且在操作时有一点不动，所以称为点群。

根据晶体中可能存在的对称要素及其组合规律，推导出**宏观晶体**中可能出现的**对称型**（点群）是非常有限的，仅有**32个**。

6、空间点阵及 14种布拉维格子（P、I、F、C格子）

7、晶体及晶族分类、晶胞参数 P_{25}

8、微观对称要素的特征、空间群的概念（230种）

在微观对称操作中都包含有平移动作

9、球体紧密堆积原理（六方密堆、立方密堆）

10、决定晶体结构的因素：组成、质点大小、极化性质

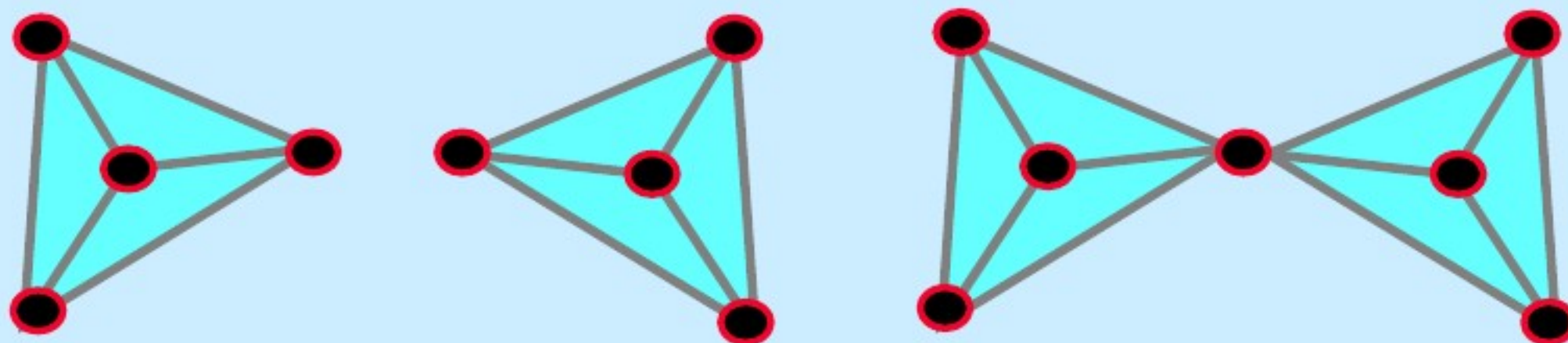
11、典型晶体结构（描述：晶胞参数、堆积填充、配位）

CaF₂结构、金刚石结构、金红石结构、刚玉结构、
钙钛矿结构、尖晶石结构

12、硅酸盐晶体结构、硅酸盐晶体结构分类的依据

硅酸盐晶体结构特点

- *a.* $[\text{SiO}]_4$ 是结构基础
- *b.* Si^{4+} 间不直接相键，通过 O^{2-} 来实现
- *c.* $[\text{SiO}]_4$ 每个顶点，最多能被 2 个 $[\text{SiO}]_4$ 所共用
- *d.* 两个相邻的 $[\text{SiO}]_4$ 之间可以共顶，而不以共棱、共面相连接



第四章、晶体结构缺陷

4.1 热力学平衡态点缺陷

4.2 非热力学平衡态点缺陷

4.3 点缺陷与化学方程式

4.4 离子晶体中的点缺陷与色心

4.5 掺杂与非化学计量化合物

4.6 晶体的线缺陷——位错

缺陷 defects

缺陷——偏离理想晶体周期性或平移对称性的结构形式。

可分为——**点缺陷**、**线缺陷**、**面缺陷**、**体缺陷**

小尺寸缺陷引起的畸变局限在几个原子间距范围内，可看成零维的点，称作点缺陷：它可以是**固有的**，也可以是外来的杂质原子引起的；前者称作**本征缺陷**，后者则为非本征缺陷。

点缺陷可分为**热缺陷**（**点阵空穴**和**填隙原子**）、**组成缺陷**、**电荷缺陷**和**非化学计量缺陷**。

1、缺陷的概念

2、热缺陷（弗伦克尔缺陷、肖特基缺陷）

热缺陷是一种本征缺陷、高于0 K就存在，热缺陷浓度的计算

影响热缺陷浓度的因数：温度和热缺陷形成能（晶体结构）

3、杂质缺陷、固溶体

4、非化学计量化合物结构缺陷（半导体）

种类、形成条件、缺陷的计算等

区别——	固溶体、	混合物、	化合物
相数	单相	多相	单相
组成	可变	可变	确定

5、连续置换型固溶体的形成条件

6、影响形成间隙型固溶体的因素

7、组分缺陷（补偿缺陷）：不等价离子取代

形成条件、特点（浓度取决于掺杂量和固溶度）

缺陷浓度的计算、与热缺陷的比较

8、缺陷反应方程和固溶式

杂质 $\xrightarrow{\text{基质}}$ 产生的各种缺陷



9、固溶体的研究与计算

写出缺陷反应方程 \longrightarrow 固溶式、算出晶胞的体积和重量
 \longrightarrow 理论密度（间隙型、置换型） \longrightarrow 和实测密度比较

