

材料科学基础 (A)

主讲：张骞

联系电话：13970784755

E-mail: zhangqian@jxust.edu.cn

QQ:27427342

1

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

参考教材



1. 张联盟等编《材料科学基础》，2008.8，第二版，武汉理工大学出版社；
2. 潘金生等著《材料科学基础》，2003.8，第一版，清华大学出版社；
3. 余永宁等编《材料科学基础》，2012.9，第二版，高等教育出版社
4.

2

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

成绩评定方式

- 总评成绩 = 平时成绩 (20%) + 实验成绩 (20%) + 考试成绩 (60%)

— 其中：

- 平时成绩主要课堂笔记和作业完成情况

3

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

第一讲 绪论

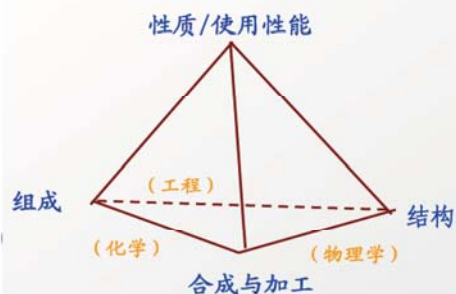
4

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

材料科学基础主要
学习什么？材料科学基础
Fundamentals of
Materials Science

5

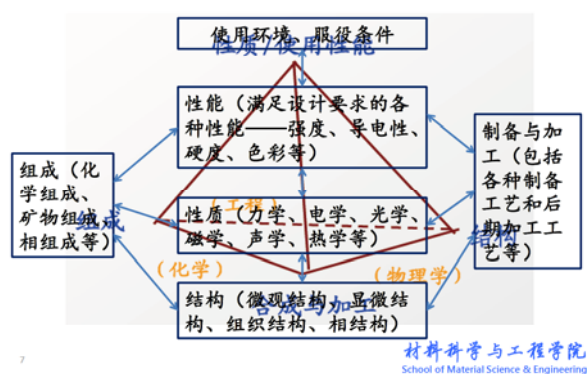
材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

讲原理，
重点研究“为什么？”重制造，
重点研究“怎么做！”

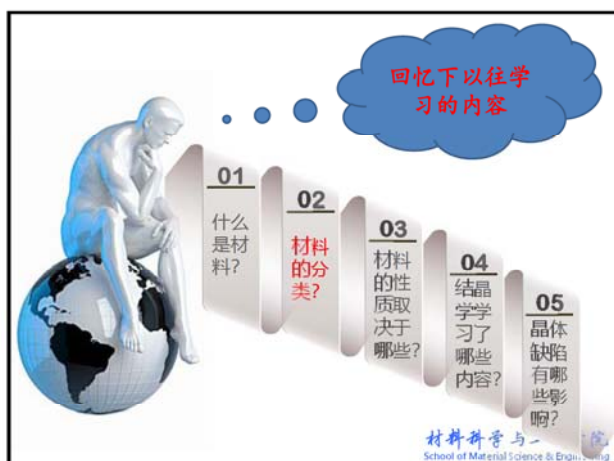
6

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

材料组成-结构-性质-工艺及其与环境的关系

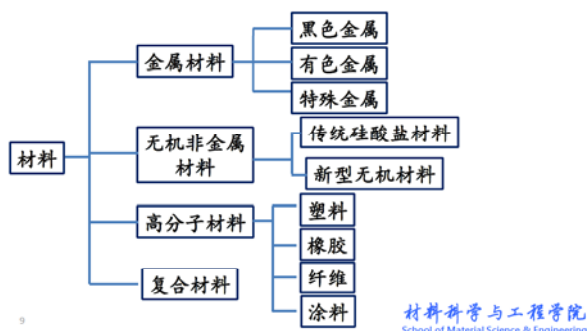


回忆下以往学习的内容

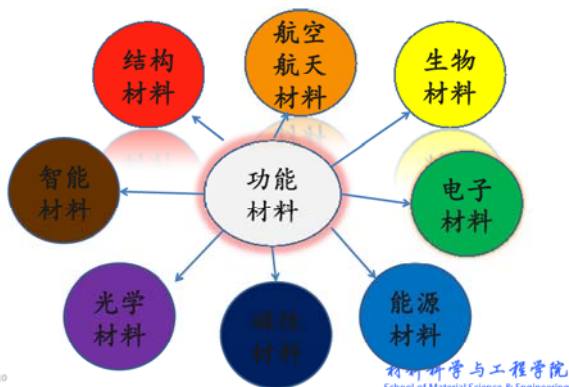


材料的分类

• 1) 按组成、结构特点分类:



