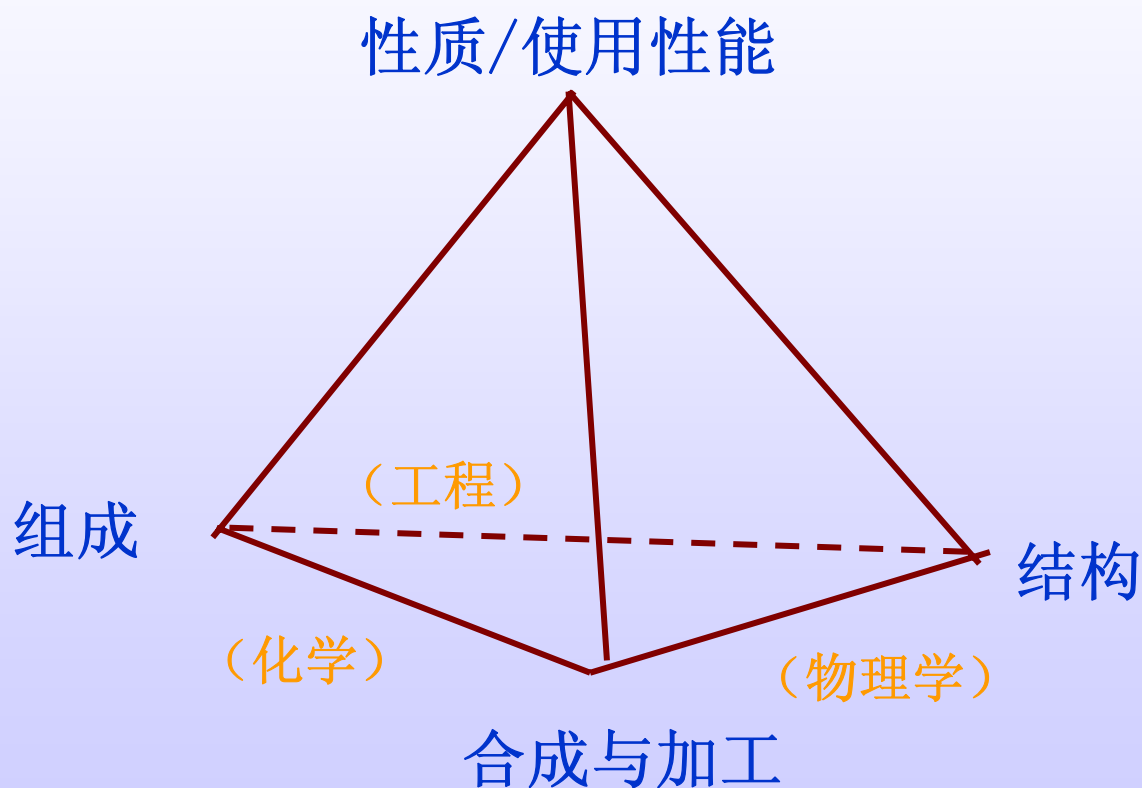


## 第二章 材料科学与工程四个基本要素



# 总论

---

- 材料的使用依赖于材料的性能，而其性能都是由其化学组成和结构决定的。
- 只有从微观上了解材料的组成、结构与性能的关系，才能有效地选择制备和使用材料。

# 本章主要内容

---

- 一. 材料的组成
- 二. 材料的结构
- 三. 材料的合成与加工
- 四. 材料的性质与使用性能

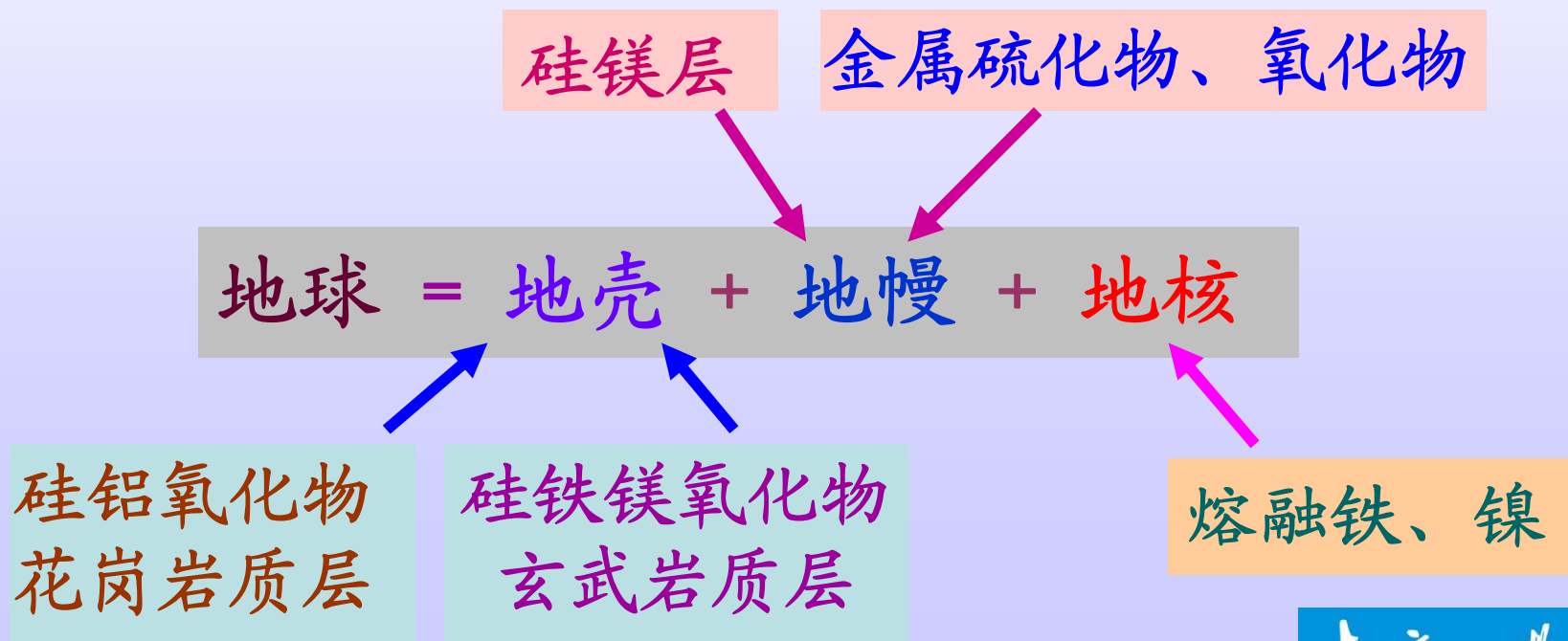
## 2.1 材料的组成

---

- 材料由原子和分子组合而成。
- 材料的**化学组成**：组成材料最基本、独立的物质，可为纯元素或稳定的化合物，以及其种类和数量。
- 材料的**相组成**：材料中具有同一化学成分并且结构相同的均匀部分称为**相**。组成材料的相的种类和数量称为**相组成**。可分为单相材料、多相材料。

# 自然界中的元素和物质

- 人类从天然材料的使用到人造材料的制备，材料的发展与地球中所孕含的元素和物质的存在形式密切相关。
- 材料所用的原料均取自于地壳。



# 地壳中主要元素的储量

- 90% {
- 氧 (O): 50%, 存在于水、岩石和各种有机体
  - 硅 (Si): 25%, 存在于800余种硅酸盐矿物中
  - 铝 (Al): 8.23%, 存在于岩石矿物中
  - 铁 (Fe): 5.8%, 存在于300余种矿物中
  - 钙 (Ca): 5.2%, 以碳酸盐、硫酸盐和硅酸盐等形式存在。
- 此外, 钠 (Na)、钾 (K)、镁 (Mg)、钛 (Ti)
  - 上述九种元素约占地壳总重量的99% 以上

# 地壳中主要元素的储量

名次	名称	含量 %	主要存在形式	占地壳总重 %		
1	O	49 ~ 50	H <sub>2</sub> O、岩石、有机体	90.03	>99	
2	Si	25 ~ 26	SiO <sub>2</sub> 、800种矿物1/3			
3	Al	7.45 ~ 8.23	岩石（长石、云母）			
4	Fe	4.2 ~ 5.8	300种矿物			
5	Ca	3.25 ~ 5.2	CaCO <sub>3</sub> 、CaSO <sub>4</sub> 、CaSiO <sub>4</sub>	9.5		
6	Na	2.4				
7	K	2.35				
8	Mg	2.35				
9	Ni	2.24				

其余90多种元素的重量加起来不到地壳总重的1%。

# 地壳中主要元素的储量

---

- Cu、Zn、Pb的含量分别为0.0006%、0.0009%、0.000001%，但这些元素有很强的富集能力，经富集可达到百分之几、百分之几十。
- 已知矿物约有2000-3000种，最常见的有100多种。
- 金属、玻璃、陶瓷、高分子材料的原料大多数来自矿物。

在103种元素中，惰性元素 6 种

非金属元素 16 种

金属元素 81 种

# 地壳中的矿物组成:

---

- **单质矿物**: 90多种, 占地壳总重的0.1%。Cu、Ag、Au、Pt、Bi、Sb、C、S
- **硫化物类矿物**: 200多种, 占地壳总重的75%。其中 $\text{Fe}_x\text{Sn}$ 和 $\text{H}_2\text{S}$ 占75%。
- **氧化物类矿物**: 有200多种, 占地壳总重的17%。Fe、Cr、Mn、Al、Ti、Sn、Nb、Ta、U、Re等元素的重要矿物。
- **卤化物类矿物**: 氢氟酸、盐酸、溴氢酸、氢碘酸所形成的盐, 阳离子主要是 $\text{K}^+$ 、 $\text{Na}^+$ 、 $\text{Ca}^{2+}$ 、 $\text{Mg}^{2+}$ 等。
- **含氧盐类矿物**: 占已知矿物的2/3。硅酸盐、硫酸盐、磷酸盐、钒酸盐、碳酸盐等。

# 材料的化学组成

---

金属 单质、合金。如 Fe、Al、Cu、Ti、Zn、Mg、Ni

无机非金属 金属元素和非金属元素组成的化合物，通常为氧化物、氮化物、碳化物等。

陶瓷  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{TiO}_2$ 、 $\text{ZnO}$ 、 $\text{SiO}_2$ 、 $\text{SiC}$ 、 $\text{Si}_3\text{N}_4$  BN

水泥  $\text{SiO}_2 - \text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Fe}_2\text{O}_3$

玻璃  $\text{SiO}_2 - \text{CaO} - \text{Na}_2\text{O}$

有机高分子 C（为主）结合H、O

还结合N、S、P、Cl、F、Si等

聚合度300 - 2500，分子量2 - 16万

# 材料的相组成

---

- 金属：单相材料
- 普通陶瓷：晶相 + 玻璃相 + 气孔      多相材料。
- 水泥： $C_2S$ 、 $C_3S$ 、 $C_3A$ 、 $C_4AF$       多相材料。
- 玻璃：单相材料
- 高分子：单相材料
- 复合材料：多相材料

## 2.2 材料的结构

---

- 材料的结构是指材料的组元及其排列和运动方式。包含形貌、化学成分、相组成、晶体结构和缺陷等内涵。
- 材料的结构决定材料的性能。

材料结构的描述:

1. 宏观组织结构:  $>1000,000\text{ nm}$
2. 微观显微结构:  $10 \sim 1000\text{ nm}$
3. 纳米结构:  $<100\text{nm}$
4. 键合结构: 原子/离子间的化学键
5. 原子结构: 原子的电子结构

# 不同层次的结构

---

- 原子结构、电子结构是研究材料特性的两个最基本的物质层次;
- 键合结构: 描述原子/离子间的化学键性质
- 纳米结构: 纳米尺度上的结构
- 显微组织 (显微结构, Microstructure) 指多晶材料的微观形貌、晶体学结构和取向、晶界、相界、界面相、亚晶界、位错、层错、孪晶、固溶和析出、偏析和夹杂、有序化等。
- 宏观组织 (Macrostructure) 如材料的孔隙、岩石的层理、木材的纹理 (纤维状) 等。

# THE SCALE OF THINGS

## Things Natural



Cat  
~0.3 m



Monarch butterfly  
~0.1 m



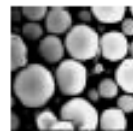
Dust mite  
300 µm



Bee  
~15 mm



Human hair  
~50 µm wide



Fly ash  
~10-20 µm

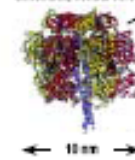


Magnetic domains  
garnet film  
11 µm wide stripes



Red blood cells  
with white cell  
~2-5 µm

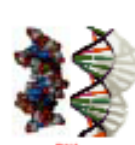
Schematic, central core



ATP synthase



10 nm

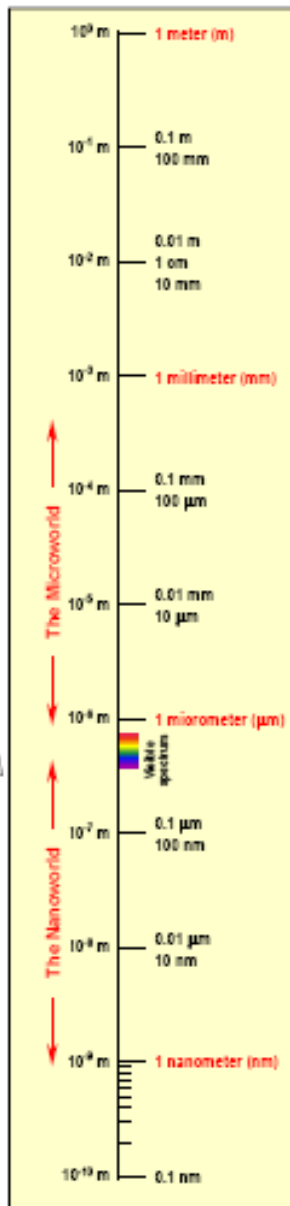


DNA  
~2 nm wide



Atoms of silicon  
spacing ~0.35 nm

Progress in atomic-level understanding



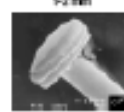
## Things Manmade



Objects fashioned from  
metals, ceramics, glasses, polymers —

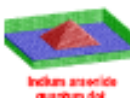


Head of a pin  
~2 mm

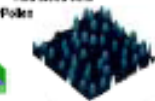


Microelectronics

MEMS (MicroElectroMechanical Systems) Devices  
10-100 µm wide



Indium arsenide  
quantum dot



Quantum dot array —  
germanium dots on silicon



Artificial flower



Self-assembled  
"molecular"



