第二章 材料科学与工程的四个基本要素

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。

第二章 材料科学与工程的四个基本要素

合成与加工

性质/使用性能

结构

（化学）

（工程）

（物理学）

组成

2.1 材料的组成

地壳中各元素的储量

材料所用的原料均取自于地壳，地壳的90％是由O、Si、Al、Fe、Ca五种主要元素构成。

1、地壳中主要元素储量

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

2、材料的化学组成

金属 单质、合金 如 Fe、Al、Cu、Ti

陶瓷 MOx、M(OH)x、非金属氧化物 如Al2O3、

MgO、TiO2、ZnO、SiO2、SiC、BN

水泥 SiO2－CaO－Al2O3－Fe2O3

玻璃 SiO2－CaO－Na2CO3

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1－100万

2.2、材料的结构

定义: 组成材料的原子或分子之间的空间分布。

材料的结构决定材料的性能。

内涵： 包含化学成分、晶体结构和缺陷、相组成、形貌等。

材料的结构

键合结构

晶体结构

组织结构

电负性：不同元素的原子在分子中吸引电子的能力 ,

与原子的亲合能和第一电离能之和成正比

电负性与键型的关系

▲ 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；

▲ 电负性相差大的不同原子结合形成离子键；

▲ 电负性相差小的不同原子结合形成共价键和

离子键的混合键。

2.2.1、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。

无方向性和饱和性－电子可在晶格之间自由活动。

极性还是非极性？

2.2.1、材料中的化学键

离子键－正负离子之间的引力所形成的键力。

无方向性，有饱和性，作用力强

2.2.1、材料中的化学键

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。有方向性和饱和性。

本质是原子轨道重合后，高概率的出现在两个原子核之间的电子与两个原子核之间的电性作用。

2.2.1、材料中的化学键

范德华键 －分子之间的作用力。

较弱，作用能在几十

kj/mol以下。

（化学键120－600kj/mol）

氢键－ 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。比范德华键略强。

如H2O、HCl

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

键型特点与物质物性的关系

▲ 实际上的凝聚态物质的键合情况往往不是

单一的，而是混合的

▲ 电负性是一个非常有用的概念，可用来定性

判断形成凝聚态所采取的结合类型。

▲ 物质的键合方式决定其性能。

在熔点、硬度上反映明显。结合能大的材

料，具有高强度、高熔点。

键合结构对材料性能的影响

键合结构对材料性能的影响

2.2.2、晶体结构

1、晶体结构

2、晶体的缺陷

3、固溶体

4、材料的结构

1、晶体结构

晶体－原子或原子团、离子或离子团按一定

规律呈周期性地排列构成的物质

单晶

固体 多晶

非晶

晶 体- 原子排列长程有序，有周期

材料的结构----晶体结构

非晶体- 原子排列短程有序，无周期

准晶体- 长程准周期性和非晶体学对称性

液晶 - 流动性、有序排列和各向异性

非晶

多晶

单晶

七大晶系

晶体性质

▲ 均匀性

▲ 各向异性

▲ 自发地形成多面体外形

▲ 有明显确定的熔点

▲ 有特定的对称性

▲ 使X射线产生衍射

金刚石的晶体结构图

返回

石墨的晶体结构图

返回

晶体结构

SO2

晶体结构

晶体结构

非晶结构的性质

＊ 各向同性

＊ 亚稳态

＊ 无固定熔点

＊ 不能使X射线产生衍射

分子排列存在位置上的无序性，但在取向上仍有一维或二维的长程有序性，也可称为位置无序晶体或取向有序液体。

液晶

向列型 　　　　　　　　　　　近晶型　　　　　　　　胆甾型

液晶

热致液晶

溶致液晶

双折射现象

一束光射入液晶后，分裂成两束光的现象

材料：有机化合物

电光效应

在电场作用下，液晶的光学特性发生变化

Kevlar

杜邦公司化学家Stephanie Kwolek发明了一种非常著名的材料Kevlar。在60年代她发现了全新的液晶聚合物，她凭着直觉对多数人拒绝研究的芳纶聚合物溶液（浑浊的可流动的液体）进行纺丝，得到了一种比以往合成纤维强度和刚度大的多的纤维。

1971年Kevlar开始进入市场，其比强度是钢的5倍，同时密度只有玻纤的一半。其应用最有名的例子便是制作防弹衣，但它还有很多用途，包括子午线轮胎帘线、刹车垫、赛艇、飞机复合材料和拉索桥等。