• 2) 按照材料的功能分类:



10

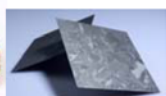
材料的分类

• 3) 按材料的结晶状态分类:

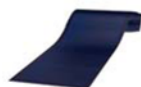
- 单晶材料: 由一个比较完整的晶粒构成的材料
- 多晶材料: 有许多晶粒组成的材料, 其性能与晶粒大小, 晶界的性质有密切关系
- 非晶体材料: 由原子或分子排列远程无序的固体材料构成, 如玻璃, 高分子材料



金刚石单晶



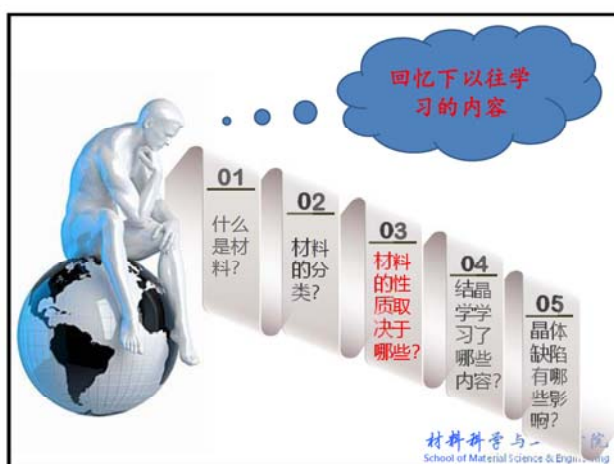
多晶硅



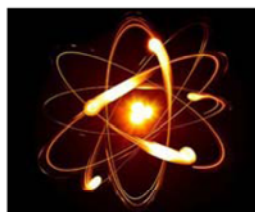
非晶硅柔性膜

11

材料科学与工程学院 School of Material Science & Engineering



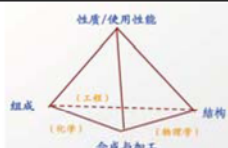
材料的性质取决于哪些？



材料的性质取决于材料的结构！

材料的结构可以从以下几个层次考虑：

- 1 原子及电子结构；
- 2 原子的空间排列；
- 3 组织结构或相结构。



13

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

原子层结构及核外电子运动状态 ——《无机化学》

碱金属元素的原子结构

元素名称	元素符号	核电荷数	电子层结构	原子半径 (nm)	n, l
锂	Li	3	$1s^2 2s^1$	0.152	2, 0 (1s)
钠	Na	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	0.186	3, 0 (2p)
钾	K	19	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$	0.227	4, 0 (3d)
铷	Rb	37	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^1$	0.248	5, 0 (4f)
铯	Cs	55	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4f^{14} 5s^2 5p^6 6s^1$	0.268	6, 0 (5g)