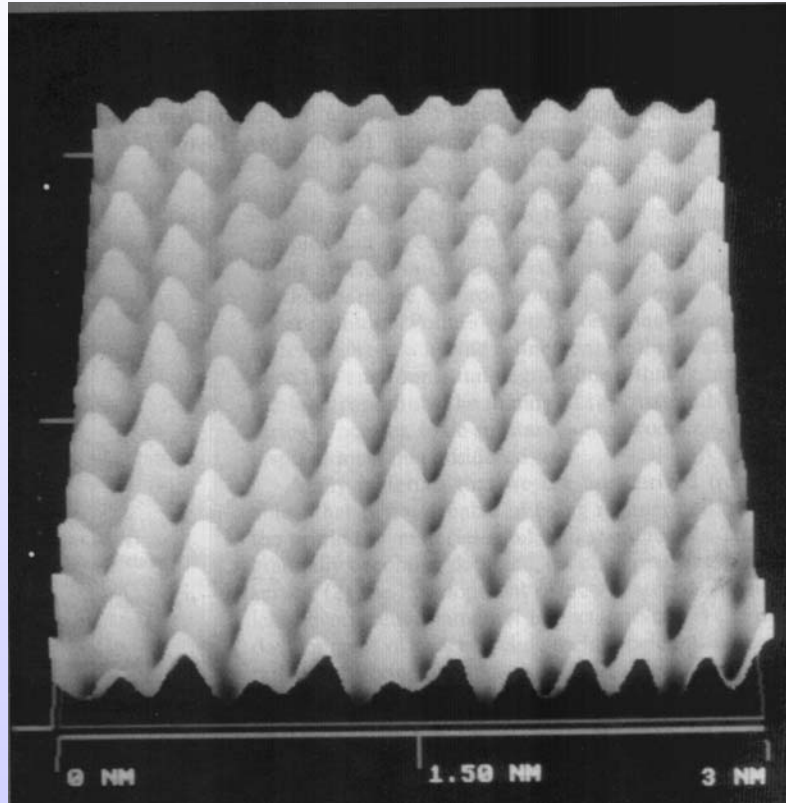
Quantum coral of 48 iron atoms on copper surface  
positioned one at a time with an STM tip  
Coral diameter 14 nm

The 21st century challenge — Fashion materials at the nanoscale with desired properties and functionality

meter	m	10 <sup>0</sup>	1 m
centimeter	cm	10 <sup>-2</sup>	0.01 m
millimeter	mm	10 <sup>-3</sup>	0.001 m
micrometer	µm	10 <sup>-6</sup>	0.000001 m
nanometer	nm	10 <sup>-9</sup>	0.000000001 m

Chart from [http://www.sc.doe.gov/production/bes/scale\\_of\\_things.html](http://www.sc.doe.gov/production/bes/scale_of_things.html)

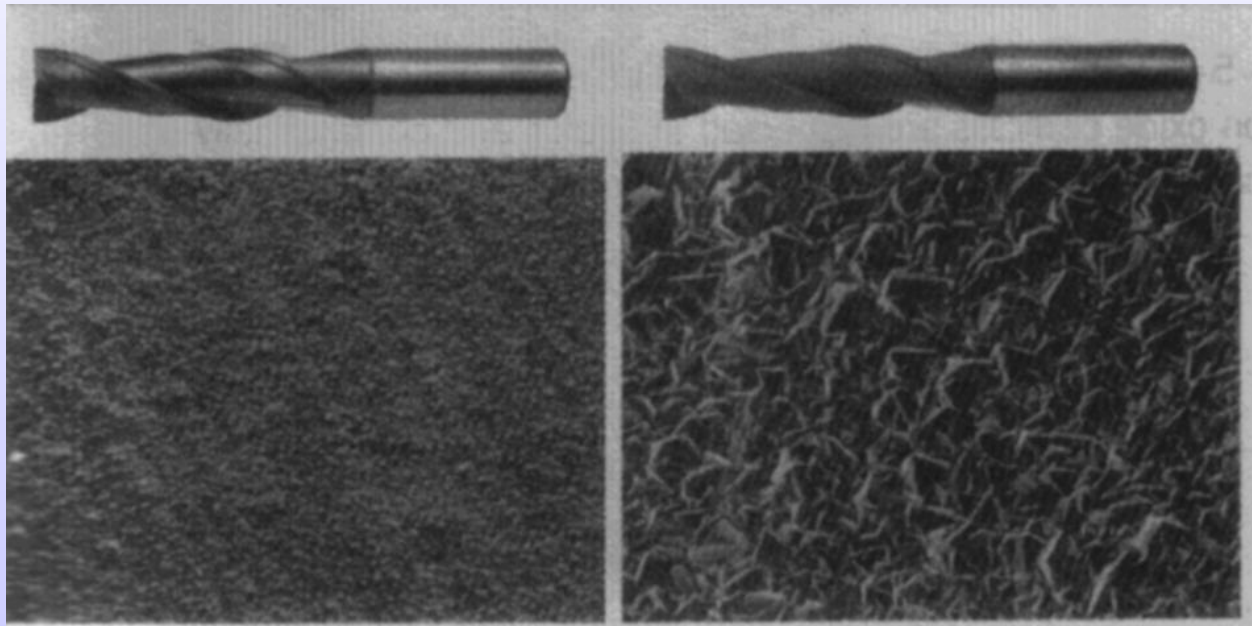
# 金的(111)晶面结构（原子力显微镜）



材料的显微结构对材料的性能具有相当大的影响。

# 原子结构

- 金刚石
- C-C共价键结合的金金刚石硬度大、熔点高，其在切割刀具上的薄膜涂层使其具有较好的抗磨损性能。
- $\sim 10^{-10} \text{ m}$  ( $1\text{\AA}$ )



金刚石涂层刀具

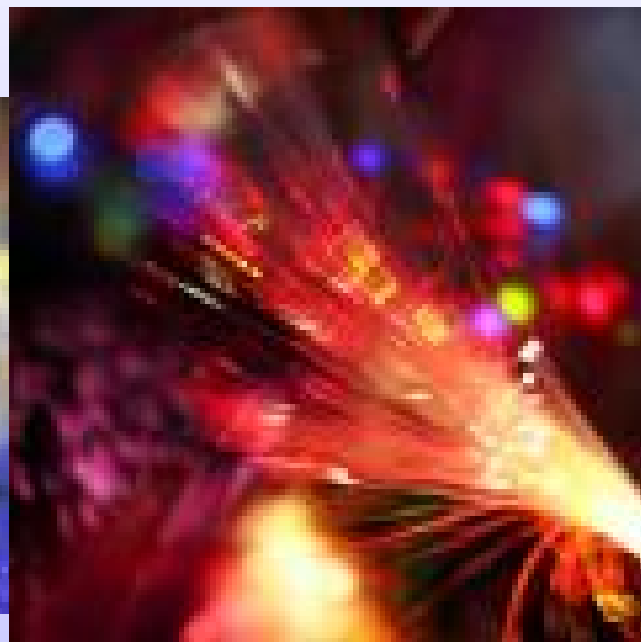
# 原子排列：长程有序

- 锆钛酸铅  $\text{Pb}(\text{Zr}_x\text{Ti}_{1-x})\text{O}_3$  (*PZT*)
- 当晶体结构中离子配位多面体以四面体和菱面体的方式排列时，材料表现出压电性能。
- PZT 陶瓷广泛地应用于点火装置、超声波发生器及振动控制。
- $10^{-10} \sim 10^{-9} \text{ m}$  ( $1 \sim 10\text{\AA}$ )



# 原子排列：短程有序

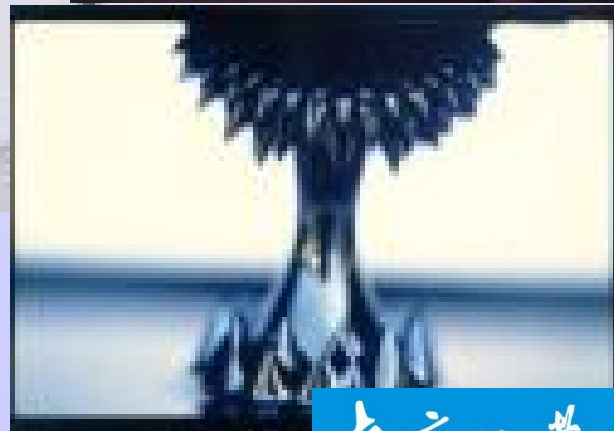
- 硅玻璃 ( $\text{SiO}_2$ ) 中  $\text{Si}^{+4}$  和  $\text{O}^{2-}$  形成四面体，四面体之间的连接是无序的，故而称为短程有序，即无定形结构。
- 无定形的硅玻璃构成了光学通信工业的基础。
- $10^{-10} \sim 10^{-9} \text{ m}$  ( $1 \sim 10 \text{ \AA}$ )



光导纤维

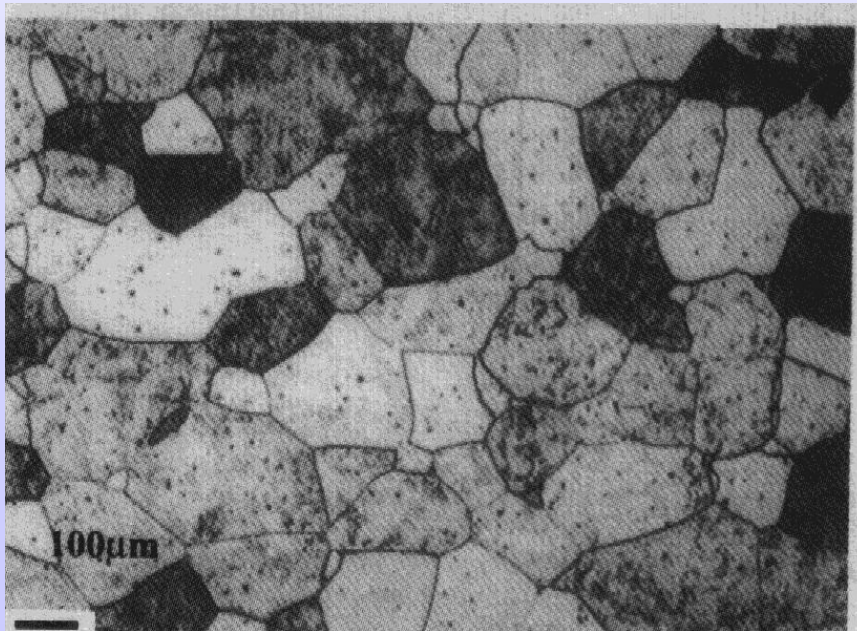
# 纳米结构

- 纳米氧化铁( $\sim 5\text{-}10\text{ nm}$ ) 颗粒分散在液体中, 制备铁磁流体和液态磁体, 用于扩音器的传热冷却。
- $10^{-9} \sim 10^{-7}\text{ m}$  ( $1 \sim 100\text{ nm}$ )。



# 显微结构

- 大部分金属和合金的力学性能受晶粒大小的影响很大，晶粒和晶界是晶态材料显微结构特征的一部分。
- 通常，室温下，较细的晶粒具有较高的强度。材料很多重要的性质也受到显微结构显著的影响。
- $10^{-8} \sim 10^{-6} \text{ m}$  ( $10 \sim 1000 \text{ nm}$ )。



不锈钢材料的  
显微结构（晶  
粒和晶界）

# 宏观结构

- 涂层：汽车车身上的油漆等，不仅仅为了美观，还提高了抗腐蚀性能。
- $\sim >10^{-6} \text{ m}$  (1000, 000 nm).



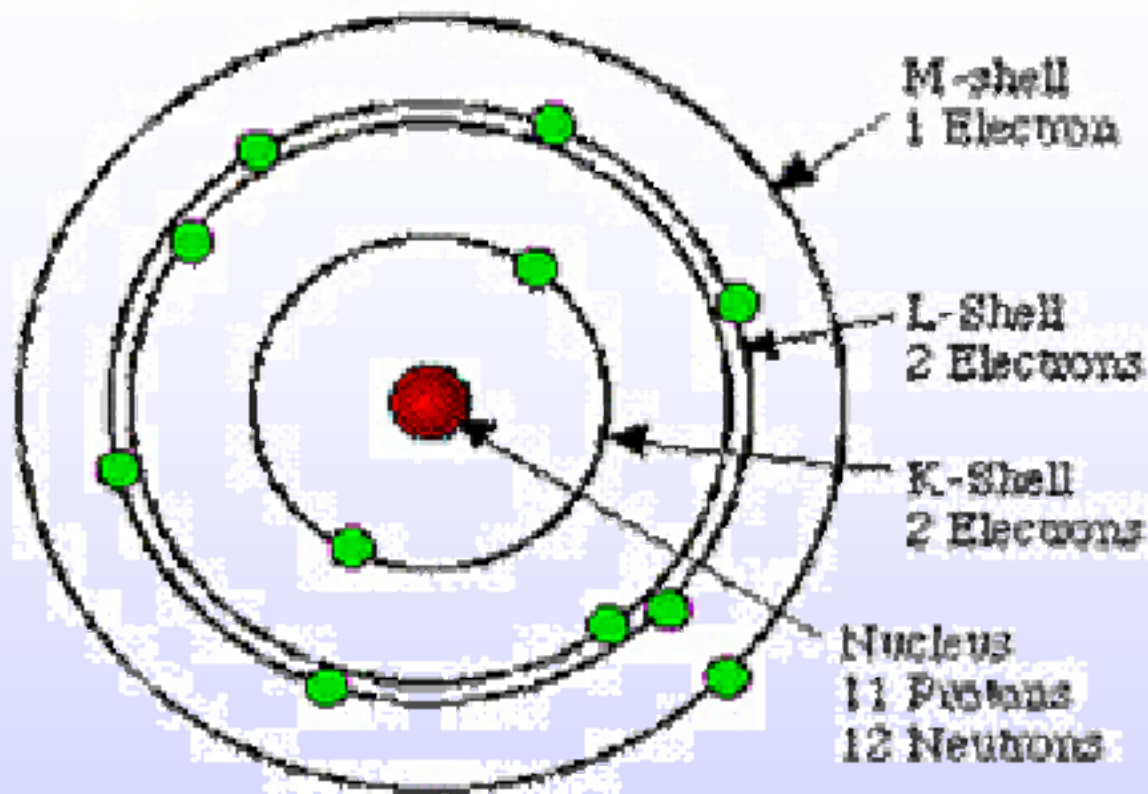
无机、有机涂层保护了汽车车身免受腐蚀，并且使其更加美观。

## 2.2.1 原子结构

- 原子的结构影响到原子之间的键合，并进一步影响到材料的力学性能和物理性质。

Atoms = nucleus (protons and neutrons) + electrons

- **电荷**: 电子和质子具有相同大小的负电荷和正电荷,  $1.6 \times 10^{-19}$  库仑.
- 中子是电中性的。
- **质量**: 质子和中子具有相同的质量,  $1.67 \times 10^{-27}$  kg.
- 电子的质量较小, 在计算原子的质量时往往可忽略  $9.11 \times 10^{-31}$  kg
- **原子质量 (A) = 质子质量 + 中子质量**
- **质子 = atomic number (Z)**

