

C 面心立方、体心四方、密排六方

答: A。

11. 描述晶体的间隙时通常可用 r_A/r_B 表示, 其中:

A r_A 表示堆积原子的半径, r_B 表示形成间隙多面体的两个原子间的距离

B r_A 表示堆积原子的半径, r_B 表示形成间隙多面体的两个原子间的距离的一半

C r_A 表示堆积原子的半径, r_B 表示形成多面体间隙中可放入最大原子的半径

答: C。

12. 描述晶体材料(非高分子)的结构时有一套系统的结构参数, 但对高分子晶体结构进行描述时, 可

A 用高分子晶体的链节特性参数进行描述

B 用一般晶体材料(非高分子)中使用的同一结构参数描述

C 用高分子晶体结晶区的形态特点, 如束状晶区和折叠链晶区的多少进行描述

答: B。高分子晶体可用一般晶体材料中使用的各种晶体参数进行描述, 但高分子晶体的对称性比金属和无机材料差, 内含大量非晶区域。

13. 缺陷的特征是:

A 不随外界条件的改变而变动, 也不会合并和消失

B 随着各种条件的改变而不断变动, 有些可与产生、发展、消失、交互作用、合并和消失

C 随着各种条件的改变而不断变动, 但不产生交互作用, 不会合并和消失

答: B。晶体中缺陷存在交互作用, 合并和消失, 如: 正负位错的合并消失, 空位、间隙原子的复合消失等。

14. 点缺陷是指:

A 一个方向上的尺寸很小, 另外两个方向上的尺寸很大的一类缺陷

B 在两个方向上的尺寸很小, 另一个方向上的尺寸相对很长的一类缺陷

C 在 X、Y、Z 三个方向上的尺寸都很小的一类缺陷

答: C。点缺陷、线缺陷、面缺陷可以近似的分别看成是零维、一维、二维缺陷。

15. 位错线与滑移方向垂直和平行的位错分别为:

A 螺旋位错和刃型位错 B 刃型位错和螺旋位错

C 刃型位错和螺型位错

答: B。

16. 正、负刃型位错的半原子面在同一垂直于该面的力的作用下, 其移动方向:

A 相反且垂直于力的方向 B 相同且平行于力的方向 C 相反且平行于力的方向

答: C。位错线的滑移方向平行于应力的方向, 因而半原子面也平行于应力方向。

17. 三条位错线在一节点相交, 若有一条 b_1 指向该节点, 另两天 b_2 和 b_3 背离该节点, 则有:

A $b_1+b_2+b_3=0$

B $b_2+b_1-b_3=0$

C

$b_1+b_2-b_3=0$

答: A。

18. 派-纳模型给出了为克服点阵阻力, 推动位错前进相应的切应力表达式:

$\tau_p = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \exp(-2\pi\omega/b)$ ——其中 ω 为位错宽度, b 为位错强度。分析此式可知:

A 位错容易从原子排列稀疏的面滑移

B 位错容易从原子密排面滑移

面滑移

C 与位错滑移面平行的晶面间距越小, 该位错越容易滑移

答: B。原子密排面位错宽度大, 派-纳力小, 位错容易滑移; 原子密排面间距小, 派-纳力小, 位错容易滑移。与位错滑移面平行的晶面间距为原子密排面(易滑移面), 原子密排面的晶面间距大, 所以 C 选项也是对的。

19. 晶格常数等于 0.361nm 的面心立方晶体, 其 $\{2\}$ 的对称倾角晶界中的位错间距为:

A $\sim 73 \text{ \AA}$

C $\sim 103 \text{ \AA}$

答: C。对称倾角晶界中位错的间距为: $D = \frac{b}{2\sin(\theta/2)} = \frac{0.361}{2\sin(10.35^\circ)} = 10.35 \text{ nm} = 103.5 \text{ \AA}$

20. 试从点阵常数与不同固溶形式时原子进入结构的位置关系考虑, 当某点阵常数减小时, 通常可以认为是:

A 形成了置换固溶体

B 形成了减小固溶体

C 形成了间隙固溶体

判断

答: A. 对间隙固体, 由于间隙原子进入间隙位置, 只可能使点阵常数增大。对于置换固体, 若溶质原子尺寸较小, 在溶质原子附近点阵发生收缩, 使固体的点阵常数减小, 若溶质原子的尺寸较大, 在溶质原子附近的点阵发生膨胀, 平均点阵常数增大。