几个概念：

- 1 主量子数
- 2 副量子数
- 3 磁量子数
- 4 自旋量子数

14

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

电负性元素周期表

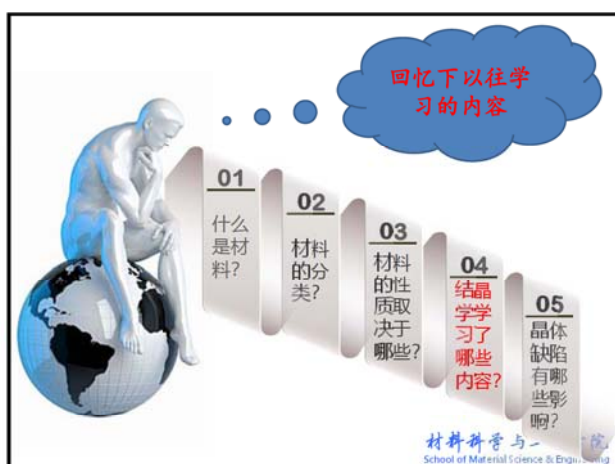
→ 原子半径减小 → 电负性增加 → 电负性增加 →

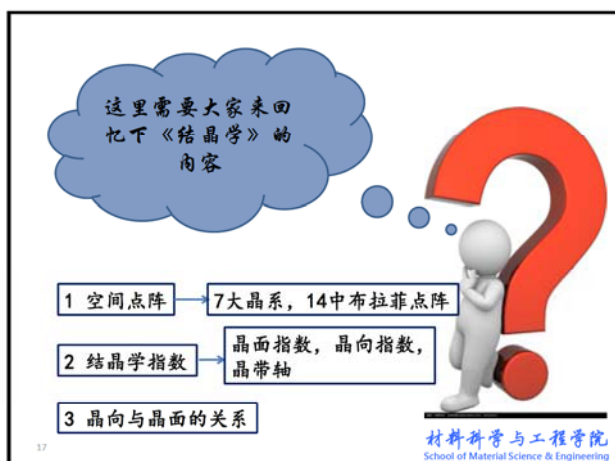
	IA	IIA	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII	XIII	XIV	XV	XVI	XVII	XVIII
1	H 2.20												B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	He 0.00
2	Li 0.98	Be 1.57											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar 0.00
3	Na 0.93	Mg 1.31											Ga 1.61	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 0.00
4	K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.99	Zn 1.65	In 1.81	Sn 2.01	Sb 2.05	Te 2.35	I 2.66	Xe 0.00
5	Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.48	Mo 1.46	Tc 1.49	Ru 1.83	Rh 1.87	Pd 1.93	Ag 1.93	Cd 1.69	Hg 1.78	Tl 1.94	Pb 2.00	Bi 2.17	Po 2.00	
6	Cs 0.79	Ba 0.89		Hf 1.38	Ta 1.48	W 1.76	Re 1.76	Os 1.85	Ir 1.91	Pt 1.95	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.00	At 2.20	
7	Fr 0.7	Ra 0.9		Rf 1.38	Hf 1.48	Ta 1.76	W 1.76	Re 1.85	Os 1.91	Ir 1.95	Pt 1.95	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.00	

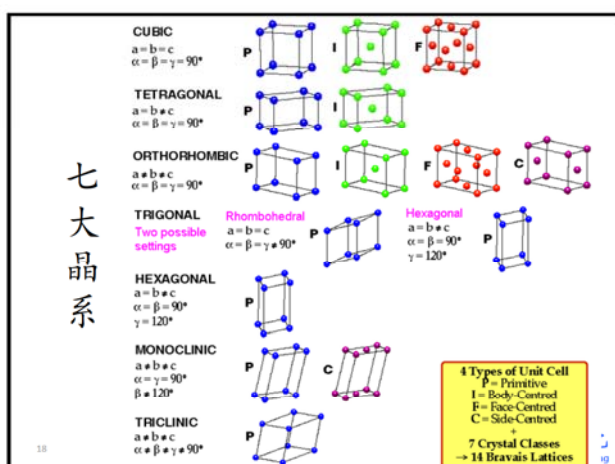
电负性元素周期表。电负性是指元素在化合物中吸引电子的能力。电负性越大，吸引电子的能力越强。电负性在周期表中呈周期性变化，从左到右逐渐增大，从上到下逐渐减小。电负性在元素周期表中的分布规律如下：