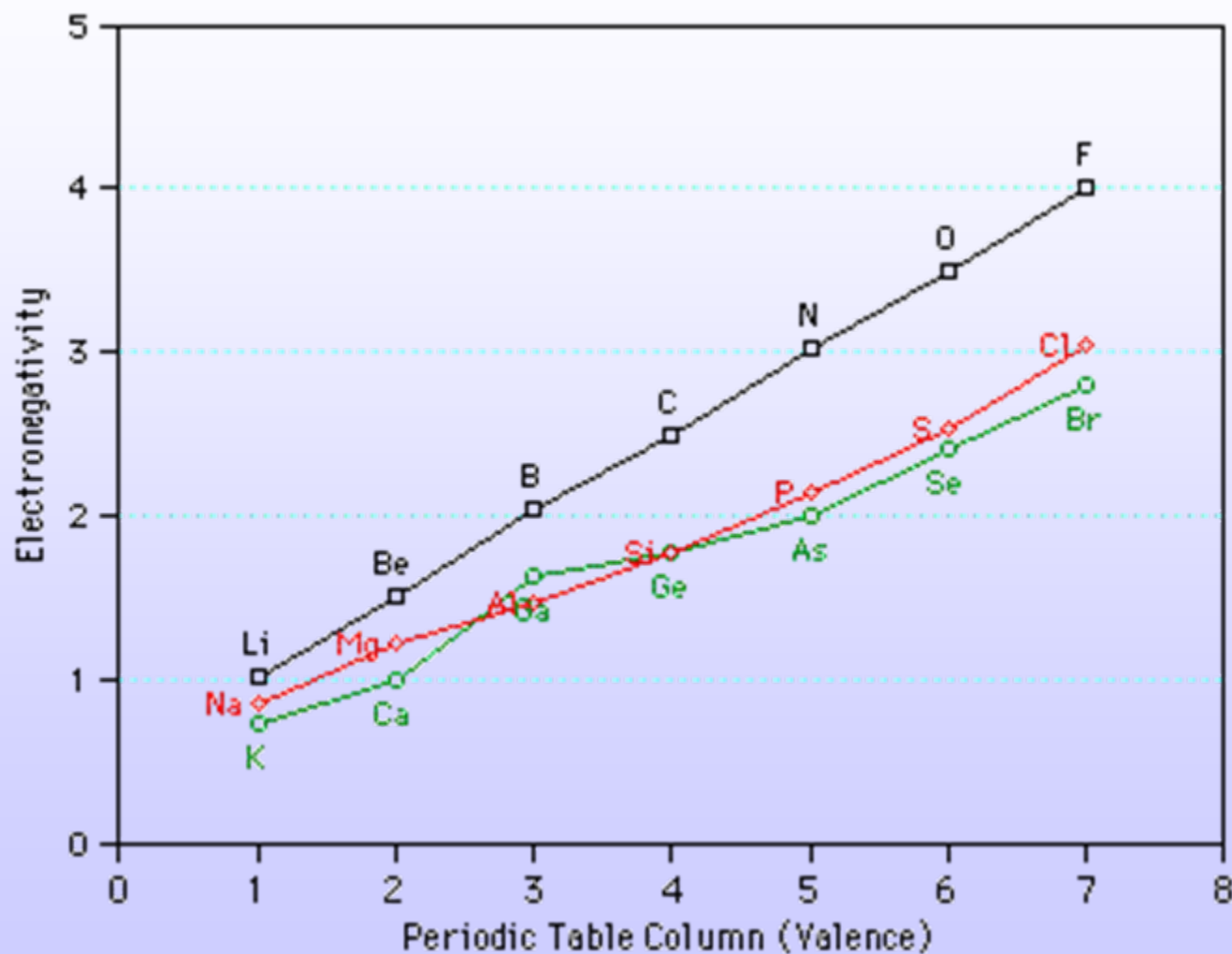


波尔原子模型

# 电负性

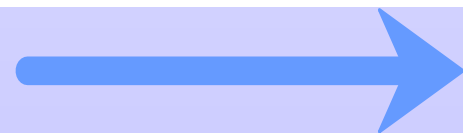
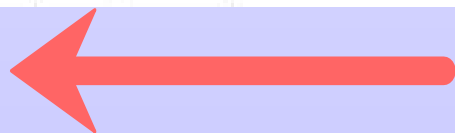
- **电负性**：表示不同元素的原子在分子中吸引电子的能力。电负性与原子的亲合能和第一电离能之和成正比， $X=0.18(I+Y)$
- I-第一电离能，原子失去一个电子而成为 1 价正离子所需能量。
- Y-亲合能，一个中性原子获得一个电子成为负离子所放出的能量。
- Cl原子核外带有7个价电子，具有强烈的获得电子的倾向；而带有1 个价电子的Na则容易失去其价电子。

# 电负性与元素周期表



# 电负性与元素周期表

IA																	0	
H 2.1	IIA																He -	
Li 1.0	Be 1.5																	Ne -
Na 0.9	Mg 1.2																	Ar -
		IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII			IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA		
K 0.8	Ca 1.0	21 Sc 1.3	Ti 1.5	23 V 1.6	Cr 1.6	25 Mn 1.5	Fe 1.8	27 Co 1.8	Ni 1.8	29 Cu 1.9	Zn 1.8	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	As 2.0	34 Se 2.4	Br 2.8	Kr -	
Rb 0.8	Sr 1.0	39 Y 1.2	Zr 1.4	41 Nb 1.6	Mo 1.8	43 Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	47 Ag 1.9	Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	Sb 1.9	52 Te 2.1	I 2.5	Xe -	
Cs 0.7	Ba 0.9	57-71 La-Lu 1.1-1.2	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	At 2.2	Rn -	
Fr 0.7	Ra 0.9	89-100 Ac-No 1.1-1.7																



# 电负性与键性的关系

- 电负性小的原子结合形成金属键;
- 电负性大的原子结合形成共价键;
- 电负性相差大的原子结合形成离子键;
- 电负性相差小的原子结合形成共价键和离子键的混合键。

# 电负性与键性的关系

NaCl

MgO

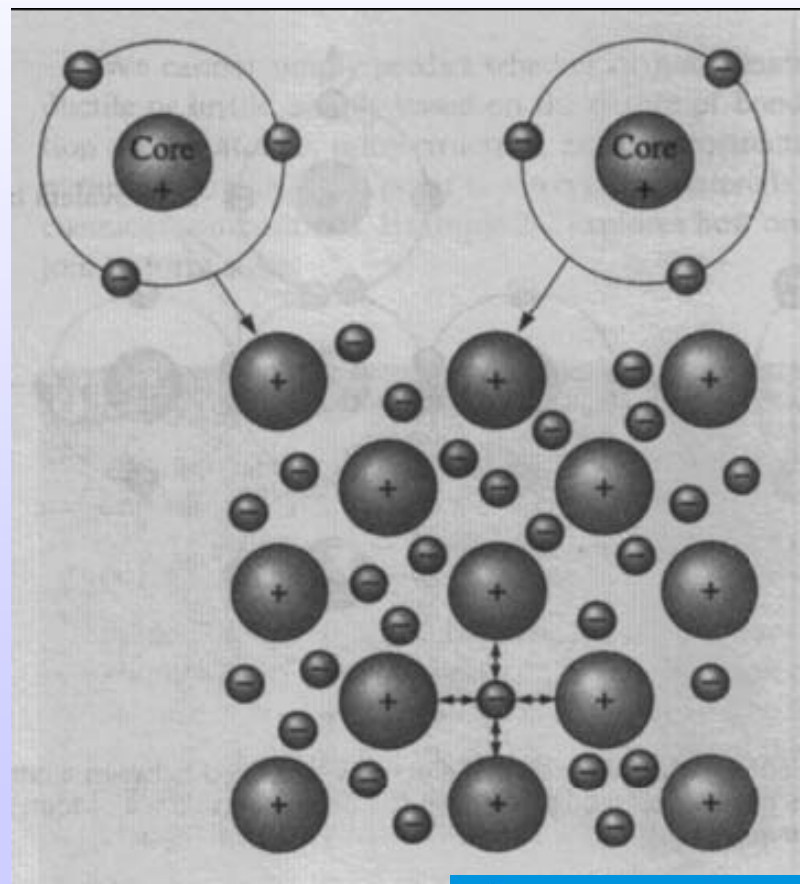
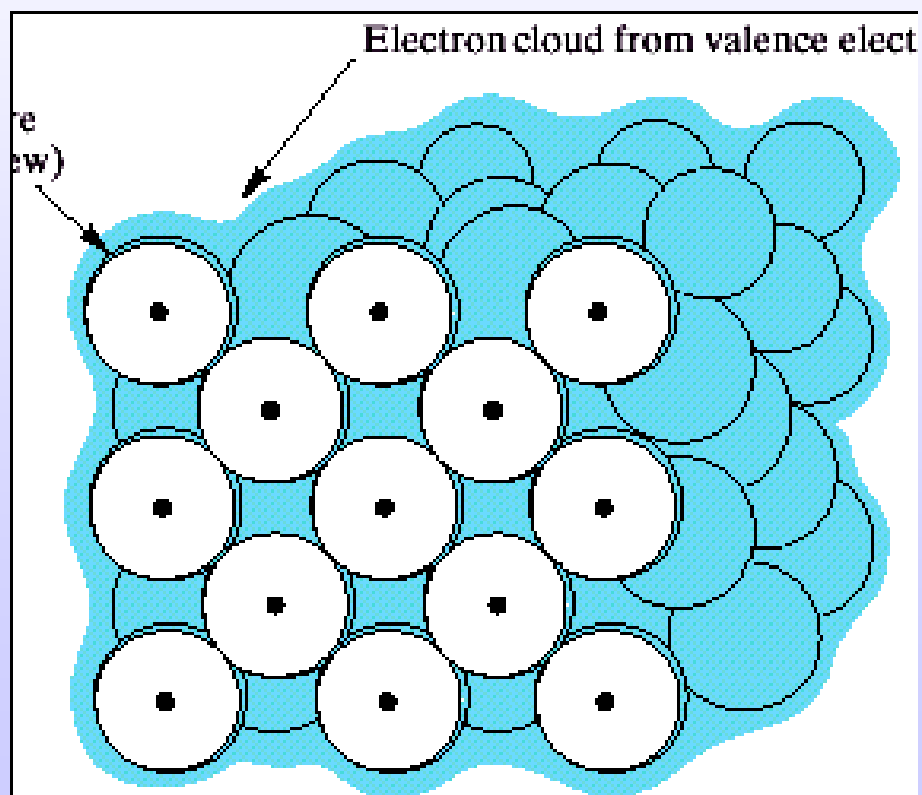
CaF<sub>2</sub>

CsCl

IA																	0	
H 2.1																	He -	
IIA	Li 1.0	Be 1.5															Ne -	
Na 0.9	Mg 1.2															Ar -		
		IIIB	IVB	VB	VIB	VII	VIII					IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.8	Ni 1.8	Cu 1.9	Zn 1.8	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8	Kr -	
Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5	Xe -	
Cs 0.7	Ba 0.9	La-Lu 1.1-1.2	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2	Rn -	
Fr 0.7	Ra 0.9	Ac-No 1.1-1.7																

## 2.2.2 材料中的化学键

- **金属键** – 金属离子与自由电子相互吸引所形成的结合力



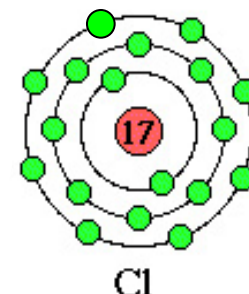
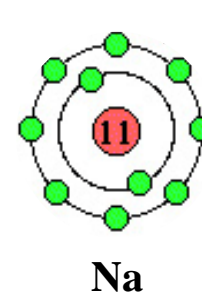
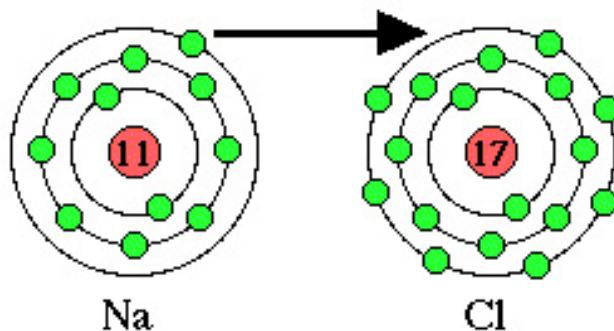
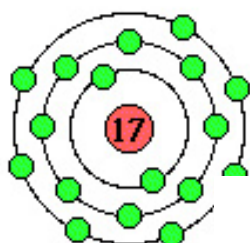
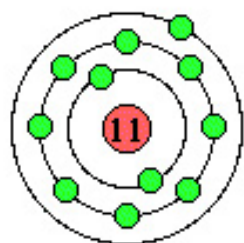
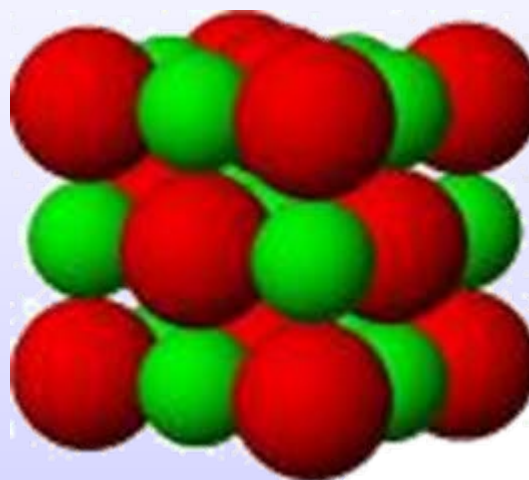
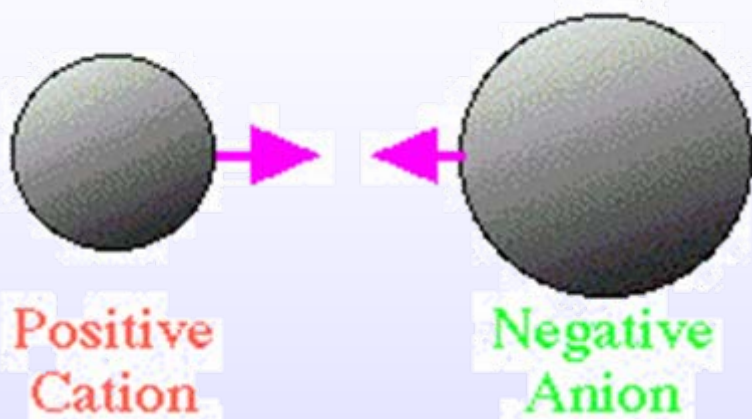
# 金属键特征

---

1. 电子属于所有原子，可在晶格之间自由活动
2. 无方向性和饱和性
3. 强度高(稍低于共价键或离子键，25-200 kcal/mol)
4. 在低电负性的原子之间形成