21. 非晶态固体常以原子径向分布函数 $RDF=4\pi r^2 \rho(r)$ 来描述, 其中 $\rho(r)$ 表示:

- A 不同半径 r 的原子密度的分布 B 不同半径 r 的球面上半径为 r 的原子密度分布
C 不同半径 r 的球面上的平均原子密度随 r 的变化

答: C. $\rho(r)$ 表示以任何一个原子为球心, 半径为 r 的球面上的平均原子密度 (统计平均值), 即表示不同半径 r 的球面上的平均原子密度随 r 的变化。

22. Voronoi 多面体是用于描述两域短程序特征的一种多面体, Voronoi 多面体是指:

- A 由相邻两个球的球心连线为棱所构成的多面体
B 以某个球为中心与最近邻的球心连线, 这些连线的垂直平分面所围成的多面体
C 一种称为 Gascell 模型的多面体——三级柱多面体

23. 玻璃网络特性的基本结构参数可用桥氧和非桥氧来描述, 考虑一玻璃成分为 12mol%Na₂O, 10mol%CaO 和 78mol%SiO₂, 则每个氧四面体的平均桥氧和非桥氧数分布为:
A 0.56 和 3.44 B 1.44 和 1.56 C 3.44 和 0.56

答: C. $R = \frac{12 \times 10 + 10 \times 2}{78} = 2.28$ 桥氧数: $Y = 2R - 2R = 8 - 4.56 = 3.44$ 非桥氧

数: $X = 2R - Z = 4.56 - 4 = 0.56$

24. 高分子非晶态的无规线团模型中分子链是在溶液中一样, 且无规线团中链段之间是无度链接, 在分子链间存在额外空隙, 即所谓的自由体积。高分子非晶态中

A 自由体积越大, 分子排列得越疏松, 密度越小

B 自由体积越大, 分子排列得越疏松, 密度越大 C 自由体积变化与密度无关

答: A.

25. 考虑扩散系数为常量的半无限一维扩散, 保持扩散源的浓度为 C_2 不变; 保持扩散介质中扩散物质的初始浓度为 C_1 , 且均匀分布, 这时扩散介质中扩散物质的浓度随扩散时间和扩散距离的变化可用下式来表示:

$$A \quad C(x,t) = \frac{C_2}{2} [1 - \exp(-\frac{x^2}{4Dt})] \quad B \quad C(x,t) = C_1 + (C_2 - C_1) [1 - \exp(-\frac{x^2}{4Dt})]$$

$$C \quad C(x,t) = \frac{C_1 - C_2}{2} + \frac{C_1 + C_2}{2} [1 - \exp(-\frac{x^2}{4Dt})]$$

答: B.

26. 一过氧金属氧化物, 存在有金属离子空位, 其空位浓度为 $[V_M]$, 原子跳动离

格点所需超过能垒的自由能为 ΔG , 原子的振动频率为 ν , 配位数为 z_p , 则空位机构, 原子跳动频率为:

$$A \quad \Gamma = \frac{\nu z_p}{V_M} \exp[-\frac{\Delta G}{kT}] \quad B \quad \Gamma = \nu z_p [V_M] \exp[-\frac{\Delta G}{kT}] \quad C$$

$$\Gamma = \frac{\nu z_p}{V_M} \exp[-\frac{\Delta G}{kT}]$$

答: B. $\Gamma = z_p R_M \omega$, 得 $R_M = [V_M]$, $\omega = \nu \exp[-\frac{\Delta G}{kT}]$ 代入得

$$\Gamma = \nu z_p [V_M] \exp[-\frac{\Delta G}{kT}]$$

27. 在柯肯达尔扩散实验中, 一个二元系统, A 组元的原子百分浓度为 0.4, 两个组元的实际扩散系数分别为 $D_A = 10^{-6} \text{cm}^2/\text{sec}$ 和 $D_B = 9 \times 10^{-6} \text{cm}^2/\text{sec}$, 在标志界面处 A 组元的成份随距离的变化率为 2.0cm^{-1} , 则互扩散系数及标志移动速度分别为:

$$A \quad 9.6 \times 10^{-6} \text{cm}^2/\text{sec} \text{ 和 } 2 \times 10^{-6} \text{cm}/\text{sec} \quad B \quad 9.6 \times 10^{-6} \text{cm}^2/\text{sec}$$

$$\text{和 } 1 \times 10^{-6} \text{cm}/\text{sec}$$

$$C \quad 9.4 \times 10^{-6} \text{cm}^2/\text{sec} \text{ 和 } 2 \times 10^{-6} \text{cm}/\text{sec}$$

