**材料人**
Cailiaoren.com

湖南大学历年招收攻读硕士学位研究生 入学考试初试资料汇编

材料科学与工程

知识点总结 (2-24)

真题答案 (25-44)

笔记 (45-70)

本科试题 (71-76)



材料科学基础知识点总结

绪论：材料概述及分类

国民经济的三大支柱 { 材料
能源 美国公布的五大关键科技领域：新材料，新能源，信息，
信息 生物，环境。

材料：世间万物，凡于我有用者，皆谓之材料。材料的两个属性：凝聚态，被使用。(eg:冰可应用来造房子，所以冰也是一种材料)

材料科学是一门以固体材料为研究对象，以固体物理、热力学、动力学、量子力学、冶金、化工等为理论基础的多学科交叉基础应用学科。

材料的分类：

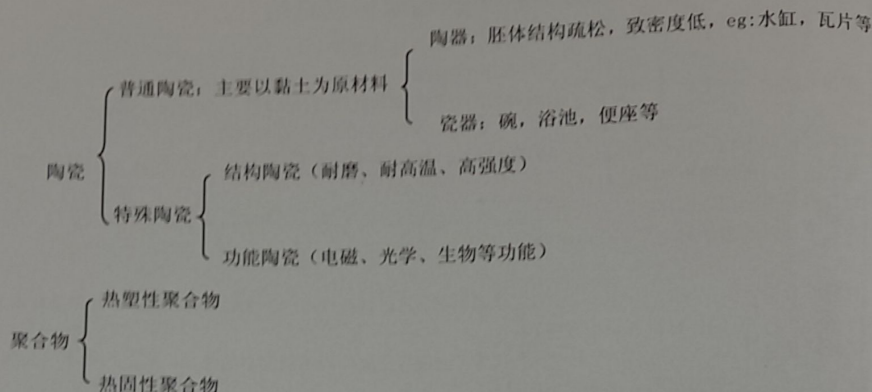
①按结构分 { 晶体材料 (长程有序) { 单晶 (一个晶体材料仅由一个大的晶体组成，称其单晶材料)
非晶材料 (又叫无定型材料) { 多晶 (由很多空间位向不同的小的晶体组成，这些小的晶体就是晶粒)

②按应用的角度分 { 结构材料 (以力学性能为主要使用性能)
功能材料 (利用材料的生、声、光、电、磁、热等性能)

③按化学组成成分 { 金属材料
(或按属性分：无机非金属材料 (陶瓷材料)
高分子材料 (又叫聚合物)
按结合键分) 复合材料
半导体 (主要的半导体材料是共价键结合的元素硅和锗以及一系列共价键化合物，从某些方面看，半导体是陶瓷的一小类，这是因为他们的键合特征和力学性能和陶瓷类似)

金属材料分为 { 纯金属
合金 { 固溶体 { 置换固溶体
间隙固溶体
金属间化合物 (又称中间相) { 正常价化合物
电子化合物
与原子尺寸相关的化合物 { 间隙相和间隙化合物
拓扑密堆相

无机非金属材料 { 传统的无机非金属材料：陶瓷、玻璃、水泥、耐火材料等
先进的 (新型的) 无机非金属材料：氧化物、氮化物、碳化物、硼化物、硅化物等，多用于航天航空领域。



合金：有两种或者两种以上的金属或者金属与非金属经熔炼、烧结或其他方法组合而成并具有金属特性的物质。

固溶体：以合金中某一组元作为溶剂，在其晶体点阵中融入其它组元原子，所形成的与溶剂有相同晶体结构、晶格常数稍有变化的固态溶体。

置换固溶体：当溶质原子溶入溶剂中形成固溶体时，溶质原子占据溶剂点阵的阵点，或者说溶质原子置换了溶剂点阵的部分溶剂原子，这种固溶体称为置换固溶体。

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称为间隙固溶体。

金属间化合物：金属和金属之间，类金属和金属原子之间以共价键形式结合生成的化合物总称为金属间化合物，由于金属间化合物在合金相图中处于相图的中间位置，故也称为中间相。

影响置换固溶体固溶度的因素：

- ①晶体结构：对于置换固溶体，晶体结构相同是组元间形成无限固溶体的必要条件；如果两组元的晶体结构不同，组元间的溶解度只能是有限的。
- ②原子尺寸因素：一般来说，溶质和溶剂的原子尺寸差别越小，越容易形成置换固溶体，并且形成固溶体的溶解度越大。
- ③电负性因素：（元素的电负性指的是从其他原子夺取电子变成负离子的能力）溶剂、溶质的电负性差越小溶解度越大，负电性差越大，倾向于生成化合物，而不利于形成固溶体。
- ④电子浓度因素：溶质元素的原子原子价越高，同样数量的溶质原子溶解时，其电子浓度增加越快，因此固溶度就越小。
- ⑤温度：在大多数情况下，温度升高，固溶度升高；而对少数含有中间相的复杂合金，情况则相反。
- ⑥其他因素如压力、凝固时的冷却速度等对固溶度也有很大影响。

形成无限固溶体的条件是（即休姆-罗瑟里规则）：

- ①溶质和溶剂的尺寸差别必须不大于 15%，即 $r_1 - r_2 / r_1 \leq 15\%$ 。
- ②两类原子的电负性必须相近。
- ③两类原子的价必须相似。
- ④两个组分必须具有完全相同的晶体结构类型。

热塑性聚合物：例如，PE，具有线性和支化高分子链结构，在共价键聚合链间具有二次键，加热后会变软，可反复加热和再成形。

热固性聚合物：例如橡胶，具有三维共价键网结构，不溶于任何溶剂，也不能熔融，加热时维持原有形状并降解——烧焦或燃烧，一旦定型后不能再改变形状，无法再生。

相关真题：

2008 年名词解释（5 分）2. 中间相。

2008 年论述题（12 分）3. 什么是固溶体？固溶体的类型有哪些？影响固溶度的原因有哪些？固溶体与其纯溶剂组元相比，其结构、力学性能和物理性能发生了哪些变化？

答：略；略；略；略；

结构：与组成固溶体的纯组元相比，固溶体的晶格类型不发生变化，但点阵常数都会发生变化。

力学性能变化：硬度、强度提高，塑性、韧性下降，但综合力学性能优于纯金属。

物理性能变化：与纯金属相比，固溶体的电阻加大，导电率下降，耐蚀性也下降。

2009 年名词解释（5 分）5. 固溶体

2009 简答题（10 分）7 简述热塑性聚合物和热固性聚合物的结构及性能特点。

2009 年论述题 5. 试从结合键的角度分析工程材料的分类及特点。（15 分）

答：金属材料：简单金属（指元素周期表上的主族元素）的结合键完全为金属键，过渡族金属的结合键为金属键和共价键的混合，但以金属键为主；特点：大多数金属强度和硬度较高，塑性较好。

陶瓷材料：是由一种或者多种金属同一种非金属（通常为氧）相结合的化合物，其主要结合方式为离子键，也有一定成分的共价键，特点：硬、脆，不易变形，熔点高。

高分子材料：大分子内的原子之间的结合方式为共价键，而大分子与大分子之间的结合键为范德瓦耳键和氢键。特点：有很高的分子量，质轻，密度小，有优良的力学性能、绝缘性能和隔热性能。

复合材料：是由两种或者两种以上的材料组合而成的物质，结合键种类繁多，非常复杂，性能差异也很大。

2010 年简答题（10 分）3. 结合具体实例简要说明热塑性塑料和热固性塑料的结构与性能差异。

2010 年简答题 (10 分) 8. 影响置换固溶体的固溶度的因素有哪些? 固溶原子的存在对金属的结构和力学性能有何影响?

2010 年论述题 (15 分) 6. 谈谈你对材料成分、组织、工艺和性能之间关系的理解。

2011 年简答题 (10 分) 9. 简要说明热塑性聚合物和热固性聚合物的结构和性能特点。

2011 年简答题 (10 分) 10. 为什么固溶体强度比纯金属的高?

答: 因为合金两类原子尺寸不同, 引起点阵畸变, 阻碍位错运动, 造成固溶强化。

2011 年论述题 (15 分) 2. 什么是置换固溶体? 影响置换固溶体固溶度的因素有哪些? 形成无限固溶体的条件是什么?

2012 年名词解释 (5 分) 2. 间隙固溶体:

2012 年简答题 (10 分) 5. 按照形成固溶体的条件来讨论 $MgO-CaO$ 能形成何种固溶体。已知 Ca^{2+} 和 Mg^{2+} 离子的半径分别为 0.1nm 和 0.071nm, Ca 和 Mg 的电负性分别为 1.0 和 1.2。

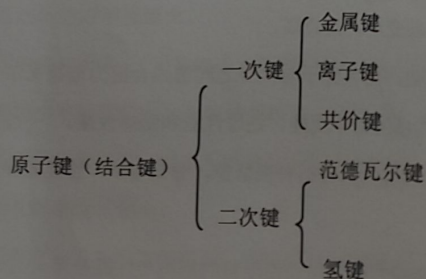
答: 尺寸: $(0.1-0.072)/0.1=28\% > 15\%$, 不符合休姆-罗瑟里规则; 电负性: Ca 的电负性分别为 1.0 和 Mg 的电负性分别 1.2, 同一周期上下, 接近。晶体结构: MgO 和 CaO , 都为 FCCNaCl 结构。电子浓度: 价电子数相同。

综上所述, 根据形成无限固溶体的条件知, $MgO-CaO$ 不能形成无限固溶体, 可以形成有限固溶体。

补充试题: 1. 比较固溶体和金属间化合物在成分、结构和性能方面的差异。

类别	成分	结构特点	力学性能特点
固溶体	溶质浓度可在固溶度范围内变化	保持溶剂的点阵类型	强度、硬度比溶剂高, 但总体看强度硬度依然很低, 而塑性、韧性较好
金属间化合物	成分固定或在一定范围内波动, 可用化学分子式表示	其点阵类型不同于组成它的任一组元	熔点较高、硬度高, 而塑性、韧性

第一章 原子结构与键合



所有的一次键都涉及到或者电子从一个原子向另一个原子的转移，或者电子在原子间的共用。

金属键的本质：金属正离子与自由电子之间的相互吸引。

离子键的本质：正电性原子和负电性原子之间的相互吸引。

共价键的本质：共价电子对的结合。

二次键与一次键的根本区别就是二次键既不涉及电子的转移，也不涉及电子的共用，二次键是来源于某些原子或分子中形成的电偶极子。一次键通常比二次键强一至两个数量级。

金属键：金属正离子与自由电子之间的相互作用构成的金属原子间的结合力称为金属键。

离子键：电子由正电性原子向负电性原子的转移形成离子键，离子键无方向性和饱和性。（影响因素：原子间的高电负性差值有利于离子键的形成）

共价键：相邻原子由于共享电子对所形成的价键，具有饱和性和方向性。

键-能曲线：将一对原子或离子有关的能量描述为两原子或离子之间距离的函数的关系曲线称为键能曲线，它是键-力曲线的积分。利用键-能曲线，可以估算键能、平均键长、弹性模量和线膨胀系数等。其他外力或能源（如：施加外载荷、电磁场或温度变化）作用于系统，键长和有效键能就有可能改变，从而改变键能曲线图。

在 X_0 处 $U(x)$ 的大小，即能量势阱的深度，就是键的固有强度，即键能的度量；另，平衡间距 X_0 （原子之间中心到中心的平均距离）对应于键长。键能曲线在 X_0 处的曲率正比例弹性模量，曲率半径越小，弹性模量越大，刚度越大。物理解释：能量势阱的两壁越陡，将原子从平衡位置移动所需的能量越大。线膨胀系数 α_{th} 随键能曲线的不对称的增大而增大。

2009 年简答题 (10 分) 1. 一次键的种类及其本质是什么？

2009 年论述题 (15 分) 1. 什么是键能曲线？利用键能曲线可以得到材料的哪些特性参量。采用哪些方法可以改变键能曲线的形状？

解：略；略；其他外力或能源（如：施加外载荷、电磁场或温度变化）作用于系统，键长和有效键能就有可能改变，从而改变键能曲线图。

2010 年简答题 (10 分) 1. 说明离子晶体、共价晶体和金属晶体中原子间的键合特征。影响原子间成键类型的重要因素有哪些？

离子晶体一定含有离子键，可能含有共价键；共价晶体只含有共价键；金属晶体：简单金属晶体只含有金属键，过渡族金属晶体含有金属键和共价键，以金属键为主。

键合特征

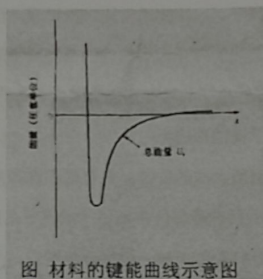
① 离子键：以离子而不是以原子为结构单元，无方向性和饱和性。

② 共价键：共用电子对，有饱和性和方向性。

③金属键：电子共有化，无饱和性和方向性。

影响原子间成键类型的重要因素：①电负性②价电子数。电负性相差大、价电子数相差很小容易形成离子键，电负性相差小、价电子数相差很大容易形成共价键，电负性相差不大不小、价电子数相差很小容易形成金属键。

2010 年简答题 (10 分) 2. 如何根据材料的键能曲线来判断材料的弹性模量、膨胀系数的大小？



弹性模量：曲率半径越小，弹性模量越大，刚度越大。物理解释：能量势阱的两壁越陡，将原子从平衡位置移动所需的能量越大。

线膨胀系数 α_{th} 随键能曲线的不对称的增大而增大。

2011 年名词解释 (5 分) 1. 键能曲线

2011 年论述题 (15 分) 1. 定性比较陶瓷材料、金属材料和高分子材料的弹性模量高低，并从材料中结合键的角度分析存在差异的原因。

答：弹性模量是表征材料在发生弹性变形时所需要施加力的大小。在给定应力下，弹性模量大的材料只发生很小的弹性应变，而弹性模量小的材料则发生比较大的弹性应变。结合键能是影响弹性模量的主要因素，结合键之间的结合键能越大，则弹性模量越大。由于陶瓷材料主要含有离子键和共价键，金属材料主要含有金属键，而高分子材料分子之间主要是二次键起作用，而结合键能的大小顺序是离子键最高，共价键次之，金属键第三，二次键最弱，所以这三种材料的弹性模量由高到低依次是：陶瓷材料、金属材料、高分子材料。实际上，常见的陶瓷的弹性模量为 250~600GPa，常见的金属材料的弹性模量为 70~350GPa，而高分子材料的弹性模量为 0.7~3.5GPa。

2012 年简答题 (10 分) 1. 简述一次键和二次键的本质特点，并从结合键的角度讨论金属的力学性能。略。金属材料的结合键主要以金属键为主，而金属键是金属正离子与自由电子之间的相互作用，金属键无饱和性和方向性，因此金属对外力响应时无需考虑电荷的性质，因而原子间可以相对滑动，并且吸收冲击能量而不至于破坏金属键，所以金属材料的强韧性好，塑性变形能力强。

第二章 晶体学基础

空间点阵：组成晶体的粒子（原子、离子或分子）在三维空间中形成有规律的某种对称排列，如果我们用点来代表组成晶体的粒子，这些点的空间排列就称为空间点阵。

单胞：完全描述空间点阵的最小重复单元称为单胞。

阵点：单胞的顶点称为阵点

点阵常数：晶胞的大小取决于其三条棱的长度 a , b 和 c ，而晶胞的形状则取决于这些棱之间的夹角 α , β , γ ，我们把 a , b , c , α , β , γ 这六个参量称为点阵常数。

基元：处在一个阵点的“物质群”称为基元。

晶体结构：组成晶体的结构基元（分子、原子、离子、原子集团）依靠一定的结合键结合后，在三维空间做有规律的周期性的重复排列方式。简单的讲就是：空间点阵+结构基元=晶体结构

若晶体的性质和测量方向无关，则称晶体称为各向同性的；若晶体的性质和测量方向有关，则称晶体是各向异性的。

配位数 (CN)：晶体结构中任一原子周围最近邻且等距离的原子数。

致密度：晶体结构中原子体积占总体积的百分数。

原子堆积因子 (APF)：在晶体结构中原子占据的体积与可利用的总体积的比率定义为原子堆积因子。

$$APF = \text{在单胞中原子体积} / \text{单胞体积}$$

影响配位数的因素：

- ①中心原子的大小。中心原子的最高配位数决定于它在周期表中的周次。
- ②中心原子的电荷。中心原子的电荷高，配位数就大。
- ③中心原子的成键轨道性质和电子构型。从价键理论的观点来说，中心原子成键轨道的性质决定配位数，而中心原子的电子构型对参与成键的杂化轨道的形成很重要。
- ④配体的性质。同一氧化态的金属离子的配位数不是固定不变的，还取决于配体的性质。配合物的中心原子与配体间键合的性质，对决定配位数也很重要。

晶向族：晶体中的原子排列情况相同，空间位向不同的一组晶向，称一个晶向族，用 $\langle uvw \rangle$ 表示。

晶面族：晶体中具有相同的条件（这些晶面上的原子排列情况和晶面间距分别完全相同），只是空间位向不同（即不平行）的各个晶面，总称为晶面族，用 $\{hkl\}$ 表示。

线密度：在晶体方向单位长度上有原子中心的数目。 ρ_L = 在一个单胞内沿方向上原子中心的数目 / 包含在一个单胞内线的长度

面密度：在晶体学面单位面积上的原子或离子中心的数目。 ρ_F = 在一个单胞内中心原子一个面上的原子数目 / 包含在一个单胞中的面的面积。

金刚石：金刚石晶体结构的点阵就是一个面心立方点阵，但决不能说金刚石晶体结构是由两个面心立方点阵穿插而成。因为这样说，就把只有抽象几何意义的点阵看成了由具体的碳原子构成了图形。

常见的几个晶体类型的参数（务必牢记）

晶体结构	每个晶胞内的原子数 n	配位数 CN	密排面	原子堆积因子	密排面间距	密排方向	密排方向最小原子间距	每个晶胞中四面体间隙个数	每个晶胞中八面体间隙个数
BCC	2	8	{110}	0.68	$\frac{\sqrt{2}}{2}a$	$\langle 111 \rangle$	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	12	6
FCC	4	12	{111}	0.74	$\frac{\sqrt{3}}{3}a$	$\langle 110 \rangle$	$\frac{\sqrt{2}}{2}a$	8	4
HCP	6	12	{0001}	0.74	$\frac{1}{2}c$	$\langle 11-20 \rangle$	a	12	6

2008 年名词解释（5 分）1. 空间点阵

2008 年简答题（8 分）1. 采用四轴坐标系标定六方晶体的晶向指数时，应该有什么样的约束条件？为什么？答：若用三轴坐标系标定六方晶体中某一晶向指数为 $[uvw]$ ，则用四轴坐标系标定为 $[uvtw]$ ，约束条件是“前三个指数之和为零”，即 $t = -(u+v)$ ，因为根据立体几何学知识知，三位空间中独立的坐标轴个数不超过三个，位于一个平面的 u 、 v 、 t 必定有一个不是独立的。

2008 年简答题（8 分）2. 写出 FCC、BCC、HCP 晶体的密排面、密排面间距、密排方向、密排方向最小原子间距。

2009 年名词解释（5 分）2. 点阵常数

2009 年简答题（10 分）2. 给出 FCC（面心立方）、BCC（体心立方）、HCP（密排六方）晶胞中的原子数、间隙的种类和数量

2009 年简答题（10 分）6. 已知金刚石晶胞中最近邻的原子间距为 0.154nm，试求出金刚石的点阵常数、配位数和致密度。

答： $\frac{\sqrt{3}}{4}a = 0.154\text{nm}$ ，所以点阵常数 $a = b = c = 0.3566\text{nm}$ ， $\alpha = \beta = \gamma = 109.5^\circ$

配位数 $C.N. = 8 - N = 4$

$$\rho = \frac{\frac{1}{8} \times 8 + \frac{1}{2} \times 6 + 4}{a^3} \times \frac{4}{3} \pi r^3 = 0.34$$

致密度

(本题求配位数时用到了“8-N 规律”。主要表现为共价键的亚金属，其晶体结构有一个共同点：配位数等于 8-N，N 是该亚金属在周期表中的族数。这一规律成为 8-N 规律。)

2010 年名词解释 (5 分) 8. 晶向族

2010 年简答题 (10 分) 4. 写出图 a 所示立方晶胞中画斜线晶面的晶面指数和图 b 中带箭头晶向的晶向指数。(本人注：原图无坐标轴)

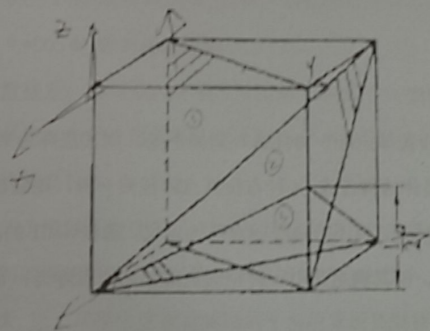


图 a

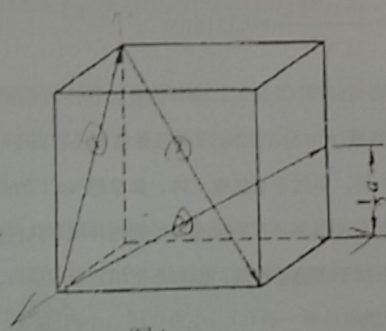


图 b

$$\begin{aligned} & 8 \times \frac{1}{8} \times \frac{\sqrt{3}}{4} \\ & = \frac{\sqrt{3}}{4} \end{aligned}$$

2010 年简答题 (10 分) 5. 简要说明晶体结构与空间点阵的关系。

答：空间点阵是把晶体的质点抽象为阵点，用来描述和分析晶体结构的周期性和对称性，要求各个阵点的周围环境相同，它只有 14 种类型。而晶体结构是指具体的物质粒子排列分布，由于结构基元可以是无穷多种，因而构成的具体的晶体结构也有无穷多种。两者之间的关系可用“空间点阵+结构基元=晶体结构”来描述。(后面可以不用写，只是帮助理解：在实际晶体中，有晶体结构不同但属于同一种晶体点阵的情况，例如 Cu, NaCl 和 CaF_2 的晶体结构不同，但它们都属于面心立方点阵。另外，类似的晶体结构也可能属于不同的空间点阵，如 W 和电子化合物 CuZn 都是体心立方结构，但 CuZn 属于简单立方点阵，W 属于体心立方点阵。)

2010 年简答题 (10 分) 9. 什么是晶体中原子的配位数？影响配位数多少的因素是什么？

答：晶体中原子的配位数是反映原子排列紧密程度的物理量之一，指晶格中任一原子周围与其最近邻且等距离的原子数目。一般配位数越大，晶体排列结构越紧密。因素：略。

2010 年论述题 (15 分) 1. 给出 FCC (面心立方)、BCC (体心立方)、HCP (密排六方) 晶胞中的原子数、间隙的种类和数量、原子堆积因子、密排面、密排方向、滑移系数目。

解：略。滑移系数目见 P11 表格。

2011 名词解释 (5 分) 原子配位数, 空间点阵

2011 简答题 (10 分) 1. 什么是点阵参数? 立方晶系和正方晶系的点阵特征是什么?

略: 立方晶系: $a=b=c$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$, 正方晶系 (即四方晶系): $a=b \neq c$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ (注意区别正交晶系: $a \neq b \neq c$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$)

2011 简答题 (10 分) 2. Ni 的晶体结构为面心立方结构, 其原子半径 $r=0.1243\text{nm}$, 试求 Ni 的晶格常数及原子数, 间隙种类和数量。

$$a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = \frac{4 \times 0.1243}{\sqrt{2}} = 0.3516\text{nm}$$



$$\begin{aligned} \sqrt{2}a &= 4r \\ a &= 2\sqrt{2}r \end{aligned}$$

2012 名词解释 (5 分) 1. 晶体的各向异性 7. 面密度

2012 简答题 (10 分) 2. NaCl 的晶体结构是否属于布拉菲点阵? 为什么? 如果不是, 则其点阵为哪种类型? 答: 不属于布拉菲点阵。如果把 NaCl 的晶体结构看成 14 种布拉菲点阵任何一种, 则它的每个阵点不可能都具有完全相同的物理环境和几何环境, 这不符合空间点阵的定义, 所以 NaCl 的晶体结构不属于布拉菲点阵。但如果把组元看成质点, 则其满足其中一种空间点阵, 空间点阵为: 面心立方点阵。

2012 简答题 (10 分) 3. 在晶胞图中给出下列晶向上的最短原子间距 (用点阵常数 a_0 表示)

(1) 面心立方 (FCC) 中 $[110][1-1-2]$

(2) 体心立方 (BCC) 中 $[111][-112]$

解: 图略, (1) $[110]$ 最短原子间距 $\sqrt{2}a_0/2$, $[1-1-2]$ 最短原子间距 $\sqrt{6}a_0/2$,

(2) $[111]$ 最短原子间距 $\sqrt{3}a_0/2$, $[-112]$ 最短原子间距 $\sqrt{6}a_0$ 。

2012 简答题 (10 分) 4. 面心立方和密排六方结构中原子的堆垛方式和致密度是否有差异? 请加以说明。

面心立方结构式以密排面 $\{111\}$ 按 ABCABC... 顺序堆垛而成的, 密排六方结构是以密排面 $\{0001\}$ 按 ABAB... 顺序堆垛起来的。面心立方结构的致密度为 0.74, 密排六方结构的致密度也为 0.74。

2012 简答题 (10 分) 8. 画出立方晶系的 $[100]$ 、 $[101]$ 晶向和 (111) $(1-11)$ 晶面。

第三章 晶体的范性形变（塑性变形）

塑性变形：在外载力作用下引起晶体中原子的永久位移称为塑性变形。

正应力：力的方向平行于作用面的法线 N ，则力是正应力。

切应力：力的方向垂直于作用面的法线 N ，则力是切应力。

（滑移）临界分切应力：使塑性变形开始发生的切应力称为临界分切应力，用 τ_{cr} 表示。它是一个定值，与材料本身性质有关，与外力取向无关。

Schmid（施密特）定律：对不同晶体取向的正应力与发生塑性变形的切应力之间的关系方程，即 $\sigma_c = \tau_{cr} / \cos \theta * \cos \phi$ ，其中 θ 为拉力与滑移方向的夹角， ϕ 为拉力与滑移面法线的夹角， $\mu = \cos \theta * \cos \phi$ 称为施密特因子。

滑移系：晶体通过滑移产生塑性变形时，由一个滑移面和位于该滑移面上的一个滑移方向所构成的系统称为一个滑移系。用 $\{hkl\} \langle uvw \rangle$ 来表示。例如，在 FCC 金属， $(111) [110]$ 是滑移系，相应的滑移族是 $\{111\} \langle 110 \rangle$ 。

关于滑移系请注意：(1) 滑移面总是晶体的密排面，而滑移方向也总是密排方向。这是因为密排面之间的面间距最大，面与面之间的结合力较小，滑移的阻力小，故易滑动。而沿密排方向原子密度大，原子从原始位置达到新的平衡位置所需要移动的距离小，阻力也小。(2) 每一种晶格类型的金属都具有特定的滑移。一般来说，滑移系的多少在一定程度上决定了金属塑性的好坏。然而，在其它条件相同时，金属塑性的好坏不只取决于滑移系的多少，还与滑移面原子密排程度及滑移方向的数目等因素有关。

常见的几种晶体的滑移系（和 P8 表格一起记忆）：

晶体结构	滑移面	滑移方向	滑移系数目
BCC	$\{110\} \{112\} \{123\}$	$\langle 111 \rangle$	48
FCC	$\{111\}$	$\langle 110 \rangle$	12
HCP	$\{0001\} \{10\bar{1}0\}$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	3

2008 年名词解释（5 分）滑移临界分切应力

2008 年简答题（8 分）常温下金属塑性变形的机制主要有哪些？它们的主要差别是什么？

答：主要变形机制是滑移和孪生。主要差别如下：

	滑移	孪生
晶体中的位向	已滑移部分和未滑移部分的取向相同	已孪生部分和未孪生部分的取向不同，两者构成镜面对称关系
位移的量	原子的位移是沿着滑移方向原子间距的整数倍	原子的位移小于孪生方向的原子间距，一般为原子间距的 $1/n$
对塑性变形的贡献	对晶体塑性变形贡献很大，即总变形量大	对晶体塑性变形贡献有限，即总变形量小
变形机制	滑移是全位错运动的结果	孪生是分位错运动的结果
应变应力	有确定的临界分切应力	所需分切应力一般高于滑移的临界分切应力
应变条件	一般情况下，先发生滑移变形	滑移变形难以进行时，或晶体的对称度很低，变形速率较低，加载速率较高

2009 年名词解释（5 分）8. 临界分切应力：晶体中的某个滑移系是否发生滑移，决定于力在滑移面内沿滑移方向的分切应力，当分切应力达到某一临界值时，滑移才能开始，此应力即为临界分切应力，它是滑移系开动的最小分切应力。材料的临界分切应力取决于材料的本身性质，但和温度以及材料的纯度等也有关系。

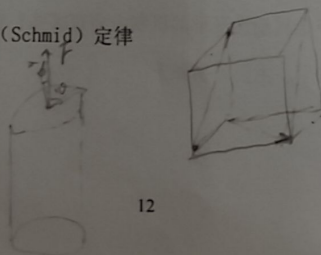
2009 简答题（10 分）5. 写出体心立方（BCC）、面心立方（FCC）、密排六方（HCP）晶体中的主要滑移系。

2010 年名词解释（5 分）施密特（Schmid）因子：拉伸变形时，能够引起晶体滑移的分切应力 τ 的大小取决于该滑移面和晶向的空间位置（ ϕ 和 θ ）。 τ 与拉伸应力 σ 间的关系为： $\tau_{CR} = \sigma_C \cdot \cos \theta \cdot \cos \phi$ ，其中 $\cos \theta \cdot \cos \phi$ 被称为取向因子，或称施密特因子，取向因子越大，则分切应力越大。

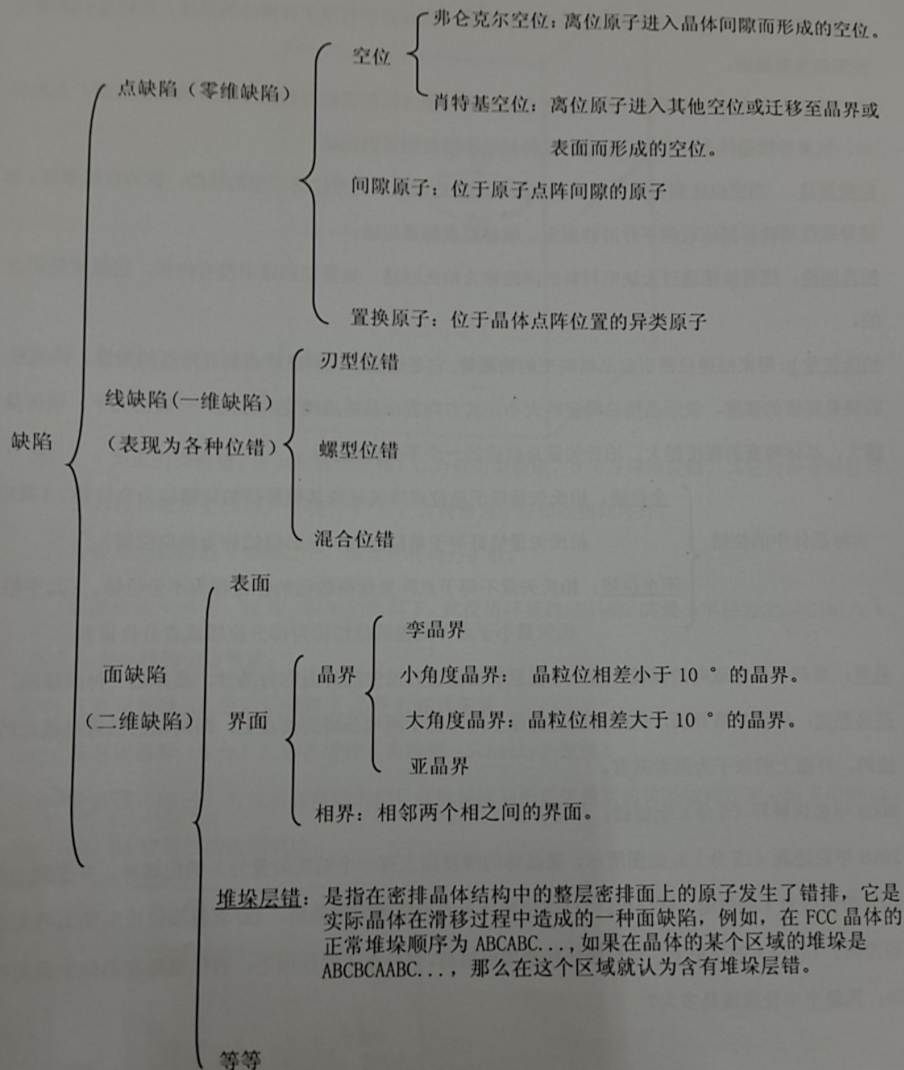
2011 简答题（10 分）3. 在面心立方（FCC）晶胞中画出（101）和[110]，并分析他们能否构成滑移系？
解：图略。不能构成滑移系，因为（101）和[110]不在一个平面上。