# 离子键 - 正负离子之间的引力所形成的键力

$$Force = \frac{-z_1 z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

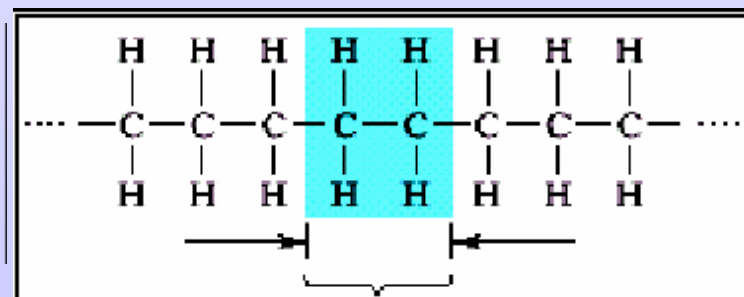
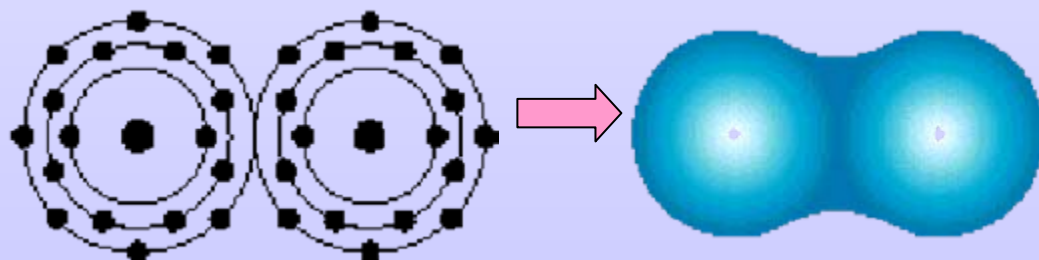
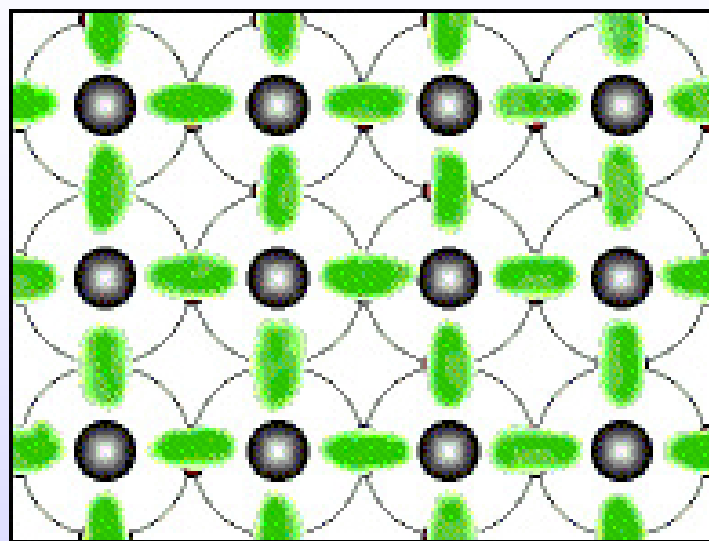
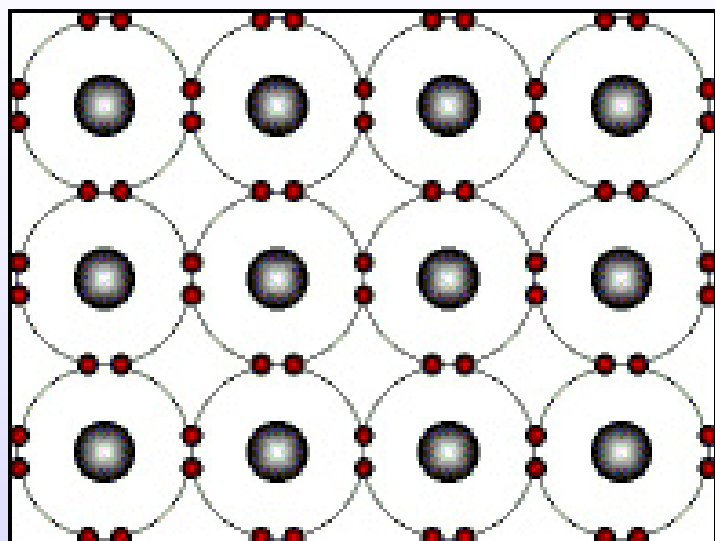


# 离子键特征

---

1. 电子在原子间转移，生成离子
2. 无方向性，有饱和性、配位数高、紧密堆积
3. 强度高 (150–370 kcal/mol)
4. 在不同电负性的原子之间形成离子键

**共价键** - 两个或多个原子相互吸引、共用若干电子所形成的键力。

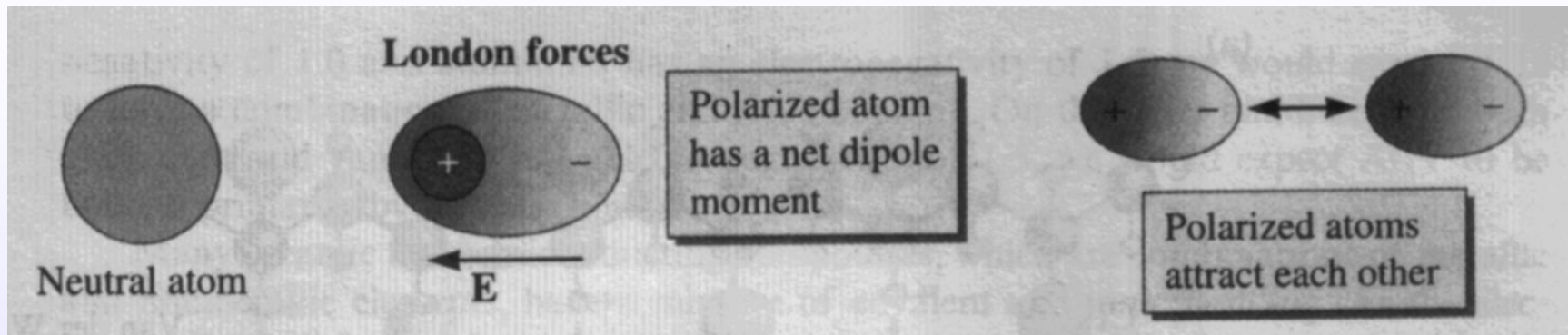


# 共价键特征

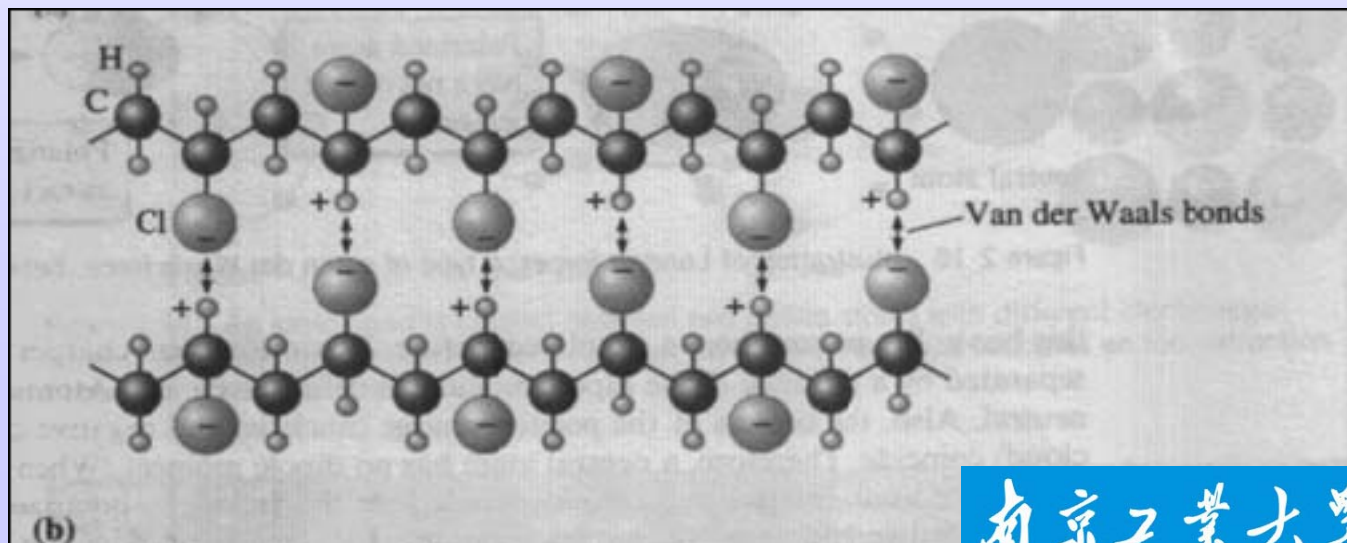
---

1. 邻近两个原子共享一对电子
2. 有方向性和饱和性、配位数低、堆积密度低
3. 强度高（略低于离子键，125-300 kcal/mol）
4. 在两个电负性大的离子之间形成

# 范德华键 - 分子之间的作用力

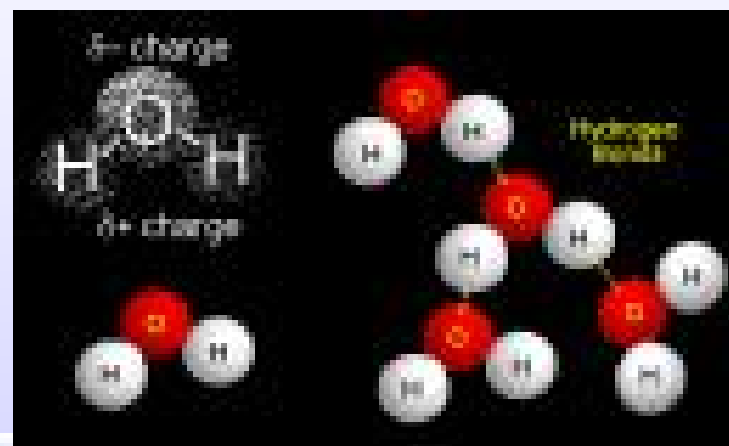
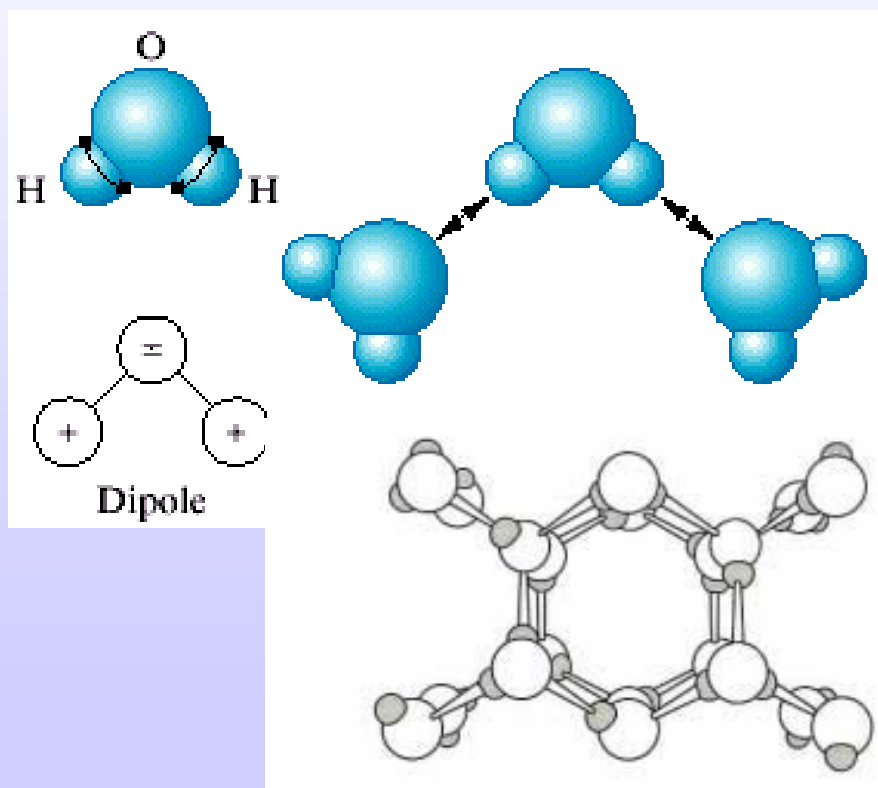


由于极化所产生的分子之间的静电作用力，较弱，作用能在几十kJ/mol以下。



# 氢键——范德华键的一种

氢原子在分子中与一个原子A结合时，还与另一个原子B结合的附加键。如 $\text{H}_2\text{O}$ ，键角**109.5**，接近于六边形结构。



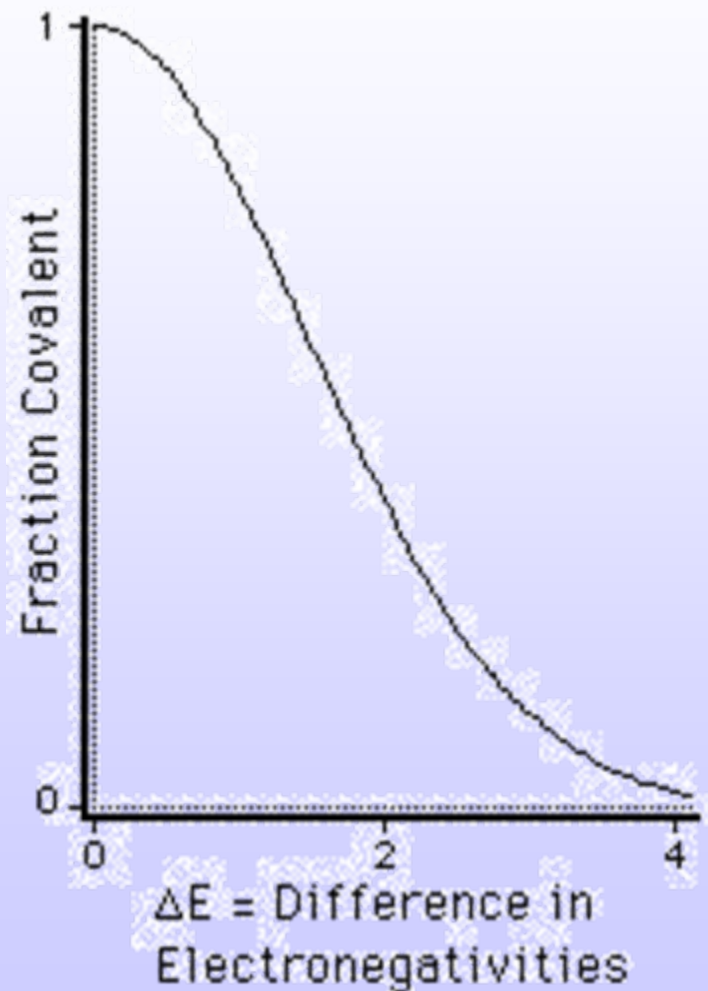
# 范德华键特征

---

1. 由于极化，分子之间产生微量静电荷
2. 无方向性，但受分子大小的影响
3. 弱键（是强键的1/100；  $<10 \text{ kcal/mol}$ ）
4. 氢键是范德华键的一种

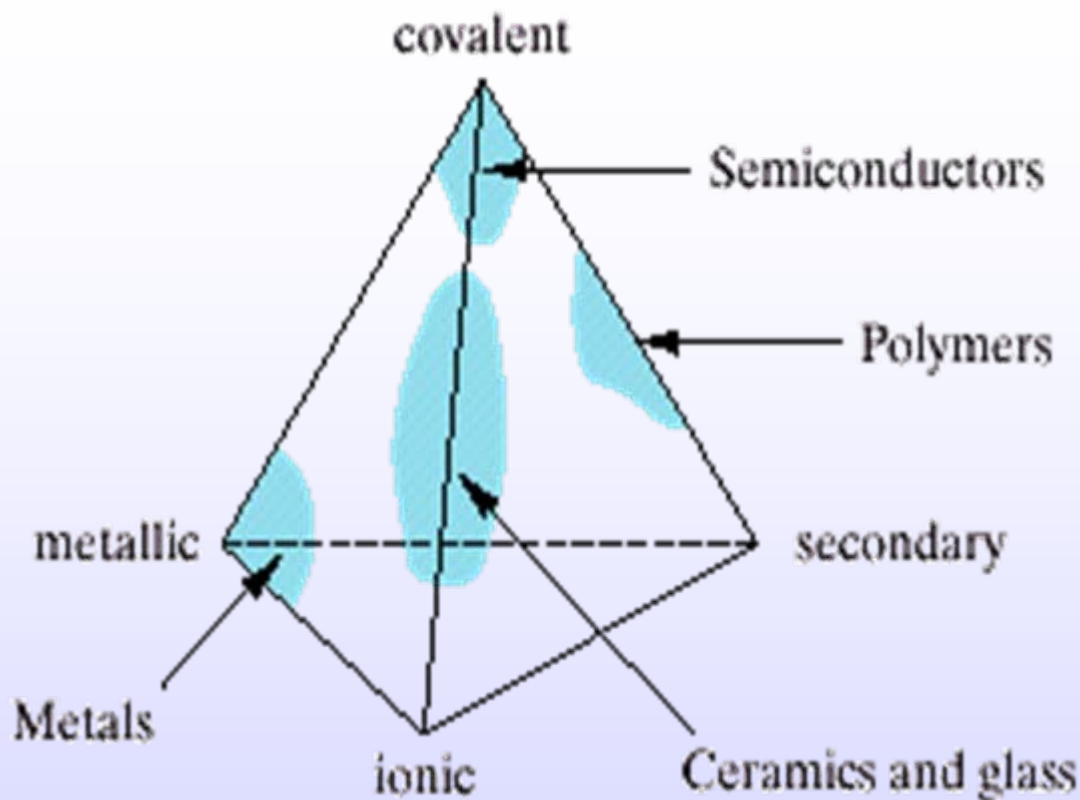
# 混合键

- 大部分材料中，原子之间的化学键并不是单一的一种化学键，而是两种或两种以上化学键的**混合键**，其键性取决于元素的电负性。
- 由金属元素和非金属元素组成的陶瓷材料和半导体材料往往是离子键和共价键的混合键，其**电负性差值越大，离子键成分越强**。
- $\text{SiO}_2$ ,  $X_{\text{Si}} = 1.8$ ,  $X_{\text{O}} = 3.5$ , 共价键成分=48.6%;  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , 共价键成分=37%,  $\text{CuO}$ , 共价键成分=53%。
- **共价键成分越多，化学键的方向性越强，离子的堆积密度越低。**



金属键	离子键	共价键	范德华键
所有原子共享电子	电子迁移，形成离子	两个相邻原子共享一对电子	极化产生微量静电荷，使分子之间产生作用力
无方向性	无方向性	有方向性	无方向性，但受分子大小的影响
强度高 (25-200 kcal/mol)	强度高 (150-370 kcal/mol)	强度高 (125-300 kcal/mol)	弱键 (强键的 1/100; <10 kcal/mol)
电负性小的原子之间形成	电负性差大的原子之间形成	电负性大的原子之间形成	氢键是范德华键的一种

# 材料中的化学键



金属：金属键

无机非金属：离子键/共价键

高分子：共价键、范德华键、氢键

半导体：共价键、离子键/共价键

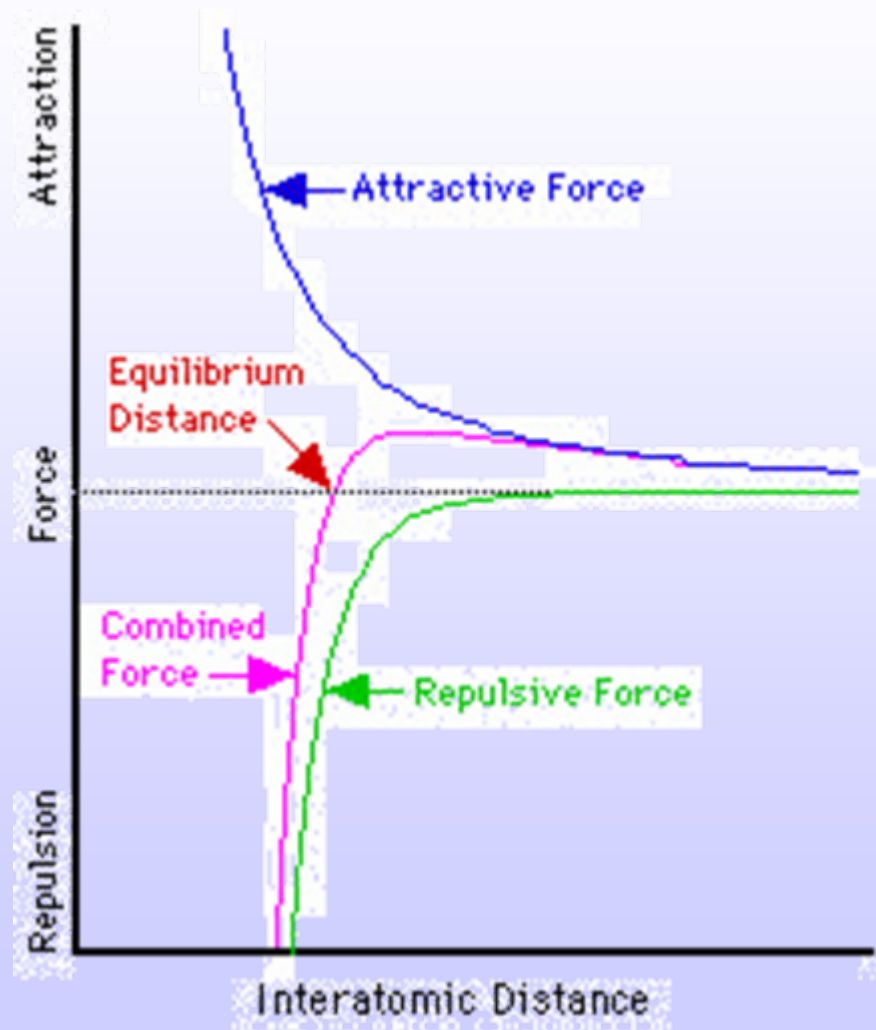
# 不同化学键材料的结合能和熔点温度

**Table 2.3** Bonding Energies and Melting Temperatures for Various Substances

<i>Bonding Type</i>	<i>Substance</i>	<i>Bonding Energy</i>		<i>Melting Temperature</i> (°C)
		<i>kJ/mol</i> ( <i>kcal/mol</i> )	<i>eV/Atom,</i> <i>Ion, Molecule</i>	
Ionic	NaCl	640 (153)	3.3	801
	MgO	1000 (239)	5.2	2800
Covalent	Si	450 (108)	4.7	1410
	C (diamond)	713 (170)	7.4	>3550
Metallic	Hg	68 (16)	0.7	−39
	Al	324 (77)	3.4	660
	Fe	406 (97)	4.2	1538
	W	849 (203)	8.8	3410
van der Waals	Ar	7.7 (1.8)	0.08	−189
	Cl <sub>2</sub>	31 (7.4)	0.32	−101
Hydrogen	NH <sub>3</sub>	35 (8.4)	0.36	−78
	H <sub>2</sub> O	51 (12.2)	0.52	0

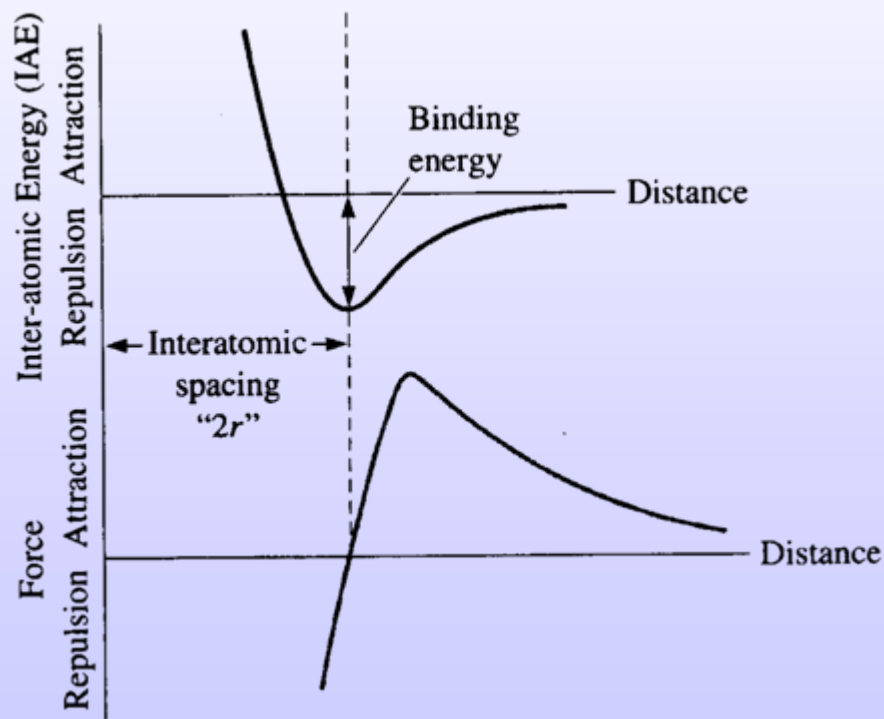
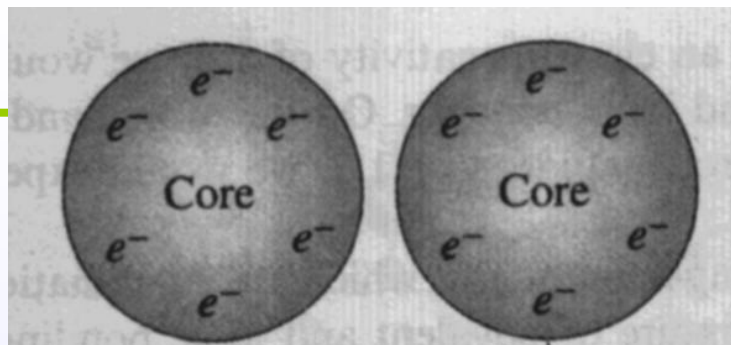
# 原子间距

- **原子间距**：当两个原子之间的吸引力和排斥力相等时的原子间平衡距离。
- 吸引力和原子之间距离的平方成反比；当两个原子靠近，排斥力随距离的减小以6-9的指数次方迅速增大。
- 平衡点的斜率反映了应力-应变曲线的斜率，即弹性模量。



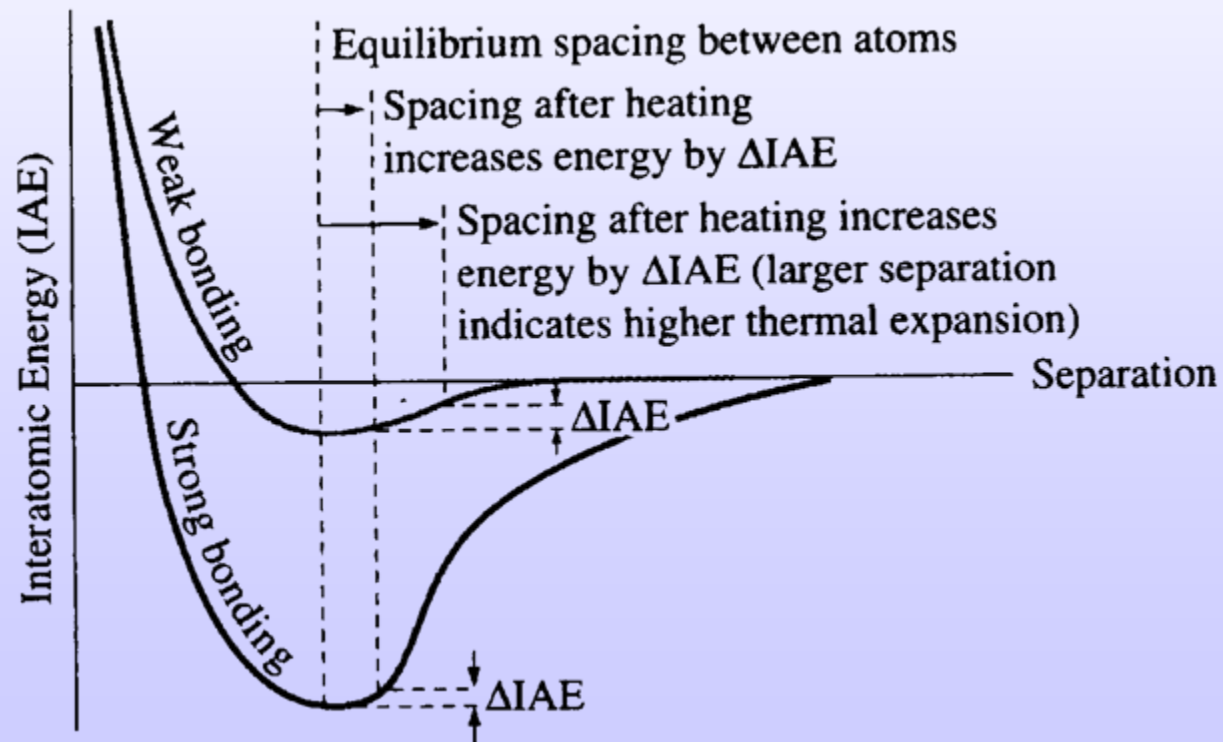
# 结合能

- 结合能的最低点即**平衡点**，其深度反映了将两个原子完全拉开所需要的能量。势阱越深，熔点越高。
- 由于排斥力随距离的变化比引力随距离的变化大，因而结合能曲线是**不对称**的，这就是材料加热时膨胀的微观原因。  
当材料接受能量后，原子的热振动引起原子在平衡位置周围的振荡，结合能曲线的不对称使得原子之间的平均距离随着温度的升高而增加。势阱越窄，热膨胀系数越低。



# 材料原子间结合能与热膨胀系数之间的关系

- 材料的热膨胀系数 (CTE) 定义为  $\alpha = (1/L) (dL/dT)$ , 即材料在给定方向上的尺度  $L$  随温度  $T$  的升高而增加, 其反映了材料尺寸随温度的变化。该宏观性质也与材料原子间的键强有关。
- 材料中原子间结合能和原子间距的曲线形状反映了化学键的强度, 进而反映了材料热膨胀系数的大小。曲线越陡峭, 最小值越低, 其线性热膨胀系数越小。



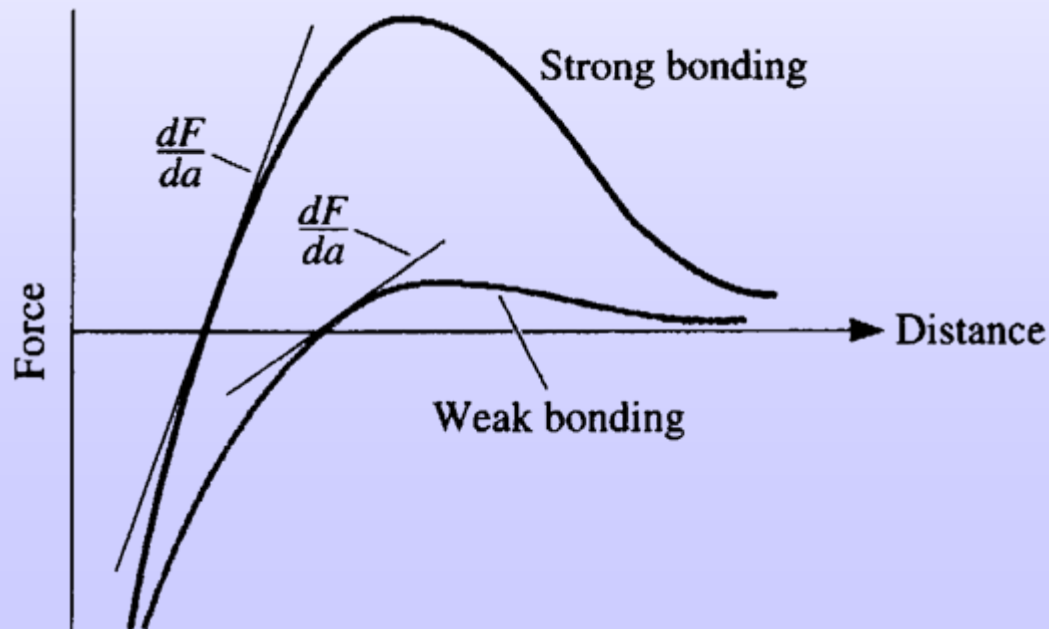
## 四种化学键材料的结合能

- 结合能大的材料，具有高强度、高熔点。
- 通常，离子键材料具有较大的结合能，而金属材料则具有较低的结合能。

Bond	Binding Energy (kcal/mol)
Ionic	150-370
Covalent	125-300
Metallic	25-200
Van der Waals	<10