答: A. 根据达朗公式,

恩波学校

上海精英

836-2-8-1030

精英教育

互扩散系数为:

$$\bar{D} = N_A D_B + N_B D_A = 0.4 \times 9 \times 10^{-8} + 0.6 \times 10^{-7} = 9.6 \times 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{sec}$$

标志运动:

$$V = (D_A - D_B) \frac{N_A}{x} = (10^{-7} - 9 \times 10^{-8}) \times 2.0 = 2.0 \times 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{sec}$$

28. 外场作用下原子的势场不再对称, 势场在作用方向上发生由高到低的倾斜, 造成空位向势场方向的运动速度:

- A 升高 B 下降 C 不变

答: B. 空位跳动几率为: $P = \exp(-\frac{E}{kT})$ 随势场方向, 空位势垒 E 增大, 因

而势场方向, 空位跳动几率降低, 即空位向势场方向运动速率下降. 对填隙原子在势场下的运动与空位相反, 即填隙原子向势场方向的运动速率升高.

29. 由于极化所引起的空位场是个纵向场, 它趋于减小纵向位移, 增加横向位移, 因此:

A 长光学纵波的频率 ω_L 恒大于长光学横波的频率 ω_T

B 长光学横波的频率 ω_T 恒大于长光学纵波的频率 ω_L

C 长光学纵波的声音是电磁声子, 长光学横波的声音是极化声子

答: A. 长光学纵波声音称为极化声子, 但只有长光学纵波伴随着宏观的极化电场, 所以, 极化声子应该主要是指纵光学波. 长光学横波不具有电荷性, 因此, 长光学横波声音是电磁声子.

30. 一简单立方格子, 晶格常数为 a. 那么其倒格子具有:

A 简单立方格子, 晶格常数为 $2\pi/a$

数 $4\pi/a$

B 体心立方格子, 晶格常

C 面心立方格子, 晶格常数为 $4\pi/a$

答: A. 简单立方的倒格子仍为简单立方; 面心立方的倒格子是体心立方, 体心立方的倒格子是面心立方.

二、分析计算题 (第 4 题 18 分, 第 6 题 12 分, 其余各题 15 分, 共 90 分)

1. BCC 结构的金属铁, 测 [110] 晶面的原子面密度为 $9.94 \times 10^{14} \text{ atoms/cm}^2$.

(1) 试计算 [110] 晶面的原子面密度, (2) 分别计算 [112] 和 [110] 晶面的

晶面间距, (3) 确定通常在哪个晶面上最可能产生晶面滑移? 为什么? (BCC 结构铁的晶格常数为 $a=0.2866 \text{ nm}$)

【参考答案】:

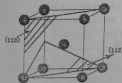
[1] BCC 结构的晶胞如下图所示, 设晶面棱长为 a.

在一个晶胞中 [110] 面的面积为 $\sqrt{2}a^2$, 在这个面上有 2 个原子, 所以其面密度

$$\rho_{[110]} = \frac{2}{\sqrt{2}a^2} = \frac{\sqrt{2}}{a^2}$$

在一个晶胞中 [112] 面的面积为 $\frac{\sqrt{3}}{4}a^2$, 在这个面上有 2/3 个原子, 所以其面密

$$\rho_{[112]} = \frac{2/3}{\frac{\sqrt{3}}{4}a^2} = \frac{8}{3\sqrt{3}a^2}$$



[110] 面的原子面密度为:

$$\frac{\rho_{[110]}}{\rho_{[112]}} \times 9.94 \times 10^{14} = \frac{\frac{\sqrt{2}}{a^2}}{\frac{8}{3\sqrt{3}a^2}} \times 9.94 \times 10^{14} = \frac{3\sqrt{6}}{8} \times 9.94 \times 10^{14} = 1.37 \times 10^{15} \text{ atoms/cm}^2$$

$$(2) \text{ [112] 面的面间距为: } d_{[112]} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{0.2866}{\sqrt{6}} = 0.1170 \text{ nm}$$

$$[110] \text{ 面的面间距为: } d_{[110]} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{0.2866}{\sqrt{2}} = 0.2027 \text{ nm}$$

(3). BCC 结构铁中, [110] 晶面原子面密度最高, 位错滑移阻力最小, 因此 [110] 面容易滑移.