Stephanie Kwolek

凯夫拉的应用

Nylon 6,6

Poly(m-phenylene isophthalamide)

(Nomex)

Poly(p-phenylene terephtalamide)

PPT (Kevlar)

液晶高分子的其它应用

热致液晶与热塑性塑料共混，“就地”形成微纤结构，增强基体力学性能（例如，聚碳酸酯/聚酯液晶，聚醚砜/聚酯液晶等）。

液晶材料热膨胀系数小，适用于光导纤维的被覆。

微波吸收系数小，耐热性好，适用于制造微波炉具。

具有铁电性，适用于显示器件、信息传递和热电检测等。

准晶

＊ 介于晶体和非晶体之间

＊ 结构完全有序

＊ 不具有平移对称性

＊ 具有宏观对称性

＊ 极低的导热率、高硬度、低表面能、低摩擦系数

同时具有长程准周期平移性和非晶体学旋转对称性的固态有序相

2. 晶体缺陷

点缺陷

类型 线缺陷

面缺陷

形成原因- 热缺陷、杂质缺陷、非化学计量缺陷等

对性能的影响-

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）

  1-大的置换原子

2-肖脱基空位

3-异类间隙原子

4-复合空位

5-弗兰克尔空位

  6-小的置换原子

点缺陷的类型

线缺陷－在一维方向上偏离理想晶体中的

周期性、规则性排列所产生的缺陷。

线缺陷的产生与材料的韧性、脆性密切相关。

对性能的影响：

实际强度<<理论强度

面缺陷－是指在二维方向上偏离理想晶体中的

周期性、规则性排列而产生的缺陷。

如晶界、表面、堆积层错、镶嵌结构等。

面缺陷的取向及分布与材料的断裂韧性有关。

对性能的影响

表面

—— 氧化、腐蚀、磨损

晶界、亚晶界

相界

强度、电学、热学、光学、

耐腐蚀等性能

　面缺陷－晶界

3、固溶体

固溶体－以某一A组元为溶剂，在其晶体点阵中

溶入B组元原子（溶质原子）所形成的

均匀混合的固体。

它保持溶剂的晶体结构类型

1） 置换固溶体－ 溶质原子占据溶剂点阵的阵点。

有无限溶解和部分溶解。

2） 间隙固溶体－ 溶质原子分布于溶剂晶格间隙

而形成的固溶体 。

4、材料的结构

金属材料

大多数为晶体（Hg除外）

多为体心、面心立方和六方晶系。

碱金属－均为体心立方结构

碱土金属－多为六方结构

过渡金属－体心立方、六方 面心立方

主要是 SiO 四面体

以不同形式的连接，形成

岛状、链状、层状、网状等结构。

无机非金属材料

硅酸盐聚合结构

陶瓷 通常含有一种或多种的晶相、

一定量的玻璃相，少量的气相。

水泥、玻璃 属近程有序、远程无序的玻璃

非晶体结构。

高分子材料结构

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。

2.3 材料的性能

材料性能是用于表征材料在给定外在条件下行为的参量。

1、力学性质 2、 物理性质 3、化学性质

硬度 磁学 催化

刚度 光学 防腐

强度 热学

塑性 电学

韧性 声学

1、材料力学性质

强度：材料抵抗外应力的能力。

与缺陷、键力有关。

表征：抗拉强度、抗弯强度、抗压强度

塑性：外力作用下，材料发生不可逆的

永久性变形而不破坏的能力。

表征：延伸率δ

硬度：材料在表面上的小体积内抵抗变形

或破裂的能力。

弹性：在外力作用下材料产生变形，外力除去

后能恢复原状的能力。

刚度：抵抗弹性变形能力。

表征： 弹性模量、杨氏模量、剪切模量

疲劳强度：材料抵抗交变应力作用下

断裂破坏的能力。华航611航班：金属疲劳

表征：疲劳极限、疲劳寿命

抗蠕变性：材料在恒定应力（或恒定载荷）作用下

抵抗变形的能力。

表征：蠕变极限、持久强度

韧 性：材料从塑性变形到断裂全过程中

吸收能量的能力

表征：断裂韧性 KIC、断裂韧性 JIC

。

材料的物理性质

磁学性质

光学性质

电学性质

热学性质

材料物理性能

1. 电学性能表征：导电率、电阻率、介电常数

2. 磁学性能表征：磁导率、矫顽力、磁化率

3、 光学性能表征： 光反射率、光折射率、光损耗率

4. 热学性能表征：热导率、热膨胀系数、熔点、比热

失效分析--材料使用性能的重要研究内容