电负性在元素周期表中的分布规律如下：

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering







晶体中质点的堆积

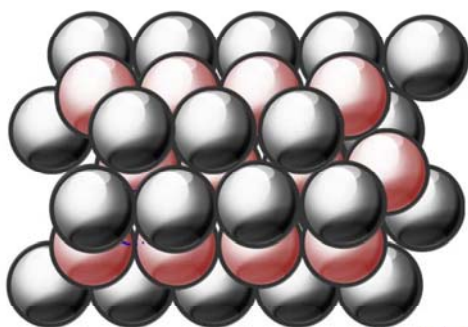
• 最紧密堆积原理：

晶体中各离子间的互相结合，可以看作是球体的堆积，球体堆积的密度越大，系统的势能就越低，晶体越稳定，此即**球体最紧密堆积原理**

适用范围：**典型的离子晶体和金属晶体。**

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

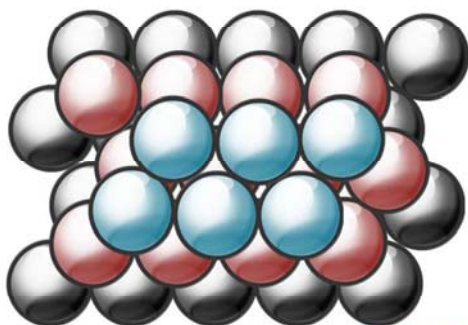
最紧密堆积方式



20

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

最紧密堆积原理与最紧密堆积方式



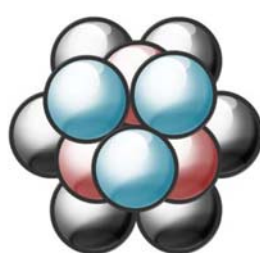
21

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

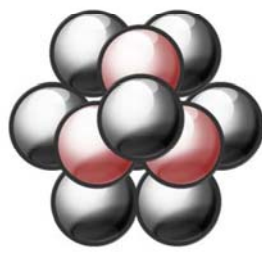
面心立方最紧密堆积和六方最紧密堆积

- 球体在空间的堆积是按照ABAB……的层序来堆积，这样的堆积可以取出一个六方晶胞，称为六方最紧密堆积。
- 另一种堆积方式是按照ABCABC……的堆积方式，这样的堆积可以取出一个面心立方晶胞，称为面心立方最紧密堆积。
- 两种最紧密堆积的配位数均为12

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

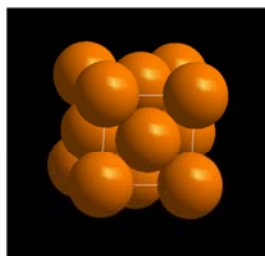


• ABCABC……堆积

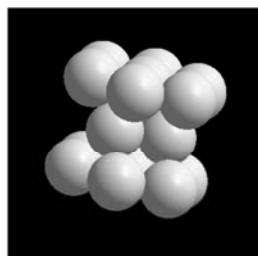


• ABAB……堆积

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering



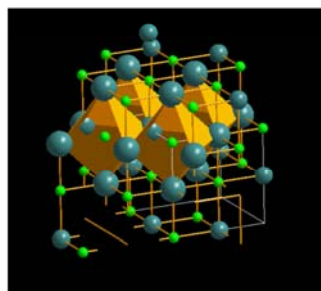
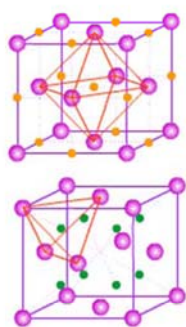
面心立方结构



密排六方结构

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

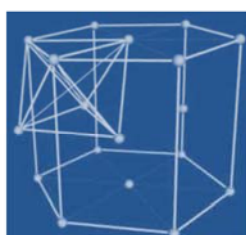
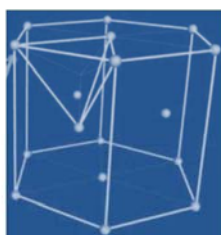
面心立方四面体空隙与八面体空隙



材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

25

密排六方中四面体和八面体



材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

26

影响晶体结构的基本因素

➤ 内在因素

- ✓ 晶体中质点的堆积
- ✓ 质点的相对大小
- ✓ 配位数与配位多面体
- ✓ 离子极化

➤ 外在因素

- ✓ 同质多晶与类质同晶
- ✓ 晶型转变

原子处于孤立状态时原子半径定义：从原子核中心到核外电子的几率密度趋于零处的距离，亦称为范德瓦半径。
原子处于结合时，根据X衍射可以测出相邻原子之间的距离，称为晶格常数。

配位数：一个原子（或离子）周围同种原子（或异号离子）的数目称为原子（或离子）的配位数。用CN表示。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

正离子配位数与正负离子半径比之间的关系

$\frac{r_+}{r_-}$	配位多面体形	配位数
0.000-0.155	哑铃形 (直线)	2
0.155-0.225	平面三角形	3
0.225-0.414	四面体形	4
0.414-0.732	四方平面形	6
0.732-1.000	八面体形	8
	十二面体形	12

CO₂, Cdl₂
 SiO₂, GeO₂
 TiO₂
 CaF₂

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

离子的极化影响?

正负离子间距缩短

未极化

弱极化

强极化

极化带来哪些变化?