2. 铜是 FCC 晶体结构, 其晶格常数为 $a=0.36151 \text{ nm}$. (1) 试分析并确定

上海翔高

高翔上海

最可能现出晶面滑移的晶面及滑移方向 (以晶面符号及晶向符号表示)。(2) 计算 Burgers 矢量的长度。

【参考答案】:

(1) FCC 晶体, (111)面为最密排面, $[110]$ 晶向为与原子最密排晶向。因此最可能出现滑移的晶面为(111)面, 滑移方向为 $[110]$ 方向。

(2) 伯格斯矢量为: $b = \frac{a}{2}[110]$, 长度为 $b = \sqrt{2}a = 0.5112$

3. 对含有 0.1% C 的钢进行表面渗碳增强处理, 渗碳时将钢置于浓度为 1.2% C 的气氛中, 在高温下通过扩散达到进入钢材体内的目的。为了获得最佳应用性能, 在钢表面以下 0.2cm 处必须达到浓度为 0.45% C, 扩散激活能为 32900 cal/mole, 气体常数 $R = 1.987 \text{ cal/mole} \cdot \text{K}$ 。若该钢材的扩散系数为 D_0 为 $0.115 \text{ cm}^2/\text{sec}$, 试求出 (1) 1100°C 时的扩散系数, (2) 扩散所需时间与扩散温度的函数关系, (3) 分解计算 800°C、900°C、1000°C、1100°C 及 1200°C 温度下所需的扩散时间并以此作出扩散时间与温度之间的关系曲线。

误差函数表, $\text{erf}(x)$ 的对应值

x	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0.2	0.6738	0.6847	0.6914	0.6961	0.7007	0.7052	0.7095	0.7136	0.7176	0.7215

(1) 1100°C 时的扩散系数为:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) = 0.115 \times \exp\left(-\frac{32900}{1.987 \times 1100}\right) = 6.776 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$$

(2) 半无限一维扩散方程: $C(x,t) = C_0 + (C_s - C_0)[1 - \exp(-\frac{x^2}{4Dt})]$

已知: $C_0 = 0.1\% \text{ C}$, $C_s = 1.2\% \text{ C}$, $C_x = 0.45\% \text{ C}$, $x = 0.2 \text{ cm}$

$$\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) = 0.68$$

查误差函数表得:

$$\frac{x}{2\sqrt{Dt}} = 0.71 \Rightarrow t = \frac{x^2}{4D(0.71)^2} = \frac{0.04}{4 \times 6.776 \times 10^{-7} \times 0.5041} = \frac{0.04}{1.36 \times 10^{-6}} = 2.94 \times 10^4 \text{ s} = 8.17 \text{ h}$$

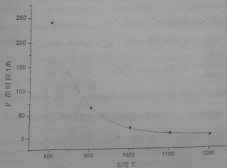
(3) $T = 800$ 时, 扩散时间 $t = 864846 \text{ s} = 240.2 \text{ h}$

$T = 900$ 时, 扩散时间 $t = 232077 \text{ s} = 64.5 \text{ h}$

$T = 1000$ 时, 扩散时间 $t = 76575 \text{ s} = 21.3 \text{ h}$

$T = 1100$ 时, 扩散时间 $t = 29695 \text{ s} = 8.2 \text{ h}$

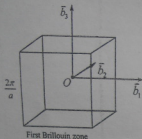
$T = 1200$ 时, 扩散时间 $t = 13096 \text{ s} = 3.6 \text{ h}$



4. 对应简单立方结构, 已知原胞的基矢为 $a_1 = a\mathbf{i}$, $a_2 = a\mathbf{j}$, $a_3 = a\mathbf{k}$ (1) 给出它的第一布里渊区, (2) 计算出该布里渊区的体积, (3) 计算被 $a_1/2$ 处有最近和最远布里渊区边界处相应自由点阵的能力 (可直接利用 Λ, μ, m, n)

