

此资料为北科材料科学基础本科生作业习题答案
供报考北科材料人员使用。

目录

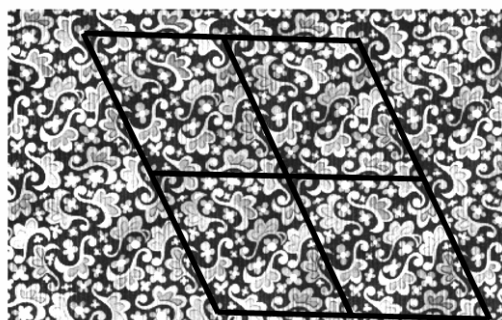
1. 第一章 晶体学.....	2
2. 第二章 晶体结构.....	19
3. 第三章 相图.....	22
4. 第四章 金属和合金中的扩散... ..	45
5. 第五章 凝固.....	56
6. 第六章 错位.....	65
7. 第七章 晶态固体的表面和界面.....	79
8. 第八章 晶体的塑性变形.....	86
9. 第九章 回复和再结晶.....	94
10.第十章 固态转变.....	100

——歪 制作合成，望有用

第 1 章 晶体学习题题解

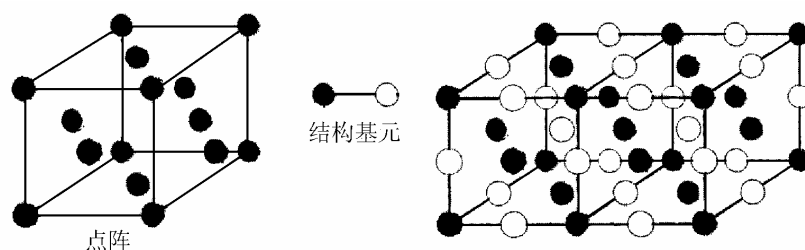
1. 把图 1-55 的图案抽象出一个平面点阵。

解：按照等同点的原则，右图(图 1-55)黑线勾画出的点阵就是由此图案抽象出的平面点阵。



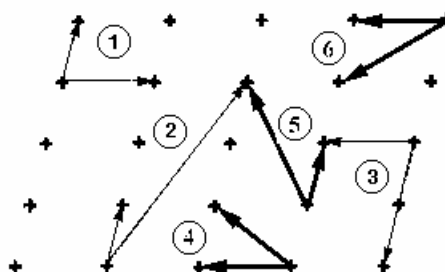
2. 图 1-56 的晶体结构中包含两类原子，把这个晶体结构抽象出空间点阵，画出其中一个结构基元。

解：下右图(图 1-56)的结构单元是由一个黑点和一个白点组成，按照等同点原则，抽象除的空间点阵如下左图所示，它的布拉喇菲点阵是面心立方。



3. 在图 1-57 的平面点阵中，指出哪些矢量对是初基矢量对。请在它上面再画出三个不同的初基矢量对。

解：根据初基矢量的定义，由它们组成的平面初基单胞只含一个阵点，右图(图 1-57)中的和 是初基矢量对， 不是初基矢量对。右图的黑粗线矢量对，即 、 和 是新加的初基矢量对。



4. 用图 1-58a 中所标的 a_1 和 a_2 初基矢量来写出 r_1, r_2, r_3 和 r_4 的平移矢量的矢量式。用图 1-58b 中所标的初基矢量 a_1, a_2 和 a_3 来写出图中的 r 矢量的矢量式。

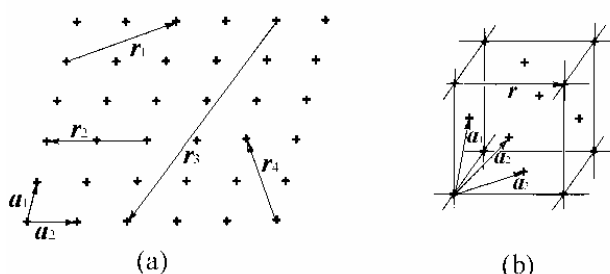
解：右图(图 1-58)a 中的 a_1 和 a_2 表示图中的各矢量：

$$r_1 = a_1 + 2a_2 \quad r_2 = -2a_2$$

$$r_3 = -5a_1 - 2a_2 \quad r_4 = 2a_1 - a_2$$

右图 b 中的 a_1, a_2 和 a_3 表示图中的 r 矢量：

$$r = -a_1 + a_2 + a_3$$



5. 用矩阵乘法求出乘积 $\{2_{[100]} \cdot 4_{[001]}\}$ 的等价操作，再求 $\{4_{[001]} \cdot 2_{[100]}\}$ 的等价操作，这些结果说明什么？

解：因

$$\{2_{[100]}\} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \{4_{[001]}\} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$\{2_{[100]}\} \cdot \{4_{[001]}\}$ 的等价操作为

$$\{2_{[100]}\} \cdot \{4_{[001]}\} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

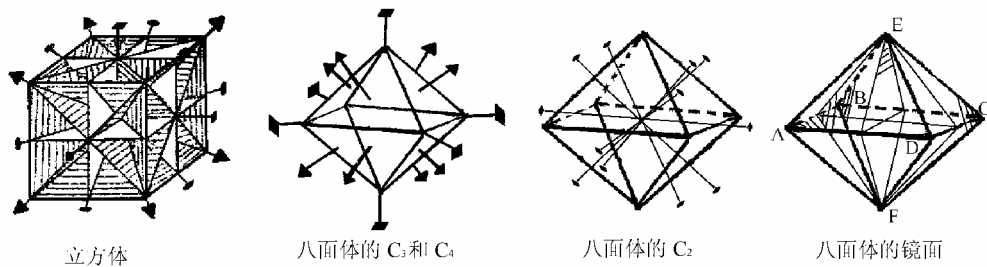
这组合的操作和 $\{2_{[1\bar{1}0]}\}$ 操作等效。 $\{4_{[001]}\} \cdot \{2_{[100]}\}$ 的等价操作为

$$\{4_{[001]}\} \cdot \{2_{[100]}\} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

这组合的操作和 $\{2_{[1\bar{1}0]}\}$ 操作等效。对比上面两个结果，操作的顺序不同，所得的操作结果不同。

6. 画出图 1-59 中各个形体所有的对称元素。其中 a) 是立方体，b) 是四面体，c) 是八面体，d) 是正六面柱体。

解：下图是立方体和八面体的对称元素示意图。

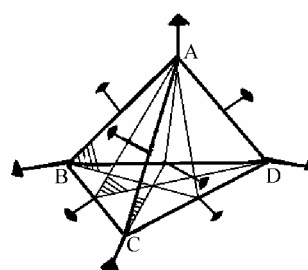
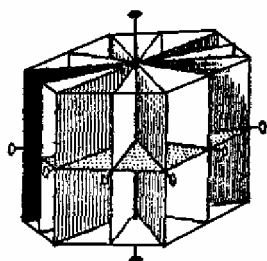


立方体有 4 个 3 次轴，它们是 4 个体对角线，即过立方体中心的 3 个 $\langle 111 \rangle$ 方向；有 3 个 4 次轴，它们是立方体三对平行面的中点连线，即过立方体中心的 3 个 $\langle 100 \rangle$ 方向；有 6 个 2 次轴，它们是过立方体中心的 6 个 $\langle 110 \rangle$ 方向；有 9 个镜面，即过立方体中心的 3 个 $\{100\}$ 面和过立方体中心的 6 个 $\{110\}$ 面；有一个对称中心，它就是立方体的中心。

立方体顶面和底面中心与过立方体中心并平行于顶面（和底面）的四边形四个顶点连接起来就是一个八面体，所以八面体的对称性质与立方体的相同。它有 4 个 3 次轴，3 个 4 次轴，见上图右 2 图；有 6 个 2 次轴，见上图的右 3 图；有 9 个镜面，上面最右边的图只画出了四个镜面，它们是过 E、F 点与 ABCD 四边形的两条中线连成的两个面以及 EAFC 面和 EBFC 面，按同样方法以 A、C 顶点和 B、D 顶点也可各得四个镜面，但是其中有三个是重复的，所以共有 9 个镜面；八面体中心是对称中心。

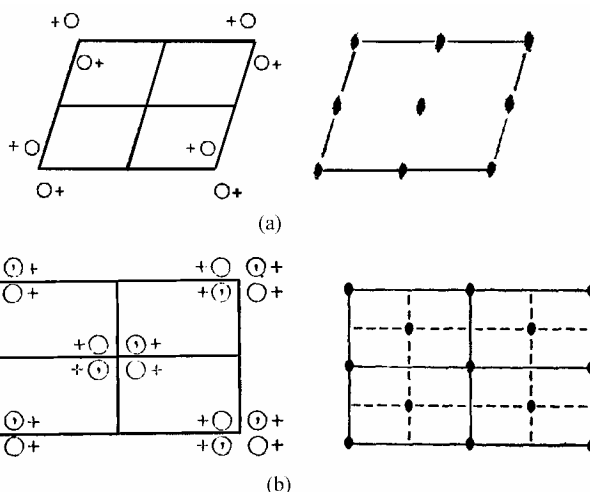
下右图是六面柱体和四面体的对称元素的示意图。六面柱体有 1 个 6 次轴，它是过六面柱体中心并垂直顶面和底面的轴；有 6 个 2 次轴，它们是过六面柱体中心的六边形的三个对角线 and 这个六边形对边中点连线；有 7 个镜面，它们是过六面柱体中心的六边形面、六

面柱体三对棱连成的三个面以及六面柱体三对柱面中线连成的三个面；有一个对称中心，它是六面柱体的中心。四面体有四个 3 次轴，它们是四个顶点与其对面的三角形中心的连线；有 3 个 2 次轴，它们是六条边两两中点的连线；有 6 个镜面，它们是每一个面(等边三角形)三条中线与这个面所对的顶角连成的三角形面，这样四个面共作出 12 个面，但它们有一半是重复的，所以共有 6 个镜面；四面体没有对称中心。



7. 画出适当的图形证明：在平行的 2 次轴通过的两个相邻阵点之间的中点上有另一个 2 次轴；在平行的镜面通过的两个相邻阵点之间的中点上有另一个镜面。

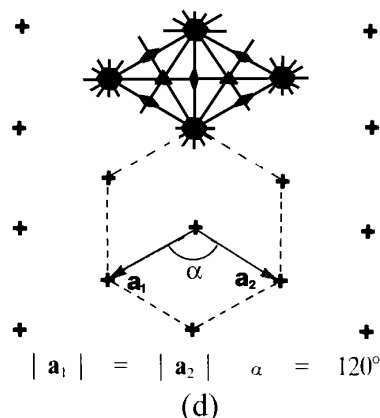
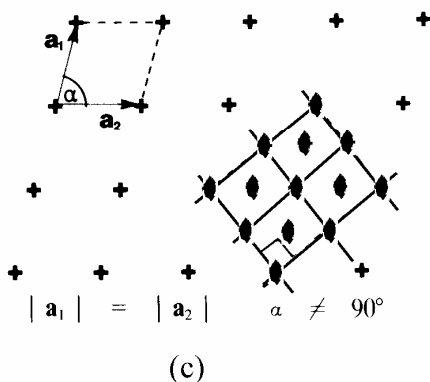
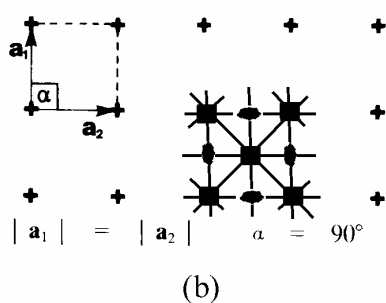
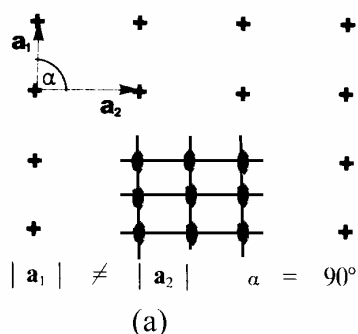
解：右图 a 是在平行的 2 次轴通过的两个相邻阵点之间的中点上有另一个 2 次轴的例子。图中只画出这个平面点阵的一个单胞，在讨论时应记住整个点阵是由这个单胞无限重复平移得出的。可以看出，在原来的阵点上有 2 次轴，显然，阵点间的中点也是 2 次轴，如图 a 左边的图所示。右图 b 是在平行的镜面通过的两个相邻阵点之间的中点上有另一个镜面的例子。同样，图中只画出这个平面点阵的一个单胞。图中通过阵点的线是镜面(图中的黑线)，可以看出，在这些镜面的中点上，仍有平行于原来镜面的镜面存在，图 b 左图的虚线。



8. 画出图 1-60 中四种平面点阵(它是无限大的)除平移外的所有对称元素及其所在位置(在有限个阵点画出就可以了)。

解：把对称元素直接画在图 1-60 中，如下图所示。图 a 中过每个阵点并垂直纸面的轴都是 2 次轴；根据上题的结果，在平行的 2 次轴中间又有 2 次轴，所以在四个相邻阵点中间出现新的 2 次轴；因为 $\alpha=90^\circ$ ，所以过 a_1 以及过 a_2 轴并垂直纸面的面是镜面，根据上题的结果，在平行的 2 个镜面中间应是镜面，故在那里又出现新的镜面。图 c 中过每个阵点并垂直纸面的轴都是 2 次轴；因在平行的 2 次轴中间应是 2 次轴，所以在阵点中间出现新的 2 次轴，在这些新的 2 次轴之间又出现新的 2 次轴；在图中看到一个复式单胞的轴之间夹角是 90° ，所以过复式单胞两根轴并垂直纸面的两个面是镜面，同样在每一组平行镜面之间又应是新的镜面。图 b 中 $a_1=a_2$ ，并且 $\alpha=90^\circ$ ，所以过每个阵点并垂直纸面的轴都是 4 次轴，4 次轴隐含 2 次轴，因在平行的 2 次轴中间应是 2 次轴，故在两个 4 次轴的中间出现

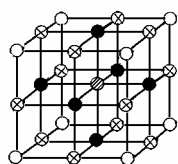
新的 2 次轴；因为 a_1 和 a_2 构成正四边形，所以过四边形的边并垂直纸面的面以及过四边形对角线并垂直纸面的面都是镜面，同样在平行的镜面的中间又出现新的镜面；在过四边形中心有 4 个镜面，它们的夹角是 45° ，根据定理，两个镜面的交线必是旋转对称轴，它的旋转角度是夹角的两倍，所以这交线是 4 次轴，结果过四边形中心又有一个新的 4 个次轴。图 d 中过每个阵点并垂直纸面的轴都是 6 次轴；6 次轴隐含 2 次轴，在平行的 2 次轴中间应是 2 次轴，所以在两个 6 次轴的中间出现 2 次轴；根据 6 次轴对称的性质，每三个阵点构成一个等边三角形，过这三三角形的边并垂直纸面的面是镜面，过等边三角形的三条中线并垂直纸面的面也是镜面；在等边三角形的中心有三个镜面通过，它们的夹角是 60° ，根据定理，两个镜面的交线必是旋转对称轴，它的旋转角度是夹角的两倍，所以这交线是 3 次轴，结果过等边三角形的中心又有一个新的 3 个次轴。



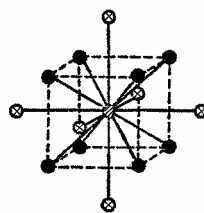
9. 立方 P、I 和 F 点阵，单胞轴长为 a ，给出这三种点阵的每一个阵点的最近邻、次近邻的点数，求出最近邻、次近邻的距离。

解：立方 P、I 和 F 点阵的阵点最近邻、次近邻的点数如右图所示。图中以影线的阵点作为中心，黑点是最近邻的

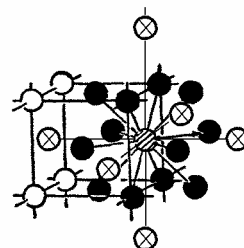
阵点，带有 \times 的阵点是次近邻阵点。P 点阵有 4 个最近邻，阵点与最近邻间的距离是 a ；有 12 个次近邻，阵点与次近邻的距离是 $a\sqrt{2}$ 。



P 点阵



I 点阵



F 点阵

I 点阵有 8 个最近邻，阵点与最近邻间的距离是 $a\sqrt{3}/2$ ，6 个次近邻，阵点与次近邻的距离是 a ；F 点阵有 12 个最近邻，阵点与最近邻间的距离是 $a\sqrt{2}/2$ ，6 个次近邻，阵点与次近邻的距离是 a 。

10. 对于立方 P、I 和 F 点阵，如果每个阵点放上硬球，证明可以填充的最大体积依次为 0.52、0.68 和 0.74。

解：如果每个阵点放上硬球，最近邻之间的硬球是相切的，它们中心的距离是硬球的直径。P 点阵的硬球半径是 $a/2$ ，硬球体积是 $4\pi(a/2)^3/3$ ，每个 P 点阵含 1 个阵点硬球，单胞的体积是 a^3 ，故 P 点阵的填充率为

$$\text{填充率} = \frac{4\pi(a/2)^3}{3a^3} = 0.5235$$

I 点阵的硬球半径是 $a\sqrt{3}/4$ ，每个 P 点阵含 2 个阵点硬球，故 I 点阵的填充率为

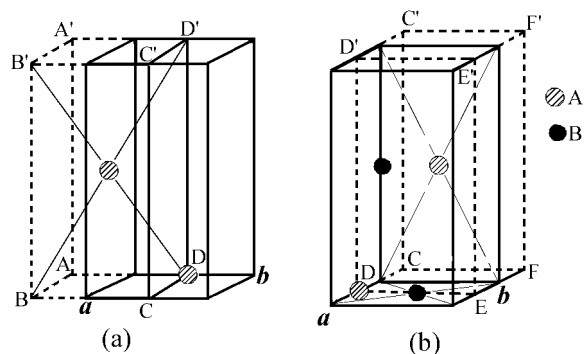
$$\text{填充率} = \frac{2 \times 4\pi(a\sqrt{3}/4)^3}{3a^3} = 0.6802$$

F 点阵的硬球半径是 $a\sqrt{2}/4$ ，每个 P 点阵含 4 个阵点硬球，故 F 点阵的填充率为

$$\text{填充率} = \frac{4 \times 4\pi(a\sqrt{2}/4)^3}{3a^3} = 0.7404$$

11. 某正交晶系单胞中，在如下位置有单原子存在： $(0, 1/2, 0)$ ， $(1/2, 0, 1/2)$ 两种位置都是同类原子； $([1/2, 0, 0])$ ， $(0, 1/2, 1/2)$ 上是 A 原子， $(0, 0, 1/2)$ ， $(1/2, 1/2, 0)$ 是 B 原子。问上两种晶胞各属于哪一种布喇菲点阵？

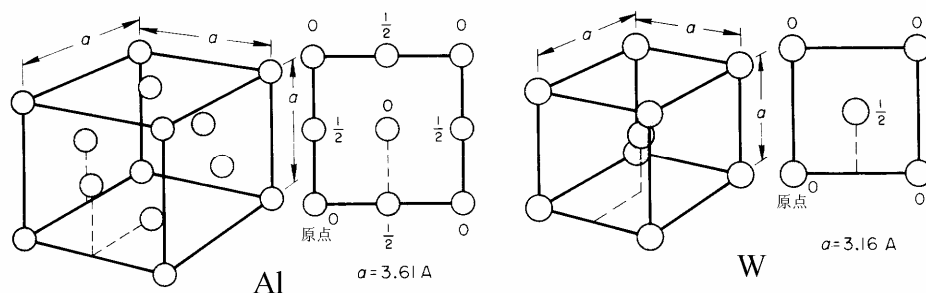
解：右图 a 中黑实线是一个正交单胞， a 和 b 分别是两个晶轴，两个带影线的圆代表给定的原子位置，应该注意到在与此等效的所有位置都有原子。根据题意，一个单胞含两个原子，如果把黑线所定的晶轴向 $-b$ 平移 $b/2$ ，把现在的 $ABCDD'A'B'C'$ 六面体看成是单胞，可以知道这是 I 点阵。



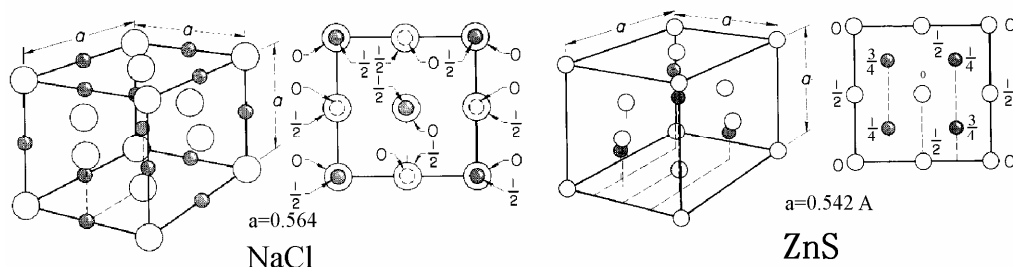
右图 b 中黑实线是一个正交单胞， a 和 b 分别是两个晶轴，两个带影线的圆代表 A 原子位置，两个黑色的圆代表 B 原子位置，应该注意到在与这些位置等效的所有位置都有相应的各类原子。如果把黑线所定的晶轴向 $-a$ 平移 $a/2$ ，把现在的 $CDEFF'C'D'E'$ 六面体看成是单胞，看出这是 I 单胞，其中结构基元由一个 A 原子和一个 B 原子构成。

12. 图 1-61 给出 Al、W、NaCl、ZnS、 MoSi_2 和 BiLi_3 结构的晶胞，图中每种结构右边的图是投影图，其中数字表示原子的坐标位置。指出它们的结构基元（用坐标位置写出）和布喇维点阵。

解：下左图是 Al 的晶胞，它的结构基元是一个 Al 原子；因为三个晶轴的长度相等，轴之间的夹角为 90° ，根据原子的分布位置知它的布喇菲点阵是面心立方点阵；每个晶胞有 4 个原子(结构基元)，它们的位置分别是 $[0,0,0]$ 、 $[0,1/2,1/2]$ 、 $[1/2,0,1/2]$ 和 $[1/2,1/2,0]$ 。下右图是 W 的晶胞，它的结构基元是一个 W 原子；因为三个晶轴的长度相等，轴之间的夹角为 90° ，根据原子的分布位置知它的布喇菲点阵是体心立方点阵；每个晶胞有 2 个原子(结构基元)，它们的位置分别是 $[0,0,0]$ 和 $[1/2,1/2,1/2]$ 。

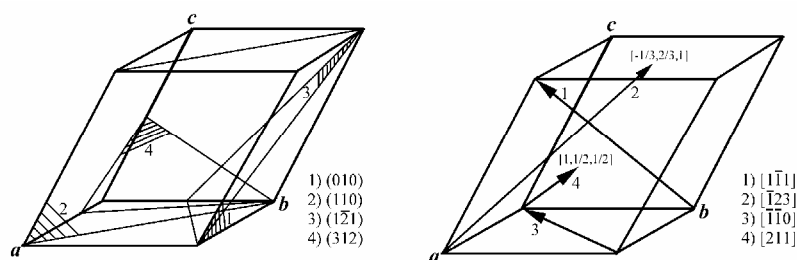


下左图是 NaCl 的晶胞，它的结构基元由相邻的一个 Na 原子和一个 Cl 原子构成，例如在 $[0,0,0]$ 位置的 Na 原子和在 $[0,1/2,0]$ 的 Cl 原子构成一个结构基元；因为三个晶轴的长度相等，轴之间的夹角为 90° ，根据结构基元的分布位置知它的布喇菲点阵是面心立方点阵；每个晶胞有 4 个结构基元(8 个原子)，结构基元的位置分别是 $[0,0,0]$ 、 $[0,1/2,1/2]$ 、 $[1/2,0,1/2]$ 和 $[1/2,1/2,0]$ 。下右图是 ZnS 的晶胞，它的结构基元由相邻的一个 Zn 原子和一个 S 原子构成，例如在 $[1,0,0]$ 位置的 Zn 原子和在 $[3/4,1/4,1/4]$ 的 S 原子构成一个结构基元；根据结构基元的分布位置知它的布喇菲点阵是面心立方点阵；每个晶胞有 4 个结构基元(8 个原子)，结构基元的位置分别是 $[0,0,0]$ 、 $[0,1/2,1/2]$ 、 $[1/2,0,1/2]$ 和 $[1/2,1/2,0]$ 。



13. 在单胞中画出 (010) 、 (110) 、 $(\bar{1}\bar{2}1)$ 、 (312) 等晶面，画出 $[1\bar{1}1]$ 、 $[\bar{1}23]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 和 $[211]$ 等晶向。

解：在右图左边的单胞画出各个晶面；右边的单胞画出各个晶向，有两个晶向给出了箭头处的坐标数。



14. 用四轴坐标系画出六方晶

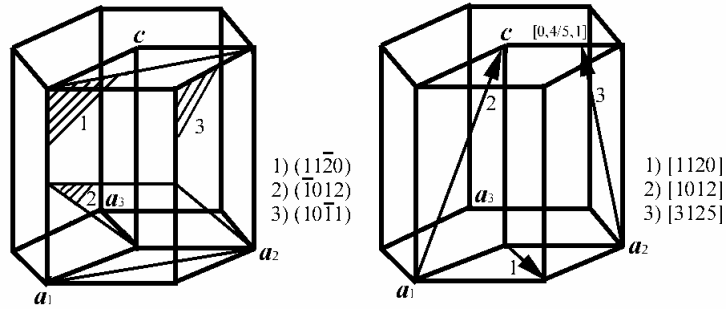
系的 $(11\bar{2}0)$ 、 $(\bar{1}012)$ 、 $(10\bar{1}1)$

等晶面及 $[11\bar{2}0]$ 、 $[\bar{2}113]$ 、

$[\bar{3}125]$ 等晶向。

解：在右图左边的单胞画出

各个晶面；右边的单胞画出各个晶向，有 1 个晶向给出了箭头处相应图中 Z 坐标轴的坐标数。



15. 写出图 1-62 中晶向的四轴坐标晶向指数。

解：为了方便地定出四轴坐标晶向指数，先定出三轴坐标的晶向指数，然后再换算成四轴坐标的晶向指数。

晶向 1，三轴坐标指数是 $[021]$ ，根据三轴坐标指数 $[UVW]$ 与四轴坐标指数 $[uvw]$ 的换算关系，得

$$u = (2U - V)/3 = (0 - 2)/3 = -2/3 \quad v = (2V - U)/3 = (2 \times 2 - 0)/3 = 4/3$$

$$t = -(u + v) = -(-2/3 + 4/3) = 2/3 \quad w = 1$$

故晶向 1 的四轴坐标指数是 $[\bar{2}4\bar{2}3]$ 。

晶向 2，三轴坐标指数是 $[111]$ ，根据三轴坐标指数 $[UVW]$ 与四轴坐标指数 $[uvw]$ 的换算关系，得

$$u = (2U - V)/3 = (2 - 1)/3 = 1/3 \quad v = (2V - U)/3 = (2 - 1)/3 = 1/3$$

$$t = -(u + v) = -(1/3 + 1/3) = -2/3 \quad w = 1$$

故晶向 1 的四轴坐标指数是 $[11\bar{2}3]$ 。

晶向 3，三轴坐标指数是 $[\bar{1}\bar{1}2]$ ，根据三轴坐标指数 $[UVW]$ 与四轴坐标指数 $[uvw]$ 的换算关系，得

$$u = (2U - V)/3 = (-2 + 1)/3 = -1/3 \quad v = (2V - U)/3 = (-2 + 1)/3 = -1/3$$

$$t = -(u + v) = -(-1/3 - 1/3) = 2/3 \quad w = 2$$

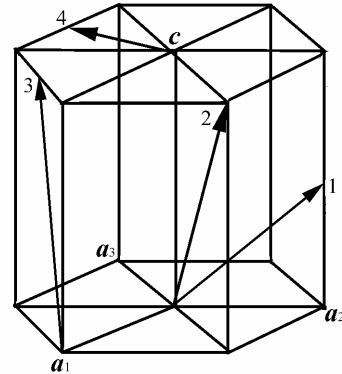
故晶向 1 的四轴坐标指数是 $[\bar{1}\bar{1}26]$ 。

晶向 4，三轴坐标指数是 $[\bar{1}\bar{2}0]$ ，根据三轴坐标指数 $[UVW]$ 与四轴坐标指数 $[uvw]$ 的换算关系，得

$$u = (2U - V)/3 = (-2 + 2)/3 = 0 \quad v = (2V - U)/3 = (-4 + 1)/3 = -1$$

$$t = -(u + v) = -(0 - 1) = 1 \quad w = 0$$

故晶向 1 的四轴坐标指数是 $[0\bar{1}10]$ 。



16. 列出三斜、单斜、正交及四方系中 $\{210\}$ 面族包含面的数目及其指数；列出六方系中 $\{21\bar{3}0\}$ 面族包含面的数目及其指数。

解：对于 $\{210\}$ 面族，三斜系的对称性最低， $\{210\}$ 面族只含一个 (210) 晶面。单斜系的 $a \neq b \neq c$ ， $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$ ， $\{hkl\}$ 晶面族中的等效晶面指数遵守的规则是： h 和 k 可以同时换号，三个指数不能交换位置； (210) 面中 2 和 1 同时换号的结果是一样的，所以 $\{210\}$ 面族只含

一个(210)晶面。正交系的 $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, $\{hkl\}$ 晶面族中的等效晶面指数遵守的规则是：三个指数不能交换位置，但可以单独换号；又因 0 的正号和负号是相同的，所以 $\{210\}$ 面族含 2 个晶面：(210) 和 $(\bar{2}10)$ 。四方系的 $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$, $\{hkl\}$ 晶面族中的等效晶面指数遵守的规则是： h 和 k 可以交换位置，三个指数可以单独换号；又因 0 的正号和负号是相同的，所以 $\{210\}$ 面族含 4 个晶面：(210)、 $(\bar{2}10)$ 、(120) 和 $(\bar{1}20)$ 。对于六方系中 $\{hkil\}$ 面族中的等效晶面指数遵守的规则是： h 、 k 和 i 三个指数可以交换位置，但仍要保持 $h+k+i=0$ 的条件。 $\{21\bar{3}0\}$ 面族中的 $l=0$ ，其正号和负号相同，故 $\{21\bar{3}0\}$ 面族含 6 个晶面：(21 $\bar{3}$ 0)、(2 $\bar{3}$ 10)、($\bar{3}$ 120)、($\bar{3}$ 210)、(12 $\bar{3}$ 0) 和 (1 $\bar{3}$ 20)。

17. $(1\bar{1}0)$ 、 $(11\bar{2})$ 、 $(\bar{3}12)$ 面是否同属一个晶带？如是，求出晶带轴的方向指数。

解：因为下面的行列式为 0：

$$\begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & -2 \\ -3 & 1 & 2 \end{vmatrix} = 0$$

所以 $(1\bar{1}0)$ 、 $(11\bar{2})$ 、 $(\bar{3}12)$ 面同属一个晶带。它的晶带轴 $[uvw]$ 的三个指数是

$$u:v:w = \begin{vmatrix} -1 & 0 \\ -2 & 1 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} = -1:-1:-1$$

即其晶带轴的方向指数为 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ ，利用晶带定律检验知道，它确实是这三个面的晶带轴。

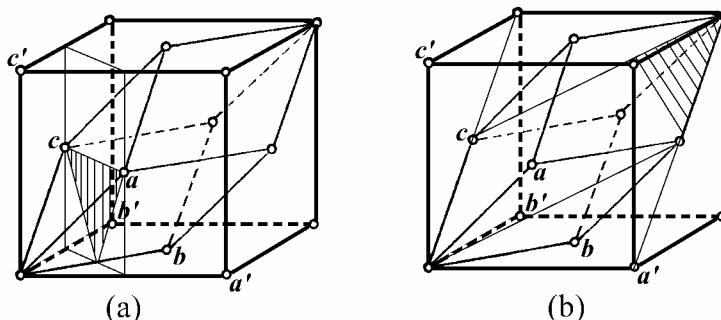
18. 下列的晶面： (234) 、 $(20\bar{1})$ 、 $(1\bar{1}1)$ 、 (241) 、 $(\bar{2}21)$ 、 $(43\bar{2})$ 、 (101) 、 (010) 和 $(4\bar{3}2)$ 中有哪些面属于同一个晶带？求出晶带轴。

解：两个晶面一定有交线，交线一定是这两个晶面的晶带轴，这些情况在这里不讨论。不用计算的方法，可以用晶带定律试探求出晶带轴。试探得 $[102]$ 是 $(20\bar{1})$ 、 $(\bar{2}21)$ 、 $(43\bar{2})$ 和 (010) 面的晶带轴。

19. 画出面心立方点阵的 P 初基单胞，写出复式单胞的 (110) 和 (011) 在初基单胞中的面指数。

从这个例子你能否看出为什么这种点阵通常采用复式单胞来描述

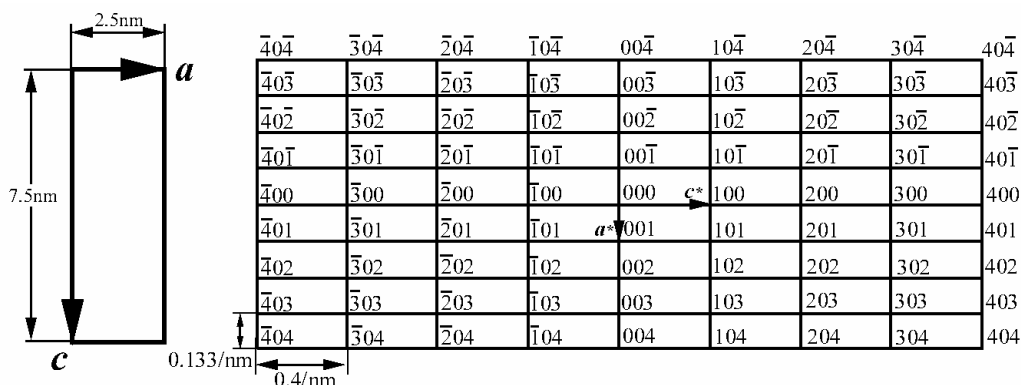
解：下图中的粗线是面心立方点阵的 F 单胞，细线是面心立方点阵的 P 初基单胞， a' 、 b' 和 c' 是 F 单胞的晶轴， a 、 b 和 c 是 P 初基单胞的晶轴。下图 a 画出 F 单胞的 (220) 面，它和 (110) 面平行，实际上也是 (110) 面。这个面和 P 单胞的三个晶轴相交构成图中影线三角形，它在 a 、 b 和 c 轴的截距分别是 1、 $1/2$ 和 1，因此它在 P 单胞中的面指数是 (212) 。下图 b 画出 F 单胞的 (011) 面，这个面和 P 单胞的三个晶轴相交构成图中影线所示的平行四



边形，它平行于 c 轴。如果把 P 单胞的原点平移 b ，得出此面在晶轴的截距分别为 1、-1 和 ∞ ，因此它在 P 单胞中的面指数是 $(1\bar{1}0)$ 。由次看出，这两个面本质是等同的，在 F 单胞它们的面指数的三个数字相同，F 单胞反映了晶体的对称性，然而在 P 单胞的面指数的三个数字不相同，P 单胞不能反映晶体的对称性，所以一般采用 F 单胞而不采用 P 单胞。

20. 四方点阵的初基单胞轴长 $a=2.5\text{nm}$ 、 $c=7.5\text{nm}$ ，画出 $(h0l)$ 的倒易阵点 (h 和 $l \pm 4$)。

解：四方点阵 $a=b \neq c$ ， $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 。 $(h0l)$ 面平行与 (010) 面，即其晶带轴是 $[010]$ ，它们的倒易阵点构成的倒易面与正点阵的 $[010]$ 轴垂直。下图左边是四方点阵(正点阵)初基单胞的 (010) 面，左边是 $(h0l)$ 的倒易阵点 (h 和 $l \pm 4$)，因为正点阵的 b 轴垂直于纸面，所以倒易点阵的 a^* 轴在纸面上与正点阵的 c 轴垂直，长度是正点阵 (100) 面间距(即 a)的倒数， $a^*=1/2.5\text{nm}=0.4/\text{nm}$ ； c^* 轴在纸面上与正点阵的 a 轴垂直，长度是正点阵 (001) 面间距(即 c)的倒数， $c^*=1/0.75\text{nm}=0.133/\text{nm}$ 。画出 $[(100)]^*$ 及 $[(001)]^*$ 倒易点后，把它们周期平移，直到 h 和 l 到 ± 4 为止。



21. 画出体心立方点阵 $[123]$ 晶带的倒易点(各指数 ≤ 10)，画出面心点阵 $[11\bar{1}]$ 晶带的倒易点(各指数 ≤ 10)。

解：立方点阵的倒易点阵也是立方点阵。设立方点阵的点阵常数 $a=1$ 。

(1) 体心立方点阵 $[123]$ 晶带的倒易点都在 $(123)^*$ 倒易面上。在倒易点阵中， $(123)^*$ 倒易面在三个轴相截均为阵点时在三个轴的截距分别是 6、3 和 2，即它们的阵点分别是 $[(600)]^*$ 、 $[(030)]^*$ 和 $[(002)]^*$ 。为了画出过 $[(000)]^*$ 的 $(123)^*$ 倒易面，把此面在 c^* 平移 $-2c^*$ ($c^*=a^*$)，这时，三个阵点的坐标变成： $[(60\bar{2})]^*$ 、 $[(03\bar{2})]^*$ 和 $[(000)]^*$ 。求出正点阵 $(60\bar{2})$ 面与 $(03\bar{2})$ 面的夹角以及 $(60\bar{2})$ 和 $(03\bar{2})$ 的面间距的倒数，就可以获得 $[(60\bar{2})]^*$ 、 $[(03\bar{2})]^*$ 和 $[(000)]^*$ 三个倒易点，把它们周期平移，并考虑其消光效应，就可得出所求的倒易面。

$(60\bar{2})$ 面与 $(03\bar{2})$ 面的夹角为

$$\cos \theta = \frac{-2 \times -2}{\sqrt{6^2 + 2^2} \sqrt{3^2 + 2^2}} = 0.1754 \quad \theta = 79.9^\circ$$

($60\bar{2}$) 面的面间距 $d_{60\bar{2}}$ 是

$$\frac{1}{d_{60\bar{2}}} = (6^2 + 2^2)^{1/2} = 6.32$$

($03\bar{2}$) 面的面间距 $d_{03\bar{2}}$ 是

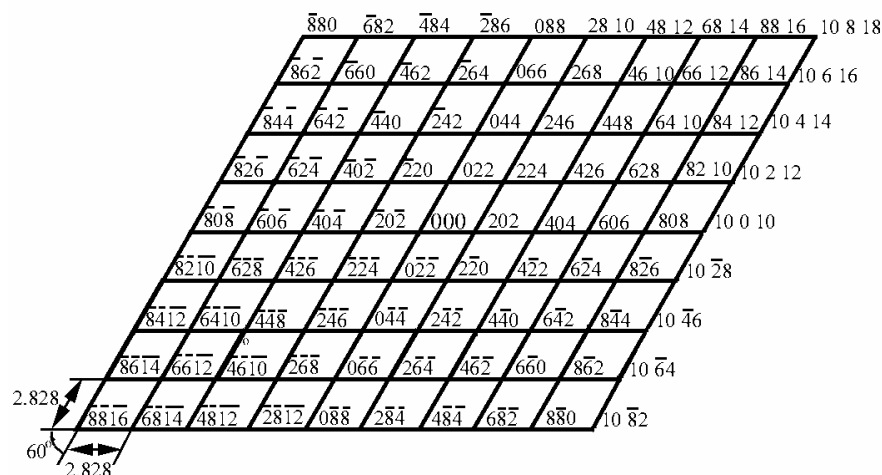
$$\frac{1}{d_{03\bar{2}}} = (3^2 + 2^2)^{1/2} = 3.60$$

右图 a 是根据上面计算的结果画出 $[(60\bar{2})]^*$ 、 $[(03\bar{2})]^*$ 和 $[(000)]^*$ 三个倒易点再把它们周期地平移所得的倒易点阵，图中各线的交点都是阵点。仔细分析这一点阵，在 $[(000)]^*$ 和 $[(60\bar{2})]^*$ 阵点之间应该还有 $[(30\bar{1})]^*$ 阵点；另外，体心立方的倒易点阵的三个指数之和不等于偶数的阵点应消失， $[(03\bar{2})]^*$ 阵点不应存在，所以， $(123)^*$ 倒易面的阵点应由 $[(000)]^*$ 、 $[(30\bar{1})]^*$ 和 $[(06\bar{4})]^*$ 阵点周期平移所得出，如上图 b 所示，图中各线的交点都是阵点。

(2) 面心点阵 $[11\bar{1}]$ 晶带的倒易点都在 $(11\bar{1})^*$ 倒易面上。在倒易点阵中， $(11\bar{1})^*$ 倒易面在三个轴相截均为阵点时在三个轴的截距分别是 1、1 和 -1，即它们的阵点坐标分别是 $[(100)]^*$ 、 $[(010)]^*$ 和 $[(00\bar{1})]^*$ 。为了画出过 $[(000)]^*$ 的 $(11\bar{1})^*$ 倒易面，把此面在 c^* 平移 c^* ($c^*=a^*$)，这时，三个阵点的坐标变成： $[(101)]^*$ 、 $[(011)]^*$ 和 $[(000)]^*$ 。因为面心立方的倒易点阵中阵点的三个指数必须同奇或同偶，否则阵点会消失，所以应以 $[(202)]^*$ 、 $[(022)]^*$ 和 $[(000)]^*$ 作为倒易点阵的基点来讨论。求出正点阵 (202) 面与 (022) 面的夹角以及 (202) 和 (022) 面的面间距，就可以获得 $[(202)]^*$ 、 $[(022)]^*$ 和 $[(000)]^*$ 三个倒易点，把它们周期平移，并进一步考虑消光效应，就可得出所求的倒易面。

(202) 面与 (022) 面的夹角为

$$\cos \theta = \frac{2 \times 2}{\sqrt{2^2 + 2^2} \sqrt{2^2 + 2^2}} = 0.5 \quad \theta = 60^\circ$$



(202)面和(022)的面间距是相等的， d_{202} 的倒数是

$$\frac{1}{d_{202}} = (2^2 + 2^2)^{1/2} = 2.828$$

上图是根据上面计算的结果画出 $[(202)]^*$ 、 $[(022)]^*$ 和 $[(000)]^*$ 三个倒易点，再把它们周期地平移所得的倒易点阵，图中各线的交点都是阵点。仔细分析这一点阵，全部阵点都没有符合消光条件，所以都是倒易阵点。

22. 求 Be (六方系, $c/a=1.57$) 的 $(11\bar{2}3)$ 与 $(\bar{1}\bar{1}20)$ 的夹角和这两种面的面间距。

解： $(11\bar{2}3)$ 和 $(\bar{1}\bar{1}20)$ 面的三轴坐标指数是 $(h_1k_1l_1)$ 与 $(h_2k_2l_2)$ 晶面夹角 θ 的余弦 $\cos\theta$ 的式子：

$$\cos\theta = \frac{[h_1h_2 + (h_1k_2 + h_2k_1)/2 + k_1k_2]4c^2/3a^2 + l_1l_2}{[(h_1^2 + h_1k_1 + k_1^2)4c^2/3a^2 + l_1^2]^{1/2}[(h_2^2 + h_2k_2 + k_2^2)4c^2/3a^2 + l_2^2]^{1/2}}$$

(113) 和 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 面的夹角 θ 的余弦 $\cos\theta$ 为

$$\cos\theta = \frac{[-1 + (-1 + -1)/2 - 1] \times 4 \times (1.57)^2 / 3}{[(1 + 1 + 1) \times 4 \times (1.57)^2 / 3 + 3^2]^{1/2} [(1 + 1 + 1) \times 4 \times (1.57)^2 / 3]^{1/2}} = -0.723$$

故 $\theta=136.3^\circ$ 。根据六方系 (hkl) 面间距的式子

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3} \frac{(h^2 + k^2 + hk)}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

计算 (113) 面间距 d_{113}

$$\frac{1}{d_{113}^2} = \frac{4}{3} \frac{(1+1+1)}{a^2} + \frac{3^2}{(1.57)^2 a^2} = 7.65 \frac{1}{a^2} \quad d_{113} = \frac{1}{(7.65)^{1/2}} a = 0.362a$$

计算 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 面间距 $d_{\bar{1}\bar{1}0}$

$$\frac{1}{d_{\bar{1}\bar{1}0}^2} = \frac{4}{3} \frac{(1+1+1)}{a^2} = \frac{4}{a^2} \quad d_{\bar{1}\bar{1}0} = \frac{1}{(4)^{1/2}} a = 0.5a$$

23. 证明 P 单胞中的 (hkl) 面在单胞各轴长上分别各有 h 、 k 和 l 个面截过。

解：设 (hkl) 面的法线单位矢量为 \mathbf{n} ， (hkl) 面的面间距为 d_{hkl} ， \mathbf{a} 轴在 a 长度截出 (hkl) 面的数目 m 应等于

$$m = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}}{d_{hkl}}$$

因为 \mathbf{n} 与倒易点阵的 $\mathbf{H}_{hkl} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$ 平行，并且 \mathbf{H}_{hkl} 的模等于 $1/d_{hkl}$ ，故

$$\mathbf{n} = \mathbf{H}_{hkl} / |\mathbf{H}_{hkl}| = \frac{(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*)}{1/d_{hkl}}$$

把它代回前面式子，得

$$m = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}}{d_{hkl}} = \frac{\mathbf{a} \cdot (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*)}{d_{hkl}(1/d_{hkl})} = h$$

同理可证明在 b 和 c 长度上各有 k 和 l 个 (hkl) 截过。

24. 证明立方系中的 (hkl) 面是按每隔 $(h^2+k^2+l^2)$ 个面重复堆垛的。

解：立方系 (hkl) 面法线方向指数与面同名，即为 $[hkl]$ ，法线从原点遇到第一个阵点，含这个阵点并平行于 (hkl) 的面就是 (hkl) 堆垛遇到的第一个重复的面。所以法线从原点遇到第一个阵点间的长度除以 (hkl) 面的面间距 d_{hkl} 所得的数目 m ，它就是重复堆垛之间的面数。根据方向指数的定义，法线 $[hkl]$ 从原点遇到第一个阵点间的长度为 $(h^2+k^2+l^2)^{1/2}$ ，故

$$m = \frac{(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}}{d_{hkl}} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}}{1/(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}} = (h^2 + k^2 + l^2)$$

25. 编制一个电算程序计算和画出任一种晶系的任一晶带的倒易阵点。

解：(略)

26. 四方系点阵的 (111) 面与 (110) 面的夹角为 26.81° ，求它的轴比；再求 (111) 与 (101) 面的夹角。

解：四方晶系 $(h_1k_1l_1)$ 面与 $(h_2k_2l_2)$ 面的夹角式子为

$$\cos \theta = \frac{(h_1h_2 + k_1k_2)c^2/a^2 + l_1l_2}{[(h_1^2 + k_1^2)c^2/a^2 + l_1^2]^{1/2} [(h_2^2 + k_2^2)c^2/a^2 + l_2^2]^{1/2}}$$

把 (111) 面与 (110) 面以及其夹角 $\theta=26.81^\circ$ 代入上式，得

$$\cos 26.81^\circ = \frac{(1+1)c^2/a^2}{[(1+1)c^2/a^2 + 1]^{1/2} [(1+1)c^2/a^2]^{1/2}} = \frac{2c^2/a^2}{[2c^2/a^2 + 1]^{1/2} \sqrt{2} c/a}$$

把上式整理，得

$$\frac{c}{a} = \left[\frac{-\cos^2 26.81^\circ}{2(\cos^2 26.81 - 1)} \right]^{1/2} = 1.399$$

把 (111) 面与 (101) 面指数代入上面给出的夹角式子，得它们的夹角 θ' 余弦为

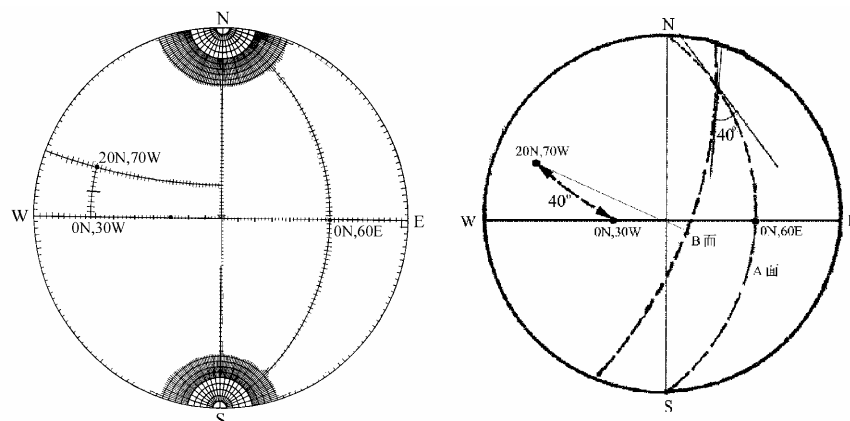
$$\cos \theta' = \frac{c^2/a^2 + 1}{[(1+1)c^2/a^2 + 1]^{1/2} [c^2/a^2 + 1]^{1/2}} = \frac{1.399^2 + 1}{[2 \times 1.399^2 + 1]^{1/2} [1.399^2 + 1]^{1/2}} = 0.7757$$

即 $\theta'=39.132^\circ$ 。

27. 某点在极射赤面投影图上的坐标用从投影圆中心开始量的纬度和经度来表示。例如：N极为 90°N ， 0°E ；E 极为 0°N 、 90°E ；余类推。A 面的大圆通过 N、S 极，并通过 0°N ， 60°E ，B 面的极点为 20°N ， 70°W 。求两个面的夹角。画出 A 和 B 面大圆的投影，量这两个投影的夹角，验证极射赤面投影的保角性。

解：用吴氏网找出 0°N 、 60°E 极点，过这一极点并通过 N、S 极点得出 A 面，同时找出 20°N 、 70°W 极点，如下右图所示。因为 A 面通过 N、S 极点，所以 A 面的极点是在 W-N 极连线上，从 0°N 、 60°E 极点向左数 90° 就获得 A 面的极点，它是 0N 、 30W 。把 B 极点在吴氏网上转到 W-E 极的连线上，向右数出 90° 得出一个极点，过这一极点以及 N 和 S 极的大圆就是 B 极点所对应的 B 面。得出的 A 面和 B 面如下右图所示。过 A 面和 B 面的交点

作切线，两切线的交角为 40° ，同吴氏网量 A 极点和 B 极点的夹角也是 40° ，这就说明极射赤面投影有保角性质。

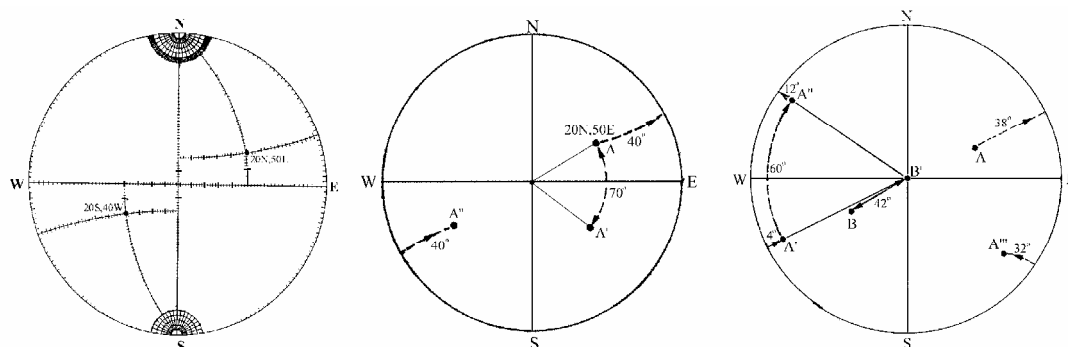


28. 极点 A 的坐标为 20°N , 50°E ，把它绕投影图的法线顺时针转动 70° ；从 N 向 S 看，以逆时针方向绕 N-S 轴转动 80° ；绕坐标为 20°S , 40°W 的极点顺时针转动 60° 。在上列每一种情况求出极点 A 转动后的位置，并画出转动路线。

解：用吴氏网找出坐标为 20°N , 50°E 极点 A 以及坐标为 20°S , 40°W 的极点 B，如下左图所示。A 极点绕投影图的法线顺时针转动 70° 的操作是：以投影圆中心为圆心，把 A 极点顺时针转动 70° 获得 A' 极点，如下中图所示。

A 极点 N-S 轴转动 80° 的操作是：把 A 极点沿 A 极点所在的吴氏网纬线向 E 方向转动，转动 40° 后到达大圆边上，然后再向反方向转动 40° ，因为此时极点在投影面下侧，以其反方向的极点表示，即下中图的 A'' 点。

A 极点绕 B 极点转动 60° 的操作(上右图)是：把 B 极点转向投影图中心，相应 A 极点沿极



点所在的吴氏网纬线向 E 方向转动，转动了 38° 后到达大圆边上，再反转 4° 转到投影圆的下侧，以其反的极点 A' 点表示；以投影圆中心为圆心，把 A' 点顺时针方向转动 60° ，到达 A'' 位置；最后把中心的 B' 点转回原来 B 极点位置，相应 A'' 点沿所在的吴氏网纬线向 W 方向转动，转动了 4° 后到达大圆边上，再反转 38° 转到投影圆的下侧，以其反的极点 A''' 点表示，A''' 极点就是 A 极点绕 B 极点转动 60° 的位置。

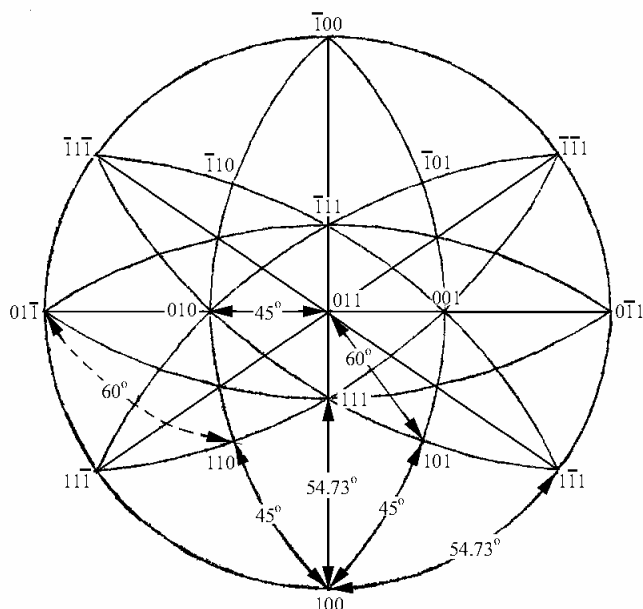
29. 画一张立方晶体的标准(011)投影图，在图上标出 $\{100\}$ 、 $\{110\}$ 和 $\{111\}$ 的所有晶面的极点以及这些晶面构成的晶带的晶带圆。在画出的图中，若 $(\bar{1}00)$ 极点为 N 极， $(01\bar{1})$ 极点为 E 极，求坐标为 17°W , 24.1°S 的晶面的面指数。

解：以立方系的(011)面作为极射赤面的投影面，[011]为晶带轴的晶带的极点都在基圆圆周上。在(011)面上找出两个互相垂直的低指数方向，如[100]和 $[0\bar{1}\bar{1}]$ ，这两个晶向的迹点一定在投影图的圆周上(如下图所示)。立方系晶面的法线方向指数与晶面指数同名，所以这两个方向的迹点也是(100)和 $(0\bar{1}\bar{1})$ 面的极点，以(011)、(100)和 $(0\bar{1}\bar{1})$ 三个互相垂直的面的极点作为参考坐标极点。因为垂直(011)面的晶向[011]是2次对称轴，所以只要标出投影面上由(011)、(100)和 $(\bar{1}00)$ 三个极点连成的直径的一侧的极点，通过[011]2次轴操作得出另一半的极点。在定出(hkl)极点的一般方法是，计算(hkl)面与三个参考坐标(011)、(100)和 $(0\bar{1}\bar{1})$ 极点的夹角，再用吴氏网找出这个极点的位置。

先标出除(100)以外的{100}的极点。(010)属于[100]晶带，所以它的极点一定在 $(0\bar{1}\bar{1})$ 与(011)相连的投影圆的直径上，计算(010)与(011)及 $(0\bar{1}\bar{1})$ 的夹角都为 45° ，用吴氏网从(011)极点沿上述直径向 $(0\bar{1}\bar{1})$ 极点方向量出 45° 就得出(010)极点。

讨论{111}面的极点。(111)属于 $[0\bar{1}\bar{1}]$ 晶带，所以它的极点一定在(100)与(011)相连的投影圆的直径上，计算知(111)与(100)

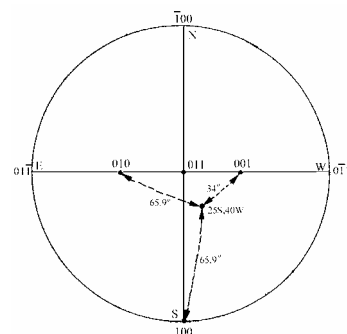
间的夹角为 54.73° ，用吴氏网从(100)极点沿上述直径量出 54.73° 就得出(111)极点； $(11\bar{1})$ 属于[011]晶带，所以它的极点一定在投影圆的圆周上，计算 $(11\bar{1})$ 与(100)及 $(0\bar{1}\bar{1})$ 的夹角分别为 54.73° 和 35.27° ，用吴氏网从(100)极点沿圆周向 $(0\bar{1}\bar{1})$ 极点方向量出 54.73° 就得出 $(11\bar{1})$ 极点。因为 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 极点应是 $(11\bar{1})$ 极点的反向，所以它的极点位置是在过 $(11\bar{1})$ 极点的直径在圆周的另一端的交点。



最后讨论除(011)和 $(0\bar{1}\bar{1})$ 以外的{110}极点。(110)极点与三个参考坐标(011)、(100)和 $(0\bar{1}\bar{1})$ 极点的夹角分别是 60° 、 45° 和 60° ，用吴氏网可量出它的位置；(101)极点与三个参考坐标(011)、(100)和 $(0\bar{1}\bar{1})$ 极点的夹角分别是 60° 、 45° 和 135° ，用吴氏网可量出它的位置。

上面已标出了半个投影圆的{100}、{110}和{111}晶面的极点，通过[011]2次轴操作得出另一半的极点。上面给出标准(011)投影图，图中的投影大圆以及一些大圆的迹径投影都分别属于一个晶带。

在右图中以 $(\bar{1}00)$ 极点为N极， $(0\bar{1}\bar{1})$ 极点为E极，用吴氏网量出坐标为 $17^\circ W$ ， $24.1^\circ S$ 的极点位置，如右图所示。这个极点为(hkl)，用吴氏网量出该极点与(100)、(010)和(001)三个极点间的夹角，它们分别为 65.9° 、 65.9° 和 34° ，则



$$h:k:l = \cos 65.9^\circ : \cos 65.9^\circ : \cos 34^\circ \\ = 0.4083 : 0.8043 : 0.829 \approx 1:1:2$$

这个极点的面指数是(112)。

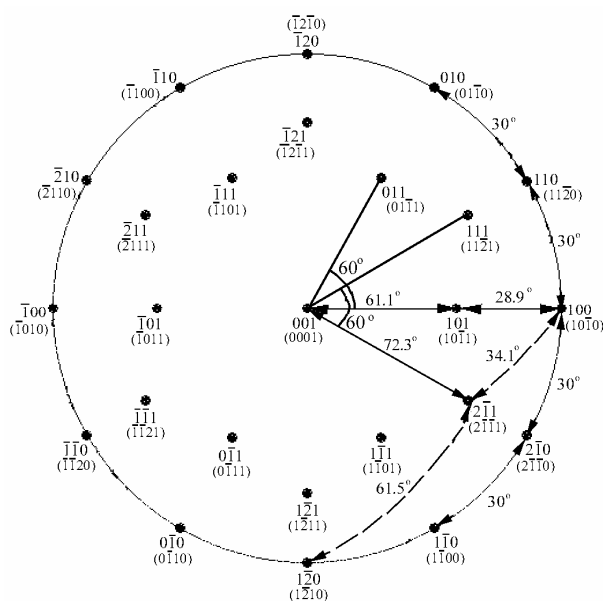
30.画一张 Be (六方晶系, $c/a=1.57$) 的标准(001)极射赤面投影图。在图上标出 $\{2\bar{1}\bar{1}0\}$ 、 $\{10\bar{1}0\}$ 、 $\{2\bar{1}\bar{1}1\}$ 和 $\{10\bar{1}1\}$ 所有晶面的极点以及它们构成的晶带圆。

解：(0001)面的三轴指数是(001)，六方系在面族中的四轴指数中第三个指数的位置不能改变，所以[001]轴 $\{10\bar{1}0\}$ 面族和 $\{2\bar{1}\bar{1}0\}$ 面族是晶带轴。 $\{10\bar{1}0\}$ 面族包含的面的三轴指数是(100)、(010)和 $(1\bar{1}0)$ ，它们的极点全部都在标准(0001)极射赤面投影图的大圆圆周上。先在圆周上任意定出(100)极点，计算(100)和(010)面间的夹角是 60° ，(100)和 $(1\bar{1}0)$ 面间的夹角是 -60° ，选定(100)极点作为起始极点，沿大圆圆周量出相应的角度就可以定出(010)和 $(1\bar{1}0)$ 以及它们反向的极点。

$\{2\bar{1}\bar{1}0\}$ 面族包含的面的三轴指数是 $(2\bar{1}0)$ 、(110)和 $(\bar{1}20)$ ，和上面讨论的道理相同，[001]轴也是它们的晶带轴，计算(100)和(110)面间的夹角是 30° ，(100)和 $(2\bar{1}0)$ 面间的夹角是 -30° ，(100)和 $(\bar{1}20)$ 面间的夹角是 90° ，这样，以(100)极点作为起始极点，沿大圆圆周量出相应的角度就可以定出 $(2\bar{1}0)$ 、(110)和 $(\bar{1}20)$ 以及它们反向的极点。

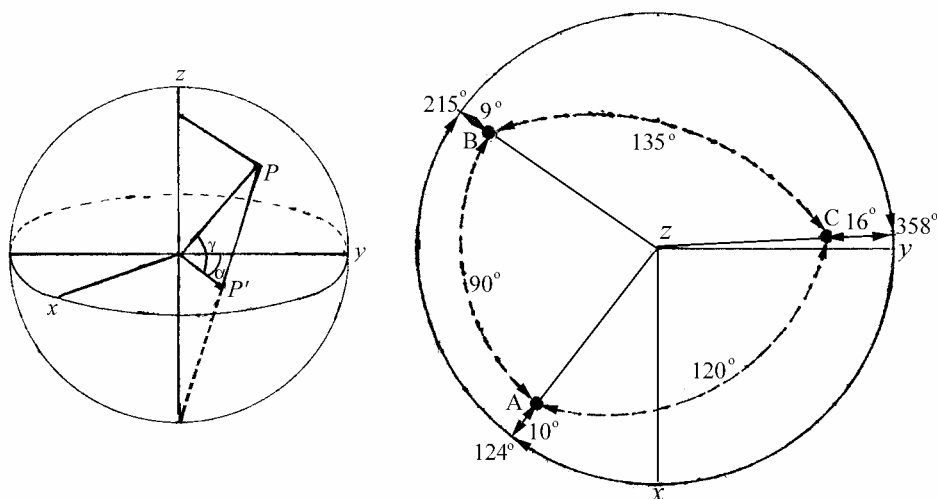
$\{2\bar{1}\bar{1}1\}$ 面的三轴指数是 $(2\bar{1}1)$ 、(111)和 $(\bar{1}21)$ ，根据六方晶系的面与面间夹角式子，并注意到 $c/a=1.57$ ，计算 $(2\bar{1}1)$ 面和(001)面间夹角为 72.3° 、 $(2\bar{1}1)$ 面和(100)面间夹角为 34.4° 、 $(2\bar{1}1)$ 面和 $(\bar{1}21)$ 面间夹角为 61.5° ，用吴氏网在上面定出的极点量出相应的角度，定出 $(2\bar{1}1)$ 极点及其反向极点的位置；因为[001]是六次轴，所以，以投影圆为中心，把 $(2\bar{1}1)$ 极点转动 60° 得到这个面族的另一个极点(111)及其反向极点的位置；再转动 60° 又得到这个面族的另一个极点 $(\bar{1}21)$ 及其反向极点的位置。

$\{10\bar{1}1\}$ 面的三轴指数是(101)、 $(1\bar{1}1)$ 和(011)，计算(101)面和(001)面间夹角为 61.1° 、(101)面和(100)面间夹角为 28.9° ，在(001)及(100)极点连线上量出上述角度，得(101)极点及其反向极点位置，以投影圆为中心，把(101)极点转动 60° 得到这个面族的另一个极点(011)及其反向极点的位置；再转动 60° 又得到这个面族的另一个极点 $(\bar{1}11)$ 及其反向极点的位置。



31. 测得一个立方晶系单晶体的三个低指数晶面的极点，设 Z 轴为投影面的法线，X 和 Y 轴在投影面上，X、Y、Z 构成右手坐标系， α 是极点方向在投影面上与 Y 轴的夹角，从投影图上看，顺时针方向转动为正， γ 是晶面极点方向(晶面法线方向)与 X-Y 面的夹角，极

点方向在投影图上方为正。三个极点的 α 和 γ 角为： $124^\circ, 10^\circ$ ； $215^\circ, 9^\circ$ 及 $350^\circ, 16^\circ$ 。查看标准极图的低指数面间的夹角关系定出三个极点的面指数。（答案： (001) 、 (100) 、 (110) ）
解：下左图是按题意定义的 α 和 γ 角的示意图。以 A、B 和 C 表示 α 和 γ 角为： $124^\circ, 10^\circ$ ； $215^\circ, 9^\circ$ 及 $350^\circ, 16^\circ$ 的极点。找出 A 的极点位置的操作是：用吴氏网从 y 极点沿大圆圆周顺时针方向量出 124° ，这点与圆中心连线，把它与吴氏网的赤道重叠，沿赤道线向中心量出 10° 所得的极点就是所求的极点位置；按同样办法找出 B 和 C 极点，如下右图所示。用吴氏网量出 A-B 极点间的夹角为 90° ；B-C 极点间夹角为 135° ；C-A 极点间夹角为 120° 。



一些立方晶体 $\{h_1k_1l_1\}$ 面族与 $\{h_1k_1l_1\}$ 面族的夹角(度)在下表列出：

$\{h_1k_1l_1\}$	$\{h_1k_1l_1\}$		
	100	110	111
100	0 90		
110	45 90	0 60 90	
111	54.7	35.3 90	0 70.5 109.5

从上表看出， $\{100\}$ 面族与 $\{110\}$ 面族各面之间的夹角可能是 45° (或 135°)，也可能是 90° ； $\{110\}$ 面族中各面之间的夹角可能是 60° (或 120°)，所以 A 极点会是属于 $\{100\}$ 面族，B 极点和 C 极点会是属于 $\{110\}$ 面族。再在面族之中考虑，若确定 A 极点为 (100) ，则 B 极点应为 $(\bar{1}\bar{1}0)$ ，C 极点应为 (011) 。

32. 图 1-63 是一个立方系单晶体，它的取向是上题标定的取向。晶体的 A 面和投影面平行，B 面和 Y 轴成 70° (如图示)，pq 是 A 面和 B 面的交线，与 X 轴平行。一个晶面和 A 面及 B 面相交的痕迹与 pq 的夹角分别是 $\alpha=55^\circ$ 和 $\beta=157.5^\circ$ ，求此面的面指数(hkl)。

解：因为 A 面是投影面，而 Z 轴是 A 面的法线，所以投影圆的中心是 Z 轴的极点；在投影圆的圆周上定出 X 和 Y 轴的极点。

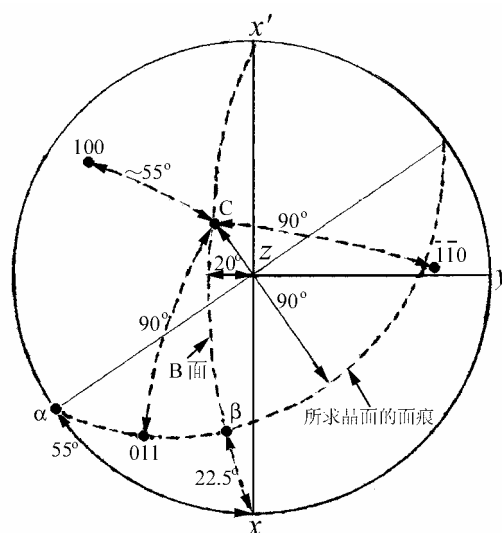
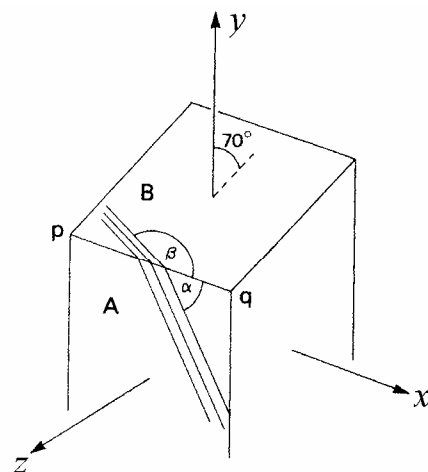
1) 先找出 A 和 B 面在投影图中的迹线。投影圆是 A 面的投影，其迹线就是大圆；从右图看出，B 面的与 Z 轴夹角为 20° ，把 XX' 与吴氏网的 N-S 轴重合，B 面的迹线应是从 N-S 轴向负 Y 方向量 20° 的经线，如下图所示。

2) 找出所求的晶面与 A 面相交的痕迹(α 线)的迹点。因 α 线在 A 面(投影面)上并与 X 轴成 55° ，从 X 极点开始在大圆周顺时针量出 55° ，这点就是 α 线的迹点。

3) 找出所求的晶面与 B 面相交的痕迹(β 线)的迹点。因 β 线在 B 面上，所以它的迹点一定在 B 面的迹线上，同时 β 线和 X 轴夹角为 $180^\circ - 157^\circ = 22.5^\circ$ 。从 X 点开始在 B 面的迹线上量出 22.5° ，它就是 β 线的迹点(见右图)。

4) 因 α 线和 β 线都在所求的晶面上，所求的晶面的法线必与 α 线和 β 线垂直，所以，过 α 线的迹点和 β 线的迹点的大圆迹痕所对应的极点就是所求面的极点，右图中的 C 极点。

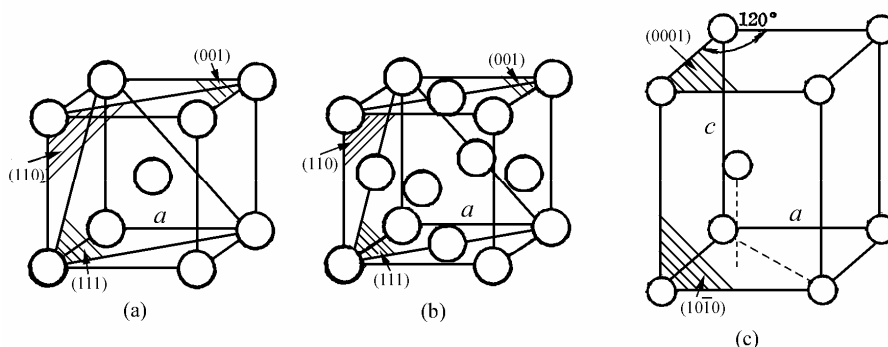
5) 量出所求晶面(hkl)的极点 C 与上题定出的 (100)、 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 和 (011) 极点间的角度，分别为 $\sim 55^\circ$ 、 90° 和 90° 。根据立方晶系计算晶面间夹角的关系， $\cos 90^\circ = 0$ ，由 (hkl) 与 (011) 间夹角为 90° 得： $k+l=0$ ；由 (hkl) 与 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 间夹角为 90° 得： $h+k=0$ ；这就得出所求晶面为 $(1\bar{1}1)$ 。另外，因 $[1\bar{1}1]$ 也是 (011) 的晶带轴，所以 (011) 极点也在过 α 线的迹点和 β 线的迹点的大圆迹痕上



第2章 晶体结构习题题解

1. 计算面心立方、体心立方结构的(100)、(110)、(111)等晶面的面密度，计算密排六方结构的(0001)、(10 $\bar{1}$ 0)晶面的面密度。(面密度定义为原子数/单位面积)

解：体心立方、面心立方和密排六方结构的晶胞分别如下图(a)、(b)和(c)。设立方结构的晶胞棱长为 a 。对于体心立方结构，在一个晶胞中的(001)面的面积是 a^2 ，在这个面积上有1个原子，所以其面密度为 $1/a^2$ ；在一个晶胞中的(110)面的面积是 $\sqrt{2}a^2$ ，在这个面积上有2个原子，所以其面密度为 $\sqrt{2}/a^2$ ；在一个晶胞中的(111)面的面积是 $\sqrt{3}a^2/2$ ，在这个面积上有两个原子，所以其面密度为 $\sqrt{3}/2a^2$ 。对于面心立方结构，在一个晶胞中的(001)面的面积是 a^2 ，在这个面积上有2个原子，所以其面密度为 $2/a^2$ ；在一个晶胞中的(110)面的面积是 $\sqrt{2}a^2$ ，在这个面积上有2个原子，所以其面密度为 $\sqrt{2}/a^2$ ；在一个晶胞中的(111)面的面积是 $\sqrt{3}a^2/2$ ，在这个面积上有1.5个原子，所以其面密度为 $\sqrt{3}/a^2$ 。对于密排六方结构，设晶胞的轴长为 a 和 c ，在一个晶胞中的(0001)面的面积是 $\sqrt{3}a^2/2$ ，在这个面积上有1个原子，所以其面密度为 $2\sqrt{3}/3a^2$ ；在一个晶胞中的(10 $\bar{1}$ 0)面的面积是 a^2c ，在这个面积上有2个原子，所以其面密度为 $2/a^2c$ 。



2. 钛具有 hcp 结构，在 20°C 时单胞体积为 0.106nm^3 ， $c/a=1.59$ ，求 a 和 c 。求在基面上的原子半径。

解：因为密排六方单胞的体积是 $a^2c\sin 60^\circ = 0.106\text{nm}^3$ ，而 $c/a=1.59$ ，把它代入体积的式子，得 $1.59a^3\sin 60^\circ = 0.106\text{nm}^3$ ，故 $a = (0.106/1.59\sin 60^\circ)^{1/3}\text{nm} = 0.4254\text{nm}$ ； $c = 1.59a = 1.59 \times 0.4254\text{nm} = 0.6764\text{nm}$ 。

3. 纯铁在 912°C 由 bcc 结构转变为 fcc 结构，体积减少 1.06%，根据 fcc 形态的原子半径计算 bcc 形态的原子半径。它们的相对变化为多少？如果假定转变前后原子半径不变，计算转变后的体积变化。这些结果说明了什么？

解：设 bcc 结构的点阵常数为 a_b ，fcc 结构的点阵常数为 a_f ，由 bcc 结构转变为 fcc 结构时体积减少 1.06%，因 bcc 单胞含 2 个原子，fcc 单胞 4 个原子，所以 2 个 bcc 单胞转变为一个 fcc 单胞。故

$$\frac{a_f^3 - 2a_b^3}{2a_b^3} = \frac{1.06}{100} \quad \text{即} \quad a_f = \left(\frac{2 \times 101.06}{100} \right)^{1/3} a_b = 1.264a_b$$

bcc 结构的原子半径 $r_b = \sqrt{3}a_b/4$ ，fcc 结构的原子半径 $r_f = \sqrt{2}a_f/4$ ，把上面计算的 a_f 和 a_b 的关系代入，并以 r_f 表示 r_b ：

$$r_b = \frac{\sqrt{3}a_b}{4} = \frac{\sqrt{3}a_f}{4 \times 1.264} = \frac{\sqrt{3} \times 4r_f}{4 \times 1.264 \times \sqrt{2}} = 0.9689r_f$$

它们的相对变化为

$$\frac{r_b - r_f}{r_b} = 0.9689 - 1 = -0.0311$$

如果假定转变前后原子半径不变，转变后的体积变化为

$$\frac{a_f^3 - 2a_b^3}{2a_b^3} = \frac{(4r_f/\sqrt{2})^3 - 2(4r_b/\sqrt{3})^3}{2(4r_b/\sqrt{3})^3} = \frac{(4/\sqrt{2})^3 - 2(4/\sqrt{3})^3}{2(4/\sqrt{3})^3} = -8.1\%$$

从上面计算的结果看出，如果转变前后的原子半径不变，则转变后的体积变化很大，和实际测得的结果不符，也和金属键的性质不符。所示，同一种金属，不同结构的原子半径应该改变，尽量使其体积变化最少。

4. 铜的相对原子质量为 63.55，密度为 8.96g/cm³，计算铜的点阵常数和原子半径。测得 Au 的摩尔分数为 40% 的 Cu-Au 固溶体点阵常数 $a=0.3795\text{nm}$ ，密度为 14.213g/cm³，计算说明它是什么类型的固溶体。

解：铜的相对原子质量为 63.55，阿佛加得罗常数是 6.0238×10^{23} ，每个 Cu 原子的质量 A_{Cu} 为

$$A_{\text{Cu}} = \frac{63.55}{6.0238 \times 10^{23}} \text{g} = 10.5498 \times 10^{-23} \text{g}$$

Cu 属面心立方结构，每个晶胞含 4 个原子，设 Cu 晶胞的点阵常数为 a ，一个晶胞的质量是 4 个 Cu 原子的质量，故

$$a^3 \times \rho = 4 \times A_{\text{Cu}}$$

$$\text{即 } a = \left(\frac{4 \times A_{\text{Cu}}}{\rho} \right)^{1/3} = \left(\frac{4 \times 10.5498 \times 10^{-23}}{8.96} \right)^{1/3} \text{cm} = 0.36113 \times 10^{-7} \text{cm} = 0.36117 \text{nm}$$

查得 Cu 的原子量为 63.55，Au 的原子量为 169.97，故 Cu-Au 固溶体中每个原子的平均重量 \bar{A}

$$\bar{A} = \frac{63.55 \times 0.6 + 169.97 \times 0.4}{6.0238 \times 10^{23}} \text{g} = 19.409 \times 10^{-23} \text{g}$$

求每个晶胞的原子数 n

$$n = \frac{a^3 \times \rho}{\bar{A}} = \frac{(0.3795 \times 10^{-7})^3 \times 14.213}{19.409 \times 10^{-23}} = 4.002$$

Cu 和 Au 都属面心立方结构，每个晶胞含 4 个原子，现在计算得每个晶胞含 4.002 个原子，很易看出，其中小数是计算误差，所以这是置换固溶体。

5. Fe-Mn-C 合金中，Mn 和 C 的质量分数为 12.3% 及 1.34%，它是面心立方固溶体，测得点阵常数 $a=0.3642\text{nm}$ ，合金密度为 7.83g/cm³，计算说明它是什么类型固溶体。

解：把合金的质量分数换成摩尔分数。查出 Fe、Mn 和 C 的原子量分别为 55.85、54.94 和 12，计算过程及结果如下表所列：

组元	Fe	Mn	C	Σ
质量分数	0.8636	0.123	0.0134	
原子量	55.85	54.94	12	
100g 合金中的摩尔数	86.36/55.85=1.546	12.3/54.94=0.2239	1.34/12=0.1117	1.8816
摩尔分数	1.546/1.8816=0.8217	0.2239/1.8816=0.119	0.1117/1.8816=0.0593	

计算固溶体中每个原子在重量 \bar{A} ，阿佛加得罗常数是 6.0238×10^{23}

$$\bar{A} = \frac{0.8217 \times 55.85 + 0.119 \times 54.94 + 0.0593 \times 12}{6.0238 \times 10^{23}} \text{g} = 8.8219 \times 10^{-23} \text{g}$$

求每个晶胞的原子数 n

$$n = \frac{a^3 \times \rho}{\bar{A}} = \frac{(0.3642 \times 10^{-7})^3 \times 7.83}{8.8219 \times 10^{-23}} = 4.2876$$

Fe-Mn-C 合金是面心立方固溶体，每个晶胞含 4 个原子，现在计算得每个晶胞含 4.2876 个原子，其中一个或全部组元都是间隙溶质原子。为了进一步考察 Mn 和 C 组元，设 Mn 是间隙原子，它的摩尔分数应是 $0.2876/4.2876=0.067$ ，而 Mn 实际的摩尔分数是 0.2239，所以 Mn 不是间隙组元；而 C 实际的摩尔分数是 0.0593，这和 0.067 接近，所以 C 是间隙组元。

6. Zn 原子的摩尔分数为 3% 的 Cu-Zn 合金是固溶体，铜的原子半径为 0.128nm，Zn 的原子半径为 0.133nm。假设点阵常数随 Zn 原子加入呈线性变化，求此合金的密度。

解：因点阵常数随 Zn 原子加入呈线性变化，原子半径与点阵常数成正比，故平均原子半径 \bar{r} 为

$$\bar{r} = r_{\text{Cu}} + (r_{\text{Zn}} - r_{\text{Cu}}) \times 3\% = 0.128 + (0.133 - 0.128) \times 0.03 \text{ nm} = 0.12815 \text{ nm}$$

摩尔分数为 3% Zn 的 Cu-Zn 合金是面心立方固溶体，根据原子半径与点阵常数的关系求出平均点阵常数 \bar{a}

$$\bar{a} = 4\bar{r} / \sqrt{2} = 4 \times 0.12815 / \sqrt{2} \text{ nm} = 0.36246 \text{ nm}$$

查得 Cu 和 Zn 的原子量分别为 63.55 和 65.37，阿佛加得罗常数是 6.0238×10^{23} ，计算合金固溶体的组元原子的平均质量 \bar{A}

$$\bar{A} = \frac{63.55 \times 0.97 + 65.37 \times 0.03}{6.0238 \times 10^{23}} \text{ g} = 10.559 \times 10^{-23} \text{ g}$$

固溶体的密度 ρ 是

$$\rho = \frac{4\bar{A}}{a^3} = \frac{4 \times 10.559 \times 10^{-23}}{(0.36246 \times 10^{-7})^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} = 8.87 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$$

7. CsI 具有 B2 结构，若 Cs 和 I 的原子（离子）半径分别为 0.172nm 和 0.227nm，求它的致密度。

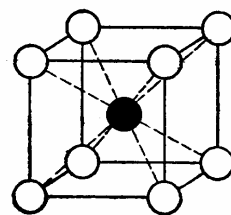
解：B2 结构如下图所示，白和黑的圆分别代表 Cs 和 I 的原子（离子）。从图看出，体对角线的长度是一个 Cs 和一个 I 的原子（离子）半径之和，设点阵常数为 a ，得

$$\sqrt{3}a = 2(r_{\text{Cs}} + r_{\text{I}})$$

$$\text{即 } a = \frac{2(r_{\text{Cs}} + r_{\text{I}})}{\sqrt{3}} = \frac{2(0.172 + 0.227)}{\sqrt{3}} \text{ nm} = 0.4607 \text{ nm}$$

每个晶胞含一个 Cs 和一个 Zn 原子，所以其致密度 η 为

$$\eta = \frac{4\pi}{3a^3} (r_{\text{Cs}}^3 + r_{\text{I}}^3) = \frac{4\pi}{3(0.4607)^3} [(0.172)^3 + (0.227)^3] = 0.719$$



8. 黄铜 (CuZn) 具有 B2 结构，其 Zn 与 Cu 原子之比为 46 54，在 450°C 时若有 90% 的 $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ 位置被铜原子占据，问有多少百分数的 $(0 \ 0 \ 0)$ 位置被铜原子占据？

解：B2 结构如上题的图所示，在计量成份即 Zn 与 Cu 原子之比为 1 1 时，黑 $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ 位置)和白 $(0 \ 0 \ 0)$ 位置)的圆分别是 Cu 和 Zn 原子。现在 Zn 与 Cu 原子之比为 46 54，设 Cu 在 $(0 \ 0 \ 0)$ 位置所占的分数为 x ，根据题意有

$$0.9 \times 0.5 + 0.5x = 0.54$$

$$\text{故 } x = \frac{0.54 - 0.9 \times 0.5}{0.5} = 0.18$$

即有 18% 的 Cu 原子处在 $(0 \ 0 \ 0)$ 位置。

第3章 相图题解

1. 根据克拉佩龙-克劳修斯方程，导出单元系两相平衡线的“外延规则”。

解：以 P-T 图为例。设 α 、 β 和 γ 三相平衡的三相点处两相平衡线的斜率分别为 $(dP/dT)^{\alpha-\beta}$ 、 $(dP/dT)^{\beta-\gamma}$ 和 $(dP/dT)^{\gamma-\alpha}$ ，根据克-克方程

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta S_m}{\Delta V_m}$$

对于 α - β 、 β - γ 及 α - γ 平衡，分别有如下关系

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)^{\alpha-\beta} = \left(\frac{\Delta S_m}{\Delta V_m}\right)^{\alpha-\beta} ; \left(\frac{dp}{dT}\right)^{\beta-\gamma} = \left(\frac{\Delta S_m}{\Delta V_m}\right)^{\beta-\gamma} ; \left(\frac{dp}{dT}\right)^{\alpha-\gamma} = \left(\frac{\Delta S_m}{\Delta V_m}\right)^{\alpha-\gamma}$$

在三相平衡时， $(\Delta S_m)^{\alpha-\gamma}$ 及 $(\Delta V_m)^{\alpha-\gamma}$ 为

$$(\Delta S_m)^{\alpha-\gamma} = (\Delta S_m)^{\alpha-\beta} + (\Delta S_m)^{\beta-\gamma} ; (\Delta V_m)^{\alpha-\gamma} = (\Delta V_m)^{\alpha-\beta} + (\Delta V_m)^{\beta-\gamma}$$

$$\text{则} \quad \left(\frac{dP}{dT}\right)^{\alpha-\gamma} = \left(\frac{\Delta S_m}{\Delta V_m}\right)^{\alpha-\gamma} = \frac{(\Delta S_m)^{\alpha-\beta} + (\Delta S_m)^{\beta-\gamma}}{(\Delta V_m)^{\alpha-\beta} + (\Delta V_m)^{\beta-\gamma}}$$

$$\text{设} \quad \left(\frac{dp}{dT}\right)^{\alpha-\beta} = \left(\frac{\Delta S_m}{\Delta V_m}\right)^{\alpha-\beta} < \left(\frac{dP}{dT}\right)^{\beta-\gamma} = \left(\frac{\Delta S_m}{\Delta V_m}\right)^{\beta-\gamma}$$

故

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)^{\alpha-\beta} = \left(\frac{\Delta S_m}{\Delta V_m}\right)^{\alpha-\beta} < \left(\frac{(\Delta S_m)^{\alpha-\beta} + (\Delta S_m)^{\beta-\gamma}}{(\Delta V_m)^{\alpha-\beta} + (\Delta V_m)^{\beta-\gamma}}\right) = \left(\frac{dP}{dT}\right)^{\alpha-\gamma} < \left(\frac{\Delta S_m}{\Delta V_m}\right)^{\beta-\gamma} = \left(\frac{dP}{dT}\right)^{\beta-\gamma}$$

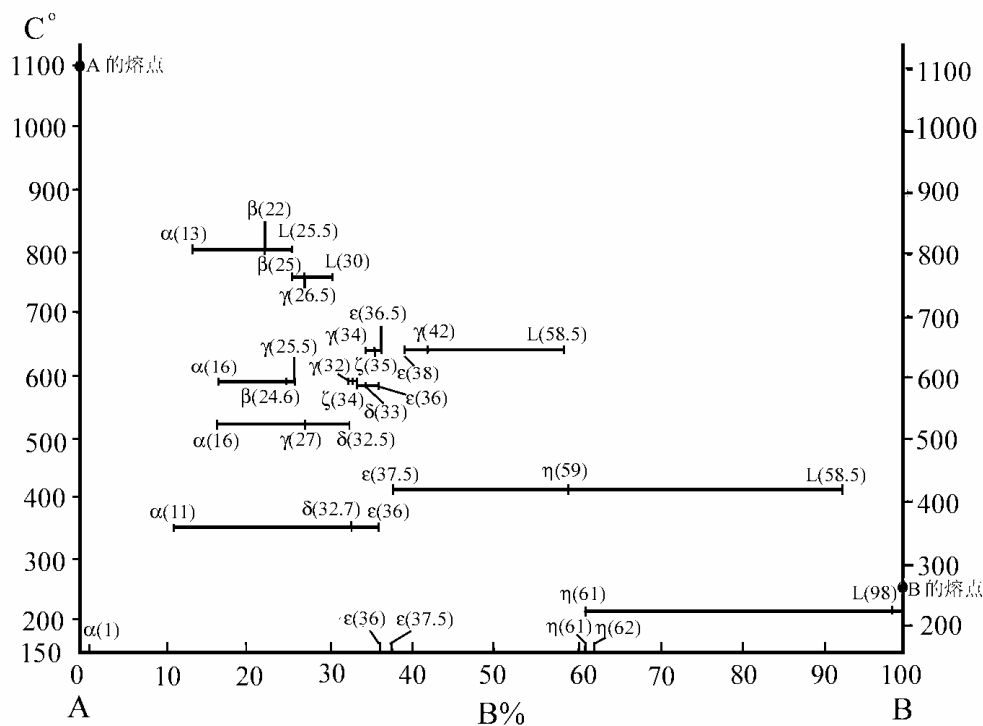
这就说明 α - γ 相线外延一定在 α - β 平衡相线和 β - γ 平衡相线之间，因此就证明了相线的外延规则。

2. 根据下列资料，作出 A-B 二元相图

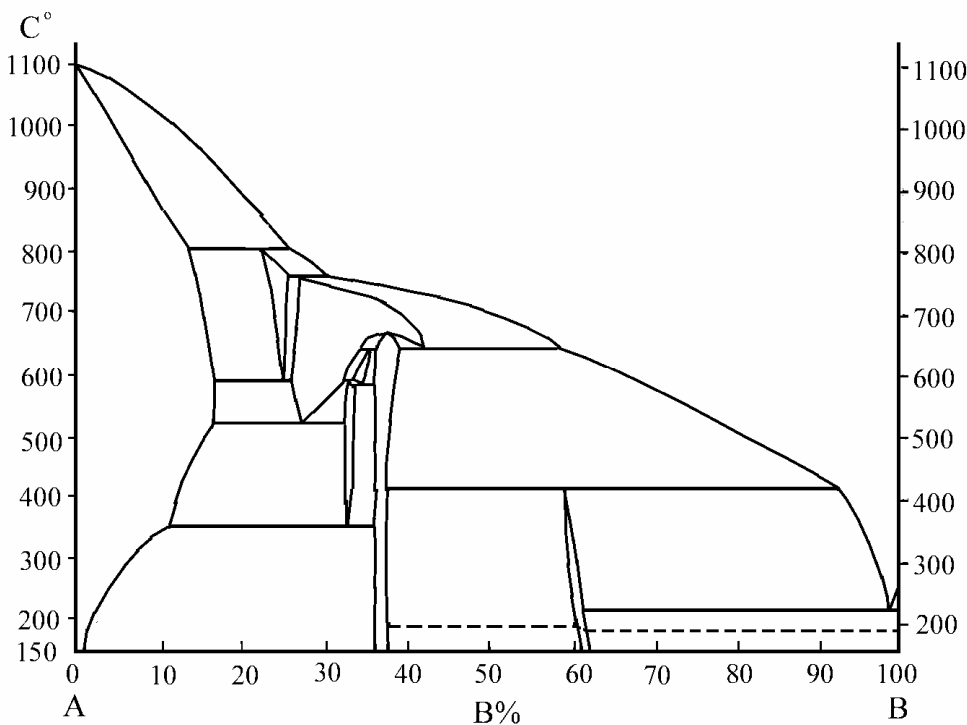
$T_A=1100^\circ\text{C}$	$T_B=250$
800°C	$\alpha(13)+L(25.5)$ $\beta(22)$
760°C	$\beta(25)+L(30)$ $\gamma(26.5)$
640°C	$\gamma(34)+\epsilon(36.5)$ $\zeta(35)$
640°C	$\gamma(42)$ $\epsilon(38.5)+L(58.5)$
590°C	$\gamma(32)+\zeta(33)$ (32.5)
586°C	$\beta(24.6)$ $\alpha(16)+\gamma(25.5)$
582°C	$\zeta(34)$ $\delta(33)+\epsilon(36)$
520°C	$\gamma(27)$ $\alpha(16)+\delta(32.5)$
415°C	$\epsilon(37.5)+L(92)$ (59)
350°C	$\delta(32.7)$ $\alpha(11)+\epsilon(36)$
227°C	$L(98)$ (61)+B

在 150°C 时 B 在 α 的溶解度为 1%。在 150°C 时 ϵ 相成分范围是 36%~37.5%， ϵ 相线和 γ 相线在 676°C 有最高共同点，共同点成分为 38%。在 150°C 时 η 相成分范围为 61%~62%， η 相有一个有序转变，在含 B 低一侧有序化温度为 189°C，在含 B 高一侧有序化温度为 186°C。A 几乎不溶于 B。

解：先化 A 和 B 的熔点、 α 相在 150°C 的溶解度、 ϵ 相在 150°C 的浓度范围、 ϵ 相消失的浓度和温度、 η 相在 150°C 的浓度范围标出，再把各三相平衡的水平线及平衡相的成份标出，如下图所示。因为 640°C 的 $\gamma \rightarrow \epsilon + \zeta$ 反应中各相的成份很相近，所以下图只画出平衡水平线及成份点，没有标出成份； ϵ 相最高温度的成份点也没有标出。



在图的基础上，把各相的成份点连接起来，就获得相图，如下图所示。要十分注意的是， γ 相有一个熔晶反应， ε 相与 γ 相之间有一个最高共溶点；另外， η 相有序转变在 $\varepsilon+\eta$ 及 $\eta+B$ 两相区表示为一直线。



3. 根据 Fe-C 相图

- 计算 $w(C)$ 为 0.1% 以及 1.2% 的铁碳合金在室温时平衡状态下相的相对量，计算共析体（珠光体）的相对量。
- 计算 $w(C)$ 为 3.4% 的铁碳合金在室温时平衡状态下相的相对量。计算刚凝固完毕时初生

γ 相（奥氏体）和共晶体的相对量。计算在共析温度下由全部初生 γ 相析出的渗碳体占总体（整个体系）量的百分数。计算在共晶体中最后转变生成的共析体占总体（整个体系）量的百分数。

解：(a)在室温下铁-碳合金的平衡相是 α -Fe(碳的质量分数是 0.008%)和 Fe_3C (碳的质量分数是 6.67%)，故 $w(\text{C})$ 为 0.1%的合金在室温时平衡状态下 α 相的相对量（质量分数） A^α 及 Fe_3C 相的相对量 $A^{\text{Fe}_3\text{C}}$ 为

$$A^\alpha = \frac{6.67 - 0.1}{6.67 - 0.008} = 98.62\% \quad A^{\text{Fe}_3\text{C}} = 1 - 98.62\% = 1.38\%$$

$w(\text{C})$ 为 1.2%的合金在室温时平衡状态下 α 相的相对量（质量分数） A^α 及 Fe_3C 相的相对量 $A^{\text{Fe}_3\text{C}}$ 为

$$A^\alpha = \frac{6.67 - 1.2}{6.67 - 0.008} = 82.11\% \quad A^{\text{Fe}_3\text{C}} = 1 - 82.11\% = 17.89\%$$

$w(\text{C})$ 为 0.1%的合金在室温下平衡状态下的组织是 α -Fe 和共析体，其组织可近似看作和共析转变完时一样，在共析温度 α -Fe 中碳的成分是 0.02%，共析的碳的成份是 0.77%，故 $w(\text{C})$ 为 0.1%的合金在室温时组织中共析体的相对量 A^P 为

$$A^P = \frac{0.1 - 0.02}{0.77 - 0.02} = 10.67\%$$

$w(\text{C})$ 为 1.2%的合金在室温下平衡状态下的组织是 Fe_3C 和共析体，在室温下组织中共析体的相对量 A^P 为

$$A^P = \frac{6.67 - 1.2}{6.67 - 0.77} = 92.71\%$$

(2) $w(\text{C})$ 为 3.4%的铁碳合金在室温平衡相是 α -Fe(碳的成分是 0.008%)和 Fe_3C (碳的成分是 6.67%)，故 $w(\text{C})$ 为 3.4%的合金在室温时平衡状态下 α 相的相对量（质量分数） A^α 及 Fe_3C 相的相对量 $A^{\text{Fe}_3\text{C}}$ 为

$$A^\alpha = \frac{6.67 - 3.4}{6.67 - 0.008} = 49.08\% \quad A^{\text{Fe}_3\text{C}} = 1 - 49.08\% = 50.92\%$$

因为刚凝固完毕时，初生 γ 相和共晶碳的成分分别为 2.11%和 4.26%，所以刚凝固完毕时初生 γ 相的相对量 A_I^γ 及共晶的相对量 A^G 为

$$A_I^\gamma = \frac{4.26 - 3.4}{4.26 - 2.11} = 40\% \quad A^G = 1 - 40\% = 60\%$$

在刚凝固完毕时，全部 γ 相(包括初生 γ 相和共晶中的 γ 相)的相对量 A^γ 是

$$A^\gamma = \frac{6.67 - 3.4}{6.67 - 2.11} = 71.7\%$$

碳的成分为 2.11%的 γ 相从共晶温度冷却到共析温度后，它的成分变为 0.77%，在冷却过程它析出 Fe_3C 相，每份 γ 相析出 Fe_3C 的量 $A^{\text{Fe}_3\text{C}}$ 为

$$A^{\text{Fe}_3\text{C}} = \frac{2.11 - 0.77}{6.77 - 0.77} = 22.71\%$$

现在 γ 相的量是 71.7%，所以到共析温度析出的 Fe_3C 相对于整体的相对量 $A^{\text{Fe}_3\text{C}}$ 为

$$A^{\text{Fe}_3\text{C}} = 71.7\% \times 22.71\% = 16.28\%$$

因为合金中的 γ 相到共析温度析出 Fe_3C ，总体的 γ 相的相对量减少 16.28%，余下的 γ 相在共析温度都转变为共析体，所以共析体的相对量为

$$A^P = 71.7\% - 16.28\% = 55.42\%$$

4. 若已知体系成分以及此体系三相平衡时的 3 个平衡相的成分，写出 3 个平衡相的相对量的解析式子。编制一个用计算机计算的程序。

解：设 A-B-C 三元系中某一体系的成分为 w_A 、 w_B 、 w_C ，在 T 温度下有 α 、 β 和 γ 相平衡， α 相的成分为 w_A^α 、 w_B^α 、 w_C^α ， β 相的成分为 w_A^β 、 w_B^β 、 w_C^β ， γ 相的成分为 w_A^γ 、 w_B^γ 、 w_C^γ ， α 、 β 和 γ 相的相对重量为 A^α 、 A^β 、 A^γ 。根据重量守恒，有如下关系：

$$w_A^\alpha A^\alpha + w_A^\beta A^\beta + w_A^\gamma A^\gamma = w_A$$

$$w_B^\alpha A^\alpha + w_B^\beta A^\beta + w_B^\gamma A^\gamma = w_B$$

$$w_C^\alpha A^\alpha + w_C^\beta A^\beta + w_C^\gamma A^\gamma = w_C$$

解上面的联立方程，得

$$A^\alpha = \frac{\begin{vmatrix} w_A & w_B & w_C \\ w_A^\beta & w_B^\beta & w_C^\beta \\ w_A^\gamma & w_B^\gamma & w_C^\gamma \end{vmatrix}}{\Delta}$$

$$A^\beta = \frac{\begin{vmatrix} w_A^\alpha & w_A & w_A^\gamma \\ w_B^\alpha & w_B & w_B^\gamma \\ w_C^\alpha & w_C & w_C^\gamma \end{vmatrix}}{\Delta}$$

$$A^\gamma = \frac{\begin{vmatrix} w_A^\alpha & w_A^\beta & w_A \\ w_B^\alpha & w_B^\beta & w_B \\ w_C^\alpha & w_C^\beta & w_C \end{vmatrix}}{\Delta}$$

其中 Δ 为

$$\Delta = \begin{vmatrix} w_A^\alpha & w_A^\beta & w_A^\gamma \\ w_B^\alpha & w_B^\beta & w_B^\gamma \\ w_C^\alpha & w_C^\beta & w_C^\gamma \end{vmatrix}$$

计算程序见附录。

5. 图 3-73 给出 A-B-C 三元成分三角形

(a) 定出图中的 P 、 R 、 S 三点的成分。问由 2kg P 、4kg R 、7kg S 混合后的体系的成分是什么？

(b) 从图中定出含 C 为 80%，而 A 和 B 组元浓度比等于 S 成分的合金的成分。

(c) 若有 2kg P 成分合金，问要配什么样成分的合金才能混合成 6kg R 成分的合金？

解：(a) 从上图量出， S 点成分为：A%=40%；B%=50%；C%=10%， R 点成分为：A%=10%；B%=60%；C%=30%， P 点成分为：A%=20%；B%=10%；C%=70%。设 2kg P 、4kg R 、7kg S 混合后的体系的成分是 A%= w_A ，B%= w_B ，C%= w_C ，混合后的体系的重量是 13kg，则

$$13w_A = 2 \times 0.2 + 4 \times 0.1 + 7 \times 0.4 = 3.6$$

$$13w_B = 2 \times 0.1 + 4 \times 0.6 + 7 \times 0.5 = 6.1$$

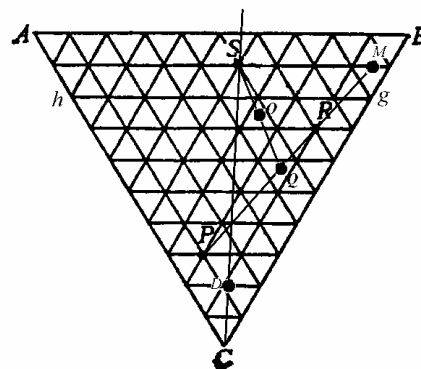
$$13w_C = 2 \times 0.7 + 4 \times 0.3 + 7 \times 0.1 = 3.3$$

故 $w_A=27.7\%$ ， $w_B=46.9\%$ ， $w_C=25.4\%$ 。

这也可以画图求出。把 S 、 P 和 M 点连成三角形，2kg P 、4kg R 混合成的合金成分点必在 P - R 边上，设为 Q 点；根据杠杆定则， PQ 长度和 QR 长度之比应为 4:2，由此定出 Q 点，如上图所示。现在 Q 成分的合金有 6kg，把它和 7kg 的 S 成分合金混合，混合成分点一定在 QS 连线上，设为 O 点，根据杠杆定则， QO 长度和 OS 长度之比应为 7:6，由此定出 O 点。从图读出 O 点成分同上面计算的一样。

(b) 在上图作过 C 点和 S 点的连线，A 和 B 组元浓度比等于 S 成分的所有合金成分都在此线上，作平行于 A-B 底边并且 C%=20%的线 hg ，它和 CS 线的较点 D 就是所求合金的成分点。在成份三角形上可直接读取 D 点的成分：A%=8.89%，B%=11.11%，C%=80%。从 hg 读数可知 A%/B%=4/5，因 C%=20%，也可以计算出 A%=(1-80%)×4/9=8.89%，B%=(1-80%)×5/9=11.11%。

(c) 以 P 点成分合金与另一成分合金混合获得 R 成分合金，根据杠杆定理，这合金的成分



点必在作过 P 与 R 点直线的外延线上。因用 2kg P 成分合金，要混合成 6kg R 成分的合金，即加入的合金重量为 4kg ，以 $P-R$ 线长为 4 ，在外延方向延长 2 (即 $P-R$ 线长的一半) 处得出 M 点，它就是所求的成分点。在成份三角形上可直接读取 M 点的成分： $A\%=5\%$ ， $B\%=85\%$ ， $C\%=10\%$ 。也可以用计算的方法来求。设 M 点的成分为： $A\%=w_A$ ， $B\%=w_B$ ， $C\%=w_C$ ， M 成分合金重量为 $(6-2=4)\text{kg}$ ，则

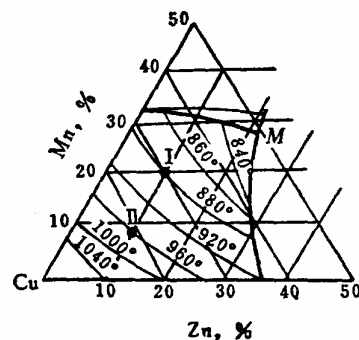
$$6 \times 0.1 = 4 \times w_A + 2 \times 0.2$$

$$6 \times 0.6 = 4 \times w_B + 2 \times 0.1$$

结果 $w_A=5\%$ ， $w_B=85\%$ ， $w_C=(1-0.05-0.85)=10\%$ 。

6. 图 3-74 给出 Cu-Mn-Zn 液相面的等温线投影图。写出
、 点的成分及它们的熔点。

解：从图量出 点成分为 $\text{Mn}\%=20\%$ ， $\text{Zn}\%=10\%$ ， $\text{Cu}\%=70\%$ ； 点的成分为 $\text{Mn}\%=8\%$ ， $\text{Zn}\%=10\%$ ， $\text{Cu}\%=82\%$ 。从图中的等温线看出， 点的熔点是 880°C ；
点的熔点是 960°C 。

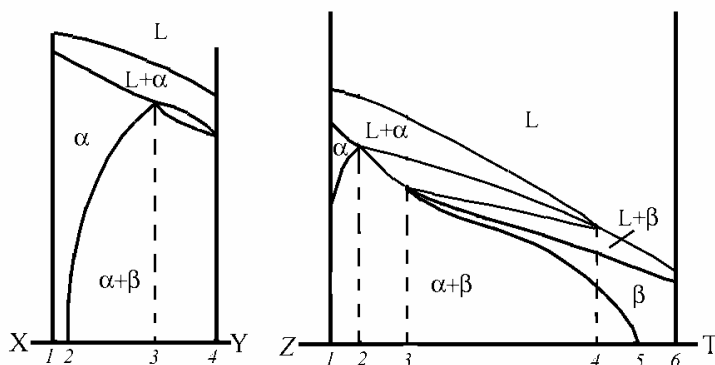
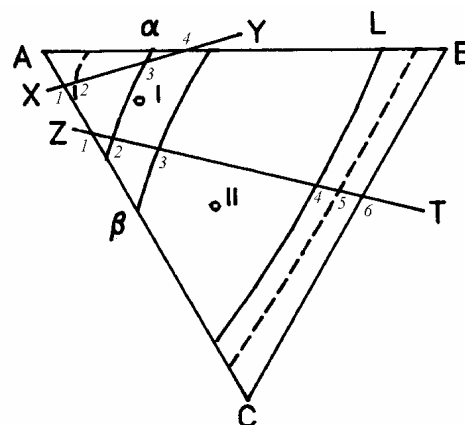


7. 根据图 3-76 给出的投影图，画出 XY 及 ZT 的垂直截面示意图，说明 及 成分合金冷却时所发生的变化。

解：首先，在投影图上把截面线与各投影线的交点按顺序编号。

XY 截面投影线的 1-4 是截面与 α 的液相面交线的投影，在截面上是 α 液相线；3-4 分别是截面与三相区的两个面的交线的投影，截面和三相区的另一个面没有相截，相截的两条线在截面上构成三相区；2-3 是截面与 α 的固相面交线的投影，在截面上是 α 固相线；整个截面如下左图所示。

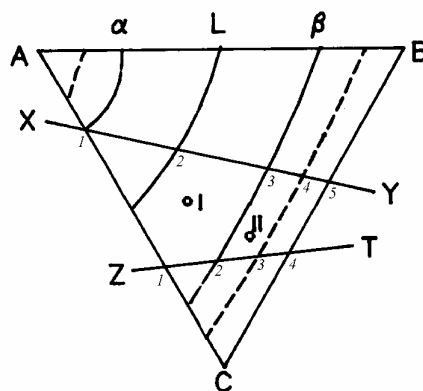
ZT 截面投影线的 2-3、3-4 和 2-4 分别是截面与三相区的三个面的交线的投影，相截的三条线在截面上构成三相区，因为是包晶反应，所以曲边三角形的顶点朝下；1-4 和 4-6 分别是截面与 α 相和 β 的液相面交线的投影，在截面上是 α 相和 β 的液相线；1-2 是截面与 α 固相面的交线，在截面上是 α 相的固相线；1-2 和 4-5 分别是截面 α 和 β 两相平衡的 α 和 β 相互溶解度面的交线的投影，在截面上是 α 和 β 的溶解度曲线线。整个截面如上右图所示。



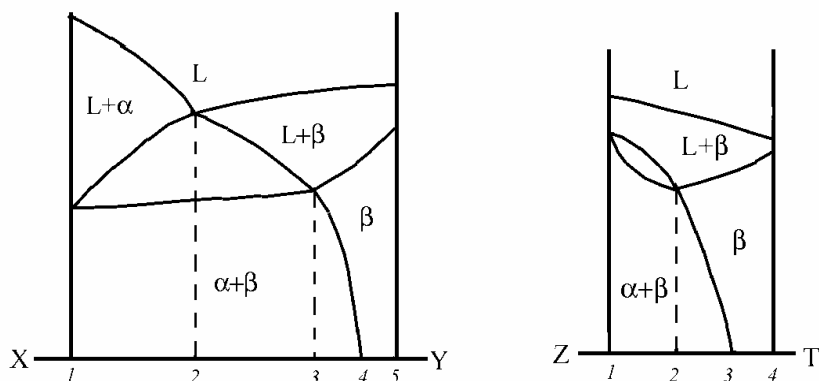
8. 根据图 3-75 给出的投影图示意地画出 XY 及 ZT 的垂直截面，并说明 及 成分合金冷却时发生的变化。

解：在投影图上把截面线与各投影线的交点按顺序编号。XY 截面投影线的 1-2 和 2-5 分

别是截面与 α 的液相面和 β 的液相面交线的投影，在截面上是两条液相线；1-2 同时也是截面与三相区的一个面的交线的投影，2-3 和 1-3 分别是截面与三相区的另外两个面的交线的投影，这三条线在截面上构成三相区的曲边三角形，因为是共晶反应，所以曲边三角形的顶点朝上；3-5 是截面与 α 的固相面交线的投影，在截面上是 α 固相线；3-4 是截面与 α 和 β 两相平衡的 β 相互溶解度面的交线的投影，在界面上是 β 相溶解度线。整个截面如下左图所示。



ZT 截面投影线的 1-2 分别是截面与三相区的两个面的交线的投影，截面和三相区的另一个面没有相截，相截的两条线在截面上构成三相区；1-4 是截面与 β 的液相面交线的投影，在截面上是一条液相线；2-4 是截面与 α 的固相面交线的投影，在截面上是 α 固相线；2-3 是截面与 α 和 β 两相平衡的 β 相互溶解度面的交线的投影，在截面上是 β 相溶解度线。整个截面如下右图所示。



9.图 3-77 给出 Fe-Cr-C 系含 $w(\text{Cr})$ 为 17% 的垂直截面。

(a)把各相区的各相的名称填上。

(a)从截面上能判断哪一些三相区的三相反应类型，是什么反应？

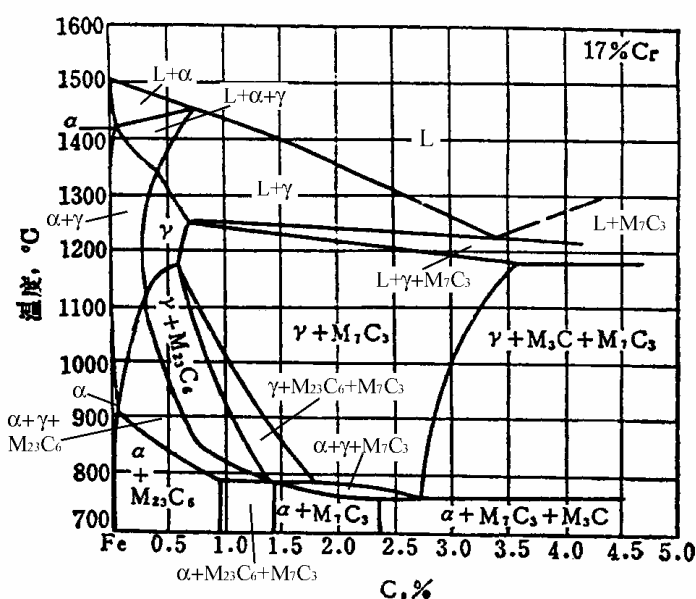
(c)有哪几个四相区，哪些四相区能从截面上判断四相反应类型，是什么反应？

(d)1.5%C-17%Cr-Fe 合金加热时不出现液相的最高温度是多少？

解：(a)各相区名称填写在图上(见下图)。

(b)截面上共有 8 个三相区，其中有 6 个与四相区邻接，

不能从图中的形状判定它的反应类型；在截面图上 $L+\gamma+M_7C_3$ 三相区的三条边不完整，也不能从图中的形状判定它的反应类型；在界面图上 $L+\alpha+\gamma$ 三相区是一个顶点朝下的曲边三角形，所以可以判定它是包晶反应，反应是 $L+\alpha\rightarrow\gamma$ 。



(c)图中有两个四相区。其中的 $\gamma + \alpha + M_7C_3 + M_2C$ 四相区在界面上只看到与它邻接的三个三相区，所以不能判定它的反应类型；另一个 $M_{23}C_6 + \gamma + M_7C_3 + \alpha$ 四相区，因为四相区在高温与两个三相区邻接，在低温与两个三相区邻接，所以是第 II 类四相反应。在高温邻接的两相区是 $M_{23}C_6 + \gamma$ ，在低温邻接的两相区是 $M_7C_3 + \alpha$ ，所以四相反应为 $M_{23}C_6 + \gamma \rightarrow M_7C_3 + \alpha$ 。

10.图 3-78 所给出的 2 个投影图，它们和图 3-44(a)和图 3-46(a)是同一类型的。

(1)示意画出其中的 XY 和 ZT 的垂直截面图。

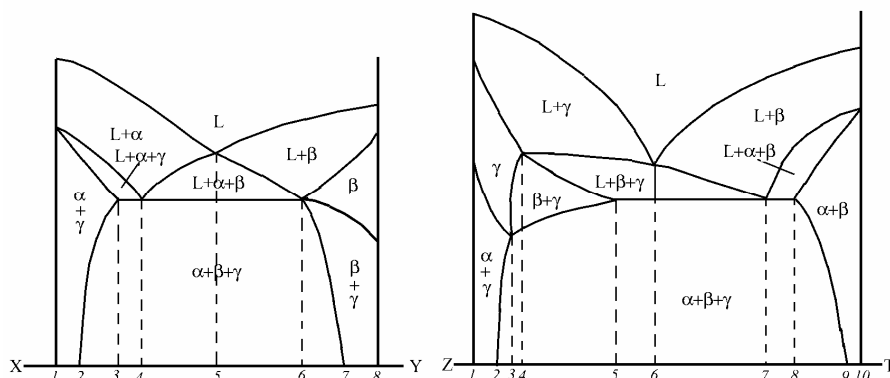
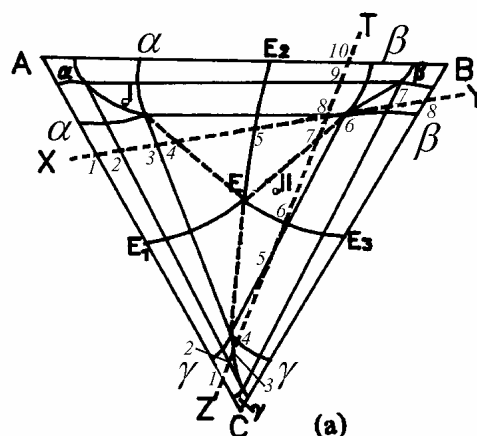
(2)说明其中 和 成分的合金的冷却过程的变化。

解：先分析图 3-78(a)。把在投影图上把截面线与各投影线的交点按顺序编号。

XY 截面投影线的 3-6 是截面与四相平衡平面交线的投影，它在截面图上是一段水平线，在这线上的 3-4 和 4-6 分别和 $L + \alpha + \gamma$ 以及 $L + \alpha + \beta$ 三相区连接，这两个三相区在四相平衡温度之上；3-6 和 $\alpha + \beta + \gamma$ 三相区连接，这个三相区在四相平衡温度之下；1-4 和 1-3 是截面与 $L + \alpha + \gamma$ 三相区两个面交线的投影，在截面是三相区的两条边界，并且这两条线在截面图的边界(它是二元系)是重合；4-5 和 5-6 是截面与 $L + \alpha + \beta$ 三相区两个面交线的投影，在截面上是三相区的两条边界，并且两线在液相线上重合；1-5 和 5-8 分别是截面与 α 和 β 相的液相面交线的投影，它们在截面上是 α 和 β 相的液相线；6-8 是截面与 α 和 β 两相平衡的共轭面的交线，在截面上是由单相 β 相区进入 $\beta + \gamma$ 两相区的线；2-3 和 6-7 是截面与 $\alpha + \beta + \gamma$ 三相区的两个面的交线的投影，在截面上是 $\alpha + \beta + \gamma$ 三相区的两条边界线。整个截面如下左图所示。

ZT 截面投影线的 5-8 是截面与四相平衡平面交线的投影，它在截面图上是一段水平线，在这线上的 5-7 和 7-8 分别和 $L + \beta + \gamma$ 以及 $L + \alpha + \beta$ 三相区连接，这两个三相区在四相平衡温度之上；5-8 和 $\alpha + \beta + \gamma$ 三相区连接，这个三相区在四相平衡温度之下；7-10 和 8-10 是截面与 $L + \alpha + \beta$ 三相区的两个面交线的投影，在截面上是三相区的两条边界，并且这两条线在截面图的边界(它是二元系)是重合；4-6 和 5-6 是截面与 $L + \beta + \gamma$ 三相区的两个面交线的投影，在截面上是三相区的两条边界，这两条线在 4 位置重合；1-6 和 6-10 分别是截面与 γ 和 β 相的液相面交线的投影，它们在截面上是 γ 和 β 相的液相线；1-4 是截面与 γ 相的固相面交线的投影，它们在截面上是 γ 相的固相线；1-3 是截面与 α 和 γ 两相平衡的 γ 相互溶解度面的交线的投影，在界面上是 γ 相溶解度线；3-4 是截面与 β 和 γ 两相平衡的 γ 相互溶解度面的交线的投影，在界面上是 γ 相溶解度线；

2-3、3-4 和 8-9 分别是截面与 $\alpha + \beta + \gamma$ 三相区的三个面交线的投影，在截面上是 $\alpha + \beta + \gamma$ 三相区的三条边界线。整个



界面图如上右图所示。

讨论图 3-78(a)中的 I 成分冷却过程的变化：从投影图看，它首先穿过 α 液相面，发生 $L \rightarrow \alpha$ 反应；然后穿过 α 固相面，进入 α 单相区；之后穿过 $\alpha+\beta$ 两相平衡面，进入 $\alpha+\beta$ 两相区；最后穿过 $\alpha+\beta+\gamma$ 三相平衡的一个面，进入 $\alpha+\beta+\gamma$ 三相区；结果在低温时是 $\alpha+\beta+\gamma$ 三相。讨论图 3-78(a)中的 II 成分冷却过程的变化：从投影图看，它首先穿过 β 液相面，发生 $L \rightarrow \beta$ 反应；然后穿过 $L+\beta+\gamma$ 三相平衡的一个面，发生 $L \rightarrow \beta+\gamma$ 共晶反应；之后到达四相面，发生 $L \rightarrow \alpha+\beta+\gamma$ 反应；最后 $\alpha+\beta+\gamma$ 三相区；结果在低温时是 $\alpha+\beta+\gamma$ 三相。

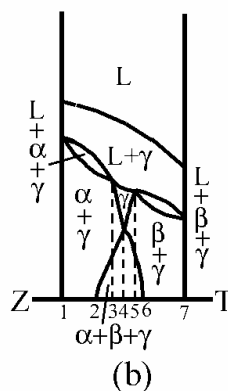
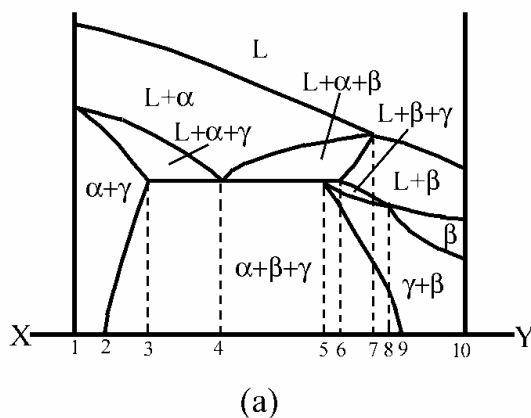
现分析图 3-78(b)。把在投影图上把截面线与各投影线的交点按顺序编号。

XY 截面投影线上的 1-7 是截面与四相平衡平面交线的投影，它在截面图上是一段水平线，在这线上的 3-4 和 4-6 分别和 $L+\alpha+\gamma$ 以及 $L+\alpha+\beta$ 三相区连接，这两个三相区在四相平衡温度之上；3-5 和 5-6 分别和 $\alpha+\beta+\gamma$ 以及 $L+\gamma+\beta$ 三相区连接，这两个三相区在四相平衡温度之下；1-4 和 1-3 是截面与 $L+\alpha+\gamma$ 三相区两个面交线的投影，在截面是三相区的两条边界，并且这两条线在截面图的边界(它是二元系)是重合；4-7 和 6-7 是截面与 $L+\beta+\gamma$ 三相区两个面交线的投影，在截面上是三相区的两条边界，并且两线在液相线上重合；1-7 和 7-10 分别是截面与 α 和 β 相的液相面交线的投影，它们在截面上是 α 和 β 相的液相线；2-3 和 5-9 是截面与 $\alpha+\beta+\gamma$ 三相区的两个面的交线的投影，在截面上是 $\alpha+\beta+\gamma$ 三相区的两条边线；5-8 和 6-8 是截面与 $L+\beta+\gamma$ 三相区的两个面的交线的投影，在截面上是 $\alpha+\beta+\gamma$ 三相区的两条边线，它们汇合在一点；9-10 是截面与 β 固相面以及 $\beta+\gamma$ 两相平衡面交线的投影，在截面上是 β 固相线和 $\beta+\gamma$ 两相区的界线。整个界面图如下图(a)所示。

ZT 截面投影线上的 1-7 是截面与 γ 相的液相面交线的投影，它们在截面上是 γ 相的液相线；1-3 是截面与 $L+\alpha+\gamma$ 三相区的两个面的交线的投影，在截面上是 $L+\alpha+\gamma$ 三相区的两条边线，它在截面边线上是闭合的；5-7 是截面与 $L+\beta+\gamma$ 三相区的两个面的交线的投影，在截面上是 $L+\beta+\gamma$ 三相区的两条边线，它在截面边线上是闭合的；3-5 是截面与 γ 的固相面交线的投影，在截面上是 γ 相的固相线；3-4 是截面与 $\alpha+\gamma$ 两相平衡面的交线的投影，在截面上是 $\alpha+\gamma$ 两相区的边线；4-5 是截面与 $\beta+\gamma$ 两相平衡面的交线的投影，在截面上是 $\beta+\gamma$ 两相区的边线；2-4 和 4-6 是截面与 $\alpha+\beta+\gamma$ 三相平衡的两个面交线的投影，在截面上是 $\alpha+\beta+\gamma$ 三相区的两条边线。整个截面如下图(b)所示。

讨论图 3-78

(b)中的 I 成分冷却过程的变化：从投影图看，它首先穿过 γ 液相面，发生 $L \rightarrow \gamma$ 反应；然后进入 $L+\alpha+\gamma$ 三



相区,发生 $L \rightarrow \alpha + \gamma$ 反应;之后到达四相平衡平面,发生 $L + \alpha \rightarrow \beta + \gamma$ 四相反应;四相反应后进入 $L + \beta + \gamma$ 三相区,发生 $L \rightarrow \beta + \gamma$ 反应;再进入 $\beta + \gamma$ 两相区,最后穿过三相平衡面进入 $\alpha + \beta + \gamma$ 三相区,结果在低温时是 $\alpha + \beta + \gamma$ 三相。

讨论图 3-78(b)中的 II 成分冷却过程的变化:从投影图看,它首先穿过 α 液相面,发生 $L \rightarrow \alpha$ 反应;再进入 $L + \alpha + \beta$ 三相区,发生 $L + \alpha \rightarrow \beta$ 反应;然后穿过三相平衡的另一个面,到达 $\alpha + \beta$ 两相区;之后穿过 $L + \beta + \gamma$ 三相区,发生 $L \rightarrow \beta + \gamma$ 反应;离开三相区进入 $\beta + \gamma$ 两相区;最后穿过 $\alpha + \beta + \gamma$ 三相平衡的一个面进入 $\alpha + \beta + \gamma$ 三相区,结果在低温时是 $\alpha + \beta + \gamma$ 三相。

11. 图 3-79 给出 V-Cr-C 三元系的液相面投影图。列出所有的四相反应的反应式。

解:根据液相线温度的走向,可以从投影图判别各四相反应的类型。

$\sim 1800^\circ\text{C}$ $L \rightarrow \alpha + \zeta + \text{石墨}$

$\sim 1750^\circ\text{C}$ $L + \alpha \rightarrow \varepsilon + \zeta$

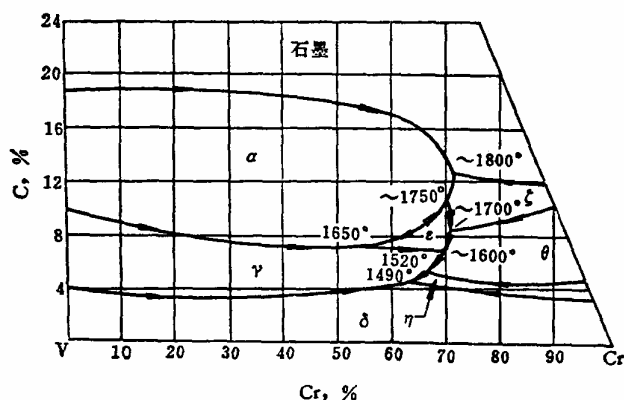
$\sim 1700^\circ\text{C}$ $L + \zeta \rightarrow \varepsilon + \theta$

1650°C $L + \alpha \rightarrow \varepsilon + \gamma$

1600°C $L + \varepsilon \rightarrow \gamma + \theta$

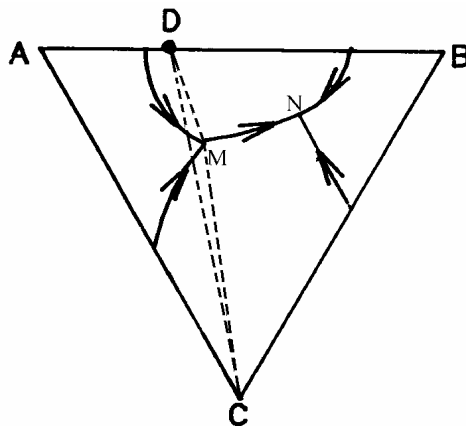
1520°C $L + \theta \rightarrow \gamma + \eta$

1490°C $L \rightarrow \gamma + \delta + \eta$



12. 图 3-80 给出 A-B-C 三元系液相面投影图, AB 系有一个稳定化合物 D, 设 A、B、C 和 D 都具有极小的溶解度。分析和写出所有的三相反应, 写出所有的四相反应。画出这个体系的投影图。

解: 因为 A、B、C 和 D 都具有极小的溶解度, 从给出的投影图可以判别各三相反应: 在 A-B 二元系, 有 $L \rightarrow A + D$ 和 $L \rightarrow B + D$ 两个三相反应; 在 A-C 二元系有 $L \rightarrow A + C$ 三相反应; 在 B-C 二元系有 $L \rightarrow B + C$ 三相反应。在 A-B-C 三元系中, 除了上述二元系的三相反应延伸如三元系外, 还有 $L \rightarrow D + C$ 三相反应。三元系中有两个四相反应: 在 M 点是 $L + A \rightarrow D + C$, 在 N 点是 $L \rightarrow B + D + C$ 。这个体系的投影图是原来液相面投影图上加上两个四相平面的投影, 把它一起画在题目给出的图中。其中 ADMC 是 $L + A + D + C$ 四相平面, BDC 是 $L + B + D + C$ 四相反应平面, 它所在的温度比 $L + A + D + C$ 四相平面的低, 如图所示。



13. 根据给出的 Pb-Cd-Bi 三元系的投影图 (图 3-81), 并已知在固态下 Bi 和 Cd 对其它组元都没有溶解度, E_T 温度为 93.3°C 。

(a) 写出 2 个四相反应的液相成分及四相反应式。

(b) 画出 $w(\text{Cd})=20\%$, $w(\text{Pb})=20\%$; $w(\text{Pb})=30\%$, $w(\text{Cd})=6\%$ 和 $w(\text{Pb})=10\%$, $w(\text{Bi})=40\%$ 等 3 个合金的冷却曲线, 在曲线转折点上标上温度, 并计算冷却后的组织相对量。

解: (a) 液相成分在 P_T 点, $w(\text{Cd})=10\%$, $w(\text{Pb})=50\%$, 温度约为 140°C 的四相反应是 $L + P_b \rightarrow \text{Cd} + \beta$; 液相成分在 E_T 点, $w(\text{Cd})=10\%$, $w(\text{Pb})=40\%$, 温度为 93.3°C 的四相反应是 $L \rightarrow \text{Bi} + \text{Cd} + \beta$ 。

(b) $w(\text{Cd})=20\%$, $w(\text{Pb})=20\%$ 的合金的成分点是图中的 M 点, 它落在 $L \rightarrow \text{Bi} + \text{Cd}$ 三相平衡的液相线上。从高温的液相冷却时, 在稍高于 120°C 到达 $L \rightarrow \text{Bi} + \text{Cd}$ 三相平衡的液相线, 发生 $L \rightarrow \text{Bi} + \text{Cd}$ 共晶反应, 冷却到四相平衡温度即 93.3°C 时发生 $L \rightarrow \text{Bi} + \text{Cd} + \beta$ 四相反应, 最终获得 $\text{Bi} + \text{Cd}$ 两相共晶及 $\text{Bi} + \text{Cd} + \beta$ 三相共晶组织。在发生四相共晶前的瞬间, 有 $\text{Bi} + \text{Cd}$ 两相共晶及成份为参相共晶成份(投影图上的 E_T 点)的液相。因 Bi 和 Cd 几乎没有溶解度, 所以 $\text{Bi} + \text{Cd}$ 两相共晶的成分必在 $\text{Bi}-\text{Cd}$ 二元成分线上, 故连 E_T 及 M 点的连线与 $\text{Bi}-\text{Cd}$ 二元成分线的焦点 M' 就是 $\text{Bi} + \text{Cd}$ 两相共晶的成分。根据杠杆定则知 $\text{Bi} + \text{Cd}$ 两相共晶组织的相对量 $A^{(\text{Bi}+\text{Cd})}\%$ 为

$$A^{(\text{Bi}+\text{Cd})}\% = \frac{\overline{E_T M}}{\overline{E_T M'}} \approx 50\%$$

$\text{Bi} + \text{Cd} + \beta$ 三相共晶组织的相对量 $A^{(\text{Bi}+\text{Cd}+\beta)}\%$ 为 $1 - A^{(\text{Bi}+\text{Cd})}\% = 50\%$ 。这个合金的冷却曲线如下图(a)所示。

成分为 $w(\text{Pb})=30\%$, $w(\text{Cd})=6\%$ 的合金在投影图上的成分点是 N 点; 它恰好处在投影图中的 $E_T-\text{Bi}$ 的连线上。从高温的液相冷却时, 在稍高于 140°C 和液相面相遇, 进入 $L + \text{Bi}$ 两相区, 然后冷却到四相平衡温度即 93.3°C 时发生 $L \rightarrow \text{Bi} + \text{Cd} + \beta$ 四相反应, 最终获得初生的 Bi 相和 $\text{Bi} + \text{Cd} + \beta$ 三相共晶组织。在发生四相共晶前的瞬间, 有 Bi 和液相, 液相的成分点是 E_T 点, 所以初生的 Bi 相的相对量 $A^{(\text{Bi})}\%$ 为

$$A^{(\text{Bi})}\% = \frac{\overline{E_T N}}{\overline{E_T Bi}} \approx 29.8\%$$

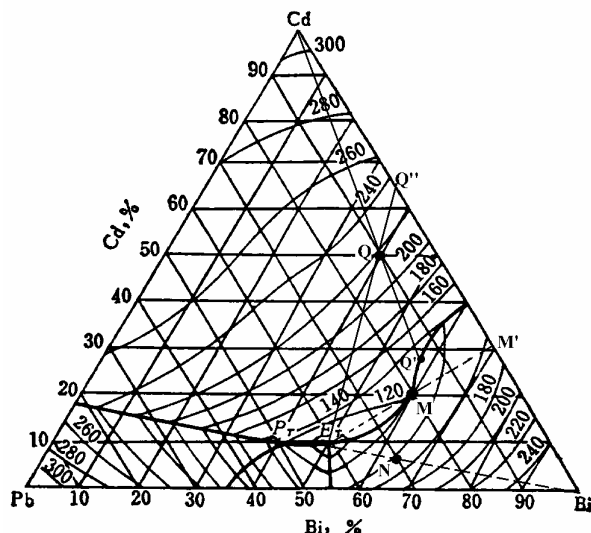
余下的液相全部转变为 $\text{Bi} + \text{Cd} + \beta$ 三相共晶, 故 $\text{Bi} + \text{Cd} + \beta$ 三相共晶的相对量 $A^{(\text{Bi}+\text{Cd}+\beta)} = 1 - A^{(\text{Bi})}\% = 1 - 29.8\% = 70.2\%$ 。这个合金的冷却曲线如下图(b)所示。

成分为 $w(\text{Pb})=10\%$, $w(\text{Bi})=40\%$ 合金的成分点是图中的 Q 点, 从高温的液相冷却时, 在稍低于 200°C 遇到 Cd 的液相面, 结晶出 Cd ; 由 Cd 与 Q 点连线延伸与液相线相交与 Q' 点, $\text{Cd}-Q'$ 线是 Q 成分合金进入的 $L + \text{Cd} + \text{Bi}$ 三相区的边线, 从液相线知这时的温度是在 $120^\circ \sim 140^\circ$ 之间, 开始发生 $L \rightarrow \text{Cd} + \text{Bi}$ 反应。因为其他两个组元对 Cd 没有溶解度, 所以初生的 Cd 相的相对量 $A^{(\text{Cd})}\%$ 为

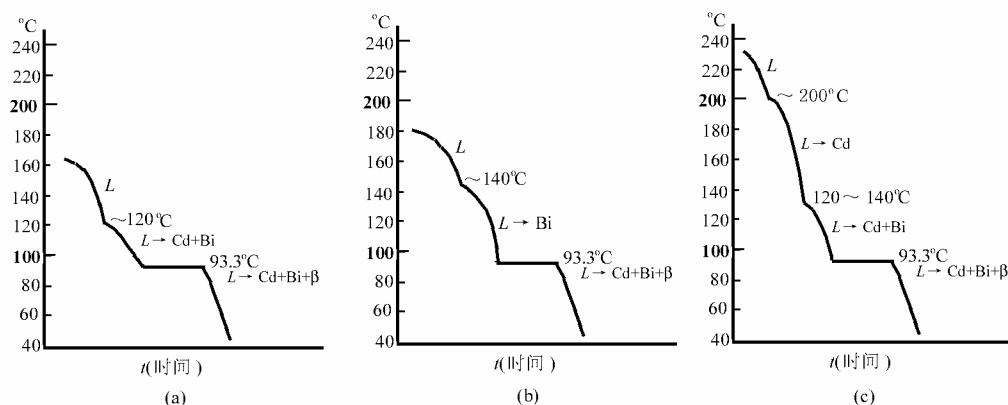
$$A^{(\text{Cd})}\% = \frac{\overline{QQ'}}{\overline{\text{Cd}Q'}} \approx 30.6\%$$

然后冷却到四相平衡温度即 93.3°C 时发生 $L \rightarrow \text{Bi} + \text{Cd} + \beta$ 四相反应, 最终获得初生的 Bi 相、 $\text{Cd} + \text{Bi}$ 两相共晶和 $\text{Bi} + \text{Cd} + \beta$ 三相共晶组织。 $\text{Bi} + \text{Cd} + \beta$ 三相共晶的成分是 E_T 点, 三相共晶前结晶的相只是 Cd 和 Bi 相, 所以三相共晶前结晶的组织整体成分一定 Cd 和 Bi 二元系的成分线上。连 E_T 和 Q 线并外延与 Cd 和 Bi 二元系的成分线相交于 Q'' 点, 可以知道 $\text{Bi} + \text{Cd} + \beta$ 三相共晶的相对量 $A^{(\text{Bi}+\text{Cd}+\beta)}\%$ 为

$$A^{(\text{Bi}+\text{Cd}+\beta)}\% = \frac{\overline{QQ''}}{\overline{E_T Q'}} \approx 37.5\%$$

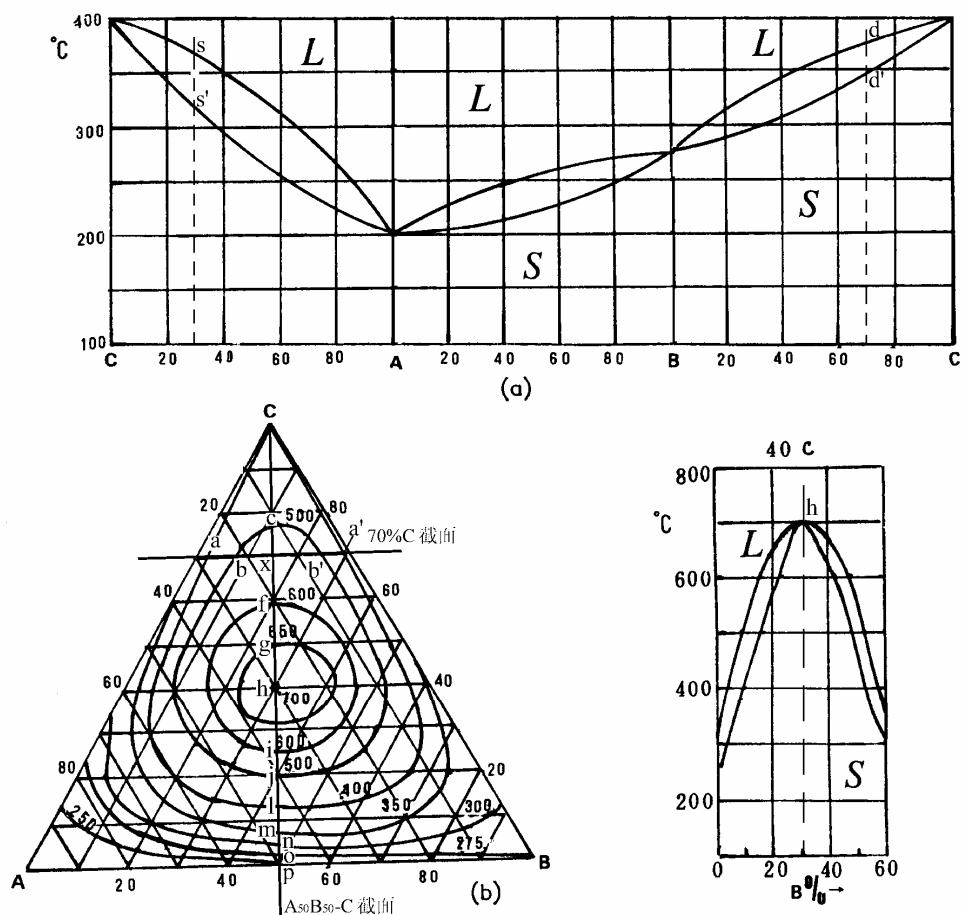


最后，Cd+Bi 两相共晶的相对量 $A^{(Cd+Bi)}\% = 1 - A^{(Cd)}\% - A^{(Bi+Cd+\beta)}\% = 1 - 30.6\% - 37.5\% = 31.9\%$ 。这个合金的冷却曲线如下图(c)所示。