共价键

导致配位数降低

离子极化示意图

键中共价成分增加

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

结晶化学定律

- 1926年哥希密特提出来的
- 内容: 晶体的结构取决于组成质点的数量关系、大小关系和极化性能。
 - 这些因素相互作用又取决于晶体的化学组成, 究竟哪种因素其主要作用, 视具体情况而定, 不能一概而论。

化学式类型	AX	AX ₂	A ₂ X ₃	ABO ₃	ABO ₄	AB ₂ O ₄
结构类型举例	氯化钠型	金红石型	刚玉型	钙钛矿型	钨酸钙型	尖晶石型
实例	NaCl	TiO ₂	Al ₂ O ₃	CaTiO ₃	PbMoO ₄	MgAl ₂ O ₄

30

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

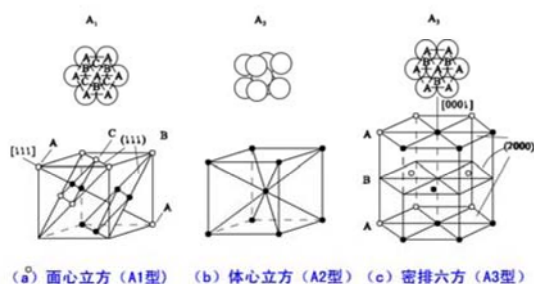
同质多晶、类质同晶

- **同质多晶**：化学组成相同的物质，在不同的热力学条件下形成结构不同的晶体的现象。
- **类质同晶**：化学组成相似或相近的物质，在相同的热力学条件下，形成的晶体具有相同的结构。

31

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

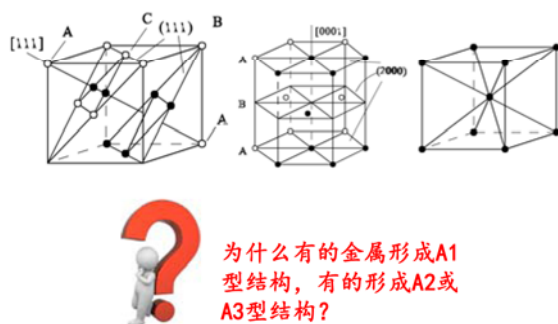
单质金属晶体的结构



常见金属晶体的晶胞结构

32

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering



33

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

- 周期表中IA族的碱金属和IB族的铜银金系列之间的差别是比较典型的。碱金属原子最外层电子皆为 ns^1 ，为了实现最大程度的重叠，原子之间互相靠近一些较为稳定，配位数为8的一圈其键长比配位数为12的一圈键长短一些，即A2型结构对碱金属更合适，更稳定些。铜，金，银元素在最外层电子内都具有 d^{10} 的电子结构，这意味着d轨道5个方向全被电子占满，这些不参与成键的d轨道在原子进一步靠近时产生斥力，使原子不能进一步靠近，因此，接触距离较大的A1型结构就比较稳定。

34

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

金属材料的特点

- 金属或合金在组成上不遵守定比或倍比定律
- 金属或合金在力学性质上表现出良好的塑性和延展性

35

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

非金属元素单质的晶体结构

- 惰性气体元素的晶体
在低温下形成A1（面心立方）和A3（密排六方）结构。
- 其他非金属元素单质的晶体结构

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

休谟-包瑟瑞规则

如果某非金属元素的原子能以单键与其他原子共价结合形成单质晶体，则每个原子周围共价单键的数目为8减去元素所在周期表的族数(m)，即共价单键数目为(8-m)。

这个规则亦称(8-m)规则。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering



X_2 (X—卤素原子)
第VII族元素单质



S、Se原子
第VI族元素单质



P_4



As

Sb

Bi

第V族元素单质



第IV族元素单质

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

- 值得注意的是O₂, N₂及石墨(C)不符合(8-m)规则

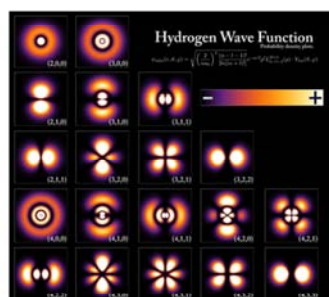
其中O₂, N₂是3键, 分别一个σ键和两个π键
石墨是sp²杂化后和同一层上的C行成σ键,
剩余的p_z电子轨道形成离域π键

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

谢谢大家!

40

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering



41

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering