

武汉理工大学 2005 年研究生入学考试试题

课程代码 1141 课程名称 材料科学基础

(共 3 页, 共七题, 答题时不必抄题, 标明题目序号, 相图直接做在试卷上, 不必重新画图)

一、解释下列基本概念, 并简述其与材料(或晶体)性质或性能的关系 (36 分)

1. 空间利用率:  $PC$  利用率越高  $PC = \frac{\text{原子体积}}{\text{晶胞体积}}$
2. 位错滑移;
3. 孪反常;
4. 弛豫界面;
5. 独立析晶;
6. 晶界扩散;
7. 非均态核化;
8. 弥散强化;
9. 矿化剂;
10. 二次再结晶;
11. 应力腐蚀;
12. 穿晶断裂。

二、钙钛矿  $ABO_3$  型结构属于立方晶系, 其中 2 价正离子位于立方晶胞顶点位置, 4 价正离子位于立方晶胞体心位置, 2 价负离子位于立方晶胞面心位置 (20 分)

1. 画出钙钛矿型结构的晶胞投影图;
2. 指出晶胞中各离子的配位数:  $CaTiO_3$   $12=6+6$
3. 根据鲍林规则计算  $O^{2-}$  离子电价是否平衡:  $\frac{2 \times 4 \times 4}{12} + \frac{4 \times 2}{6} = 2$
4.  $BaTiO_3$  和  $CaTiO_3$  都属于钙钛矿结构, 其中  $BaTiO_3$  晶体具有铁电效应而  $CaTiO_3$  没有, 请从结构方面予以解释;

5. 证明形成理想钙钛矿结构时, 两种阳离子半径  $r_A$ 、 $r_B$  与氧离子半径  $r_O$  之间满足下面的关系式  $r_A + r_O = \sqrt{2}(r_B + r_O)$ : 分

三、计算题 (15 分)

1.  $MgO$  晶体中, Schottky 缺陷的生成能为  $6eV$ , 计算在  $25^\circ C$  和  $1600^\circ C$  时热缺陷的浓度。

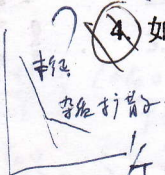
( $1eV = 1.6 \times 10^{-19} J$ )  $[V] = \exp(-\frac{E_g}{kT})$   $\frac{n}{N} = \exp(-\frac{6eV}{2kT})$   $25^\circ C = 2.21 \times 10^{-51}$

2. 如果  $MgO$  晶体中, 含有  $10^{-6} mol$  的  $Al_2O_3$  杂质, 则在  $1600^\circ C$  时,  $MgO$  晶体中是热缺陷占优势还是杂质缺陷占优势, 说明原因。

3. 此时  $MgO$  晶体中的扩散是本征扩散还是非本征扩散占主导地位?

4. 如果  $Al_2O_3$  杂质的含量为  $10^{-8} mol$ , 其  $\ln D - 1/T$  曲线转折点向何方移动, 为什么?

折向  $\ln D$  增大的方向移动, 因为在低温下, 杂质扩散影响显著, 加速了扩散





四、请阐述书写组成缺陷反应方程式时应遵循的基本原则，依据上述原则写出下列缺陷反应方程式，根据书写过程总结出书写组成缺陷反应方程式的一般规律。(20分)

1.  $ZrO_2$  加入到  $Al_2O_3$  中;

2.  $CaF_2$  加入到  $YF_3$  中。

五、在成核-生长相变中，当形成半径  $r$  的球形新相时，整个系统自由焓的变化  $\Delta G_r$  应为体积的自由焓变化、界面能变化和应变能的代数和，即

$$\Delta G_r = \frac{4}{3}\pi r^3 \Delta G_v + 4\pi r^2 \gamma_{LS} + \frac{4}{3}\pi r^3 \Delta G_E$$

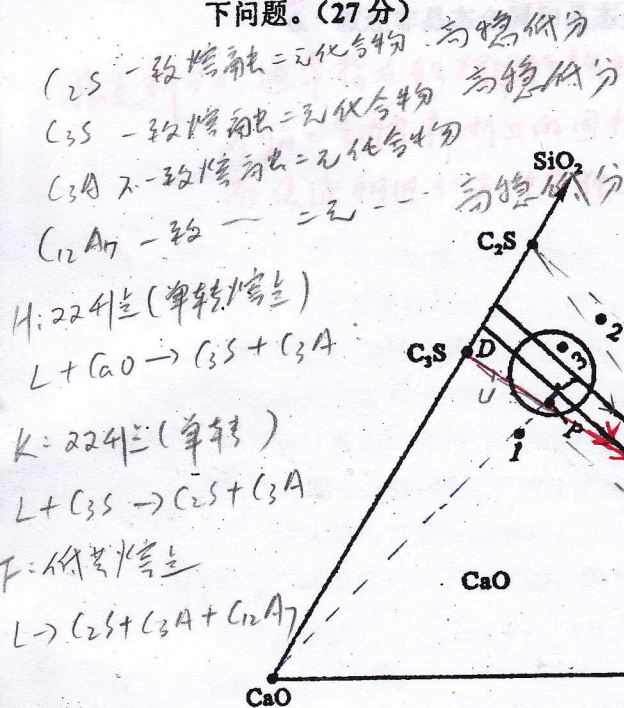
式中： $r$  为球形新相的半径， $\gamma_{LS}$  为液-固界面能， $\Delta G_v$ 、 $\Delta G_E$  分别为除去界面能外单位体积的自由焓和应变能的变化。(12分)

1. 确定新相可以稳定成长的临界半径及相变势垒;

2. 在什么情况下处理问题时可以忽略应变能的影响?

3. 说明新相形成初期温度起伏与新相形成的关系。

六、下图是  $CaO-Al_2O_3-SiO_2$  系统中的富钙部分  $CaO-C_2S-C_{12}A_7$  系统，根据相图解答以下问题。(27分)

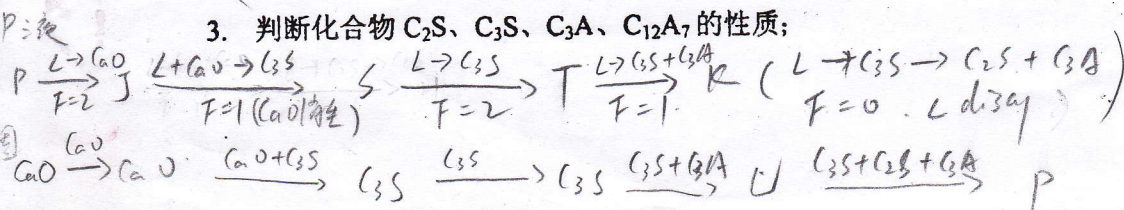


第六题图

1. 请将该区域副三角形化;

2. 用箭头表示界线温度变化方向及界线性质;

3. 判断化合物  $C_2S$ 、 $C_3S$ 、 $C_3A$ 、 $C_{12}A_7$  的性质;





1.  $\text{CaO}$ ,  $\text{C}_3\text{S}$ ,  $\text{C}_3\text{A}$
2.  $\text{C}_2\text{S}$ ,  $\text{C}_3\text{A}$ ,  $\text{C}_{12}\text{A}_7$
3.  $\text{C}_2\text{S}$ ,  $\text{C}_3\text{S}$ ,  $\text{C}_3\text{A}$

4. 写出 H、K、F 点的平衡过程，并指出无变量点的性质；
5. 写出 P 点的平衡结晶过程；
6. 比较 1、2、3 点平衡条件下的结晶产物；

**P 点的组成实际冷却过程中会发生独立析晶现象吗？** 若冷却速度较快，会

七、选择题，在下面 6 道题中任意选择 2 道题。（10×2 分）

1. 烧结中后期的正常晶粒长大与二次再结晶有什么区别？*定义不同*
2. 简述影响扩散的因素。*内、外*
3. 简述影响固相反应速率的因素。*内、外*
4. 论述广义腐蚀对材料性能的影响。
5. 分析表面粗糙度对表面力场及润湿的影响。
6. 叙述非晶态金属和晶态金属在结构和性质上的差异。

**独立析晶：**通常指在转熔过程中发生的，由于冷却速度较快，液相中的晶相有可能先被新析出的固相包裹起来，使转熔过程不能继续进行，从而使液相进行另一个单独的析晶过程。

例：萤石  $\text{ABO}_3$  型结构属于立方晶系，其中 2 价正离子位于立方晶胞顶点位置，4 价正离子位于立方晶胞体心位置，2 价负离子位于立方晶胞面心位置。（10 分）

1. 画出萤石晶胞的晶胞投影图；
2. 指出晶胞中各离子的配位数；
3. 根据电价规则计算  $\text{O}^{2-}$  离子电价是否平衡；
4.  $\text{BaTiO}_3$  和  $\text{CaTiO}_3$  都属于萤石结构，其中  $\text{BaTiO}_3$  晶体具有铁电效应而  $\text{CaTiO}_3$  没有，请从结构方面予以解释；
5. 证明形成理想萤石结构时，两种阳离子半径  $r_A$ 、 $r_B$  与阴离子半径  $r_O$  之间满足下列关系式： $r_A + r_O = \sqrt{2}(r_B + r_O)$ 。（10 分）

三、计算题（15 分）

1.  $\text{MgO}$  晶体中，Schottky 缺陷的生成能为 6 eV，计算在 25℃ 和 1600℃ 时热缺陷的浓度。（ $k = 8.6 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$ ）
2. 如果  $\text{MgO}$  晶体中，含有  $10^{-4} \text{ mol}$  的  $\text{Al}_2\text{O}_3$  杂质，则在 1600℃ 时， $\text{MgO}$  晶体是铁电体还是顺电体？说明原因。
3. 此时  $\text{MgO}$  晶体中的杂质是哪种离子扩散占主导地位？
4. 如果  $\text{Al}_2\text{O}_3$  杂质含量增加， $\text{MgO}$  晶体的居里点向何方移动，为什么？