2011 简答题（10 分）4. 简述单晶体塑性变形的施密特（Schmit）定律，画图并写出表达式，说明每个量所代表的物理意义。

2012 年名词解释（5 分）施密特（Schmid）定律



第四章 晶体中的缺陷



弗伦克尔缺陷: 离位原子进入点阵的间隙位置, 而在晶体中同时形成数目相等的空位和间隙原子, 这种点缺陷称为弗伦克尔缺陷, 出于尺寸的考虑, 大多数的弗伦克尔缺陷都涉及正离子。(注意与弗伦克尔空位的区别)

肖特基缺陷: 在离子固体中形成的小的正离子和负离子空位的丛集。在这些丛集中正离子: 负离子

的比率要调整维持电的中性。

位错：晶体中普遍存在的线缺陷，是晶体中某处一列或若干列原子有规律的错排。位错是引起塑性变形的的主要原因。

位错滑移：指在外力作用下，位错线在自身的滑移面（即位错线与伯氏矢量 b 构成的晶面）上的移动，结果导致晶体永久变形，位错的这种运动不涉及物质的输运。

位错攀移：当空位迁到刃型位错多余半原子面的边缘时，刃型位错发生的移动，称为位错攀移，攀移导致位错转移到临近的平行滑移面上，攀移要求物质运输。

柏氏回路：绕着位错通过无缺陷材料的回路称为柏氏回路，如果在回路中没有位错，它通常是闭合的。

柏氏矢量 b ：用来描述位错引起晶格畸变的物理量，它是连接柏氏回路终点到开始点的矢量。该矢量的模是层错的强度，表示晶格总畸变的大小，其方向表示晶格点畸变的方向。一般情况下，该矢量越大，晶体畸变的程度越大。柏氏矢量是位错的一个不变的性质。

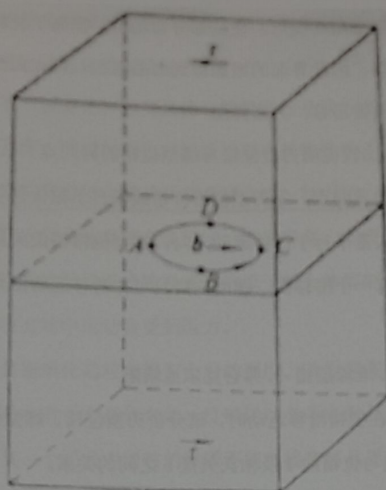
实际晶体中的位错 { **全位错**：柏氏矢量等于单位点阵矢量或其整数倍的位错称为全位错。（其中柏氏矢量恰好等于单位点阵矢量的位错称为单位位错）
不全位错：柏氏矢量不等于点阵矢量整数倍的位错称为不全位错。（其中柏氏矢量小于点阵矢量的位错称为部分位错或者分位错）

晶界：当两个任意取向的晶粒，沿一个任意表面接合时发生的界面称为晶界。晶界是一种面缺陷。

共格界面：所谓共格界面，是指界面上的原子同时位于两相晶格的结点上，即两相的晶格是彼此链接的，界面上的原子为两者共有。

2008 年名词解释（5 分）全位错：共格界面

2008 年论述题（15 分）2. 如图所示，某晶体的滑移面上有一个柏氏矢量为 b 的位错环，并受到一个均匀的切应力 τ 的作用。试分析：(1) 该位错环各段位错的结构类型。(2) 求各段位错所受力的大小和方向。(3) 在 τ 的作用下，该位错环将要如何运动。(4) 在 τ 的作用下，若位错环在晶体中稳定不动，其最小半径应该是多大？



答：1. A 为正刃型位错，B 为右螺旋位错，C 为负刃型位错，D 为左螺旋位错，其它为混合型位错。

2. 各段位错所受的力大小均为 $\tau |b|$ ，方向垂直于位错线指向环外。

3. 在外加切应力 τ 的作用下，位错环将向外扩散。

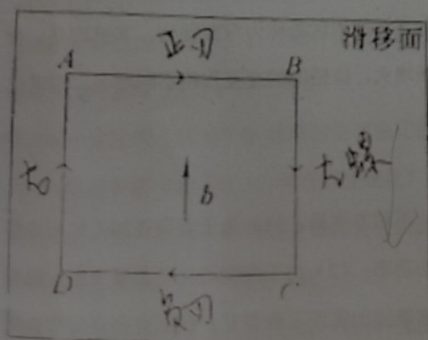
4. 由公式 $\tau = G|b|/2r$ 得：在 τ 的作用下，此位错环要稳定不动，其最小半径为 $r_{min} = G|b|/2\tau$ ，

其中 G 为材料的切变模量。

2009 年名词解释（5 分）1. 位错 3. 晶界 4. 柏氏矢量

2010 年名词解释（5 分）3. 位错滑移 6 肖特基（Schottky）空位

2010 论述题（15 分）3. 位错有哪些类型？其位错线与柏氏矢量间的关系如何？请分析下图中 AB、BC、CD、DA 位错线的位错类型。



2010 论述题（15 分）4. 论述面缺陷的种类及对材料力学性能的影响。

解：面缺陷包括：表面、晶界、相界、堆垛层错等。影响：界面阻碍位错的运动，引起界面强化，

从而提高了材料的强度。界面阻碍变形，使变形分布均匀，提高了材料的塑性。强度和塑性的提高相应使材料的韧性得到改善，因此界面的增加得到细晶组织，可大大改善材料的力学性能。

2011 年名词解释（5 分）位错滑移，其格界面

2011 年简答题（10 分）6. 比较说明刃型位错与螺型位错的异同点

答：刃型位错和螺型位错的异同点：①刃型位错位错线垂直于柏氏矢量，螺型位错位错线平行于柏氏矢量；②刃型位错柏氏矢量平行于滑移运动方向，螺型位错柏氏矢量垂直于滑移运动方向；③刃型位错可作攀移运动且只有一个滑移面，螺型位错只可作滑移运动但有无数个滑移面；④两者都可以用柏氏矢量表示。

2012 年名词解释（5 分）4. 堆垛层错 9. 弗仑克尔点缺陷

2012 年简答题（10 分）6. 在位错滑移运动时，请分析刃型位错、螺型位错、混合位错的位错线 l 与柏氏矢量 b ，位错运动方向与位错线 l 及柏氏矢量 b 之间的关系。

答：（备注：画位错环）

位错类型	l 与 b 的关系	位错运动方向与 l 关系	位错运动方向与 b 关系
刃型位错	垂直	垂直	平行
螺型位错	平行	垂直	垂直
混合位错	成一定角度，既不垂直又不平行	垂直	成一定角度，既不垂直又不平行

2012 年论述题（15 分）2. 晶界类型有哪几种？试论述晶界对材料性能及变形的影响。

第五章 材料强化机制

应变硬化：金属在冷加工过程中流变应力随应变的增加而增加的现象称为应变硬化。其机理是：金属在形变过程中位错密度不断增加，使强性应力场不断增大，位错间的交互作用不断增强，因而位错的运动越来越困难。

应变硬化在生产实际中有何意义？

在生产实际中，应变硬化有不利方面，也有有利方面。不利方面是：（1）由于金属在加工过程中塑性变形抗力不断增加，使金属的冷加工需要消耗更多的功率；（2）由于应变硬化使金属变脆，因而在冷加工过程中需要多次中间退火，使金属软化，能够继续加工而不致裂开；（3）有些金属尽管某些性能很好，但由于解决不了加工问题，其应用受到很大限制。

有利方面：（1）有些加工方法要求金属必须有一定的加工硬化；（2）可以通过冷加工控制产品的最

后性能；(3)有些零部件在工作条件表面会不断硬化，以达到表面耐冲击、耐磨损的要求。

材料的主要强化机制有哪几种？其强化机制是什么？

答：固溶强化、细晶强化、第二相强化、形变强化。其机理均是通过在金属中引入大量的缺陷，阻碍位错的运动来提高材料的强度。不同的强化方法的机理有其特殊性。

固溶强化：利用点缺陷对位错的阻力使金属基体获得强化的一种方法。具体方法是通过在金属基体中融入一种或数种溶质元素形成固溶体而使金属强度、硬度升高。溶质元素可以使材料得到强化的微观机制在于：无论是间隙式固溶原子还是置换式固溶原子都会使溶剂金属的晶格产生畸变，从而产生内应力，位错在此内应力场中运动会受到阻力。

细晶强化：又称晶界强化，是指细化晶粒来提高金属的强度。其原理在于晶界对位错滑移的阻滞效应。细晶强化的微观机制在于：对于多晶体来说，位错运动必须克服晶界的阻力。这是由于晶界两侧位错的取向不同，所以在某一个晶粒中滑移的位错不能直接穿越晶界进入相邻的晶粒，只有在晶界处塞集了大量位错后引起应力集中，才能激发相邻晶粒中已有位错的运动产生滑移。所以晶粒越细，晶界越多，材料的强度就越高。

第二相强化：指在金属基体（通常是固溶体）中还存在另外一个或者几个相，这些相的存在使金属的强度得到提高。因获得第二相的工艺不同，第二相强化分为①沉淀强化：通过相变热处理获得第二相②弥散强化：通过粉末烧结或内氧化获得。第二相强化的微观机制是：位错在运动过程中遇到第二相，需要切过（沉淀强化的小颗粒和弥散强化的颗粒；强度低，有一定塑性）或者绕过（沉淀强化的大颗粒；颗粒硬，不宜变形）第二相，从而第二相（沉淀相和弥散相）阻碍了位错的运动。

形变强化：材料屈服以后，随着形变量的增加，所需的应力是不断增加的，这种现象叫形变强化，也叫加工强化。其机理是：金属在形变过程中位错密度不断增加，使强性应力场不断增大，位错间的交互作用不断增强，因而位错的运动越来越困难。

2008 年论述题（15 分）1. 介绍合金强化的四种主要机制及其强化原因。

2009 名词解释（5 分）应变硬化

2009 年论述题（15 分）3. 材料的主要强化机制有哪几种？其强化机制是什么？

2010 年简答题（10 分）10. 何谓应变硬化？在实际生产中有何意义？

2011 论述题（15 分）6. 利用位错理论分析论述第二相粒子对金属塑性变形行为及强度的影响。

2012 名词解释（5 分）应变硬化

2012 年论述题（15 分）1. 提高金属材料强度的途径有哪些？其强化机制是什么？

第六章 固体中原子及分子的运动

上坡扩散：在化学位差为驱动力的条件下，原子由低浓度位置向高浓度位置进行的扩散。

下坡扩散：原子由高浓度区向低浓度区的扩散叫顺扩散，又称下坡扩散。

菲克第一定律：在稳态条件下，通过某一截面的扩散流量与垂直这个截面方向上的浓度梯度成正比，其方向与浓度降低方向一致，其数学表达式为：

$$J = -D \frac{dC}{dx}$$

其中 J 表示扩散通量，单位 $\text{g}/\text{cm}^2 \cdot \text{s}$ ， D 是扩散系数，单位是 cm^2/s ， dC/dx 表示沿 x 轴的浓度梯度，单位是 g/cm^3 。

菲克第二定律：在非稳态条件下，扩散物质浓度的变化速率等于扩散通量随位置的变化率，其一般形式为：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

扩散的驱动力：原子扩散的真正驱动力是化学位梯度，而不是浓度梯度。

晶体固体中，扩散的微观机制有：间隙机制，空位机制，交换机制，填隙机制等

离子晶体的扩散机制：①空位扩散②间隙扩散③亚晶格间隙扩散。

影响扩散的因素：

- ①温度的影响：温度越高，扩散越快。
- ②晶体结构的影响：结构不同，扩散系数不同。
- ③固溶体类型对扩散的影响：不同的固溶体，原子的扩散和机制不同。
- ④固溶体浓度对扩散的影响：浓度越大，扩散越易进行。
- ⑤晶体缺陷的影响：晶界、位错、空位都会对扩散产生影响。
- ⑥化学成分对扩散的影响：加入化学元素对扩散会产生阻碍。
- ⑦应力的作用：不管合金内部还是外部存在应力，都会促使扩散的进行。

2008 年名词解释（5 分）上坡扩散

2008 年简答题（8 分）4. 什么是柯肯达尔效应？请用扩散理论加以解释。若 Cu-Al 组成的互扩散偶发生扩散时，界面标志物会向哪个方向移动。

答：柯肯达尔效应：在置换式固溶体的扩散过程中，放置在原始界面上的标志物朝着低熔点元素的方向移动，移动速率与时间成抛物线关系。

柯肯达尔效应否定了置换式固溶体中扩散的换位机制，而证实了空位机制：系统中不同组元具有不同的分扩散系数；相对而言，低熔点组元扩散快，高熔点组元扩散慢，这种不等量的原子交换造成了柯肯达尔效应。

当 Cu-Al 组成的互扩散偶发生扩散时, 界面标志物会向着 Al 的方向移动。

2009 年简答题 (10 分) 3. 在 MgO 晶体中掺入 Li_2O 后, 晶体的空位浓度如何变化?

答: 晶体中空位的浓度增加。因为每个 Li^+ 置换一个 Mg^{2+} , 导致损失一个正电荷, 如果没有间隙产生, 这损失的正电荷必须由产生负离子空位来平衡。电荷中性要求每两个 Li^+ 杂质产生一个氧空位浓度。所以最终结果是即使在 MgO 晶体中掺入少量的 Li_2O , 晶体中会产生比热空位浓度大的多的氧空位浓度。

2009 年简答题 (10 分) 4. 简述菲克第一定律和菲克第二定律的含义, 写出表达式, 指明其字母的物理意义。

2009 年论述题 (15 分) 2. 离子晶体中的扩散机制有哪些? 影响因素有哪些?

2010 年简答题 (10 分) 7. 在氧化物陶瓷中掺杂其它氧化物时, 氧空位浓度会如何变化?

2010 论述题 (15 分) 2. 扩散的驱动力是什么? 扩散的微观机制有哪些? 结合扩散理论, 谈谈生产实际中如何提高钢铁材料的渗碳效率。略: 略; 从外部来讲: 加热至高温, 增加 CO/CO_2 气体比率; 从内部讲: 提高扩散系数 D , 增加扩散激活能。

2011 年简答题 (10 分) 5. 在 MgO 晶体中掺入 Li_2O 后, 晶体的空位浓度如何变化?

2011 论述题 (15 分) 3. 分析和讨论影响固态晶体中原子扩散的主要因素。

2012 简答题 (10 分) 9. 提高 ZrO_2 晶体的氧空位浓度可以提高其电导率, 请阐述掺杂哪类价态的氧化物可以提高其氧空位浓度?