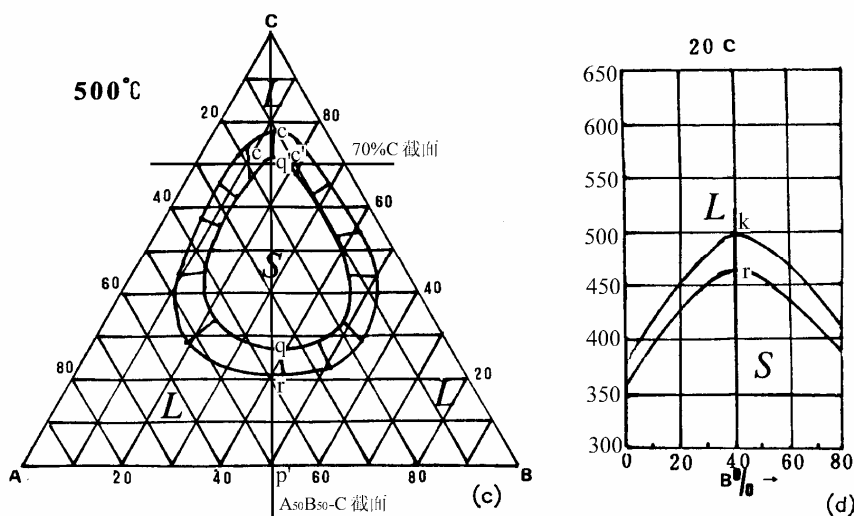
14.图 3-82 给出三元系 A-B-C 的一些资料：图 3-82(b)是液相面投影，图 3-82(c)是 500°C 恒温截面，图 3-82(d)是 40%C 和 20%C 恒元垂直截面。画出 70%C 的恒元垂直截面以及 $A_{50}B_{50}-C$ 的垂直截面。

解：(a)画出 70%C 的恒元垂直截面。



在给出所有的资料图中画出 70%C 的恒元垂直截面的交线。在液相面投影、500°C 恒温截面图、A-C 和 B-C 二元相图上各画出这些交线，如下图所示。在液相面等温线投影图上标出垂直截面的交线与 400°C 和 500°C 等温线的交点 a、a'和 b、b'，根据其对应的成分在截面上定出其位置；在 500°C 等温截面上标出垂直截面的交线与液相线和固相线的交点 b、

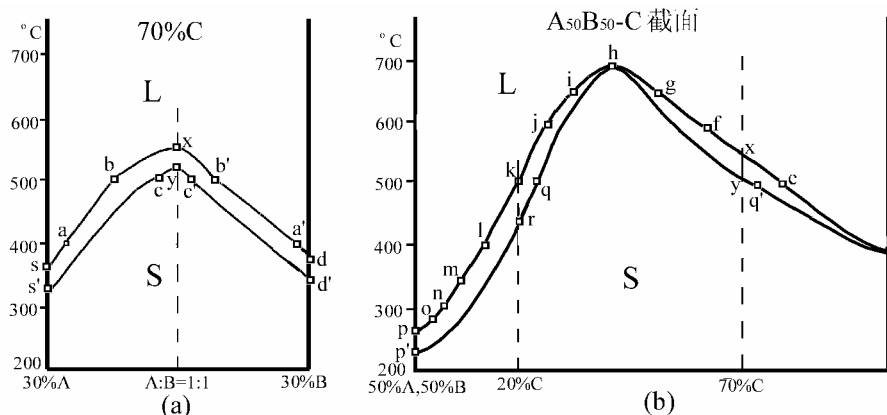
b'和 c、c'，其中 b、b'点是和液相线投影图重复的，根据其对应的成分在截面图上定出其位置；在截面图左侧是 A-C 二元系，A-C 在二元相图上读出 L+S 两相平衡温度 s、s'，在截面图右侧是 B-C 二元系，B-C 在二元相图上读出 L+S 两相平衡温度 d、d'，在截面图两



侧定出其位置。还可以根据(b)作出的截面图中相应 70%C 的成分得出另外两个参考点 x、y，也可供作截面图的资料。所得的截面图如下(a)图所示。

(b)画出 $A_{50}B_{50}-C$ 的垂直截面。

在给出所有的资料图中 $A_{50}B_{50}-C$ 的垂直截面的交线。在液相面投影、 500°C 恒温截面图、A-B 二元相图上各画出这些交线，如上图所示。在液相面等温线投影线图上标出垂直截面的交线与各等温线交点：e、f、g、h、I、j、k、l、m、n 和 o 点，根据其对应的成分和温度在截面图上定出其位置；在 500°C 等温截面上标出垂直截面的交线与液相线和固相线的交点 k、k' 和 q、q'，其中 k、k' 点是和液相线投影图重复的，根据其对应的成分在截面图上定出其位置；在截面图左侧是 A-B 二元系，在 A-B 二元相图上读出 L+S 两相平衡温度 p、p'，在截面图右侧 C 单元系，得出 C 的熔点温度，在截面图两侧定出其位置；在 20%C 恒元垂直截面上 $A_{50}B_{50}-C$ 的垂直截面线读出液相线和固相线交点 k 和 r(k 点也是重复的)，在截面图上的 A:B=1:1 的线上定出它的位置。所得的截面图如下(b)图所示。在这个截面图上的 70%C 的成分线与截面图上的液相线和固相线相交与 x 和 y 点，它也可供作 70%C 恒元截面图的点。



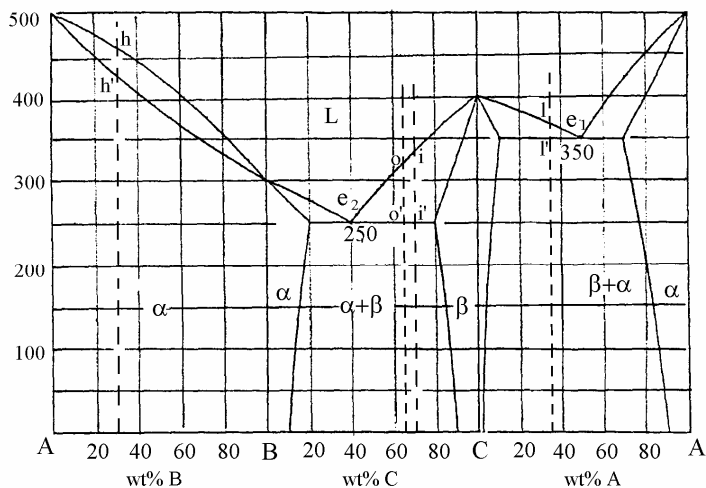
15.图 3-83 给出三元系 A-B-C 的一些资料：图 3-83(b)是液相面投影图，图 3-83(c)是三个温度的三相平衡区投影，其中虚线是室温截面图。画出 $w(B)=30\%$ 以及 $w(C)=65\%$ 的垂直截

面。

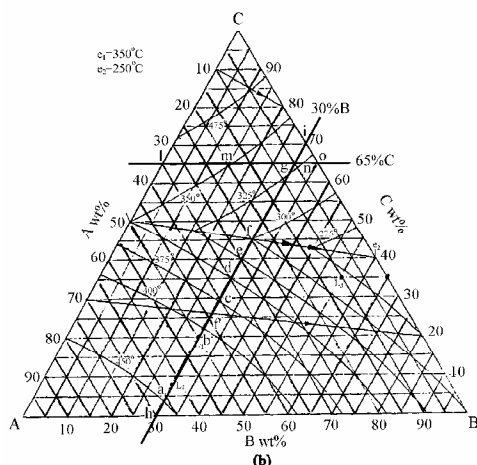
解：(a)画出 $w(B)=30\%$ 的垂直截面。

在给出所有的资料图中画出 $w(B)=30\%$ 的垂直截面的交线。在液相面投影图中标出垂直截面与等温线的交点： h 、 a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 g 和 i ，由三相区投影图确定 $30\%B$ 截面与三相平衡的液相温度 f 和 f' 点，再由 A-B 和 C-B 二元相图定出截面两端的液相线和固相线温度： h 、 h' 和 i 、 i' 。

根据 h 、 a 、 b 、 c 、 d 和 f 各点对应的成分和温度画出截面图的 α 液相线，根据 f 、 g 和 i 各点对应的成分和温度画出截面图的 β 液相线；根据 h 和 i 对应的成分和温度画出截面图的 α

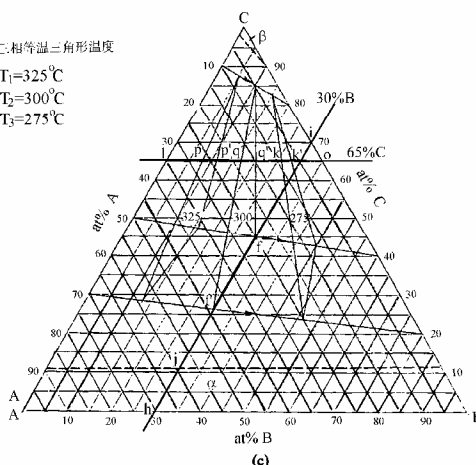


(a)



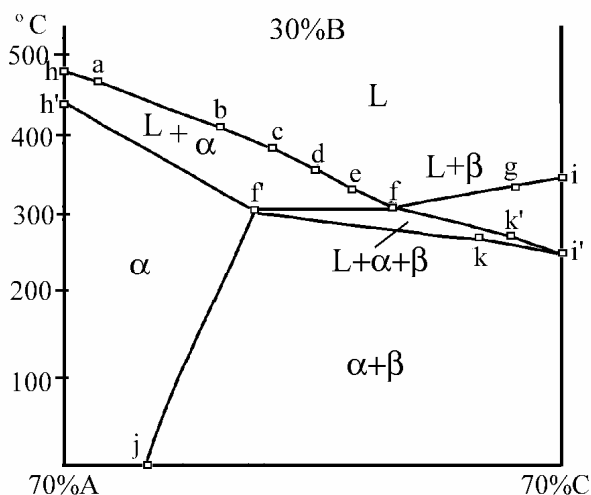
(b)

三相等温三角形温度
 $T_1=325^\circ\text{C}$
 $T_2=300^\circ\text{C}$
 $T_3=275^\circ\text{C}$

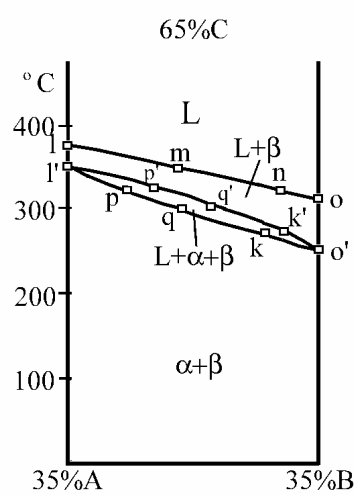


(c)

固相线；在三相区投影图中 $30\%B$ 截面的交线标出两个温度下的三相平衡的成分： f 、 f' 和 k 、 k' ，因 f 、 f' 与截面交线重合，所以在截面上是一条平行于底边的水平线，根据 k 、 k' 和 i 点的成分和位置画出截面图的三相区；在三相区投影图中 $30\%B$ 截面的交线标出与



(a)



(b)

室温截面线的交点 j，根据 f 和 j 点的成分和位置画出截面图中的 α 固溶度曲线。所得的截面图如上(a)图所示。

(b)画出 $w(C)=65\%$ 的垂直截面。

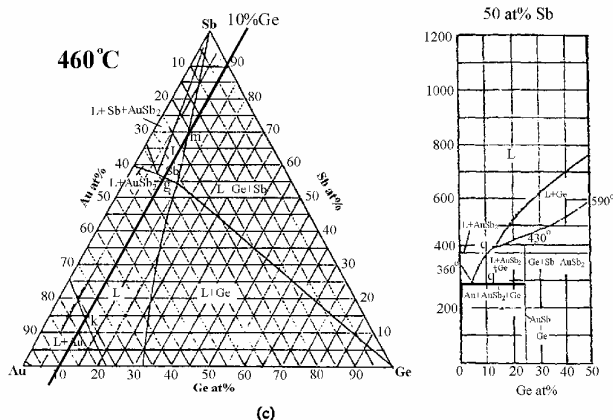
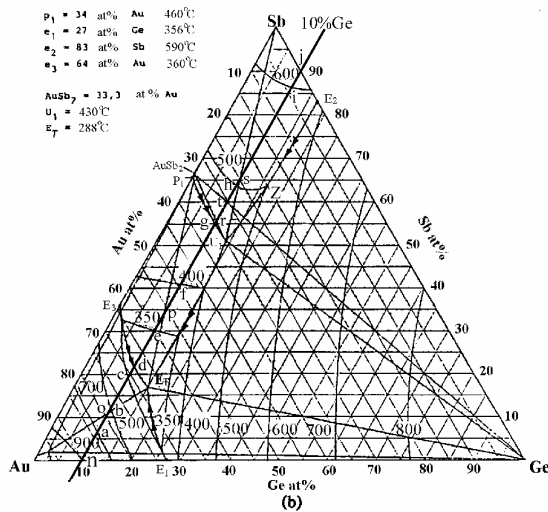
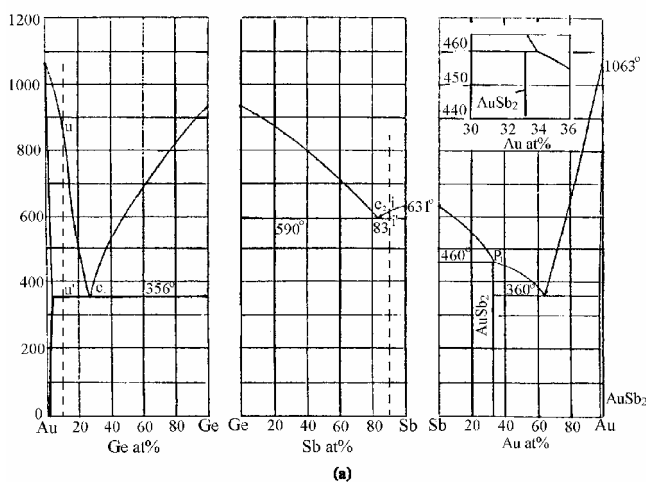
在给出所有的资料图中画出 $w(C)=65\%$ 的垂直截面的交线。在液相面投影图中标出垂直截面与等温线的交点：l、m、n 和 o 点，其中 l 和 o 点是从 A-C 和 B-C 二元相图中 65% C 的成分线获得，根据这些点的成分和位置画出截面上的液相线；在三相区投影图中 65% C 截面的交线标出三个温度下的三相平衡的成分：p 和 p'、q 和 q'以及 k 和 k'，根据它们的成分和温度在截面上画出三相区，这个三相区在截面两侧的 l'和 o'点，由 A-C 和 B-C 二元系的共晶温度确定。所得的截面图如上(b)图所示。

16.图 3-84 给出 Au-Sb-Ge 三元系的一些资料：图 3-84(b)是液相面投影图以及两个四相平衡投影，图 3-84(c)是 450 的恒温截面，作出 500°C 以及室温的恒温截面。作出 $x(\text{Ge})=10\%$ 的垂直截面。用表 3-4 的方式描述 Au-Sb-Ge 系发生的反应。

解：(a)画出 500°C 以及室温的恒温截面。

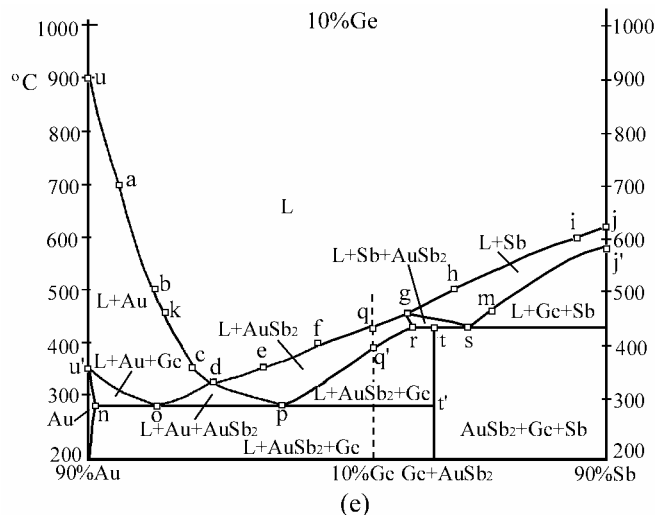
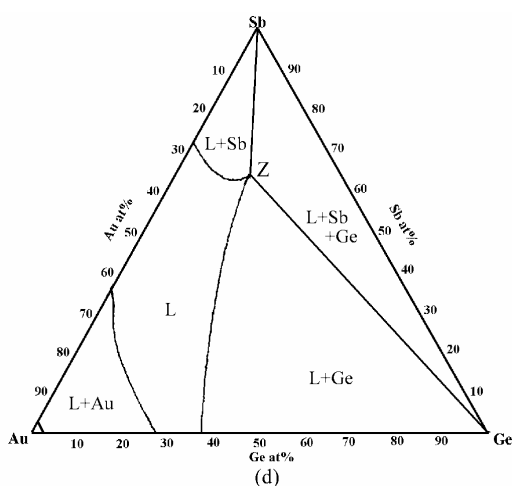
根据给出的液相面投影图以及两个四相平衡投影(图 b)，取其中液相面 500°C 的等温线，因 Sb 液相面与 Ge 液相面等温线的交点(图中的 Z 点)是 L+Sb+Ge 三相区的液相线，所以它是 500°C 的 L+Sb+Ge 三相平衡的液相成分。又因 Sb 和 Ge 都不具有溶解度，所以三相平衡的截面三角形是由 Z、Sb 和 Ge 三点构成。Au 有少许溶解度，在给出的资料中没有 500°C 下 Au 的溶解度资料，但参考 460°C 的恒温截面中 Au 的溶解度线，500°C 下 Au 的溶解度应略比它溶解度大一些，据此作出近似的溶解度线。所得截面图如图(d)所示。

关于室温的恒温截面，给出的液相面投影图以及两个四相平衡投影(图 b)知道，室温下只有 Au+Sb+Ge 三相平衡，Sb 和 Ge 都不具有溶解度，而 Au 只有很低的溶解度，所以室温的恒温截面基本上就是成分三角形，它是 Au+Sb+Ge 三相区。不再把截面画出。



(c)画出 $x(\text{Ge})=10\%$ 的垂直截面。

先画出 $x(\text{Ge})=10\%$ 的垂直截面与给出的所有资料中的交线。在垂直截面与液相面投影图以及两个四相平衡投影(图 b)的交线中, 标出交线与液相面等温线的交点: u、a、b、c、d、e、f、g、h、I 和 j 各点, 在 50%Sb 的恒温截面图中的 10%Ge 的线上得出液相线的 q 点以及进入 $\text{L}+\text{AuSb}_2+\text{Ge}$ 三相区的温度 q' 点, 根据液相面各点的成分和温度定出它们在截面上的位置, 得出截面上的液相线, 但 d 和 g 点从图 b 中只知道其成分位置, 而温度是由液相线其它部分外推得出的; 在图 b 的四相平衡面投影与所求垂直截面交线的交点得出 $\text{L}+\text{Sb}+\text{Au}+\text{Ge}$ 四相平面上的 n、o、p 和 t 点以及 $\text{L}+\text{Sb}+\text{Ge}+\text{AuSb}_2$ 四相平面的 r、t 和 s 点, 再由四相平面温度在截面图上画出两个四相平衡的水平线; 在 $\text{Au}-\text{Ge}$ 二元相图中定出 10%Ge 的液相线温度 u 及三相平衡温度 u', 在 $\text{Ge}-\text{Sb}$ 二元相图中定出 10%Ge 的液相线温度 i 及三相平衡温度 j; 因为 o-n 是 $\text{L}+\text{Au}+\text{Ge}$ 三相区与四相平面的交线, 所以连 u'-n 和 u'-o 得 $\text{L}+\text{Au}+\text{Ge}$ 三相区; o-p 是 $\text{L}+\text{Au}+\text{AuSb}_2$ 三相区与四相平面的交线, 所以连 d-o 和 d-p 得 $\text{L}+\text{Au}+\text{AuSb}_2$ 三相区; p-t' 是 $\text{L}+\text{Ge}+\text{AuSb}_2$ 三相区与四相平面的交线, 连同 q' 以及 $\text{L}+\text{Sb}+\text{Ge}+\text{AuSb}_2$ 四相平面的 r 点, 得 $\text{L}+\text{Ge}+\text{AuSb}_2$ 三相区的边界线; 在 $\text{L}+\text{Sb}+\text{Ge}+\text{AuSb}_2$ 四相平面的 r-s 线是 $\text{L}+\text{Sb}+\text{AuSb}_2$ 三相区与四相平面的交线, g 点是 $\text{L}+\text{Sb}+\text{AuSb}_2$ 三相区的液相点, 所以连 g-r 及 g-s 得出 $\text{L}+\text{Sb}+\text{AuSb}_2$ 三相区; 因为 Ge 和 AuSb_2 都不具有溶解度,



所以 $\text{Ge}+\text{AuSb}_2$ 两相区是由 Ge 和 AuSb_2 两个成分线连起来的一个垂直面, 在截面上就是 t-t' 的垂直线。所得截面图如图 e 所示。

(c) Au-Sb-Ge 系发生的反应及它们之间的关系如下表所示。

Au-Sb	Au-Sb-Ge	Au-Ge	Sb-Ge
$\text{L}+\text{Sb} \rightarrow \text{AuSb}_2$ (P ₁ 460°C)			$\text{L} \rightarrow \text{Sb}+\text{Ge}$ (e ₂ 590°C)
	$\text{L}+\text{Sb} \rightarrow \text{Ge}+\text{AuSb}_2$ (u ₁ 430°C)		
$\text{L} \rightarrow \text{AuSb}_2+\text{Au}$ (e ₃ 360°C)	$\text{L}+\text{AuSb}_2+\text{Ge}$	$\text{L} \rightarrow \text{Au}+\text{Ge}$ (e ₁ 356°C)	
	$\text{L} \rightarrow \text{Au}+\text{AuSb}_2+\text{Ge}$ (E ₁ 288°C)		
	$\text{Au}+\text{AuSb}_2+\text{Ge}$		
	$\text{AuSb}_2+\text{Sb}+\text{Ge}$		