10、位错概念

刃位错：滑移方向与位错线垂直，伯格斯矢量b与位错线垂直

螺位错：滑移方向与位错线平行，伯格斯矢量b与位错线平行



固体材料中存在的**界面**包括**相界**和**晶界**

界面和**表面**(interface and surface)

界面是指两相接触的约**几个分子厚度的过渡区**.
两相中的一相为**气体**时的界面通常称为**表面**。

表面可以由一系列的物理化学数据来描述（表面积、表面组成、表面张力、表面自由能、熵、焓等），表面与界面的组成和结构对其性能有着重要的影响。

相界：指具有不同组成或结构的两固相间的分界面

晶界：是指同材料相同结构的两个晶粒之间的边界

特点：表面结构复杂，性质相差悬殊，研究固体表面比研究液体表面困难，难以定量描述。

第五章、表面与界面

- 1、界面的分类与特点，固体是如何降低其表面能的？
- 2、晶体表面弛豫与重构，表面的TLK模型
- 3、润湿的概念、定义

改善润湿的方法：去除表面吸附膜（提高固体表面能）、
改变表面粗糙度、降低固液界面能

- 5、决定晶界构型的因素（界面能与晶界能的相互关系）
- 6、粘土荷电的原因、粘土与水的作用、电动电位
- 7*、泥浆胶溶的原理与条件、粘土泥浆属于塑性流动
- 8*、泥浆发生触变的原因

第六章、相平衡

- 1、相律以及相图中的一些基本概念：相、独立组分、自由度等
- 2、水型物质相图的特点（固液界线的斜率为负）
- 3、 SiO_2 相图中的可逆与不可逆多晶转变（重建型转变、位移型转变）
- 4、一致熔化合物和不一致熔化合物的特点
- 5、形成连续固溶体的二元相图的特点（没有二元无变量点）
- 6、界线、连线的概念及相互关系
- 7、等含量规则、等比例规则、背向规则、杠杆规则、
连线规则、切线规则、重心规则。
- 8、三元相图析晶路径的分析
 - 判断化合物的性质
 - 划分副三角形
 - 标出界线上的温度走向和界线的性质
 - 确定无变量点的性质
 - 分析具体的析晶路程

第七章、固体中质点的扩散

- 1、固体中扩散的特点 各向异性、扩散速率低
- 2、菲克定律（宏观现象）与扩散系数
 - 菲克第一定律：稳态扩散
 - 菲克第二定律：不稳态扩散
- 3、扩散推动力（化学位梯度）
- 4、扩散系数的一般热力学关系式
- 5、质点的扩散方式（五种、其中空位最常见，所需能量最小）
- 6、本征扩散、非本征扩散及其相应的扩散系数D
 - 产生本征扩散与非本征扩散的原因
- 7、扩散的影响因素

第八章、固相化学反应

- 1、固相反应的定义、泰曼温度
- 2、固相反应的转化率
- 3、固相反应的一般动力学关系（反应的总阻力=各个分阻力之和）
- 4、固相反应的特点（化学反应动力学范围、扩散动力学范围）
- 5、杨德尔方程 $G < 0.3$
- 6、金斯特林格方程 $G < 0.8$
- 7、影响固相反应的因素
- 8、如果要合成 MgAl_2O_4 ，可提供选择的原料为 MgCO_3 、 $\text{Mg}(\text{OH})_2$ 、 MgO 、 $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ 、 $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ 、 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ ，从提高反应速率的角度出发，选择什么原料较好？

第九章、固态相变

结构起伏是产生晶核的结构基础。

- 1、相变的概念
- 2、相变的分类，无扩散型相变的特点
- 3、一级相变、二级相变、马氏体相变、有序一无序相变
- 4、相变过程中的亚稳态
- 5、晶核的形成条件、临界晶核 r_k 。（要有 ΔT ）
- 6、影响成核速率的因素：核坯的数目、质点加到核坯上的速率
 $I_v = P \cdot D$
- 7、均匀成核与非均匀成核的区别
- 8、影响晶体生长速率的因素：温度(过冷度)和浓度(过饱和度和度)等

第十章、固态烧结

- 1、烧结的概念
- 2、烧成与烧结、烧结与固相反应
- 3、烧结的推动力（过剩的表面能 ΔG ）
- 4、经典烧结模型
- 5、液相烧结与固相烧结的异同点
- 6、蒸发-凝聚传质过程的特点($\Delta L/L=0$)
- 7、晶粒生长与二次再结晶的概念（烧结中后期）
- 8、影响烧结的因素