# 原子间作用力和弹性模量之间的关系

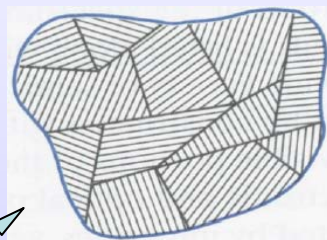
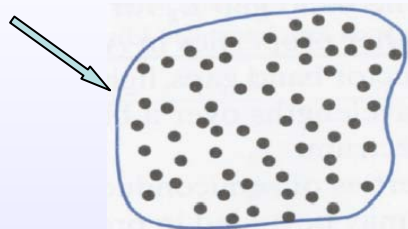
- 材料的**弹性模量**（杨氏模量）与原子间作用力——原子间距离的曲线密切相关。曲线斜率越陡，键强越高，材料的**结合能**和**熔点**越高，表明化学键伸展所需要的力越大，即弹性模量越大（ $dF/da$  越陡）。



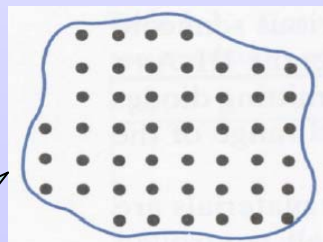
## 2.2.3 材料的显微结构

- 为什么化学组成相同  
(C) 的石墨与金刚石  
有完全不同的性质?
- 材料中原子和离子的  
排列显著影响材料的  
性质。

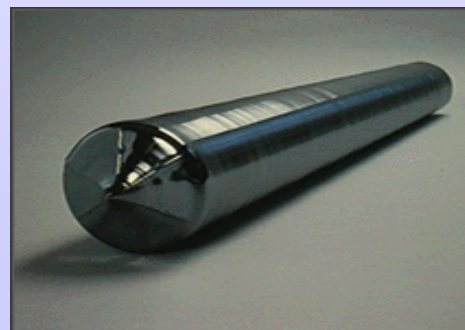
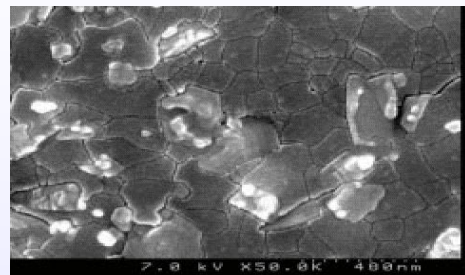
非晶



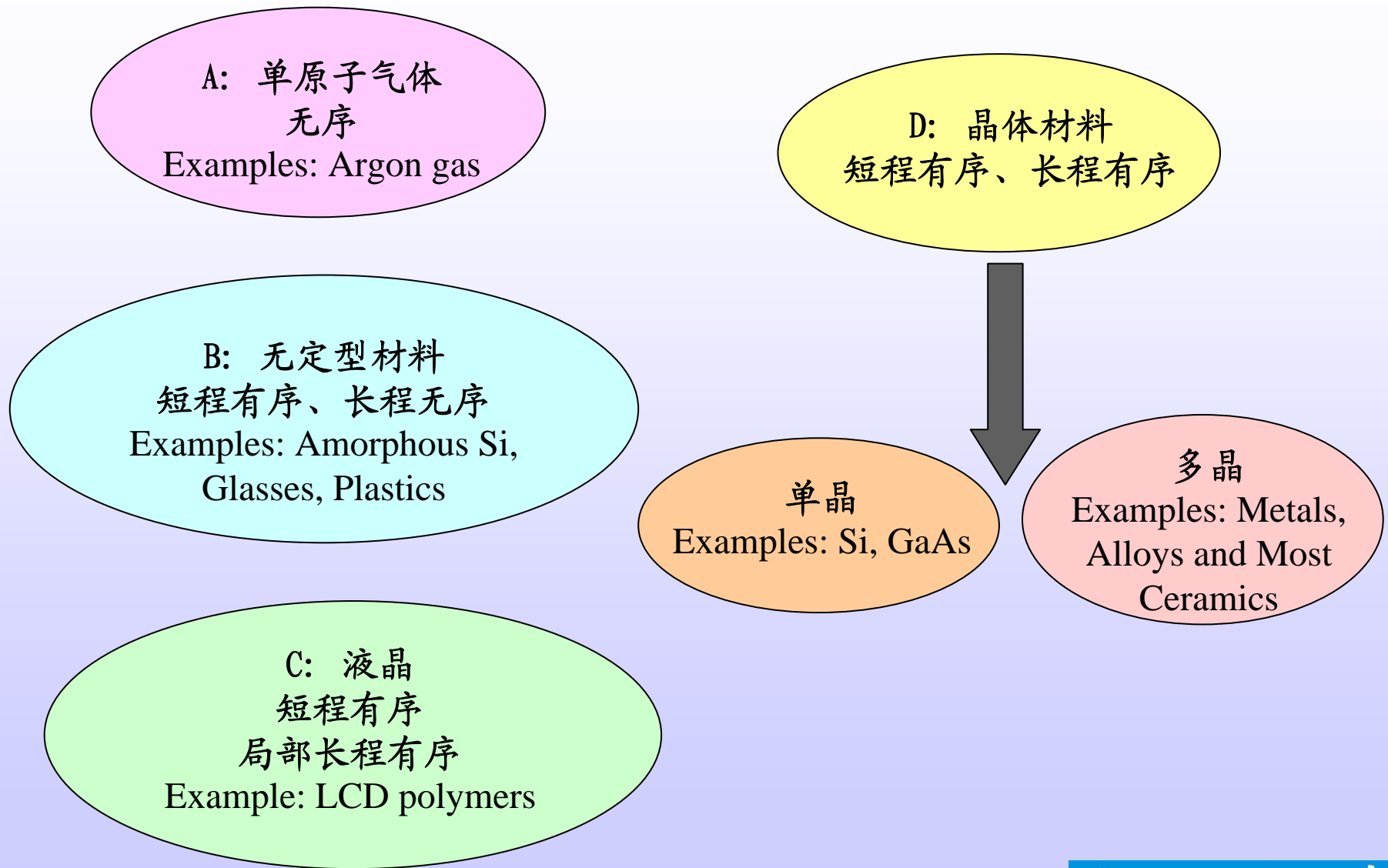
多晶



单晶

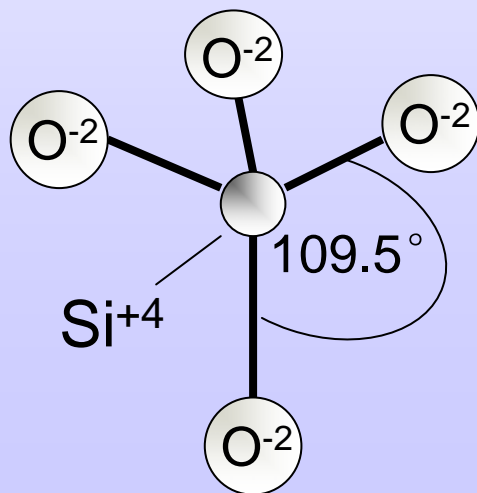
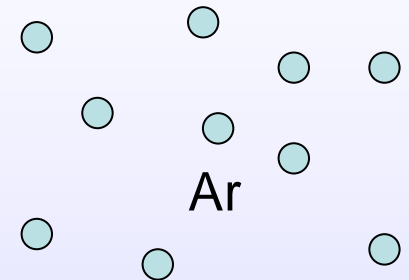
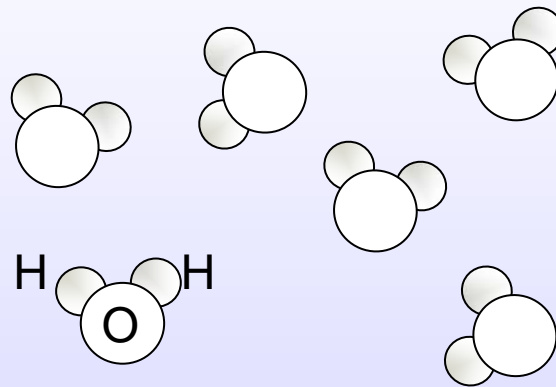


# 材料中原子的排列方式

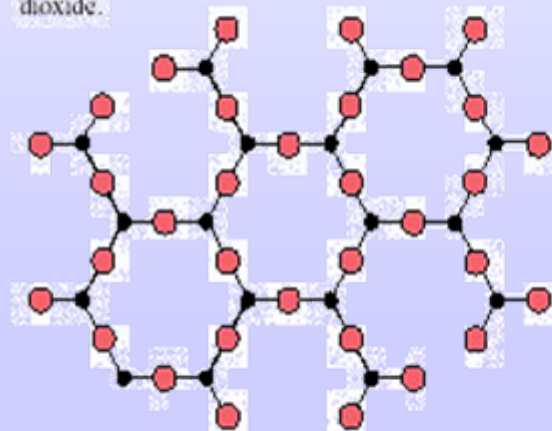


# 原子的无序排列和短程有序排列 (SRO):

- 无序排列: 高温和低压下的单原子气体
- 短程有序: 水蒸气、无定形硅以及二氧化硅玻璃



noncrystalline silicon dioxide.



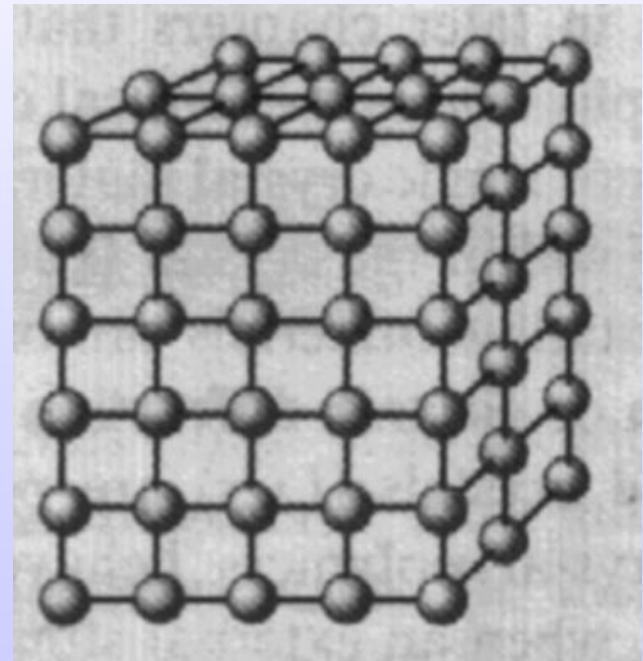
(a)

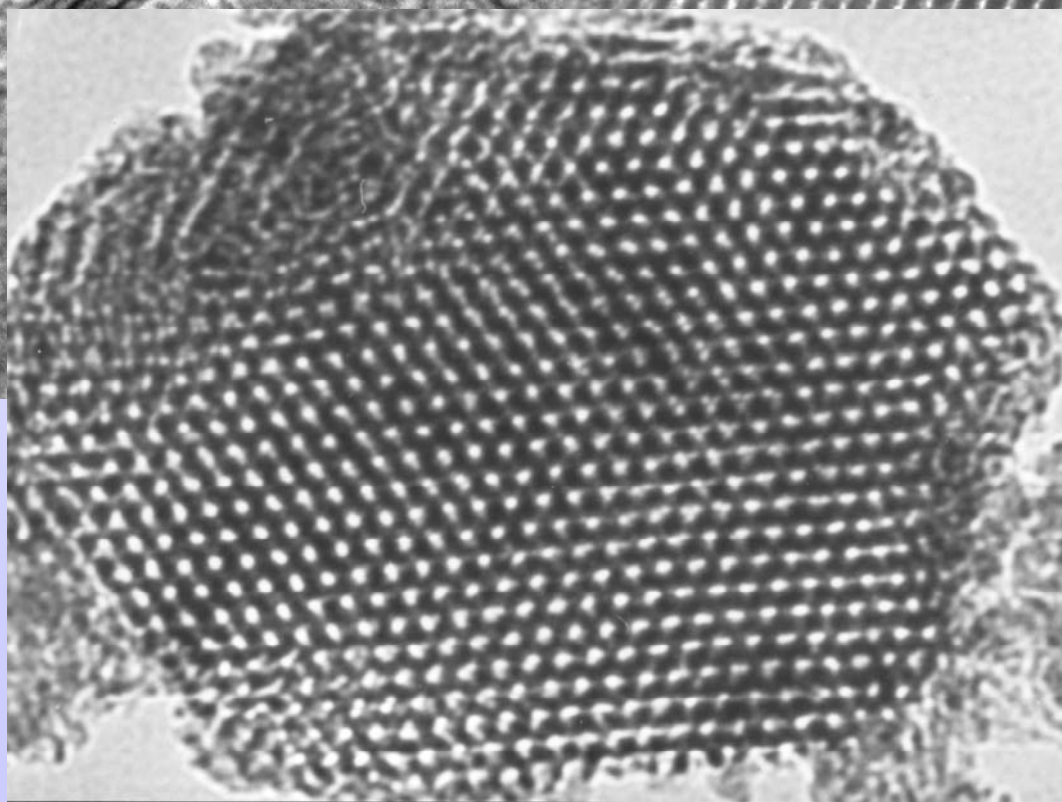
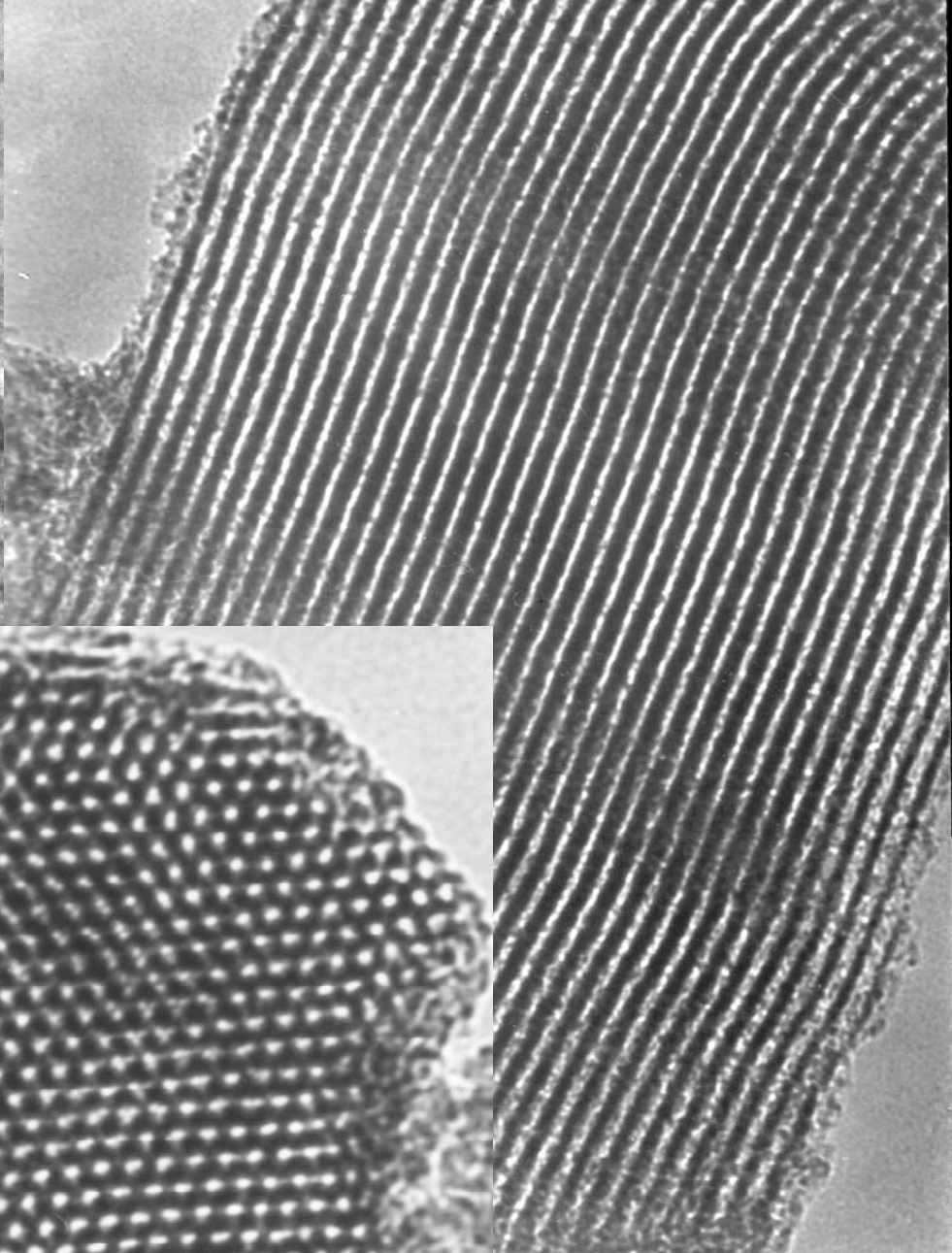
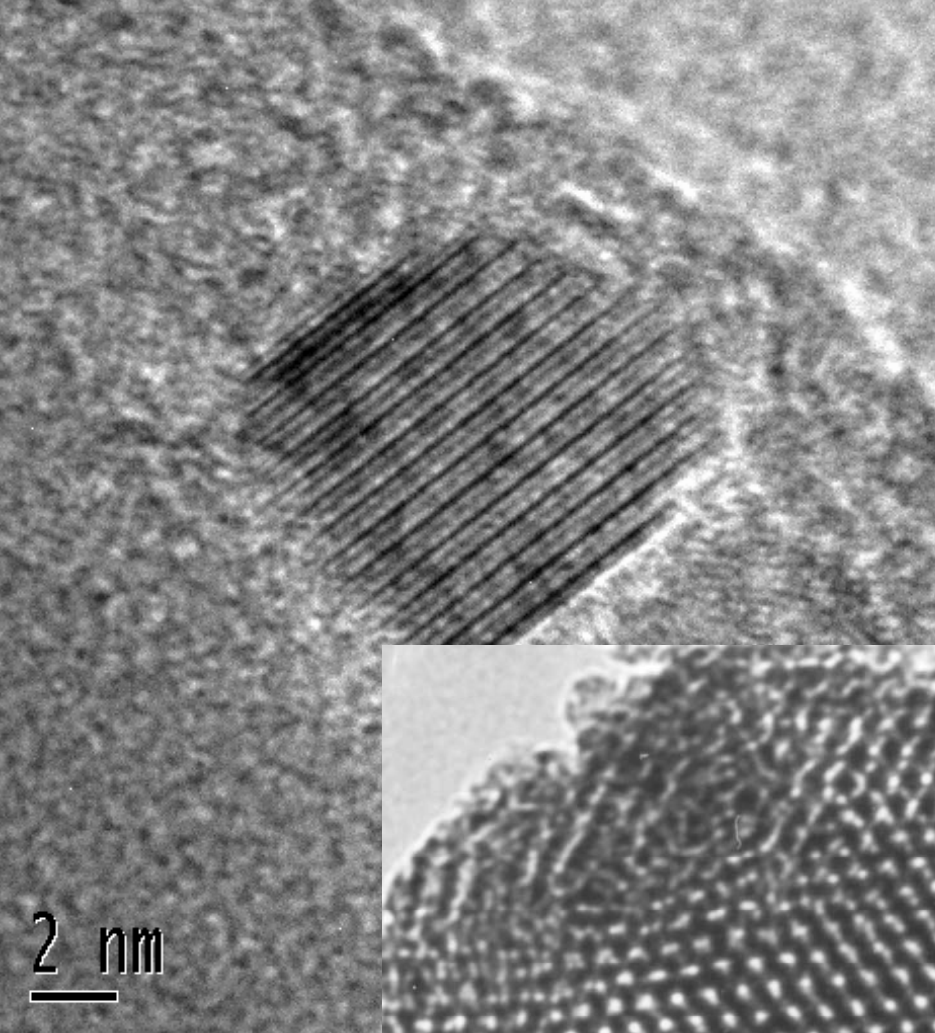


## 长程有序 (LRO):

---

- 大部分的固体材料，其原子/离子排列是按照规则的在三维空间呈周期性的重复排列的。
- 大部分的金属、合金、半导体、无机非金属材料以及部分高分子材料其内部质点的排列是长程有序的，即具有晶体结构。





# 单晶材料

---

- 由一个晶体组成，大量应用于电子和光学领域。例如，计算机集成电路板中应用单晶硅。



**Silicon Single Crystal**

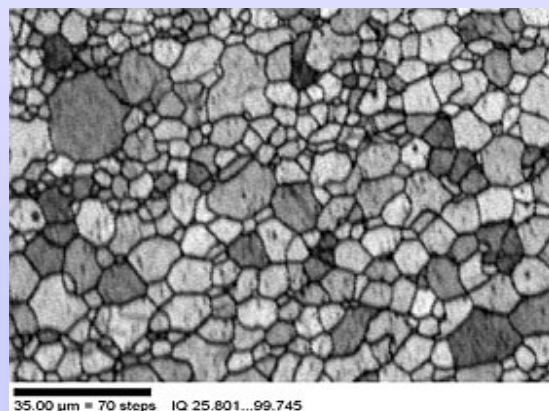
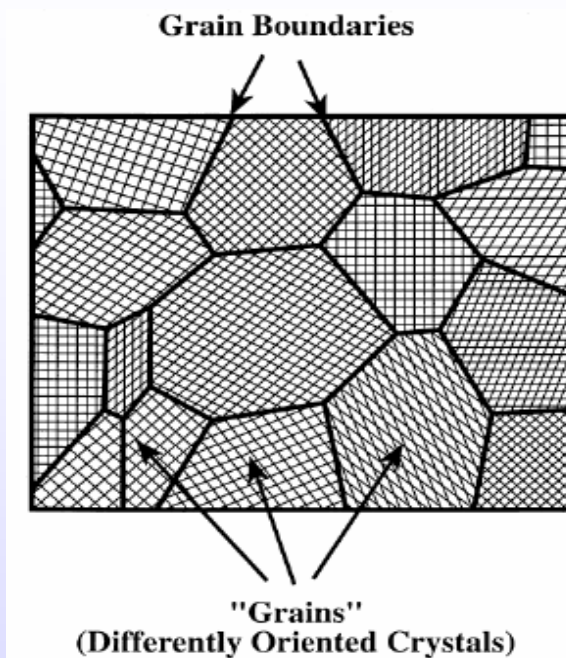
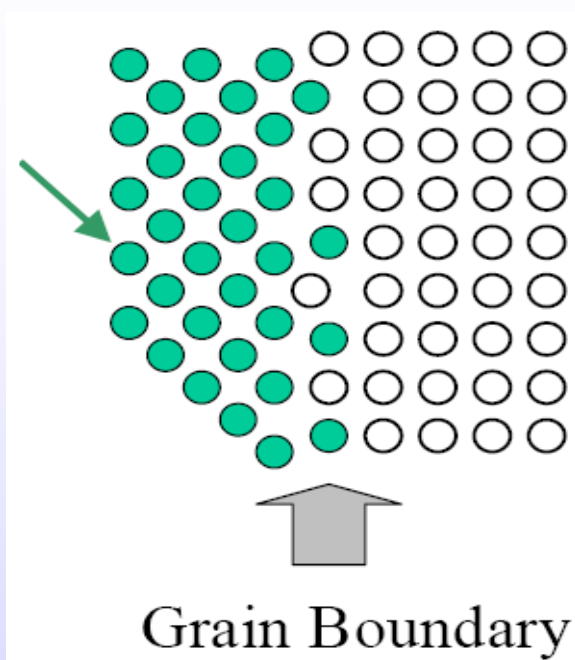


# 多晶材料

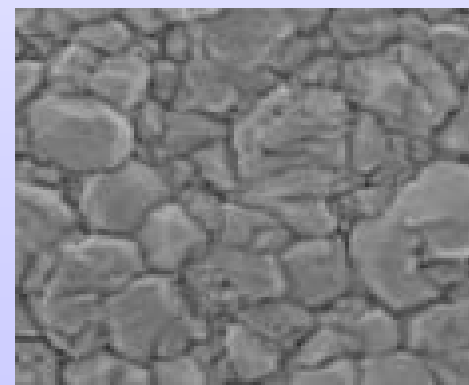
- 多晶材料由许多在空间不同取向的小晶体构成，小晶体之间的边界区域原子/离子排列不规则，称之为**晶界**。
- 工程上实际应用的大量晶体材料均为多晶材料，如钢材、铝合金等。



# 多晶材料的微观结构



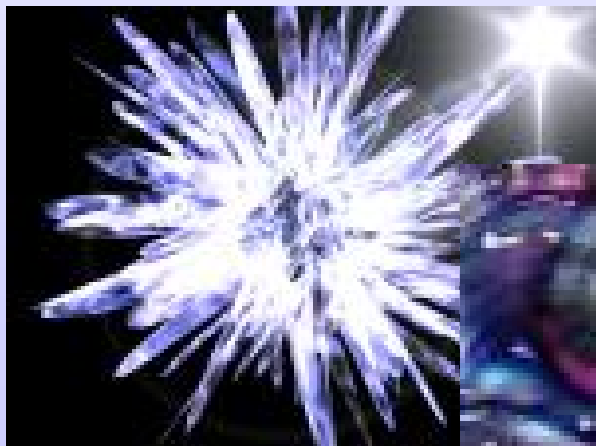
Au



ZnO

# 液晶

- **液晶**是一种内部质点具有特殊有序排列的高分子材料。
- 液晶高分子材料通常具有无定形结构，然而，在电场或温度变化等外部刺激下其分子在局部范围内排列有序，成为晶体，故称之为液晶。

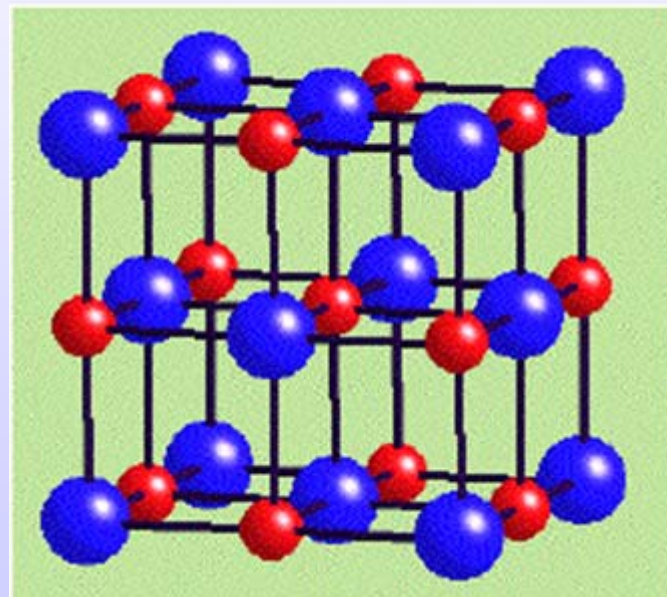


## 2.2.4 晶体结构

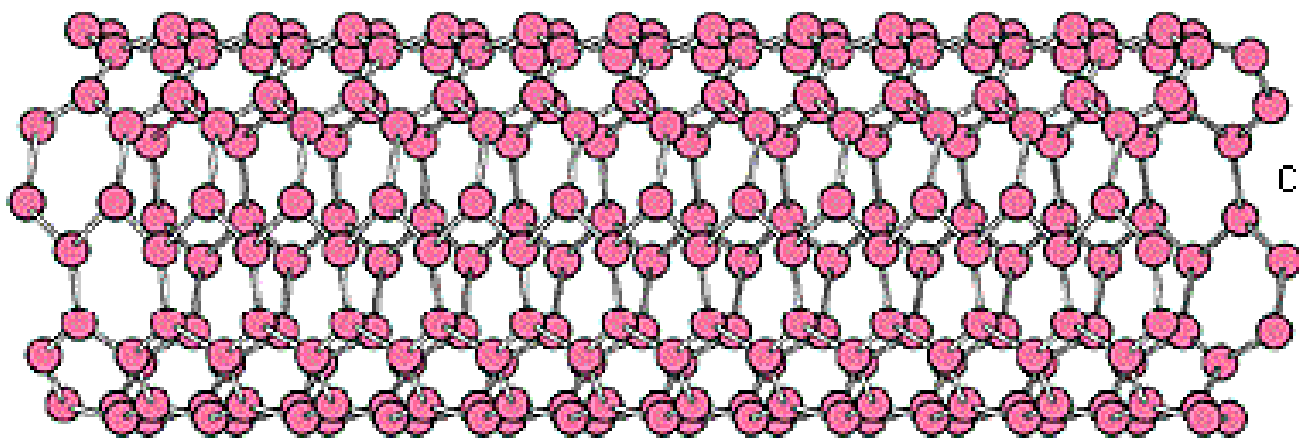
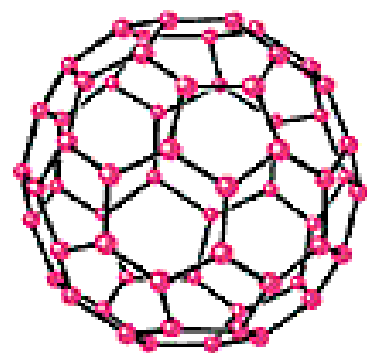
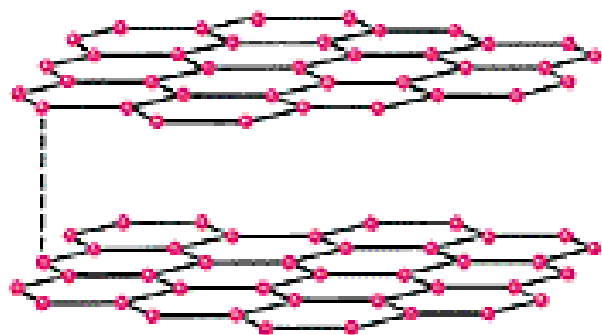
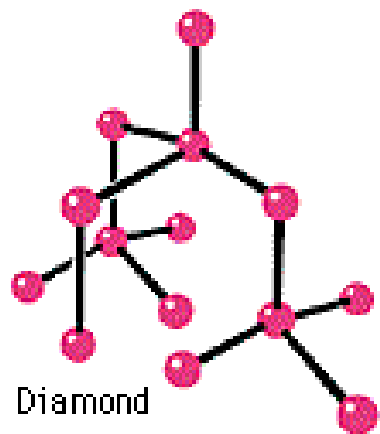
- 晶体：内部质点在三维空间呈周期性重复排列的固体。

### 单位晶胞

- 单位晶胞：能够充分反映整个晶体结构特征的最小构造单位。



# 同质多晶



# 材料的晶体结构

---

- 金属材料大多数为晶体（Hg除外），多为立方、六方晶系。
- 无机非金属材料主要是Si、O组成的四面体以不同形式的连接，形成岛状、成群状、链状、层状、架状等结构。
- 高分子材料由大量重复的结构单元连接成链状、网状、聚集体。主要为非晶体结构，次要为晶体。

## 2.2.5 晶体结构缺陷

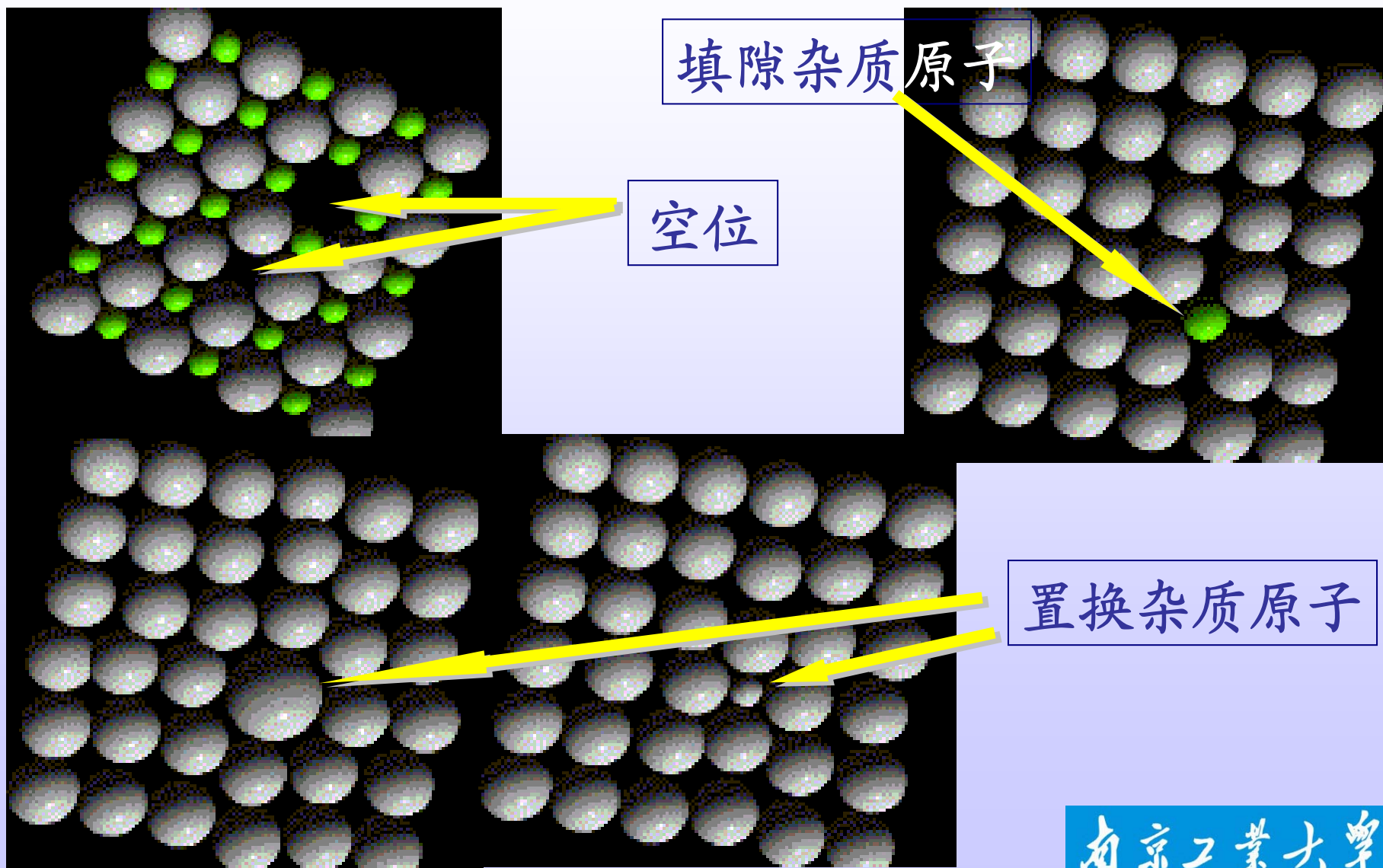
- 实际晶体中总是存在着缺陷
- 根据缺陷存在的范围可分为：

对性能的影响：

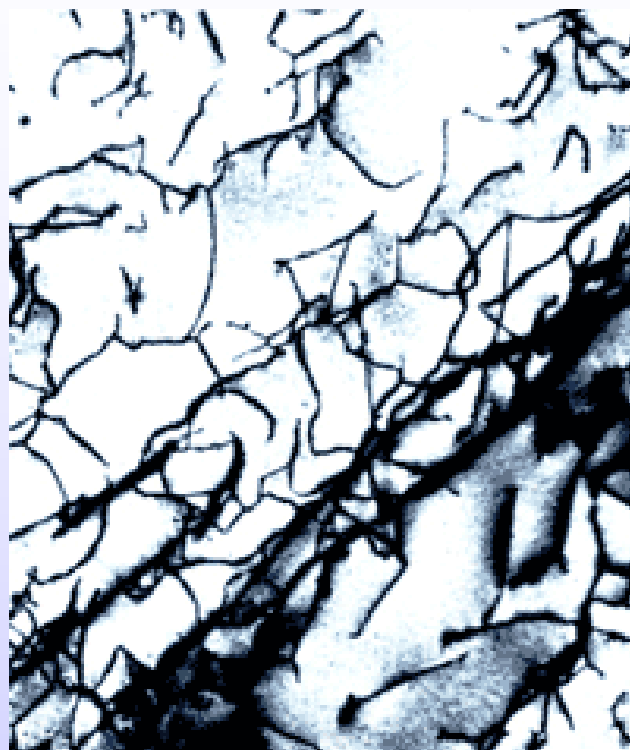
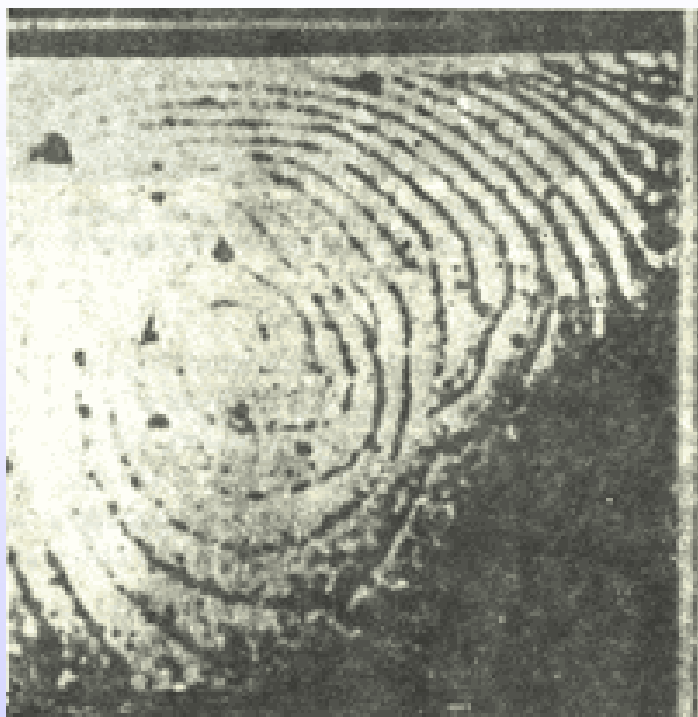
- 空位
  - 填隙原子/离子
  - 取代原子/离子
- } 点缺陷
- 位错
- 线缺陷
- 晶界
- 面缺陷

- 比容、比热容、电阻率
- 扩散系数、内耗、介电常数
- 光吸收
- 力学性能(固溶强化)

# 杂质缺陷



## ◆线缺陷——“位错”



晶体生长情况判断出位错的存在 透射电子显微镜观察到晶体中位错

对性能的影响：实际强度 $\ll$ 理论强度

# 自然界的缺陷现象



## 2.3 合成与加工

---

合成与加工是指建立原子、分子和分子聚集体的新排列，在从原子尺度到宏观尺度的所有尺度上对结构进行控制以及高效而有竞争力地制造材料和零件的演变过程。

- 合成 ( Synthesis)
- 常常是指原子和分子组合在一起制造新材料所采用的物理和化学方法。合成是在固体中发现新的化学现象和物理现象的主要源泉。
- 加工 (Processing)
- 这里所指的是成型加工，除了上述为生产出有用材料对原子和分子控制外，还包括在较大尺度上的改变，有时也包括材料制造等工程方面的问题。

# 材料的合成与加工


---


- 在材料科学与工程中，合成和加工之间的区别变得越来越模糊
- 合成是新技术开发和现有技术改进的关键性要素
- 现代材料合成技术是人造材料的唯一实现途径

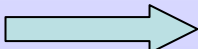
# 材料的制备

---

不同的材料制备方法，分别具有不同的材料科学基础内容，即：

冶金过程                                            冶金物理化学

熔炼与凝固                                            凝固学理论

粉末烧结                                            烧结原理

高分子聚合                                            聚合反应

# 冶金过程（化学冶金）

---

目的： 从原料中提取出金属

内容： 火法冶金

炼铁、炼铜

熔盐电冶金

电解铝、镁

湿法冶金

水溶液电解锌

. . . . .

# 熔炼与凝固（物理冶金）

---

目的:

1. 金属的精练提纯
2. 材料的“合金化”
3. 晶体的生长

内容:

1. 平衡凝固	4. 区域熔炼
2. 快速凝固	5. 玻璃的熔炼
3. 定向凝固	6. 熔融法提拉单晶

# 粉末烧结

---

目的: 1. 粉末成型  
2. 粉末颗粒的结合

内容: 1. 粉末冶金技术  
2. 现代陶瓷材料的制备

# 高分子聚合

---

目的： 实现小分子发生化学反应，相互结合形成高分子。高分子聚合是人工合成三大类高分子材料：塑料、橡胶、合成纤维的基本过程。

内容： 1 . 本体聚合      3 . 悬浮聚合  
2 . 乳液聚合      4 . 溶液聚合

# 材料的加工

---

传统意义上，材料的加工范畴包括四个方面：

- 材料的切削：车、铣、刨、磨、切、钻
- 材料的成型：铸造、拉、拔、挤、压、锻
- 材料的改性：合金化、热处理
- 材料的联接：焊接、粘接

# 材料的成型

---

三大类材料的成型技术在材料工程中是内容最为丰富的一部分。如果按材料的流变特性来分析，则材料的成型方法可分为三种：

1. 液态成型

金属的铸造、溶液纺丝

2. 塑变成型

金属的压力加工

3. 流变成型

金属、陶瓷、高分子成型

## 2.4 材料的性能与功能

---

- 材料的**性能** (Performance) 指材料对外部刺激（外力、热、电磁、化学刺激、药品）的反应或抵抗（被动地响应），又称“行为”，“表现”。如强度，电导率等。
- 材料的**功能** (Function) 指物质（材料）对应于某种输入信号时，所产生的质或量的变化，或其中某些变化会产生一定的输出，即能产生另一种效应。如压电效应，热电效应等。

# 物理性质的交互性——材料应用的关键点

---

- 现代功能材料不仅仅表现出单一的物理性质，更重要的是具备了特殊的物理交互性。例如：

电学-----机械

电致伸缩

机械-----电学

压电特性

磁学-----机械

磁致伸缩

电学-----磁学

巨磁阻效应

电学-----光学

电致发光

# 使用性能（服役性能）

---

- 使用性能 (Service Performance) 是材料在使用条件下应用性能的度量，通常指材料在最终使用状态时的行为，是材料固有性质与产品设计、工程能力和人类需要相融合在一起的一个要素，必须以使用性能为基础进行设计才能得到最佳的方案。
- 使用性能取决于材料的基本性能。

# 使用性能

---

使用性能描述符



```
graph TD; A[使用性能描述符] --> B[可靠性、耐用度、寿命、性能价格比、安全性，  
及材料固化为产品后，表征产品优良程度的各种  
性能指标，如飞行速度.使用温度等。];
```

可靠性、耐用度、寿命、性能价格比、安全性，  
及材料固化为产品后，表征产品优良程度的各种  
性能指标，如飞行速度.使用温度等。

# 材料要素间联系

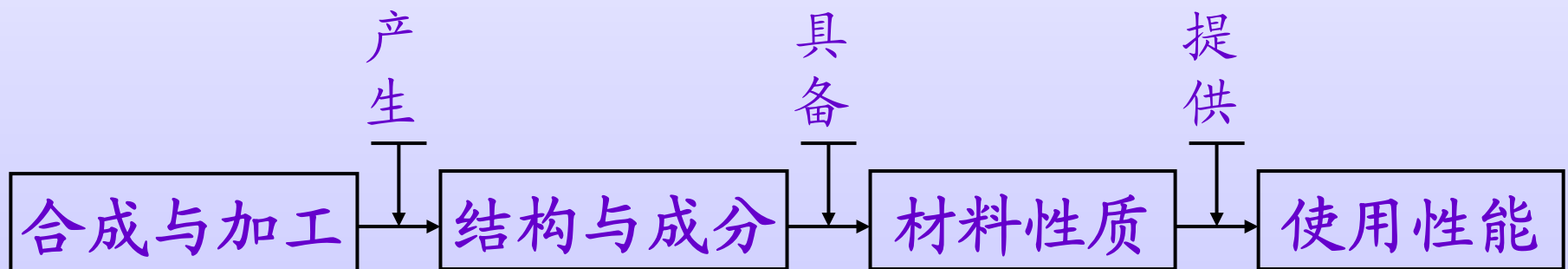
---

材料的性质取决于其内部结构，只有改变了材料的内部结构才能达到改变和控制材料性能的目的，而材料的合成和加工工艺常常对材料的结构起决定性作用。

# 与其它要素的关系

---

从材料的产生到进入使用过程，直至损耗，四大要素存在着逻辑上的因果顺序，即：



# 总结

---

无论是为制造某种产品选择合适材料，选择最佳的加工工艺，正确地使用材料，还是改善现有材料或者研制新材料，都需要我们具有材料内部结构与性能的知识，都需要材料科学的理论指导。特别是新型材料，其主要特点是以科学为基础，与新技术、新工艺的发展有相互依存、相互促进的关系。