2012 年论述题 (15 分) 4. 论述原子扩散在金属材料中的应用。

①固溶强化: 合金元素通过扩散形成间隙固溶体或置换固溶体, 达到强化金属的目的, 例如 C、Cr 等元素的作用。

②时效强化: 合金中的元素通过扩散, 在金属基体中偏聚, 形成第二相强化金属, 例如 Cu-Al 合金

③扩散焊接: 两种不同的材料通过扩散达到焊接的目的, 多在 HIP (热等静压) 条件下进行

④热处理⑤固态烧结

第七章 相图

相: 在没有外力作用下, 物理、化学性质完全相同、成分相同的均匀物质的聚集态称为相, 相与相之间有明确的物理界面。关于“相”要注意: ①水的固态、液态、气态三种状态是三个相。②气体在平衡状态下, 无论有多少组分, 均是均匀的, 因此气相只有一种。③一个相中可能含有不止一种物质, 如空气, 固溶体, NaCl 溶液等。④一种物质可以有几种相的存在, 如冰水混合物。

相图: 反应材料在平衡状态下相的状态 (固态、液态或气态) 与温度及成分关系的综合图形, 也称为平衡图, 状态图, 平衡状态图。所谓平衡, 是指在一定条件下合金系中参与相变过程的各相的成

分和相对质量不再变化所达到的一种状态。

相律：是物质发生相变所遵循的规律之一，它是表示材料在平衡状态下，系统的自由度 f 与组元数 C 和平衡相数 P 三者之间关系的定律。当压力不变时， $f=C-P+1$ 。

组元：组成材料最基本、独立的物质称为组元。组元可以是纯元素，如金属元素（Fe, Cu, Al）；非金属元素（C, N, O），也可以是化合物（ SiO_2 ）。材料可以由单一组元组成，如纯铁，纯铜，也可以由多种组元组成，如钢是由 Fe 和 C 两种组元组成。

杠杆规律：根据合金及存在的相的成分计算在两相区所存在的两个相的相对量的方程。 $M_L/M_S = \text{杠杆右端长/杠杆左端}$ 。

共晶反应：一种液相在恒温下同时结晶出两种固相的反应叫做共晶反应。

包晶反应（转变）：包晶反应是指一定成分的固相和一定成分的液相，在恒温下转变成一个新的一定成分的固相的过程，包晶反应用符号表示为： $L + \alpha \rightleftharpoons \beta$ 。

均匀形核：金属结晶时的形核方式之一，是在金属液体中依靠自身的结构均匀自发地地形核。

非均匀形核：金属结晶时的形核方式之一，是依靠外来杂质所提供的固相界面非自发、不均匀地地形核。

二元相图的基本类型：二元匀晶反应： $L \rightleftharpoons \alpha$ 和下表

等温转变类型		反应式	合金实例
分解型（共晶式）	二元共晶反应	$L \rightleftharpoons \alpha + \beta$	Pb-Sn
	二元偏晶反应	$L_1 \rightleftharpoons L_2 + \beta$	Cu-Pb
	二元熔晶反应	$\beta \rightleftharpoons \alpha + L$	Fe-S
	二元共析反应	$\gamma \rightleftharpoons \alpha + \beta$	Cu-Al
	二元单析（偏析）反应	$\alpha_1 \rightleftharpoons \alpha_2 + \beta$	Al-Zn
合成型（包晶式）	二元包晶反应	$L + \alpha \rightleftharpoons \beta$	Cu-Zn
	二元包析反应	$\alpha + \beta \rightleftharpoons \gamma$	Fe-W
	二元合晶反应	$L_1 + L_2 \rightleftharpoons \gamma$	Fe-Sn

相图的分析：

①相图中所有的线条都是代表发生相转变的温度和平衡相的成分。合金在加热或冷却过程中，每碰到一条线，都表示将发生某种相转变，并且成分随温度的改变也沿着这条线变化。这些线条包括：液相线、固相线、固溶度线、三相恒温线（亦为固相线）。

②相图中由线条围城相区，每一种相区代表相型相同的相区。二元相图中的相区分为单相区、两相

烧卖

区、三相区。单相区代表一种具有独特结构和性质的相的成分和温度的范围，若单相区为一直线，则表示相的成分不变。两相区的两个相就是两边相邻的两个相区的相。在二元相图中，三相区必为一水平线，表示等温反应，三个单相区分别交于水平线的三个点，即水平线的两个端点和线中间的一点，水平线上下分别与三个两相区毗邻。

关于相图必须遵守的一个规律：与水平线端点毗邻的单相区边界线的延长线必须进入两相区内。

分析复杂相区的方法：相图中有稳定化合物时，以稳定化合物为界，把相图分为几部分分别进行分析。成分固定的化合物在相图中为一垂直线，以垂直线为界，把相图分开；成分可变的稳定化合物在相图中为一相区，此时可以用虚线（垂线）把相图分开。这样把复杂的相图分为几个简单的基本相图，分别进行分析。

2008 年名词解释（5 分）包晶转变

2008 年简答题（8 分）指出相图的错误。（图略）

（1）三相区必为一水平线，表示等温反应。

（2）二元系三相平衡时自由度为零，三个相均有确定的成分，即三相平衡时的焦点唯一。

（3）任何温度下做连接线都必须分别交于液相线和固相线，不能交于单一液相线或单一固相线。

2009 年名词解释（5 分）共晶反应

2009 年简答题（10 分）8. 二元相图中可能发生的固固相平衡的反应有哪些？写出相应的平衡反应式。

2010 名词解释（5 分）相图杠杆定律，包晶反应，非均匀形核

2011 名词解释（5 分）非均匀形核，相图杠杆定律

2011 年简答题（10 分）8. 比较二元共晶转变和包晶转变的异同。

答：形同点：①均是恒温、恒成分转变②两种转变反映在相图上均为水平线③都有两个固相和一个液相参与反应。

不同点：①共晶反应为分解型反应，包晶反应为合成型反应

②共晶反应全是固相线，包晶反应只有部分是固相线。

③共晶三角在水平线上，包晶三角在水平线下。

2012 名词解释（5 分）非均匀形核

2012 年简答题 7. 简述二元系统中共晶反应、包晶反应和共析反应的特点，并计算三相平衡的自由度。

共晶反应为分解型反应，其反应特点为： $L \rightleftharpoons \alpha + \beta$ ，自由度为： $f = 2 - 3 + 1 = 0$ 。

包晶反应为合成型反应，其反应特点为： $L + \alpha \rightleftharpoons \beta$ ，自由度为： $f = 2 - 3 + 1 = 0$ 。

共析反应为分解型反应，其反应特点为： $\gamma \rightleftharpoons \alpha + \beta$ ，自由度为： $f = 2 - 3 + 1 = 0$ 。

第八章 非晶态与半晶态材料

聚合物的数均摩尔质量：按分子数统计平均的相对摩尔质量称为数均相对摩尔质量。

重均相对摩尔质量：按重量统计平均的相对摩尔质量称为重均相对摩尔质量。

Z 均相对摩尔质量：按 Z 值统计平均的相对摩尔质量称为 Z 均相对摩尔质量。

聚合物构型：用于表述侧基之间关系的术语，三种常见的构型是无规立构、全同立构、间同立构。

聚合物的结晶度：聚合物都只是部分结晶的，聚合物结晶度就是指结晶部分占总数的百分比，它是

表征聚合物材料的一个重要参数，聚合物结晶度变化的范围很宽，一般从 30%~80%。

玻璃转变温度：对任何一个无定形固体，在试验时间内区分玻璃行为和橡胶行为的临界温度称为玻璃转变温度。玻璃转变温度是所有非晶态材料的特征。

决定聚合物结晶度的因素：

①侧基的尺寸：具有尺寸和容积大的侧基不能有效的堆垛，所以很难形成晶体。

②链分支的程度：有分支的链要比无分支的链形成晶体难得多。

③立构规整度：无规立构不易排成晶态材料所要建立的长程有序方式，而全同立构和间同立构则容易得多。

④重复单元的复杂性：具有长的重复单元的聚合物，它晶化比较慢。

⑤平行链段之间二次键合的程度：极性侧基有利于聚物品态区域的形成。

玻璃的网络修饰体：一个离子它与其近邻不能形成三个或更多的键，这里通常是指氧化物玻璃。打断三维网络，它们不是良好的玻璃形成体。

2009 年名词解释（5 分）玻璃转化温度，聚合物的构型

2009 年论述题（15 分）4. 决定聚合物结晶度的因素有哪些。

2010 年名词解释（5 分）玻璃的网络修饰体

2010 简答题（10 分）9. 影响聚合物结晶度的因素有哪些？

2011 年名词解释（5 分）玻璃转变温度

2011 简单题（10 分）7. 什么叫玻璃的网络修饰体？其对玻璃的结构和性能有何影响？

2011 年论述题（15 分）5. 什么是聚合物的结晶度？影响聚合物结晶度的因素有哪些？

2012 名词解释（5 分）聚合物的数均摩尔质量

2012 年论述题（15 分）3. 论述提高聚合物结晶度的措施有哪些？

要提高聚合物的结晶度，从结构来说，可以：

- ①增加分子链的对称性；②增加分子链的立体规整性；③增加重复单元的排列有序性，即无规共聚；④增加分子链内含的氢键；⑤降低分子链的支化度或交联度；

从外部因素来看，可以在工厂实施的方法：

- ①退火，缓慢降温可以提高结晶度②注意应力的影响，如橡胶和纤维，应力条件下就加速结晶；
- ③溶剂的选择，良溶剂中不易结晶。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

2014年真题

一、名词解释：

晶体：内部原子按某种特定的方式在三维空间呈周期性重复排列的固体，有固定熔点，各向异性。

柏氏矢量：反映了位错周围点阵畸变总量、量的大小和方向，其方向表示位错运动导致晶体滑移的方向；其模表示畸变的程度（位错强度）。

临界分切应力：滑移系开动所需的最小分切应力；它是一个定值，与材料本身性质有关，与外力取向无关。

一级相变：凡新旧两相的化学位相等，化学位的一次偏导不相等的相变。

共析转变：由一种固相分解得到其他两个不同固相的转变。

位错攀移：位错垂直于滑移面方向的运动称为攀移。只有刃型位错能够攀移，把多余的半原子面向上运动称为正攀移，向下运动称为负攀移。

弗伦克尔缺陷：离子位原子进入点阵的间隙位置，而在晶体



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

中同时形成数目相等的空位和间隙原子，这种点缺陷称为弗伦克尔缺陷。出于尺寸考虑，大多数的弗伦克尔缺陷都涉及正离子。

金属玻璃：是指合金液相过冷区域较宽，温度降低时不结晶而是直接凝固的材料。

② 将熔融的合金喷射到冷的铜板上，降温速度在 10^5 万摄氏度每秒以上，由于降温速度极高，液态合金来不及形成结晶就凝固了，结果获得了如同玻璃一样的非晶态合金。用X射线衍射法进行测试，发现这种急冷的合金与平常的金属不同，它不是晶体而是玻璃体，故非晶态合金又称为金属玻璃。

二、简答题

1. 何谓键能曲线？如何利用键能曲线来判断材料的线膨胀系数？

答：将一对原子或离子有关的能量描述为两原子或离子之间距离的函数的关系曲线称为键能曲线。线膨胀系数 α_L 随键能曲线的不对称性增大而增大。

补充： $\frac{x_e - x_0}{x_0} = \alpha_L (T - T_0)$ ， x_e 为温度 T 时的平衡间距， x_0 为参考温度 T_0 时的平衡间距。 α_L 为线膨胀系数。 α_L 是尺寸归一化值随温度而改变的度量，所以，随着键-能曲线不对称性的增加， α_L 的数值增大。

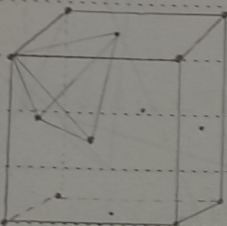


湖南大学数学与计量经济学院教案纸

②. 针对 FCC、BCC 和 HCP 晶胞分别在晶胞图上画出任一四面体间隙的位置，指出该四面体间隙的中心坐标并写出每种晶胞中四面体间隙数量。

解：

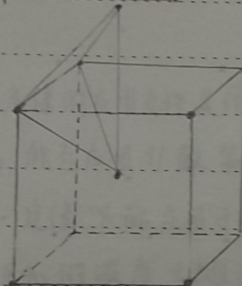
(1) FCC:



中心坐标: $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

四面体间隙数量: 8

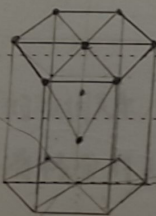
(2) BCC



中心坐标: $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

四面体间隙数量: 12

(3) HCP



中心坐标: $(\frac{1}{2}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2})$

四面体间隙数量: 4

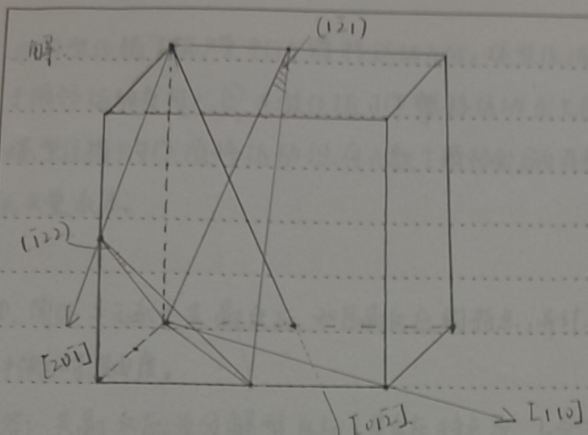
$(0, 0, \frac{2}{3})$; $(0, 0, \frac{1}{3})$

$(\frac{1}{2}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2})$; $(\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$

③. 在立方晶胞内画出 $(1\bar{1}1)$ 、 $(\bar{1}22)$ 晶面，以及 $[0, 1\bar{2}]$ 、 $[110]$ 、 $[20\bar{1}]$ 晶向。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸



4. 扩散第一定律的应用条件是什么? 对于浓度梯度随时间变化的情况, 能否应用扩散第一定律.

答: 扩散第一定律只能应用于浓度梯度不随时间而变化的问题, 扩散因元的浓度又随距离变化, 不随时间变化的情况. 不能, 对于浓度梯度随时间变化的情况需要应用扩散第二定律.

5. 试从位错与晶体的几何关系, 位错线与柏氏矢量方向的关系, 柏氏矢量与位错和滑移面的关系方面分析刃位错与螺位错的异同点.

答: ①刃型位错中存在某一晶面, 其上半部分有半原子面; 螺型位错在位错线附近的原子按螺旋形排列; 刃型位错位错线垂直于柏氏矢量, 螺型位错位错线平行于柏氏矢量;



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

⑤刃型位错柏氏矢量平行于滑移运动方向，螺型位错柏氏矢量垂直于滑移运动方向；⑥刃型位错可作攀移运动且只有一个滑移面，螺型位错只可作滑移运动但有无数个滑移面，两者都可以用柏氏矢量表示。

④. 简述二元系中共晶反应和包晶反应的特点，并计算其各相平衡时自由度。

答：共晶反应为分解型反应，其反应特点为 $L \rightleftharpoons \alpha + \beta$ ，
自由度为： $f = 2 - 3 + 1 = 0$ 。

包晶反应为合成型反应，其反应特点为 $L + \alpha \rightleftharpoons \beta$ ，
自由度为： $f = 2 - 3 + 1 = 0$ 。

7. 什么是聚合物的热塑性、热固性？其结构有何区别？

答：聚合物的热塑性即指聚合物可以被反复加热和再成形的性质；热固性即指聚合物在重新加热时维持原有形状并降解但不熔化的性质。热塑性聚合物在链间具有二次键，而热固性聚合物则具有三维共价键网结构。

8. 什么叫玻璃的网络修饰体？其对玻璃的结构和性能有何影响？

答：碱金属离子被认为是均匀而无序地分布在某些四面体之间的空隙中，以保持网络中局部地区的电中性，因为它们



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

的主要作用是提供额外的氧离子,从而改变网络结构,故它们称为“网络修饰体”。当网络修饰体与一个或多个网络形成氧化物联合时会引起玻璃的键结构改变,网络修饰体能打断三维网络的一次键从而降低一次键的密度,使玻璃转变温度降低。

三、论述题

1. 试从结合键的角度分析工程材料的分类及特点。

①金属材料: 简单金属的结合键完全为金属键,过渡金属的结合键为金属键和共价键的混合,但以金属键为主;

特点: 大多数金属强度和硬度较高,塑性较好。

②陶瓷材料: 是由一种或多种金属同一种非金属相结合的化合物,主要结合方式为离子键,也有一定成分的共价键。

特点: 硬、脆、不易变形,熔点高。

③高分子材料: 大分子内的原子之间的结合方式为共价键,而大分子与大分子之间的结合键为范德华键和氢键。

特点: 有很高的分子量,质轻、密度小,有优良的力学性能、绝缘性能和隔热性能。

④复合材料: 由两种或两种以上的材料组合而成的物质,结合键种类繁多,非常复杂,性能差异也很大。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

2. 何谓第二相强化? 何谓细晶强化? 试从位错理论的角度分析上述强化机制, 并结合实例说明其在生产实际中的应用。

答: 第二相强化 指在金属基体(通常是固溶体)中还存在另外一个或者几个相, 这些相的存在使金属的强度得到提高。因获得第二相的工艺不同, 可分为沉淀强化和弥散强化。

第二相强化的微观机制是位错在运动过程中遇到第二相, 需要切过(沉淀强化的小颗粒或弥散强化的颗粒; 强度低, 有一定塑性)或者绕过(沉淀强化的大颗粒; 颗粒硬, 不易变形)第二相, 从而第二相阻碍了位错的运动。生产实际中通过增加溶质原子的过饱和度和选用适合的时效工艺来增加析出相的体积分数。如马氏体时效钢, 用粉末冶金法制得的铝和氧化铝弥散强化型合金材料。

细晶强化 又称晶界强化, 是指细化晶粒来提高金属的强度, 其原理在于晶界对位错滑移的阻滞效应。对于多晶体来说, 位错运动必须克服晶界的阻力。这是由于晶界两侧位错的取向不同, 所以在某一个晶粒中滑移的位错不能直接穿越晶界进入相邻的晶粒, 只有在晶界处塞集了大量位错后引起应力集中, 才能激发相邻晶粒中已有位错的运动产生滑移, 所以晶粒越细, 晶界越多, 材料的强度就越高, 如实际生产的细晶粒钢。

3. 什么是置换固溶体? 影响置换固溶体固溶度的因素有



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

哪？形成^限固溶体的条件是什么？

答：当溶质原子溶入溶剂中形成固溶体时，溶质原子占据溶剂点阵的阵点，或者说溶质原子置换了溶剂点阵的部分溶剂原子，这种固溶体称^限置换固溶体。影响固溶体固溶度的因素有①晶体结构；②原子尺寸因素；③电负性因素；④电子浓度因素；⑤温度；⑥其他因素如：压力、凝固时的冷却速度等。

形成无限固溶体的条件是

- ① 溶质和溶剂的尺寸差别必须不大于1%；
- ② 两类原子的电负性必须相近；
- ③ 两类原子的价必须相似；
- ④ 两个组分必须具有完全相同的晶体结构类型。

十 晶体中若有较多的线缺陷和面缺陷，其强度会明显升高，产生这一现象的原因是什么？并结合实例说明其在生产实际中的应用。

答：位错密度不断增大，使弹性应力场不断增大，位错间的交互作用不断增强，因而位错的运动越来越困难。这是应变硬化机理。在实际生产中，~~使~~应变硬化既有有利的一面，也有不利方面。

有利方面：有些加工方法要求金属必须有一定的加工硬化；可以通过冷加工控制产品的最后性能；有些零部件在工作



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

条件表面会不断硬化，以达到表面耐冲击，耐^磨蚀的要求。
 不利方面：(1)由于金属在加工过程中塑性变形抗力不断增加，使金属的冷加工需要消耗更多的功率；(2)由于应变硬化使金属变脆，因而在冷加工过程中需要多次中间退火，使金属软化，能够继续加工而不致裂开。

在实际中，
 [如果把应变硬化作为强化材料的手段，那么也中须同时克服加工过程中应变硬化而带来的一些问题。例如，在拉拔线材或者挤压管材时，就会发生应变硬化，此时我们就必须保证材料具有可接受的塑性。而在轿车和卡车制造中，要使用钢板冲压出外形美观的汽车框架，此时使用的钢板就必须能够在冲压时容易地展开易于弯曲，而冲压后的汽车框架则必须具有足够的强度，此时应变硬化就能够使产品强度提高。]

→在加工过程中
 可以使其强度增
 加70%。

5.