断裂

磨损

腐蚀

三类主要的材料力学失效形式

2.1.3失效分析

TITANIC

2.1.3失效分析

3、化学性能

材料抵抗各种介质作用的能力。

包括溶蚀性、耐腐蚀性、抗渗性、抗氧化性，即

化学稳定性。还有催化性和离子交换性。

材料结构、结合键、组成相、性能的关系

种类 键型 结构特征 组成相 性能

金属 金属键 晶体规则排列 固溶体、两相 高韧性、高延展性、导热、导电、不透

明、易腐蚀（Pt、Au、Ir 、Ag除外）

无机 离子键 单晶、多晶体 固溶体、玻璃相 熔点、硬度、强度高，耐高温、腐蚀、

非金属 共价键 非晶态 晶相、 气相 磨损、氧化，弹性模量大，化学稳定

性好，脆性、绝缘

高分子 分子键 由103－106个 晶态、非晶态 轻、韧性、耐磨、易加工、隔热、绝缘、

共价键 结构单元连成 化学稳定性好、光老化、 不耐热

大分子链、网状

国际材料数据库建设简况

英、美金属学会合建金属材料数据库

西方七国组成有关新材料数据及标准的“凡尔赛计划”

原苏联及东欧各国组成了COMECON材料数据系统，包括16个数据库

北京科技大学等单位联合建成材料腐蚀数据库

武汉材料保护研究所建成材料磨损数据库

北京钢铁研究总院建立合金钢数据库

航天航空部材料研究所建立航天材料数据库

2.4 合成与加工

1.定义

2.合成与加工的主要内容

3.与其它要素的关系

4.发展方向

2.4.1、定义

合成与加工－用化学、物理方法建立原子、分子和分子团

的新排列，在所有尺度上（从原子尺寸到宏

观尺度）对结构的控制，以及高效而有竞争

力地制造材料与元件的过程。

需要说明的问题

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

2.4.2、合成与加工的主要内容

2.4.2、 材料的合成与加工

一、 原料的选用

名称 主要原料

金属材料 天然金属矿

无机非金属 材料黏土类、石英类、长石类、

碳酸盐类、工业废渣

高分子材料 天然纤维、塑脂、橡胶，石油、天然气、煤

二、制造工艺

炼钢工艺

矿石—C还原 —生铁 — 吹氧精练 —非镇静钢 — 脱氧 — 镇静钢

高炉 饱和C 转炉 C低O高 浇包钢 C低无O

铝的生产工艺

铝矿石－生产Al2O3－纯Al2O3－电解制Al－液体Al－澄清－注锭

二、制造工艺

陶瓷的生产工艺

配料 — 混料 — 成型 — 干燥 — 施釉 — 锻烧 — 检验包装

水泥的生产工艺

配料— 粉磨 — 窑外分解 — 锻烧 — 冷却 — 破碎 — 熟料库 — 粉磨— 水泥库—包装—成品库—水泥出厂

玻璃的生产工艺

配料—溶炼—澄清—成型— 检验包装—出厂

二、制造工艺

高分子材料的生产工艺

裂解 聚合 加工

石油、天然气、煤——单体——高分子聚合体——高分子材料

橡胶 硫化－交联

单体－聚合－闪蒸脱气－凝聚－洗涤－脱水－干燥－成型－橡胶

塑料

单体－聚合－高压分离－低压分离－ 造粒－塑料－挤出、注塑、吹塑成型

纤维－熔融纺丝

玻璃钢－手糊 层压、模压、缠绕等工艺。

三、材料制备的方法

冶金过程

熔炼与凝固

粉末烧结

高分子聚合

1、冶金过程（化学冶金）

2、熔炼与凝固（物理冶金）

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

3、粉末烧结

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

4、 高分子聚合

四、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

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

２．塑变成型

3 .流变成型

金属的铸造、溶液纺丝

金属的压力加工

金属、陶瓷、高分子成型

材料的成型

五、材料表面工程

表面改性

表面防护

薄膜技术

----改变材料表面的性质

三束表面改性

化学表面改性 化学热处理

表面淬火

1、表面改性

激光束、电子束、离子束

腐蚀防护－大气、海水、工业介质腐蚀防护

摩擦磨损防护 －增加抗磨损性、润滑性

2、表面防