【参考答案】:

(1) 简单立方的第一布里渊区如下图所示:



(2) 简单立方所对应的倒格矢为:

$$b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1} = \frac{2\pi}{a} \hat{i}, \quad b_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_2} = \frac{2\pi}{a} \hat{j}, \quad b_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_3} = \frac{2\pi}{a} \hat{k}$$

第一布里渊区的体积: $b_1 \cdot (b_2 \times b_3) = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$

(3) 最近布里渊区边界为上图布里渊区立方体的六个面的面心, 记为 A,

$$\frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2}, 0, 0\right), \text{ 波矢为 } k_A = \frac{\pi}{a} \hat{i}, \text{ 自由电子的能量为: } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

最近布里渊区边界为上图布里渊区立方体的六个顶角, 记为 B, $\frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$

$$\text{波矢为 } k_B = \frac{\sqrt{3}\pi}{a}, \text{ 自由电子的能量为: } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

5. TiO_2 是一种性能优越的光催化和氧化电极材料, 这与 TiO_2 中 Ti 是一种易变价离子有一定的关系。当 TiO_2 材料中失去氧, 通常会引起 Ti 离子从四价变为三价, 即 TiO_2 变为 TiO_2^- , 在体系中产生氧空位。这中缺陷形成过程与晶格能及键能关系, 试以此写出 (1) 缺陷反应的反应方程, (2) 根据质量作用定律, 写出反应平衡常数 K 的表达式, (3) 给出体系中氧空位浓度与氧分压之间的函数表达式。

【参考解答】:

(1) 缺陷反应方程为: $2\text{TiO}_2 \rightarrow 2\text{Ti}^{3+} + \text{V}_\text{O}^{2+} + 3\text{O}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \uparrow$

(2) 缺陷反应等价于: $\text{O}_2 \rightarrow 2e' + \text{V}_\text{O}^{2+} + \frac{1}{2}\text{O}_2 \uparrow$, 根据质量守恒定律, 平衡常数为:

$$K = \frac{[e']^2 [\text{V}_\text{O}^{2+}] [\text{P}_{\text{O}_2}]^{1/2}}{[\text{O}_2]}$$

(3) 晶体中氧离子浓度基本不变, $[e']$ 是 $[\text{V}_\text{O}^{2+}]$ 的两倍, 所以有: $[\text{V}_\text{O}^{2+}] \propto [\text{P}_{\text{O}_2}]^{1/2}$

6. 一个非晶态二元体系, 其中 A 原子浓度百分数为 70%, B 原子浓度百分数为 30%。从非晶态物质的化学短程序观点看, 原子排列的均匀性也不同, 其化学短程序也不同。在甲、乙两种不同的指标条件下, 发现这个体系中每个原子的平均总配位数为 8, 甲条件下制备的样品中 A 原子最近邻的 B 原子配位数为 2, 乙条件下制备的样品中 A 原子最近邻的 B 原子配位数为 1.2。 (1) 试计算两种条件下体系的 Warren-Cowley 短程序参数 α_p , (2) 比较两个条件下样品晶化倾向的大小。

【参考解答】:

(1) 已知: $\langle Z \rangle = 8$, $C_A = 0.7$, $C_B = 0.3$, 甲样品: $\langle z_{AB} \rangle = 2$; 乙样品:

$$\langle z_{AB} \rangle = 1.2$$

$$\text{甲样品的 Warren-Cowley 短程序参数为: } \alpha_p = 1 - \frac{z_{AB}}{\langle Z \rangle} = 1 - \frac{2}{8 \times 0.3} = 0.17$$

$$\text{乙样品的 Warren-Cowley 短程序参数为: } \alpha_p = 1 - \frac{z_{AB}}{\langle Z \rangle} = 1 - \frac{1.2}{8 \times 0.3} = 0.50$$

(2) 甲样品的 Warren-Cowley 短程序参数小于乙样品的 Warren-Cowley 短程序参数, 即乙条件下样品中各原子间的化学亲和力强, 非晶晶化时结构调整不易, 不易形成晶体。
甲条件下样品晶化倾向大。