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

2013年真题

一、名词解释

原子堆积因子：在晶体结构中原子占据的体积与可利用的总体积的比率。APF = $\frac{\text{在单胞中的原子体积}}{\text{单胞体积}}$

柏氏矢量：反映了位错周围点阵畸变总量 \vec{b} 的大小和方向，其方向表示位错运动导致晶体滑移的方向，其模表示畸变的程度（位错强度）。

临界分切应力：滑移系开动所需的最小分切应力；它是一个定值，与材料本身性质有关，与外力取向无关。

半共格界面：当在界面处吻合的两相晶面原子排列相近，但原子间距差别较大，则两相原子在界面处不能全部吻合形成共格界面，而是部分吻合形成共格区，不吻合处形成刃型位错，这种界面叫做半共格界面。

共析反应：由一种固相分解得到其他两个不同固相的转变。 $\alpha + \beta \rightleftharpoons \gamma$

位错滑移：指在外力作用下，位错线在自身的滑移面（即位错线与柏氏矢量 b 构成的晶面）上的移动，结果导致晶体永久变形，位错的这种运动不涉及物质的输运。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

肖脱基点缺陷：在离子固体中形成的小的正离子和负离子空位的丛集。在这些丛集中正离子：负离子的比率要调整维持电的中性。

嵌段共聚物：由在化学上不相同，而以末端相连的链段所组成的大分子。

二. 简答题

1. 什么是键能曲线？利用键能曲线可以得到材料的哪些信息？

答：将一对原子或离子有关的能量描述为两原子或离子之间距离的函数的关系曲线称为键能曲线。它是键-力曲线的积分。利用键-能曲线，可以估算键能、平均键长、弹性模量和线膨胀系数等。

[如何判断(得到)这些信息]

在 x_0 处 $V(x)$ 的大小，即能量势阱的深度，就是键的固有强度，即键能的度量，平衡间距 x_0 (原子之间中心到中心的平均距离) 对应于键长。键能曲线在 x_0 处的曲率正比例弹性模量，曲率半径越小，弹性模量越大，刚度越大。物理解释：能量势阱的两壁越陡，将原子从平衡位置移动所需要的能量越大。线膨胀系数 α 随键能曲线的不对称的增大而增大。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

2. 指出 FCC 晶体八面体间隙和四面体间隙的位置及数量。

答：八面体：中心一个，每条棱的中心对应八面体中心。

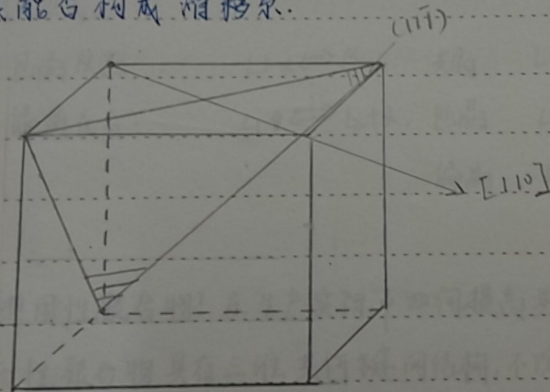
$$(1/2) \times 12 = 4$$

l, m, n 是 1 或 3。

四面体： $1/4$ 棱处，即 4 条棱对棱线上的两个 $1/4$ 长度处。 $4 \times 2 = 8$

[每个单胞包含 8 个 $1/4$ 棱类型四面体位置]

3. 在面心立方 (FCC) 晶胞中画出 $(11\bar{1})$ 晶面， $[110]$ ，分析其能否构成滑移系。



不能，因为 $[110]$ 不在 $(11\bar{1})$ 晶面上。

4. 如图 1 所示有一个位错环，请分析图中 A、B、C 和 D 点处位错的性质并说明它们可能存在的运动方式。

解：以逆时针旋转时，A 为负刃型位错；B 为右螺型位错；C 为正刃型位错；D 为左螺型位错。在外力作用下，



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

但循环将回内扩散。

5. 高分子材料中的化学键有几种?

答: 高分子材料中分子内的原子间的结合方式为共价键, 而大分子与大分子之间的结合键为范德华键和氢键。

[补充: 特点: ①有很高的分子量, 质轻, 密度小, 有优良的力学性能、电绝缘性能和隔热性能]。

6.

6. 列举二元相图中可能发生的液-固三相平衡反应, 并写出相应的平衡反应式。

答: ①. 包晶反应: $L + \alpha \rightleftharpoons \beta$ 共晶 $L \rightleftharpoons \alpha + \beta$

②. 偏晶反应: $L_1 \rightleftharpoons L_2 + \alpha$ 包晶 $L + \beta \rightleftharpoons \alpha$

偏晶 $L_1 \rightleftharpoons L_2 + \alpha$

7. 何谓热固性聚合物? 在生产实际中如何提高其刚性?

答: 热固性聚合物具有三维共价键网络结构, 不溶于任何溶剂, 也不能熔解, 加热时维持原有形状并降解, 一烧焦或燃烧, 一旦定型后不能再改变形状, 无法再生。

在实际生产中可以从以下几方面来提高其刚性:

- ①. 增加极性基团或氢键; ②. 适度的交联; ③. 形成共聚合物或共混; ④. 刚性粒子增韧增强聚合物强度;
- ⑤. 在成型工艺中加入成核剂; ⑥. 取向来提高材料强度(加入



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

讨论题：

8. 影响固溶体固溶度的因素有哪些？固溶体与纯溶剂组元相比其结构和力学性能有何变化？

答：影响固溶体固溶度的因素有①晶体结构②原子尺寸③电负性④电子浓度⑤温度⑥其他因素如压力、凝固时的冷却速度等。固溶体与纯溶剂组元相比：

结构上，固溶体的晶格类型不发生变化，但点阵常数都会发生变化。力学性能上，硬度^{强度}提高，塑性、韧性下降，但综合力学性能优于纯金属。物理性能上，与纯金属相比，固溶体的电阻加大，导电率下降，耐蚀性也下降。

三、论述题

1. 试从结合键的角度分析金属材料塑性或延展性优于无机非金属材料的原因。

答：金属材料的结合键主要以金属键为主，而金属键是金属正离子与自由电子之间的相互作用，金属键无饱和性和方向性，因此金属对外力响应时无需考虑电荷的性质，因而原子间可以相对滑动，并且吸收冲击能量而不至于破坏金属键，所以金属材料韧性好，塑性变形能力强。而无机非金属主要结合方式为离子键，也有一定成分的共价键。无机非金属晶体结构复杂，滑移



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

和金属相比，在滑移过程中有可能遇到同号离子进一步限制滑移的进行，无机非金属的滑移相变能量一般比金属大，离子键能大，所以通常以脆性断裂来响应外加载荷。所以金属材料的塑性或延展性优于无机非金属材料。

2. 结合一类材料谈谈材料成分、组织、制备工艺和性能之间的关系。

答：材料的成分、组织、工艺和性能之间的关系非常紧密，互相影响。材料的性能与它们的化学成分和组织结构密切相关，材料的力学性能往往对结构敏感。设计者根据需求，设计出合理成分，制订最佳工艺流程，而后生产出符合要求的材料。如钢中存在的碳原子对钢的性能起着关键作用，许多金属材料中一些极微量的合金元素也足以严重影响其性能。材料的内部结构可分为不同层次，如原子结构、原子排列方式、显微组织和结构缺陷。如果同样的金属材料，它的晶粒或相的形态和分布改变，就可以大大改善其性能。而材料的制备不仅赋予材料一定的尺寸和形状，而且是控制材料成分和结构的必要手段。如钢材可以通过退火、淬火、回火等热处理来改变它们内部的结构而达到预期的性能。冷轧硅钢片经过复杂的加工工序使晶粒按一定取向排列，大大减少铁损。飞机发动机的叶片可以通过铸造的凝固控制做成单晶体叶片，使之没有晶粒边界，大大提高



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

它们使用^非温度和性能等等。往往一种合成加工上的新突破会产生一种新材料，如有了快速冷却的加工方法，才有了^非固态的金属合金。

3. 金属材料的晶粒细化后，其性能会发生哪些变化？解释原因。

答：金属材料的晶粒细化后，强度和硬度会提高，其原因在于晶粒强化作用，原理在于晶界对位错滑移的阻碍效应。晶粒强化的微观机制在于：对于多晶体来说，位错运动必须克服晶界的阻力。这是由于晶界两侧位错的取向不同，所以在某一个晶粒中，滑移的位错不能直接穿越晶界进入相邻的晶粒，只有在晶界处塞集了大量位错后引起应力集中，才能激发相邻晶粒中已有位错的运动产生滑移，所以晶粒越细，晶界越多，材料的强度就越高。

4. 写出 Fick 第二定律的数学表达式，说明影响方程中扩散系数的主要因素。

答：
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

影响扩散系数的主要因素有以下几个：

1. 温度的影响；温度越高，扩散越快， D 越大；
2. 晶体结构；结构不同，扩散系数不同；
3. 固溶体类型；不同的固溶体，原子的扩散机制不同， D 也不同。
- ④ 固溶体浓度；浓度越大，扩散越易进行。这是 $\frac{\partial C}{\partial t}$
- ⑤ 晶体缺陷；晶界、位错、空位都会影响扩散系数。
6. 化学成分；加入化学元素对扩散产生阻碍， D 减小。
7. 应力；应力会促使扩散的进行， D 增大。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

5. 晶体中若有较多的线缺陷和面缺陷,其强度会明显提高,产生这一现象的原因是什么?如何提高这两类晶体缺陷的密度?

答:无论是线缺陷还是面缺陷都会造成晶格畸变,从而使晶体强度增加。

线缺陷: ①应变硬化,即通过冷加工使金属在形变过程中不断增加位错密度。

面缺陷: ①通过细晶强化,增加晶界密度,利用晶界对位错的阻碍效应,强化材料; ②加入第二相,增加相界,利用第二相阻碍位错的运动来强化材料。

线缺陷密度增大,应力强度不断增大,位错间的交互作用不断增强,对材料起钉扎强化作用;
面缺陷密度增大,对位错运动的阻碍作用增强,从而提高材料强度。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

2012年真题

1. 晶体的各向异性：沿晶体的不同方向，原子排列的周期性和疏密程度不尽相同，由此导致晶体在不同方向的物理化学特性也不同。

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。

3. Schmid定律：对不同晶体取向的正应力与^{发生}塑性变形的切应力之间的关系方程，即 $\tau = \sigma \cos\theta \cos\phi$ 。
 θ ：拉力与滑移方向的夹角； ϕ ：拉力与滑移面法线的夹角。
 $m = \cos\theta \cos\phi$ 称为施密特因子。

4. 堆垛层错：一种面缺陷，是晶体结构层正常的周期性重复堆垛顺序在某一层间出现了错误，从而导致的沿该层间平面（层错面）两侧附近原子的错误排列。

5. 应变硬化：金属在冷加工过程中流变应力随应变的增加而增加的现象称为应变硬化。

6. 聚合物的数均摩尔质量：按分子数统计平均的相对摩尔



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

质量称为数均相对摩尔质量。

7. 面密度：在晶体学面单位面积上的原子或离子中心的数目。
 $\rho_p = \frac{\text{在一个单胞内中心位于一个面上的原子数目}}{\text{包含在一个单胞中的面的面积}}$

8.

△. 简述一次键和二次键的本质特点，并从结合键的角度讨论金属的力学特性。

答：一次键的本质是电子从一个原子向另外一个原子的转移或电子在原子间共用。二次键则来源于某些原子或分子中形成的电偶极子。金属材料主要含有金属键，金属键是金属中的自由电子与金属正离子相互作用所构成的键合，无饱和性和方向性，因此金属对外力响应时无须考虑电荷的性质，因而原子间可以相对滑动，并且吸收冲击能量而不至于破坏金属键，所以金属材料的强韧性好，塑性变形能力强。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

重要概念:

电负性: 用来表示两个不同原子形成化学键时吸引电子能力的相对强弱, 是元素的原子在分子中吸引共用电子的能力。

能量最低原理: 电子的排布总是尽可能使体系的能量最低。即电子先占据能量最低的壳层。

洪德规则: 在同一个亚层各个能级中, 电子的排布尽可能占不同的能级, 而且自旋方向相同。

晶体: 内部原子按某种特定的方式在三维空间呈周期性重复排列的固体, 有固定熔点, 各向异性。

非晶体: 指组成物质的分子(或原子、离子)不呈空间有规则周期性排列的固体。

各向异性: 沿晶体的不同方向, 原子排列的周期性和疏密程度不尽相同, 由此导致晶体在不同方向的物理化学特性也不同。

离子键: 由正、负离子间通过静电作用形成的化学键。(无方向性和饱和性)

共价键: 由两个或多个电负性相差不大的原子间通过共用电子对而形成的化学键。(有方向性和饱和性)

金属键: 金属中的自由电子与金属正离子相互作用所构成

金属的键合。

晶体类型

点缺陷：在结点上或邻近的微观区域内偏离晶体结构的正常排列的一种缺陷是最简单的晶体缺陷。

肖特-亨空位：在晶体中晶体中当某一原子具有足够大的振动能而使振幅增大到一定程度时，就可能克服周围原子对它的制约作用，跳离其原来位置，迁移到晶体表面或内表面的正常结点位置上而使晶体内部留下空位。

弗兰克尔空位：离开平衡位置的原子挤入点阵中的间隙位置，而在晶体中同时形成相等数目的空位和间隙原子。

置换固溶体：当溶质原子溶入溶剂中形成固溶体时，溶质原子占据溶剂点阵的结点，或者说溶质原子置换了溶剂点阵的部分溶剂原子。

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。

稳态扩散：扩散组元的浓度只随距离变化，而不随时间变化。

非稳态扩散：扩散组元的浓度不仅随距离 x 变化，也随时间变化。

柯肯达尔效应：在置换固溶体中，由于两种原子以不同的速率相对扩散而引起标记面向扩散快的一侧移动的现象。

扩散机制：①. 交换机制. ②. 间隙机制. ③. 空位机制. ④. 晶界扩散及表面扩散

影响扩散的因素及原理：

1. 温度：(最主要的因素) 温度越高，原子扩散激活能越大，越易发生迁移，扩散系数也越大。

2. 固溶体类型：间隙固溶体的扩散激活能比置换原子的小，

故扩散速度较大;

3. 晶体结构; A致密度越小, 原子迁移越易, B结构不同, 扩散元素的溶解度也不同, C各向异性的影响.

4. 晶体缺陷; 晶界, 表面和位错等对扩散起加速作用, 由于晶体缺陷处点阵畸变较大, 原子处于较高的能量状态, 易于跳跃.

5. 化学成分; 结合键, 溶质的浓度, 第三组元既影响扩散速率, 还影响方向.

9.6. 应力作用; 应力梯度可以促使原子扩散.

刃型位错: 在晶体中的某一晶面, 在其上部有多余的半排原子面, 好像一把刀刃插入晶体中, 使这一晶面上下两部分晶体之间产生了原子错排, 称为刃型位错. 其柏氏矢量与位错线垂直.

螺型位错: 位错线附近的原子按螺旋形排列的位错称为螺型位错. 其柏氏矢量与位错线平行.

混合位错: 滑移矢量既不平行也不垂直于位错线, 而与位错线相交成任意角度.

柏氏回路: 在实际晶体中, 从任一原子出发, 围绕位错以一定的步数作一定旋向闭合回路.

柏氏矢量: 反映了位错周围点阵畸变总量大小和方向, 其方向表示位错运动导致晶体滑移的方向; 其模表示畸变的程度(位错强度).

滑移: 在外加切应力的作用下, 通过位错中心的附近原子沿着柏

位矢量的方向在滑移面上不断地以作少量的位移而逐步实现。

攀移: 刃型位错除了可以在滑移面发生滑移外, 还可以在垂直于滑移面的方向上运动, 把多余的半原子面面向上运动称正攀移, 向下运动称为负攀移。

交滑移: 当某一螺型位错在原滑移面上运动受阻时, 有可能从原滑移面转移到与之相交的另一滑移面上去继续滑移, 这一过程为交滑移。

滑移系: 一个滑移面和该面上的一个滑移方向合起来叫做一个滑移系。

滑移面和滑移方向往往是金属晶体中原子排列最密的晶面和晶面。密排面的面间距最大, 点阵阻力最小, 因而容易沿着这些面发生滑移; 密排方向上原子间距最短, 即位错的柏氏矢量最小, 也易产生滑移。

施密特因子 (取向因子): 拉伸变形时, 能够引起晶体滑移的分切应力 τ 的大小取决于该滑移面和晶向的空间位置 (λ 和 ϕ)。 τ 与拉伸应力 σ 间的关系为 $\tau = \sigma \cos \phi \cos \lambda$; 则 $\cos \phi \cos \lambda$ 被称为取向因子, 或施密特因子, 取向因子越大, 则分切应力越大。

离子晶体位错难易情况:

离子晶体的滑移方向或滑移面都不是密排的, 因而位错在离子晶体中移动的阻力比金属晶体中的高, 此外, 同类离子相接触的可能性进一步限制了离子晶体中的滑移系数目。因



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

此, 这些因素都降低了位错的流动性, 导致脆性断裂的倾向。
 共价晶体: 低配位数导致它的原子致密度较低, 也导致其线密度和面密度也较低。因此它的柏氏矢量也较长, 位错移动的固有阻力值变高。此外位错移动时必须破坏高的共价键能, 从而使得它具有高的强度。

聚合物: 聚合物的晶胞尺寸很大, 几何关系较复杂, 所以柏氏矢量比其他晶体结构中大很多, 而且聚合物中分子内共价键比分子间二次键强很多, 使得主滑移方向沿着高分子链的轴方向。

小角度晶界: 相邻晶粒位向差小于 10° 的晶界;

大角度晶界: 相邻晶粒位向差大于 10° 的晶界。

孪晶界: 两个晶体沿一个公共的晶面构成镜面对称的位向关系, 这两个晶体称孪晶, 此公共界面叫, 孪晶界, 分共格与非共格孪晶界。

共格孪晶界: 在孪晶面上的原子同时位于两个晶体点阵的结点上, 为两个晶体所共有, 属于自然、地完全匹配, 是无畸变的完全共格晶面, 界面能为普通晶界界面能的 $1/10$, 很稳定。

非共格孪晶界: 孪晶界相对于孪晶面旋转一定角度得到的界面, 孪晶界上只有部分原子为两部分晶体所有, 原子错排较严重, 界面能为普通界面能的 $1/2$ 。

强化方法与机制:

1. 合金强化: 由于合金元素(杂质)的加入, 导致邻近的溶剂原子稍微偏离其平衡位置, 相应的增加晶体的应变能。

2. 应变硬化: 塑性变形时, 晶体的位错数目急剧地增



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

加,把位错的应力场拖过晶体中的其他位错的联合的应力场必须做额外的功,使其强度和硬度上升,塑性和韧性下降的现象。

3. 晶粒细化: 晶粒愈细小,晶界的总长度越大,对位错滑移的阻碍越大,材料的屈服强度愈高。

4. 沉淀强化: 沉淀物邻域的点阵畸变阻碍位错的移动,使其强度、硬度高于不存在沉淀物时强度和硬度的硬化机制。

均匀形核: 新相晶核是在母相中存在均匀地生长的,即晶核由液相中的一些原子团直接形成,不受杂质粒子或外表面的影响。

非均匀形核: 新相优先在母相中存在的异质处形核,即依附于液相中的杂质或外来表面形核。

粗糙界面: 界面的平整结构约有一半的原子被固相原子占据而另外一半位置空着。也称“非小平面”。

光滑界面: 固相一侧几乎全部为固相原子所占据,只剩下少数空位和台阶。

合金: 由两种或两种以上的金属或者金属与非金属经熔炼、烧结或者其它方法组合而成并具有金属特性的物质。

固溶体: 以合金中某一组元作为溶剂,在其晶体点阵中融入其它组元原子,所形成的与溶剂有相同晶体结构、晶格常数稍有变化的固态液体。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

金属间化合物: 金属和金属之间, 类金属和金属原子之间以共价键形式结合生成的化合物总称为金属间化合物, 由于金属间化合物在合金相图中处于相图的中间位置, 故也称为中间相。

影响置换固溶体固溶度的因素:

1. 晶体结构: 晶体结构相同是组元间形成无限固溶体的必要条件, 如果两组元的晶体结构不同, 组元间的溶解度只能是有限的。
2. 原子尺寸因素: 溶质和溶剂的原子尺寸差别越小, 越容易形成置换固溶体, 并且形成固溶体的溶解度越大。
3. 电负性因素: 溶剂、溶质的电负性差越小, 溶解度越大, 电负性差越大, 倾向于生成化合物, 而不利于形成固溶体。
4. 电子浓度因素: 溶质元素的原子原子价越高, 同样数量的溶质原子溶解时, 其电子浓度是增加越快, 因此溶固度就越小。
5. 温度: 在大多数情况下, 温度升高, 固溶度升高; 而对少数含有中间相的复杂合金, 情况则相反。
6. 其他因素如压力、凝固时的冷却速度等对固溶度也有很大影响。

形成无限固溶体的条件: (即休姆-罗瑟里规则)

1. 溶质和溶剂的尺寸差别必须不大于15%。 $(r_1 - r_2)/r_1 \leq 15\%$
2. 两类原子的电负性必须相近。
3. 两类原子的价必须相似。
4. 两个组分必须具有完全相同的晶体结构类型。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

热塑性聚合物：具有线性和支化高分子链结构，在其价键聚合链间具有二次键，加热后会变软，可反复加热和再成形。

热固性聚合物：具有三维共价键网结构，不溶于任何溶剂，也不能熔融，加热时^指维原有形状并降解。一烧焦或燃烧，一旦定型后不能再改变形状，无法再生。

△ 固溶体与其纯溶剂组元相比，其结构、力学性能和物理性能发生了哪些变化？

结构：与组成固溶体的纯组元相比，固溶体的晶格类型不发生变化，但点阵常数都会发生变化。

力学性能：硬度、强度提高，塑性、韧性下降，但综合力学性能优于纯金属。

物理性能：与纯金属相比，固溶体的电阻加大，导电率下降，耐腐蚀性也下降。

△ 从结合键的角度分析工程材料的分类及特点。

金属材料：简单金属的结合键完全为金属键，过渡族金属的结合键为金属键和共价键的混合，但以金属键为主；

特点：大多数金属强度和硬度较高，塑性较好。

陶瓷材料：是由一种或者多种金属同一种非金属相结合的化合物，主要结合方式为离子键，也有一定成分的共价键，特点：硬、脆，不易变形，熔点高。

高分子材料：大分子内的原子之间的结合方式为共价键，而大分子



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

与分子之间的结合键为范德瓦耳键和氢键。特点：有很高的分子量，质轻、密度小，有优良的力学性能、绝缘性能和隔热性能。

复合材料：由两种或两种以上的材料组合而成的物质，结合键种类繁多，非常复杂，性能差异也很大。

△. 为什么固溶体强度比纯金属的高？

合金两类原子尺寸不同，引起点阵畸变，阻碍位错运动，造成固溶强化。

△. 固溶体和金属间化合物在成分、结构和性能方面的差异。

固溶体	金属间化合物
成分：溶质浓度可在固溶度范围内变化。	成分固定或在一定范围内波动，可用化学分子式表示。
结构：保持溶剂的点阵。	其点阵类型不同于组成它的任一组元。
力学性能特点：强度、硬度比溶剂高，但总体看强度、硬度依然很低，而塑性、韧性较好。	熔点较高，硬度高，而塑性、韧性差。

金属键的本质：金属正离子与自由电子之间的相互吸引。

离子键的本质：正电性原子和负电性原子之间的相互吸引。

共价键的本质：共价电子对的结合。

一次键都涉及到了电子从一个原子向另一个原子的转移，或者



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

电子在原子间的共用。二次键既不涉及电子的转移，也不涉及电子的共用，二次键是来源于某些原子或分子中形成的电荷极子。一次键通常比二次键强一至两个数量级。

键能曲线：将一对原子或离子有关的能量描述为两原子或离子之间距离的函数的关系曲线称为键能曲线。它是键力曲线的积分。利用键-能曲线，可以估算键能、平均键长、弹性模量和线膨胀系数等。其他外力或能源（如，施加外载荷、电磁场或温度变化）作用于系统，键长和有效键能就有可能改变，从而改变键能曲线图。

在 x_0 处 $U(x)$ 的大小，即能量势阱的深度，就是键的固有强度，即键能的度量；平衡间距 x_0 （原子之间中心到中心的平均距离）对应于键长。键能曲线在 x_0 处的曲率正比例弹性模量，曲率半径越小，弹性模量越大，刚度越大。物理解释：能量势阱的两壁越陡，将原子从平衡位置移动所需的能量越大。线膨胀系数 α 随键能曲线的不对称的增大而增大。

△ 离子晶体、共价晶体和金属晶体中原子间的键合特征。影响原子间成键类型的重要因素有哪些？

离子晶体一定含有离子键，可能含有共价键；共价晶体只含有共价键；金属晶体：简单金属晶体只含有金属键，过渡金属晶体含有金属键和共价键，以金属键为主。

键合特征：

离子键：以离子而不是以原子为结构单元，无方向性和饱和性。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

共价键：共用电子对，有饱和性和方向性。

金属键：电子共有化，无饱和性和方向性。

影响原子间成键类型的重要因素：①电负性，②价电子数。电负性相差大，价电子数相差很小容易形成离子键，电负性相差小，价电子数相差很大容易形成共价键，电负性相差 \neq 不大不小，价电子数相差很小容易形成金属键。

△. 定性比较陶瓷材料、金属材料和高分子材料的弹性模量高低，并从材料中结合键的角度分析存在差异的原因。

弹性模量是表征材料在发生弹性变形时所需要施加力的大小。在给定应力下，弹性模量大的材料只发生很小的弹性应变，而弹性模量小的材料则发生比较大的弹性应变。结合键能是影响弹性模量的主要因素，结合键之间的结合键能越大，则弹性模量越大。由于陶瓷材料主要含有离子键和共价键，金属材料主要含有金属键，而高分子材料分子之间主要是二次键起作用，而结合键能的大小顺序是离子键最高，共价键次之，金属键第三，二次键最弱，所以这三种材料的弹性模量由高到低依次是：陶瓷材料、金属材料、高分子材料。实际上，常见的陶瓷的弹性模量为 $250 \sim 600 \text{ GPa}$ ，常见的金属材料的弹性模量为 $70 \sim 350 \text{ GPa}$ ，而高分子材料的弹性模量为 $0.7 \sim 3.5 \text{ GPa}$ 。

△. 从结合键的角度讨论金属的力学性能。

金属材料的主要结合键以金属键为主，而金属键是金属正离子与自由电子之间的相互作用，金属键无饱和性和方向性，因此



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

金属对外力响应时无需考虑电荷的性质，因而原子间可以相互对滑动，并且吸收冲击能量而不至于破坏金属键，所以金属材料**的强韧性好，塑性变形能力强。**

空间点阵：组成晶体的粒子（原子、离子或分子）在三维空间中形成有规律的某种对称排列，如果我们用点来代表组成晶体的粒子，这些点的空间排列就称为空间点阵。

单胞：完全描述空间点阵的最小重复单元称为单胞。

点阵常数：晶胞的大小取决于其三条棱的长度 a 、 b 和 c ，而晶胞的形状则取决于这些棱之间的夹角 α 、 β 、 γ ；我们把 a 、 b 、 c 、 α 、 β 、 γ 这六个参量称为点阵常数。

晶体结构：组成晶体的结构基元（分子、原子、离子、原子集团）依靠一定的结合键结合后，在三维空间做有规律的周期性的重复排列方式。简单讲即：空间点阵 + 结构基元 = 晶体结构。

配位数 (CN)：晶体结构中任一原子周围最近邻且等距离的原子数。

原子堆积因子 (APF)：在晶体结构中原子占据的体积与可利用的总体积的比率定义为原子堆积因子。

$APF = \frac{\text{在单胞中原子体积}}{\text{单胞体积}}$

影响配位数的因素：

① 中心原子的大小：中心原子的最高配位数决定于它在周期表中的周次。

② 中心原子的电荷：中心原子的电荷高，配位数就大。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

③中心原子的成键轨道性质和电子构型。从价键理论的观点来说,中心原子成键轨道的性质决定配位数,而中心原子的电子构型对参与成键的杂化轨道的形成很重要。配体的性质。同一氧化态的金属离子的配位数不是固定不变的,还取决于配体的性质。配合物的中心原子与配体间键合的性质,对决定配位数也很重要。

晶向族: 晶体中的原子排列情况相同,空间位向不同的一组晶向,称一个晶向族,用 $\langle uvw \rangle$ 表示。

晶面族: 晶体中具有相同的条件(这些晶面上的原子排列情况和晶面间距分别完全相同),只是空间位向不同(即不平行)的各个晶面,总称为晶面族,用 $\{hkl\}$ 表示。

线密度: 在晶体方向单位长度上有原子中心的数目。 $\rho_l =$ 在一个单胞内沿方向上原子中心的数目 / 包含在一个单胞内线的长度。

面密度: 在晶体学面单位面积上的原子或离子中心的数目。

$\rho_p =$ 在一个单胞内中心^{原子}数 / 包含在一个单胞中的面的面积。

△. 采用四轴坐标系标定六方晶体的晶向指数时,应该有什么样的约束条件? 为什么?

若用三轴坐标系标定六方晶体中某一晶向指数为 $[uvw]$, 则用四轴坐标系^系标定为 $[uvtw]$, 约束条件是“前三个指数之和为零”, 即 $t = -(u+v)$, 因为根据立体几何学知识知, 三位空间中独立的坐标轴个数不超过三个, 位于平面的 u, v, t 必定有一个不是独立的。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

已知金刚石晶胞中最近邻的原子间距为 0.154 nm , 试求该金刚石的点阵常数、配位数和致密度。

$$\begin{aligned}
 \frac{\sqrt{3}}{4} a &= 0.154 \text{ nm}, & \therefore a=b=c &= \frac{4 \times 0.154}{\sqrt{3}} = 0.3566 \text{ nm}; \\
 \alpha=\beta=\gamma &= 107.5^\circ, & \text{配位数 } CN &= 8-N=4, & \gamma &= \frac{\sqrt{3}}{2} a, \\
 \text{致密度 } \rho &= \frac{\frac{1}{8} \times 8 + \frac{1}{2} \times 6 \times 4}{a^3} \times \frac{4}{8} \times \gamma^3 = \frac{8 \times \frac{4}{8} \times \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^3}{16} = 0.34
 \end{aligned}$$

简要说明晶体结构与空间点阵的关系

空间点阵是把晶体的质点抽象为阵点, 用来描述和分析晶体结构的周期性和对称性, 要求各个阵点的周围环境相同, 它只有 14 种类型。而晶体结构是指具体的物质粒子排列分布, 由于结构基元可以是无穷多种, 因而构成的具体的晶体结构也有无穷多种。两者之间的关系可用“空间点阵 + 结构基元 = 晶体结构”来描述。

NaCl 的晶体结构是否属于布拉菲点阵? 为什么? 如果不是, 则其点阵为哪种类型?

不属于布拉菲点阵。如果把 NaCl 的晶体结构看成 14 种布拉菲点阵任何一种, 则它的每个阵点不可能都具有完全相同的物理环境和几何环境, 这不符合空间点阵的定义, 所以 NaCl 的晶体结构不属于布拉菲点阵。但如果把组元看成质点, 则其满足其中一种空间点阵, 面心立方点阵。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

塑性变形: 在外力作用下引起晶体中原子的永久位移称为塑性变形。

(滑移) 临界分切应力: 使塑性变形开始发生的切应力称为临界分切应力, 用 τ_R 表示。它是一个定值, 与材料本身性质有关, 与外力取向无关。

Schmid (施密特) 定律: 对不同晶体取向的正应力与发生塑性变形的切应力之间的关系方程, 即 $\tau_c = \tau_R / \cos\theta \cdot \cos\phi$, θ : 拉力与滑移方向的夹角; ϕ : 拉力与滑移面法线的夹角。 $m = \cos\theta \cdot \cos\phi$ 称为施密特因子。

滑移系: 晶体通过滑移产生塑性变形时, 由一个滑移面和位于该滑移面上的一个滑移方向所构成的系统称为一个滑移系。

△ 常见的几种晶体的滑移系

晶体结构	滑移面	滑移方向	滑移系数
BCC	$\{110\} \{112\} \{123\}$	$\langle 111 \rangle$	48
FCC	$\{111\}$	$\langle 110 \rangle$	12
HCP	$\{0001\} \{10\bar{1}0\}$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	3

○ 常温下金属塑性变形的机制主要有哪些? 它们的主要差别是什么?

主要形变机制是滑移和孪生, 差别如下:



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

	滑移	孪生
晶体中的位向	已滑移部分和未滑移部分的取向相同	已孪生部分和未孪生部分的取向不同,两者构成镜面对称关系
位移向量	原子的位移是沿着滑移方向原子间距的整数倍	原子位移小于孪生方向的原子间距,一般为原子间距的 $\frac{1}{n}$
对塑性变形的贡献	对晶体塑性变形贡献很大,即总变形量大	对晶体塑性变形贡献有限,即总变形量小
变形机制	滑移是位错运动的结果	孪生是分位错运动的结果
临界应力	有确定的临界分切应力	所需分切应力一般高于滑移的临界分切应力
应变条件	一般情况下,先发生滑移变形	滑移变形难以进行时,或晶体的对称度很低,变形速度较低,加载速率较高

施密特因子: 拉伸变形时,能够引起晶体滑移的分切应力 τ 的大小取决于该滑移面和晶向的空间位置 (ϕ 和 θ), τ 与拉伸应力 σ 间的关系为: $\tau = \sigma \cdot \cos\phi \cos\theta$. 其中 $\cos\phi \cos\theta$ 被称为取向因子,或称施密特因子,取向因子越大,则分切应力越大.

弗伦克尔空位: 高位原子进入晶体间隙而形成的空位.

肖特基空位: 高位原子进入其他空位或迁移至晶界或表面而形成的空位.



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

弗伦克尔缺陷: 离位原子进入点阵的间隙位置, 而在晶体中同时形成数目相等的空位和间隙原子。这种点缺陷称为弗伦克尔缺陷, 出于尺寸考虑, 大多数的弗伦克尔缺陷都涉及正离子。

肖特基缺陷: 在离子固体中形成的小的正离子和负离子空位的丛集。在这些丛集中正离子: 负离子的比率要调整维持电的中性。

位错: 晶体中普遍存在的线缺陷, 是晶体中某处一系列或若干列原子有规律的错排。位错是引起塑性变形的主要原因。

位错 滑移: 指在外力作用下, 位错线在自身的滑移面(即位错线与伯氏矢量 b 构成的晶面)上的移动, 结果导致晶体永久变形, 位错的这种运动不涉及物质的输运。

柏氏回路: 绕着位错通过无缺陷材料的回路称为柏氏回路, 如果在回路中没有位错, 它通常是闭合的。

柏氏矢量 b : 用来描述位错引起晶格畸变的物理量, 它是连接柏氏回路终点到起始点的矢量。该矢量的模是位错的强度, 表示晶格总畸变的大小, 其方向表示晶格点畸变的方向。一般情况下, 该矢量越大, 晶体畸变的程度越大。柏氏矢量是位错的一个不变的性质。

全位错: 柏氏矢量等于单位点阵矢量或其整数倍的位错称为全位错。

不全位错: 柏氏矢量不等于单位点阵矢量的位错称为不全位错。
(其中柏氏矢量小于点阵矢量的位错称为部分位错 或者分位错)



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

晶界：当两个任意取向的晶粒，沿一个任意表面接合时发生的界面称为晶界。晶界是一种面缺陷。

共格界面：界面上的原子同时位于两相晶格的结点上，即两相的晶格是彼此连接的，界面上的原子为两者共有。

△面缺陷种类及对材料力学性能的影响。

面缺陷包括：表面、晶界、相界、堆垛层错等。

影响：界面阻碍位错的运动，引起界面强化，从而提高了材料的强度。界面阻碍变形，使变形分布均匀，提高了材料的塑性。强度和塑性的提高相应使材料的韧性得到改善，因此界面的增加得到细晶组织，可大大改善材料的力学性能。

△比较说明刃型位错与螺型位错的异同点。

①刃型位错柏氏矢量垂直于位错线，螺型位错位错线平行于柏氏矢量。②刃型位错柏氏矢量平行于滑移运动方向，螺型位错柏氏矢量垂直于滑移运动方向；③刃型位错可作攀移运动且只有一个滑移面，螺型位错只可作滑移运动但有无数个滑移面；④两者都可以用柏氏矢量表示。

△应变硬化：金属在冷加工过程中流变应力随应变的增加而增加的现象称为应变硬化。机理是：金属在形变过程中，^{使弹性应力不断增大}位错密度不断增大，位错间的交互作用不断增强，因而位错的运动越来越困难。

应变硬化在生产实际中有何意义？



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

在生产实际中,应变硬化有不利方面,也有有利方面。

不利方面: (1) 由于金属在加工过程中塑性变形抗力不断增大,使金属的冷加工需要消耗更多的功率; (2) 由于应变硬化使金属变脆,因而在冷加工过程中需要多次中间退火,使金属软化,能够继续加工而不致裂开; (3) 有些金属尽管某些性能很好,但由于解决不了加工问题,其应用受到很大限制。

有利方面: (1) 有些加工方法要求金属中须有一定的加工硬化; (2) 可以通过冷加工控制产品的最后性能; (3) 有些零部件在工作条件^①表面会不断硬化,以达到表面耐冲击,耐腐蚀的要求。

△材料的主要强化机制有哪几种,其强化机制是什么?

固溶强化、细晶强化、第二相强化、形变强化。其机理^①是通过在金属中引入大量的缺陷,阻碍位错的运动来提高材料的强度。不同的强化方法的机理有其特殊性。

固溶强化: 利用点缺陷对位错的阻力使金属基体获得强化的一种方法。具体方法是通过在金属基体中溶入一种或数种溶质元素形成固溶体而使金属强度、硬度升高。溶质元素可以使材料得到强化的微观机制在于: 无论是间隙式固溶原子还是置换式固溶原子都会使溶剂金属的晶格产生畸变,从而产生内应力,位错在此内应力场中运动会受到阻力。

细晶强化: 又称晶界强化; 是指细化晶粒来提高金属的强度, 其原理在于晶界对位错滑移的阻滞效应。细晶强化的微



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

观机制在于：对于多晶体来说，位错运动必须克服晶界的阻力。这是由于晶界两侧位错的取向不同，所以在某一晶粒中移动的位错不能直接穿越晶界进入相邻的晶粒，又只有在晶界处塞集了大量位错后引起应力集中，才能激发相邻晶粒中已有位错的运动产生滑移。所以晶粒越细，晶界越多，材料的强度就越高。

第二相强化：指在金属基体（通常是固溶体）中还存在另外一或者几相，这些相的存在使金属的强度得到提高。因获得第二相的工艺不同，第二相强化分为①沉淀强化：通过相变热处理获得第二相。②弥散强化：通过粉末烧结或内氧化获得。第二相强化的微观机制是：位错运动过程中遇到第二相，需要切过（沉淀强化的小颗粒和弥散强化的颗粒；强度低，有一定塑性）或者绕过（沉淀强化的大颗粒；颗粒硬，不易变形）第二相，从而第二相（沉淀相和弥散相）阻碍了位错的运动。

形变强化：材料屈服以后，随着形变量的增加，所需的应力是不断增加的，这种现象叫形变强化，也叫加工强化。其机理是：金属在形变过程中位错密度不断增加，使弹性应力场不断增大，位错间的交互作用不断增强，因而位错运动越来越困难。

上坡扩散：在化学位差为驱动力的条件下，原子由低浓度位置向高浓度位置进行的扩散。

下坡扩散：原子由高浓度区向低浓度区的扩散叫下坡扩散，也叫下坡扩散。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

菲克第一定律: 在稳态条件下, 通过某一截面的扩散流量与垂直这个截面方向上的浓度梯度成正比。

$$J = -D \frac{dc}{dx}$$

J : 扩散通量 ($\text{g}/\text{cm}^2 \cdot \text{s}$) D : 扩散系数 (cm^2/s)

菲克第二定律: 在非稳态条件下, 扩散物质浓度的变化速率等于扩散通量随位置的变化率, 其一般形式为

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

扩散的驱动力: 原子扩散的真正驱动力是化学位梯度, 而不是浓度梯度。

晶体固体中, 扩散的微观机制有: 间隙机制、空位机制、交换机制、填隙机制等。

离子晶体的扩散机制: 空位扩散; 间隙扩散; 亚晶格间隙扩散。

影响扩散的因素:

① 温度的影响: 温度越高, 扩散越快。

② 晶体结构的影响: 结构不同, 扩散系数不同。

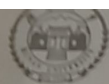
③ 固溶体类型对扩散的影响: 不同的固溶体, 原子的扩散机制不同。

④ 固溶体浓度对扩散的影响: 浓度越大, 扩散越易进行。

⑤ 晶体缺陷的影响: 晶界、位错、空位都会对扩散产生影响。

⑥ 化学成分对扩散的影响: 加入化学元素对扩散会产生阻碍。

⑦ 应力的作用: 不管合金内部还是外部存在应力, 都会促使扩散的进行。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

△ 什么是柯肯达尔效应，请用扩散理论加以解释。若Cu-Al组成的互扩散发生扩散时，界面标志会向哪个方向移动。

柯肯达尔效应：在置换式固溶体的扩散过程中，放置在原始界面上的标志物朝着低熔点元素的方向移动，移动速度与时间^或抛物线关系。

柯肯达尔效应否定了置换式固溶体中扩散的换位机制，而证实了空位机制；体系中不同组元具有不同的自扩散系数，相对而言，低熔点组元扩散快，高熔点组元扩散慢，这种不等量的原子交换造成了柯肯达尔效应。

与Cu-Al组成的互扩散发生扩散时，界面标志物会向着Al的方向移动。

△ 在MgO晶体中掺入Li₂O后，晶体的空位浓度如何变化？

答：晶体中氧的空位浓度增加。因为每个Li⁺置换一个Mg²⁺会导致损失一个正电荷，如果没有间隙产生，这损失的正电荷必须由产生负离子空位来平衡了。电荷中性要求每两个Li⁺杂质产生一个氧空位。所以最终结果是即使在MgO晶体中掺入少量的Li₂O，晶体中会产生比热空位浓度大的多的氧空位浓度。

△ 结合扩散理论，谈谈生产实际中如何提高钢铁材料的渗碳效率。

从外部来讲，加热至高温，增加CO/CO₂气体比率；从内部讲：提高扩散系数D，增加扩散激活能。

湖南大学数学与计量经济学院教案纸

Q. 什么是柯肯达尔效应，请用扩散理论加以解释，若Cu-Al组成的互扩散发生扩散时，界面标志会向哪个方向移动。

柯肯达尔效应：在置换式固溶体的扩散过程中，放置在原始界面上的标志物朝着低熔点元素的方向移动，移动速率与时间^{1/2}成抛物线关系。

柯肯达尔效应否定了置换式固溶体中扩散的换位机制，而证实了空位机制；系统中不同组元具有不同的自扩散系数；相对而言，低熔点组元扩散快，高熔点组元扩散慢，这种不等量的原子交换造成了柯肯达尔效应。

若Cu-Al组成的互扩散发生扩散时，界面标志物会向着Al的方向移动。

Q. 在MgO晶体中掺入Li₂O后，晶体的空位浓度如何变化？

答：晶体中阳离子空位浓度增加。因为每个Li⁺置换一个Mg²⁺会导致损失一个正电荷，如果没有间隙产生，这损失的正电荷必须由于产生负离子空位来平衡了。电荷中性要求每两个Li⁺杂质产生一个氧空位。所以最终结果是即使在MgO晶体中掺入少量的Li₂O，晶体中会产生比热空位浓度大的多的氧空位浓度。

Q. 结合扩散理论，谈谈生产实际中如何提高钢铁材料的渗碳效率。

从外部来讲，如提高温度，增加C/Fe气体比率；从内部讲：提高扩散系数D，增加扩散激活能。

湖南大学数学与计量经济学院教案纸

②. 论述原子扩散在金属材料中的应用。

①. 固溶强化：合金元素通过扩散形成间隙固溶体或置换固溶体，达到强化金属的目的，例如 C、Cr 等元素的作用。

②. 时效强化：合金中的元素通过扩散，在金属基体中聚集，形成第二相强化金属，例如 Cu-Al 合金。

③. 扩散焊接：两种不同的材料通过扩散达到焊接的目的，多在 HIP（热等静压）条件下进行。

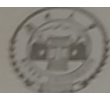
④. 热处理：⑤. 固态烧结。

△. 相：在没有外力作用下，物理、化学性质完全相同，成分相同的均匀物质的聚集态称为相，相与相之间有明确的物理界面。

相图：反应材料在平衡状态下相的状态（固态、液态或气态）与温度及成分关系的综合图形，也称为平衡图，状态图，平衡状态图。所谓平衡，是指在一定条件下合金系中参与相变过程的各种相的成分和相对质量不再变化所达到的一种状态。

相律：是物质发生相变所遵循的规律之一，它是表示材料在平衡状态下，系统的自由度 f 与组元数 C 和平衡相数 P 三者之间关系的定律。当压力不变时， $f = C - P + 1$ 。

组元：组成材料最基本、独立的物质称为组元。组元可以是纯元素，如金属元素（Fe, Cu, Al），非金属元素（C, N, O），也



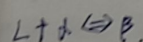
湖南大学数学与计量经济学院教案纸

可以是化合物 (SiO_2)。

杠杆规律: 根据合金及存在的相的成分计算在两相区所存在的两个相的相对量的方程。

共晶反应: 一种液相在恒温下同时结晶出两种固相的反应叫做共晶反应。

包晶反应 (转变): 一定成分的固相和一定成分的液相, 在恒温下转变成一个新的、一定成分的固相的过程。符号表示为:



均匀形核: 金属结晶时的形核方式之一, 是在金属液体中依靠自身的结构均匀自发地形核。

非均匀形核: 金属结晶时的形核方式之一, 是依靠外来杂质所提供的固相界面非自发、不均匀地形核。

△. 比较二元共晶转变和包晶转变的异同。

相同点: ① 均是恒温、恒成分转变; ② 两种转变反映在相图上均为水平线; ③ 都有两个固相和一个液相参与反应。

不同点: ① 共晶反应为分解型反应, 包晶反应为合成型反应。

② 共晶反应全是固相线, 包晶反应只有部分是固相线。

③ 共晶三角在水平线上, 包晶三角在水平线下。

非晶态与半晶态材料

聚合物的数均摩尔质量: 按分子数统计平均的相对摩尔质量称为数均相对摩尔质量。

重均相对摩尔质量: 按重量统计平均的相对摩尔质量称为重均相对摩尔质量。



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

^{摩尔}
2. 相对摩尔质量: 按 Z 值统计平均的相对质量称为 Z 相对摩尔质量。

聚合物构型: 用于表述侧基之间关系的术语, 三种常见的构型是无规立构、全同立构、间同立构。

聚合物的结晶度: 聚合物都只是部分结晶的, 聚合物结晶度就是指结晶部分占总数的百分比, 它是表征聚合物材料的一个重要参数, 聚合物结晶度变化的范围很宽, 一般从 30% ~ 80%。

玻璃转变温度: 对任何一个无定形固体, 在试验时间内区分玻璃行为和橡胶行为的临界温度称为玻璃转变温度。玻璃转变温度是所有非晶态材料的特征。

决定聚合物结晶度的因素:

- ① 侧基的尺寸: 具有尺寸和容积大的侧基不能有效的堆垛, 所以很难形成晶体。
- ② 链分支的程度: 有分支的链要比无分支的链形成晶体难得多。
- ③ 立构规整度: 无规立构不易排成晶态材料所要建立的长程有序方式, 而全同立构和间同立构则容易得多。
- ④ 重复单元的复杂性: 具有长的重复单元的聚合物, 它结晶比较慢。
- ⑤ 平行链段之间二次键合的程度: 极性侧基有利于聚合物晶态区域的形成。

玻璃的网络修饰体: 一个离子官能团不能形成三个或



湖南大学数学与计量经济学院教案纸

或更多的键，这里通常是指聚合物玻璃。打断三维网络，它们不是良好的玻璃形成体。

Q. 论述提高聚合物结晶度的措施有哪些？

从结构来说，可以：

- ① 增加分子链的对称性；② 增加分子链的立体规整性；③ 增加重复单元的排列有序性，即无规共聚；④ 增加分子链内含有的氢键；⑤ 降低分子链的支化度或交联度；

从外部因素来看，可以在工厂实施的方法：

- ① 退火，缓慢降温可以提高结晶度；② 注意应力的影响，如橡胶和纤维，应力条件下就加速结晶；③ 溶剂的选择，良溶剂中不易结晶。

湖南大学 本科

一、考试的基本要求

全面掌握金属学的基本概念、基本规律、基本原理，要求能灵活运用金属学的基本理论综合分析材料的金属学问题。

二、考试题型

概念题；简答题；综合论述及应用题。

三、考试内容

第1章 晶体学基础

晶体结构、空间点阵、晶胞、晶系、点阵常数、晶面、晶向、晶面族、晶面族和晶面间距等基本概念；晶体结构与空间点阵的联系与区别；晶面指数和晶向指数的标定；晶带定理及应用；晶体的宏观对称、对称操作和对称要素、对称要素的组合。

第2章 金属及合金的晶体结构

典型的晶体结构与合金相的特点、分类，包括：

三种典型金属晶胞中原子的排列形式，包括晶格常数与原子半径的关系、晶胞内原子数、配位数、致密度、四面体间隙和八面体间隙数目；

相、组织、固溶体、金属间化合物、固溶强化、置换固溶体、间隙固溶体、有序固溶体、电子化合物、间隙相化合物等基本概念；

固溶体与金属间化合物的区别，间隙固溶体与间隙相及间隙化合物的联系和区别；

影响置换固溶体和间隙固溶体固溶度的因素，金属间化合物的分类及形成控制因素。

第3章 晶体缺陷

晶体缺陷的基本类型和特征，位错线与柏氏矢量、位错运动方向、晶体滑动方向与外加切应力之间的关系；

单位位错、不全位错、堆垛层错、扩展位错和固定位错等基本概念；

位错的应力场和应变能特点、位错的增殖以及交割方式；

位错运动的方式及位错反应的必要条件；

晶体缺陷及其对材料性能的影响，金属及合金强化的位错机制。

第4章 固体中的扩散

自扩散、互扩散、柯肯达尔效应、上坡扩散、反应扩散、稳态扩散、非稳态扩散、扩散通量、空位扩散、间隙扩散、扩散常数、扩散系数、扩散激活能等基本概念；

扩散驱动力；菲克定律，扩散的基本规律及其应用；

扩散的机制及其影响因素。

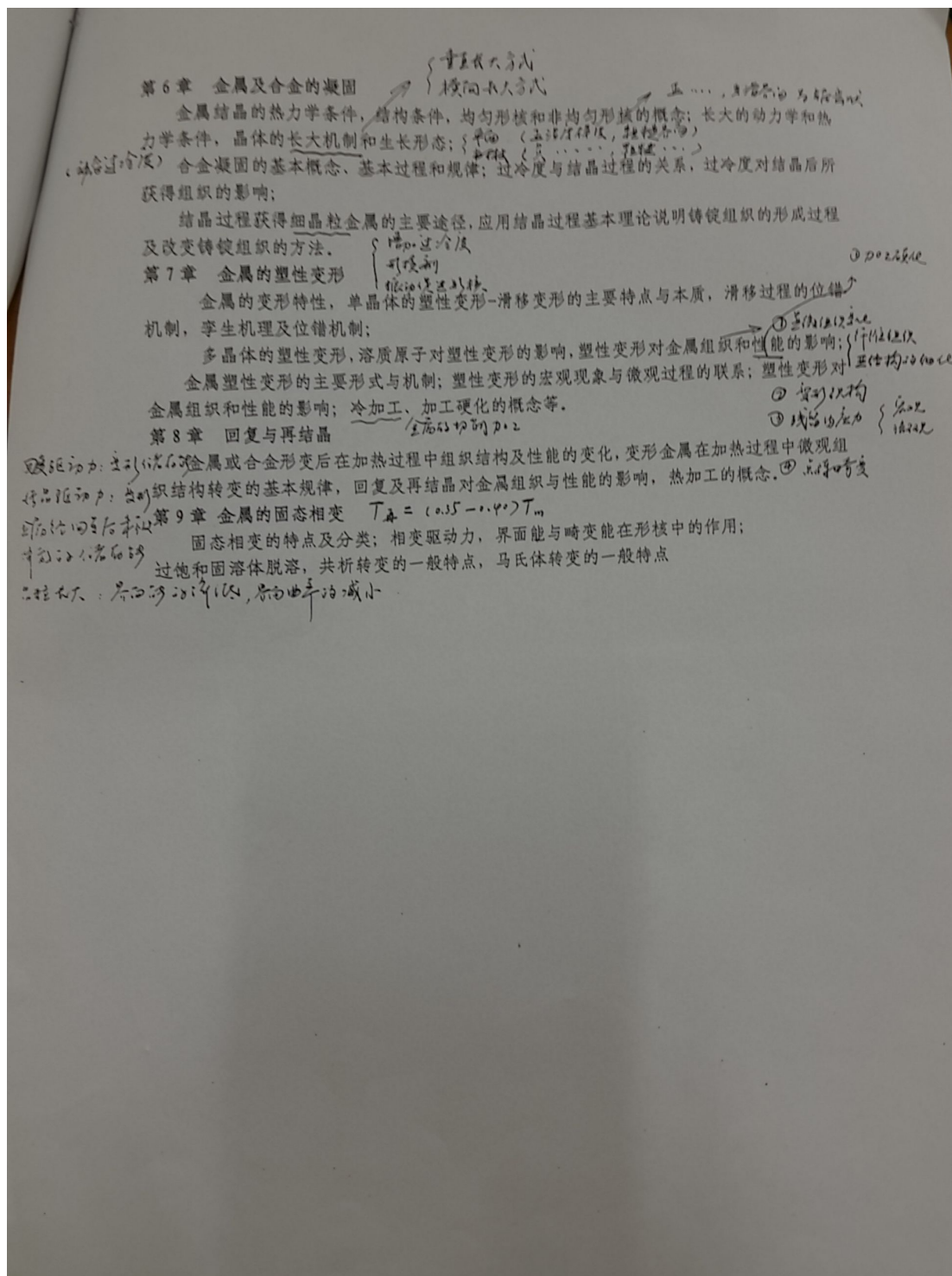
第5章 合金相图

相平衡与相平衡图的基本概念、相律、杠杆定律，二元合金相图的建立，二元相图的基本类型：匀晶相图及固溶体的结晶、共晶相图及其合金的结晶、包晶相图及其合金的结晶，其它类型的二元合金相图及相图与性能的关系；

合金组元、相、组织、相组成物、组织组成物等基本概念；匀晶、共晶相图，典型合金的结晶过程，杠杆定律及其应用，相图与性能的关系。

铁碳合金的平衡结晶过程及室温下所得到的组织，应用杠杆定律进行相组成物相对含量计算；铁素体、奥氏体、珠光体、莱氏体和渗碳体等基本概念；理解成分过冷的形成及影响因素、成分过冷对组织形态的影响；

三元相图的基本知识，熟悉浓度三角形、直线法则、重心法则、单变量线、投影图、垂直截面、等温截面等。分析简单的三元相图。



上次测试的卷子~

湖南大学本科王

大家可以按照思路复习前面几章的。

多多注意这道题 2011级《材料科学基础》单元测试之一

姓名_____ 学号_____ 班级_____

一 填空题 (8×6')

1. 布拉菲点阵共有 14 种, 归纳为 7 个晶系。面心立方结构单个晶胞中的原子数为 4 个, 密排六方结构单个晶胞中的原子数为 6 个。
2. 描述反应动力学的阿累尼乌斯方程表明: 反应速率对与温度和 反应活化能 的变化是极为敏感的。
 $v = Ae^{-\frac{Q}{RT}}$
3. 在聚合物、陶瓷、金属材料中, 只有 聚合物 才能形成橡胶。
4. 聚合物的构型分为 全同立构、间同立构 和 无规立构 三种。
5. 非晶态的线性高聚物在不同温度下按力学性质分为 玻璃态、高弹态 和 粘流态。
6. 在非平衡凝固条件下, 某些亚共晶或过共晶成分的合金也能得到 100% 的共晶组织, 这种共晶组织称为 伪共晶。
7. 空位属于 点 缺陷, 而空洞或沉淀物属于 体 缺陷。
8. 金属的三种常见晶体结构中, 不能作为一种空间点阵的是 HCP 结构。

二 名词解释 (4×6')

原子堆积因子 配位数 面密度 线密度

三 简答题 (2×14')

1. 画出立方晶系的晶面和晶向: $(11\bar{1})$ 、 (421) 、 $[1\bar{1}1]$ 。
2. 利用键能曲线可以得到材料的哪些性能指标?

键能、平均键长、弹性模量、线膨胀系数。

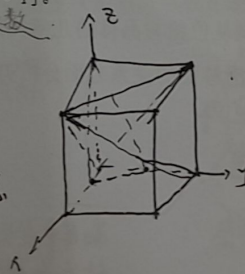
原子堆积因子 APF: 在晶体结构中原子占据的体积与利用的总体积的比率。

线密度 ρ_L 是沿一个方向单位长度上相同阵点的数目。

面密度 ρ_A 是在所关心的面的单位面积上的原子数。

配位数 CN: 原子在晶体中的最近邻原子数。

晶体结构中, 任一原子周围最近邻且等距离的原子数。



2011 级《材料科学基础》单元测试之二

姓名_____ 学号_____ 班级_____

一 填空题 (8×6')



1. 面心立方 (fcc) 晶体的滑移面是 $\{111\}$ 滑移方向是 $\langle 110 \rangle$, 共有 12 个滑移系。

2. 每个体心立方晶胞中的原子数为 2, 配位数为 8; 每个面心立方晶胞中的原子数为 4, 配位数为 12。

3. NaCl 和金刚石的晶体结构相差很大, 但它们都属于 FCC 点阵。

4. 金属晶体的配位数主要由 原子的几何条件 决定。

5. 当杂质原子处于溶剂原子之间的空间时, 称它们为间隙原子, 由两类原子以这种形式混合的固溶体称为 间隙固溶体。

6. 在置换型固溶体中, 原子扩散的方式一般为 空位换位机制。

7. 钢中的珠光体是 $\alpha\text{-Fe}$ 和 Fe_3C 的混合物。

8. 铸铁与碳钢的区别在于有无 石墨体。

二 名词解释 (4×6')

空间点阵: 原子或离子在三维空间周期性排列形成的三维阵列, 是人为的对晶体内部空间点阵。

晶胞: 在点阵中取出一个具有代表性的最小单元作为点阵的组成单元, 称为晶胞。

配位数: 晶体结构中, 任一原子周围最近邻且等距的原子数。

三 简答题 (2×14')

滑移系: 晶体中一个滑移面以及该面上一个滑移方向的统称, 一个滑移系。

1. 画出立方晶系的晶面和晶向: (211) 、 (421) 、 $[121]$ 、 $(21\bar{1})$ 、 (421) 、 $[121]$ 。

2. 试从位错与晶体的几何关系、位错线与柏氏矢量方向的关系、柏氏矢量与位错和滑移面的关系方面分析刃位错与螺位错的异同点。

空间点阵

晶胞

滑移系: 晶体中发生变形的表面是滑移面, 在滑移面上沿着它发生变形的方向称为滑移方向, 滑移面和滑移方向的组合称滑移系。

2011 级《材料科学基础》单元测试之三

姓名_____ 学号_____ 班级_____

一 填空题 (8×6')

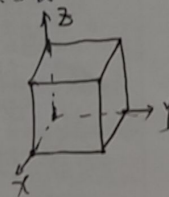
- 氯化钠 (NaCl) 的晶体结构属于 FCC 空间点阵。
- 面心立方 (fcc) 晶体的滑移面是 {111}，滑移方向是 {110}，共有 12 个滑移系。
- 自扩散的激活能等于 空位形成的激活能和空位扩散的激活能
- 含 0.4%C 的碳钢经平衡凝固后，其室温组织组成物为 铁素体、渗碳体和珠光体
- 粘性流动是一个热激活过程，流动性除受粘性变形的激活能支配外，还与 温度 有关。
- 离子晶体中的配位数主要受 离子半径比 决定的，而在共价键结合的材料中，最近邻的数目是有每个原子的 杂化轨道数 决定的。
- 空位属于 点 缺陷，而空洞或沉淀物属于 体 缺陷。
- 在非平衡凝固条件下，某些亚共晶或过共晶成分的合金也能得到 100% 的共晶组织，这种共晶组织称为 伪共晶

二 名词解释 (4×6')

密勒指数 非均匀形核 奥氏体 稳态扩散

三 简单题 (2×14')


- 分别计算 fcc 晶体中 [100]、[110] 和 [111] 晶向上的线密度 (用点阵常数 a 表示)，并说明哪个晶向是密排方向。
 $\frac{1}{a}$ $\frac{2}{\sqrt{2}a} = \frac{\sqrt{2}}{a}$ $\frac{2}{\sqrt{3}a}$
- 根据位错理论，试论述金属的固溶强化和弥散强化机制。



2011 级《材料科学基础》单元测试之四

姓名_____ 学号_____ 班级_____

一 填空题 (8×6')

- 合金相可以分为 固溶体 和 中间相 (金属间化合物) 两大类。
- 根据溶质在溶剂晶格中的位置, 固溶体可以分为 间隙固溶体 和 置换固溶体 两大类。
- 体心立方结构最密排的晶向族为 <111>。
- 体心立方 BCC 材料中沿 [110] 方向的线密度是 $\frac{1}{2a}$ 。 
- 根据材料的性质与测量方向有无关系, 可把材料称作各向同性或各向异性, 单晶体呈现一定程度的 各向异性。
- 二次键与一次键的根本区别在于 二次键既不涉及电子的转移, 也不涉及电子的共用。
- 点缺陷包括空位、间隙原子和 置换原子。
- 原子扩散的驱动力是 浓度差 (化学势差) 化学位梯度。

非稳态扩散: 扩散组元的浓度不仅随距离变化, 也随时间变化的扩散。
 均匀形核: 新相晶核是在母相中均匀地生长的, 即晶核由液相中的一些原子团自发形成, 不受外来杂质或外来表面的影响。
 铁素体: 碳在 α -Fe 中形成间隙固溶体称为铁素体。
 非晶体材料: 指材料原子没有长程有序的周期排列, 无固定的熔点。

三 简答题 (2×14')

- 体心立方、面心立方、密排六方晶胞中的原子数、配位数、致密度分别是多少?
- 如何根据键-能曲线获得材料的弹性模量、热膨胀系数性能的信息?

	BCC	FCC	HCP	键能
原子数	2	4	6	
配位数	8	12	12	
致密度 APF	0.68	0.74	0.74	
原子半径关系	$\sqrt{3}a=4r$	$\sqrt{2}a=4r$	$a=2r$	
密排晶向	<111>	<110>	轴向 <1120>	
最密密排面	{111}	{111}	底面 <0001>	