17. 根据铁碳相图获得 $\gamma\text{-Fe}_3\text{C}$ 平衡时 $\gamma\text{-Fe}$ 的浓度和温度关系 (如下表), 求 Fe_3C 在 $\gamma\text{-Fe}$ 的溶解热。

温度/	727	780	820	860	900	940	980	1020	1060	1100	1140
w(C)/%	0.770	0.881	0.987	1.100	1.213	1.333	1.474	1.619	1.760	1.912	2.074

解: Fe_3C 在 $\gamma\text{-Fe}$ 的形成稀溶液, 故溶解度方程是

$$C = k \exp(-\Delta H/RT)$$

其中 ΔH 是溶解热, k 为常数。把上述方程两端取对数, 得

$$\ln C = \ln k - \Delta H / RT$$

把给出的数据换成 $\ln C$ 和 $1/T$ (开尔文温度 K) 对数形式:

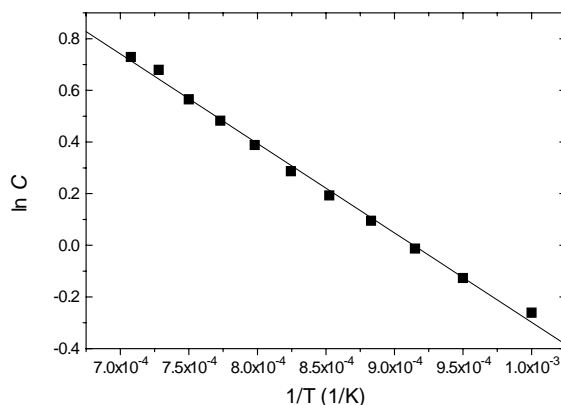
$1/T(1/K)$	1×10^{-3}	9.5×10^{-4}	9.15×10^{-4}	8.83×10^{-4}	8.525×10^{-4}	8.244×10^{-4}
$\ln C$	-0.261	-0.127	-0.013	0.095	0.193	0.287
$1/T(1/K)$	7.98×10^{-4}	7.73×10^{-4}	7.5×10^{-4}	7.28×10^{-4}	7.077×10^{-4}	
$\ln C$	0.388	0.482	0.565	0.679	0.729	

根据上表数据进行线性回归, 得

$$\ln C = 3.1637 - 3464.07 / T$$

即

$$\begin{aligned} \Delta H &= 3464.07R = 3464.07 \times 8.314 \text{ J/mol} \\ &= 28800 \text{ J/mol} \end{aligned}$$



18. 试证亚规则溶体模型中, A-B 二元系溶解度间隙的临界温度 T_c 及系数 P_1 、 P_0 间关系如下:

$$\frac{RT_c}{x_A x_B} = 6P_1 x_B - 2(P_1 - P_0) \quad \frac{RT_c}{x_A^2 N_B^2} = \frac{6P_1}{2x_B - 1}$$

解: 亚规则溶体模型的过剩自由能 $(G_m)^E = x_A x_B (P_0 + P_1 x_B)$, 用简单的近似方法, 以 $d^2 G_m / dx_B^2 = 0$ 所对应的温度是为溶解度间隙的临界温度 T_c 。因 G_m 中的线性项对 x_B 的二阶导数为 0, 所以只讨论其非线性项 ΔG_m , ΔG_m 为

$$\Delta G_m = RT(x_A \ln x_A + x_B \ln x_B) + (G_m)^E = \Delta(G_m)^I + (G_m)^E$$

上式对 x_B 取一阶导数, 得

$$\frac{d\Delta G_m}{dx_B} = RT[-\ln(1 - x_B) + \ln x_B] + P_0(1 - 2x_B) + P_1(2x_B - 3x_B^2)$$

对 x_B 再取一次阶导数, 得

$$\frac{d^2 \Delta G_m}{dx_B^2} = \left(\frac{1}{x_A} + \frac{1}{x_B}\right)RT - 6P_1 x_B + 2(P_1 - P_0)$$

上式等于 0, 得拐点方程

$$\frac{RT}{x_A x_B} = 6P_1 x_B - 2(P_1 - P_0)$$

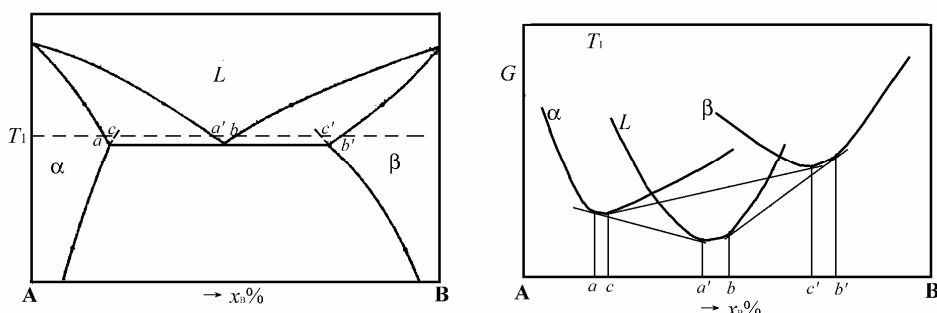
上式曲线的顶点温度就是临界温度 T_c 。因为假设曲线是关于成分对称的, 所以其顶点处的导数应为 0, 上式取导得

$$\frac{RT_C}{x_A^2 N_B^2} = \frac{6P_1}{2x_B - 1}$$

故亚规则溶体模型中，A-B 二元系溶解度间隙的临界温度 T_c 及系数 P_1 、 P_0 间关系如上式所示。

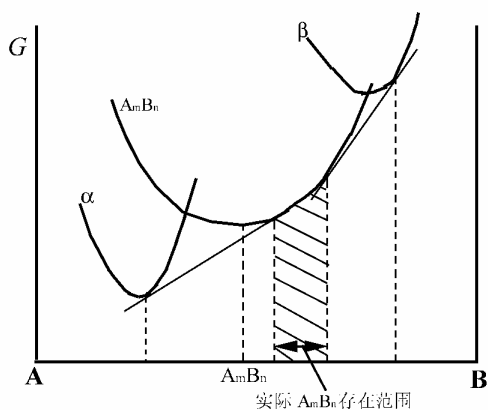
19. 用吉布斯自由能曲线以及切线方法证明二元相图两相平衡共轭线的“外延规则”。

解：用一个 A-B 二元含共晶反应的相图(见下左图)来说明。在 T_1 温度下， α 相、 β 相和 L 相的自由能—成分曲线如下右图所示。在下右图， L 相与 α 相自由能曲线的公切线切点成分为 a 和 a' 点，它和左边的相图相应的成分点对应； L 相与 β 相自由能曲线的公切线切点成分为 b 和 b' 点，它和左边的相图相应的成分点对应；如果存在 α 与 β 相的亚稳平衡，它们的平衡成分也应由 α 相与 β 相的自由能公切点确定，在下左图中可以看出， α 相与 β 相的自由能公切点成分 c 一定在 a 及 a' 成分点之间，成分点 c' 一定在 b 及 b' 成分点之间，而 c 和 c' 点成分应该处在 α 相与 β 相平衡共轭线的外延线上，这样就证明了两相平衡共轭线的外延一定处在两相区中。



20. 用吉布斯自由能曲线以及公切线方法说明某些中间相存在的成分范围有可能不包含其理想配比的成分。

解：如果中间相不是很稳定的化合物，在等温的自由能-成分曲线不是很尖锐，在相图上与它邻接的两个相的自由能-成分曲线如果处于某种适当的位置上时，这些相的自由能-成分曲线与所讨论的化合物的自由能-成分曲线作公切线时，产生的处在两个切点有可能在此化合物计量成分之外。右图就是这种情况的一个例子。图中表示 A-B 二元系在某一温度下各相自由能-成分曲线， A_nB_m 化合物不是很稳定，它的自由能-成分曲线不是很尖锐， α 相的自由能-成分曲线的位置比较低， β 相的自由能-成分曲线的位置比较高，这样使 α 相的自由能-成分曲线与 A_nB_m 自由能-成分曲线的公切线在 A_nB_m 自由能-成分曲线的切点在 A_nB_m 计量成分的外侧，结果 A_nB_m 计量成分落在 $\alpha+A_nB_m$ 两相区内，所以 A_nB_m 存在的成分范围不包含其理想配比的成分。



21. 证明两相平衡时在两相的相线出现最大（最小）共同点处 $dT/dx_B=0$

解：根据 Gibbs-Duhem 关系，对于液相和固相有如下关系：

$$S_m^l dT + x_A^l d\mu_A + x_B^l d\mu_B = 0$$

$$S_m^s dT + x_A^s d\mu_A + x_B^s d\mu_B = 0$$

上面两个式子相减，得

$$-(S_m^l - S_m^s) \frac{dT}{dx_B} = (x_A^l - x_A^s) \frac{d\mu_A}{dx_B} + (x_A^l - x_A^s) \frac{d\mu_B}{dx_B}$$

因 $(S_m^l - S_m^s) = \Delta H_f / T_f \neq 0$ ，其中 ΔH_f 和 T_f 分别是摩尔形成焓和平衡温度，而 $d\mu_A/dx_B$ 及 $d\mu_B/dx_B$ 不会趋于无穷大，故 $dT/dx_B = 0$ 。

22. 图 3-85 给出 Cd-Bi 二元相图，设 Cd-Bi 液相构成理想溶体。

(a) 求 Bi 和 Cd 的凝固潜热。

(b) 利用求得的凝固潜热资料，计算 Cd-Bi 相图，并和实际相图比较。

解：首先导出熔点温度与凝固热的关系。在平衡温度 T_f 下两相的摩尔熵变 ΔS_f 与摩尔焓变 ΔH_f 有如下关系： $\Delta S_f = \Delta H_f / T_f$ ，忽略了 ΔH_f 随温度的变化，则在 T 温度转变时的摩尔自由能变化 ΔG_f 为

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T \Delta S_f = \Delta H_f (1 - T / T_f)$$

凝固时，组元在液相和固相的化学势相等， $\mu_A^l = \mu_A^s$ 。化学势表达为

$$\mu_A^l = {}^*G_A^l + RT \ln a_A^l$$

$$\mu_A^s = {}^*G_A^s + RT \ln a_A^s$$

其中 ${}^*G_A^l$ 及 ${}^*G_A^s$ 分别是纯 A 是液相和固相的摩尔吉布斯自由能，代入 $\mu_A^l = \mu_A^s$ ，得

$${}^*G_A^s - {}^*G_A^l = RT \ln \frac{a_A^l}{a_A^s}$$

把摩尔焓变代入，得

$$\Delta H_f \left(\frac{T_A - T}{T_A} \right) = RT \ln \frac{a_A^l}{a_A^s}$$

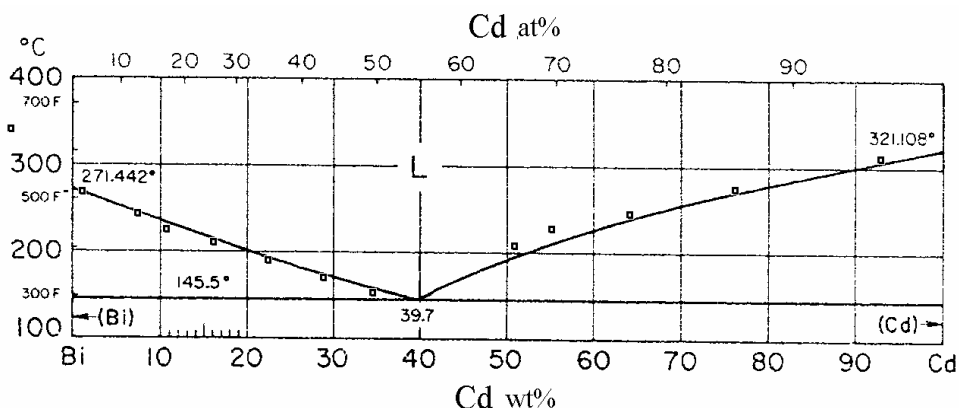
现在用理想溶体模型，活度等于摩尔浓度，上式变为

$$\Delta H_f \left(\frac{T_A - T}{T_A} \right) = RT \ln \frac{x_A^l}{x_A^s}$$

Bi 和 Cd 之间几乎没有互溶度，在液相和固相平衡时， x_A^s 可看作为 0，上式变成

$$\ln x_A^l = \frac{\Delta H_f}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_A} \right) = \frac{\Delta H_f}{RT_A} \frac{\Delta T}{T}$$

其中 $\Delta T = T_A - T$ 。



Bi 的熔点 T_{Bi} 为 544.4K，并从相图量得

x_{Bi}^l (%)	0.95	0.9	0.85	0.8
$\ln x_{Bi}^l$	-0.0513	-0.1054	-0.1625	-0.2231

$T(K)$	534.8	521.48	511.5	497.3
$\Delta T(K)$	9.6	22.92	32.9	47.1
$\Delta T/T$	1.795×10^{-2}	4.395×10^{-2}	6.432×10^{-2}	9.471×10^{-2}

对 $\ln x_{Bi}^l$ 及 $\Delta T/T$ 进行线性回归，得

$$\ln x_{Bi}^l = -2.28 \frac{\Delta T}{T}$$

即 $\Delta H = 2.28RT_{Bi} = 2.28 \times 8.314 \times 544.4 \text{ J/mol} = 10299 \text{ J/mol}$

同理，Cd 的熔点 T_{Cd} 为 594.1K，并从相图量得

$x_{Cd}^l (\%)$	0.95	0.9	0.85	0.8
$\ln x_{Cd}^l$	-0.0513	-0.1054	-0.1625	-0.2231
$T(K)$	572.0	556.6	542.0	529.5
$\Delta T(K)$	22.1	37.5	52.1	64.6
$\Delta T/T$	3.864×10^{-2}	6.737×10^{-2}	9.613×10^{-2}	1.220×10^{-1}

对 $\ln x_{Cd}^l$ 及 $\Delta T/T$ 进行线性回归，得

$$\ln x_{Cd}^l = -1.833 \frac{\Delta T}{T}$$

即 $\Delta H_{Cd} = 1.833RT_{Cd} = 1.833 \times 8.314 \times 594.1 \text{ J/mol} = 9053.8 \text{ J/mol}$

(b) 因为设 Cd-Bi 液相构成理想溶体，所以液相线方程很简单，没有必要编程计算。Bi 的液相线方程是

$$\ln x_{Bi}^l = -2.28 \frac{\Delta T}{T}$$

按上式计算得

$T(K)$	540	520	500	480	460	440	420
$\Delta T(K)$	4.4	24.4	44.4	64.4	84.4	104.4	124.4
x_{Bi}^l	0.982	0.896	0.817	0.736	0.658	0.583	0.508

Cd 的液相线方程是

$$\ln x_{Cd}^l = -1.833 \frac{\Delta T}{T}$$

按上式计算得

$T(K)$	580	550	520	500	480	460
$\Delta T(K)$	14.1	44.1	74.1	94.1	114.1	134.1
x_{Bi}^l	0.956	0.863	0.770	0.708	0.874	0.647

把计算画在原来相图中(见图中的 符号)，可以看出，用最简单的理想溶液模型，也得到较好的结果。

23. 设 A-B 二元合金系，无论液相或固相都形成理想溶体。纯 A 金属相变吉布斯自由能数 (单位： $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$)：

$\beta(\text{bcc})$ L	熔点	$T_A^\beta = 2900\text{K}$	$\Delta G_A^{\beta \rightarrow L} = 4186(5800 - 2.0T)$
$\epsilon(\text{hcp})$ L	熔点	$T_A^\epsilon = 1900\text{K}$	$\Delta G_A^{\epsilon \rightarrow L} = 4186(3800 - 2.0T)$
$\alpha(\text{fcc})$ L	熔点	$T_A^\alpha = 1530\text{K}$	$\Delta G_A^{\alpha \rightarrow L} = 4186(3300 - 2.15T)$

$\beta \rightarrow \varepsilon$		$\Delta G_A^{\beta \rightarrow \varepsilon} = 8372$
$\alpha \rightarrow \varepsilon$		$\Delta G_A^{\alpha \rightarrow \varepsilon} = 4186(-500 - 0.15T)$
$\alpha \rightarrow \beta$		$\Delta G_A^{\alpha \rightarrow \beta} = 4186(-2500 - 0.15T)$
纯 B 金属相变吉布斯自由能数据：		
$\beta \rightarrow L$	熔点 $T_B^\beta = 1420K$	$\Delta G_B^{\beta \rightarrow L} = 4186(3980 - 2.8T)$
$\varepsilon \rightarrow L$	熔点 $T_B^\varepsilon = 2550K$	$\Delta G_B^{\varepsilon \rightarrow L} = 4186(5100 - 2.0T)$
$\alpha \rightarrow L$	熔点 $T_B^\alpha = 1730K$	$\Delta G_B^{\alpha \rightarrow L} = 4186(4980 - 2.8T)$
$\beta \rightarrow \varepsilon$		$\Delta G_B^{\beta \rightarrow \varepsilon} = 4186(-1120 - 0.8T)$
$\alpha \rightarrow \varepsilon$		$\Delta G_B^{\alpha \rightarrow \varepsilon} = 4186(-120 - 0.8T)$
$\alpha \rightarrow \beta$		$\Delta G_A^{\alpha \rightarrow \beta} = 4186$

(a)作出涉及液相的 T_0-x_B 曲线图(即各相的熔点-成分线)。 T_0 的定义为：

$$\Delta G^{u_1 \rightarrow u_2} = (1-x_B)\Delta G_A^{u_1 \rightarrow u_2} + x_B\Delta G_B^{u_1 \rightarrow u_2} = 0$$

其中 u_1 和 u_2 代表任意两个相。

(b)计算并作出 (1500K 以上部分) 的 A-B 相图。

解：根据给出的 T_0 式子，先计算各相熔点温度 T 与成分的关系。

$$\beta \rightarrow L; \quad (1-x_B)(5800-2.0T) + x_B(3980-2.8T) = 0$$

$$\text{即} \quad x_B^{\beta \rightarrow L} = \frac{5800-2.0T}{1820+0.8T}$$

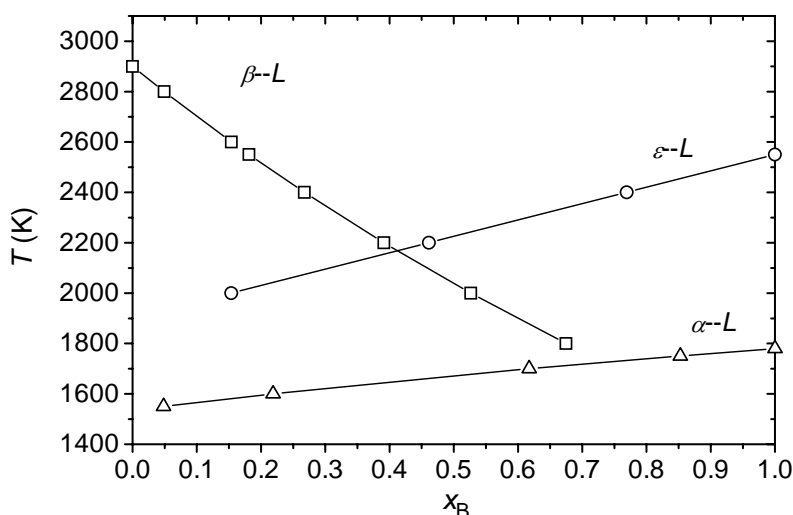
$$\varepsilon \rightarrow L; \quad (1-x_B)(3800-2.0T) + x_B(5100-2.0T) = 0$$

$$x_B^{\varepsilon \rightarrow L} = \frac{3800-2.0T}{-1300}$$

$$\alpha \rightarrow L; \quad (1-x_B)(3300-2.15T) + x_B(4980-2.8T) = 0$$

$$\text{即} \quad x_B^{\alpha \rightarrow L} = \frac{3300-2.15T}{-1680+0.65T}$$

根据上面式子画出熔点温度 T 与成分的关系，如下图所示。



(b)计算并作出 (1500K 以上部分) 的 A-B 相图。

从上面的计算和图形看出，靠近 A 边首先发生 $L \rightarrow \beta$ 转变，靠近 B 边首先发生 $L \rightarrow \varepsilon$ 转变。并且从数据看出，涉及 α 的相变温度都在 1500K 以下。所以在 1500K 以上的相图，只有 $L \leftrightarrow \beta$ 、 $L \leftrightarrow \varepsilon$ 和 $\varepsilon \leftrightarrow \beta$ 三个转变。

计算 $L \leftrightarrow \beta$ 的平衡线。设 x 为平衡的固相(β)成分， y 为平衡的液相成分，根据平衡时化学势相等，并且因液相或固相都形成理想溶液，得如下方程

$$F_A(x, y) = {}^*G_A^L - {}^*G_A^\beta + RT \ln \frac{1-y}{1-x} = 0$$

$$F_B(x, y) = {}^*G_B^L - {}^*G_B^\beta + RT \ln \frac{y}{x} = 0$$

把给出的数据代入：

$$F_A(x, y) = 24279 + 8.314T \ln \frac{1-y}{1-x} = 0$$

$$F_B(x, y) = 16325 + 8.314T \ln \frac{y}{x} = 0$$

用第三章附录给出的程序，计算所得结果如下：

$T(K)$	2850	2800	2750	2700	2650	2600
x_β	0.0168	0.0341	0.0521	0.0706	0.0897	0.1095
x_L	0.0339	0.0680	0.1024	0.1369	0.1717	0.2065
$T(K)$	2550	2500	2450	2400	2350	2300
x_β	0.1300	0.1513	0.1734	0.1963	0.2202	0.2451
x_L	0.2416	0.2768	0.3121	0.3475	0.3830	0.4185
$T(K)$	2250	2200	2150	2100	2050	2000
x_β	0.2711	0.2982	0.3266	0.3564	0.3877	0.4205
x_L	0.4540	0.4895	0.5249	0.5603	0.5955	0.6305

计算 $L \rightleftharpoons \varepsilon$ 的平衡线。设 x 为平衡的固相(ε)成分， y 为平衡的液相成分，把数据代入上面给出的化学势相等的方程，得

$$F_A(x, y) = 15906 + 8.314T \ln \frac{1-y}{1-x} = 0$$

$$F_B(x, y) = 21384 + 8.314T \ln \frac{y}{x} = 0$$

用第三章附录给出的程序，计算所得结果如下：

$T(K)$	2500	2450	2400	2350	2300	2250
x_ε	0.9320	0.8629	0.7927	0.7212	0.6484	0.5742
x_L	0.9135	0.8284	0.7446	0.6624	0.5816	0.5025
$T(K)$	2200	2150	2100	2050	2000	
x_ε	0.4983	0.4207	0.3413	0.2597	0.1758	
x_L	0.4250	0.3493	0.2754	0.2035	0.1335	

计算 $\beta \rightleftharpoons \varepsilon$ 的平衡线。设 x 为平衡的 β 相成分， y 为平衡的 ε 相成分，把数据代入上面给出的化学势相等的方程，得

$$F_A(x, y) = 8372 + 8.314T \ln \frac{1-y}{1-x} = 0$$

$$F_B(x, y) = -4688 - 8.314T \ln \frac{y}{x} = 0$$

用第三章附录给出的程序，计算所得结果如下：

$T(K)$	2350	2300	2250	2200	2150	2100
x_β	0.2795	0.2808	0.2820	0.2833	0.2844	0.2856
x_ε	0.5292	0.5344	0.5397	0.5451	0.5506	0.5562
$T(K)$	2050	2000	1950	1900	1850	1800

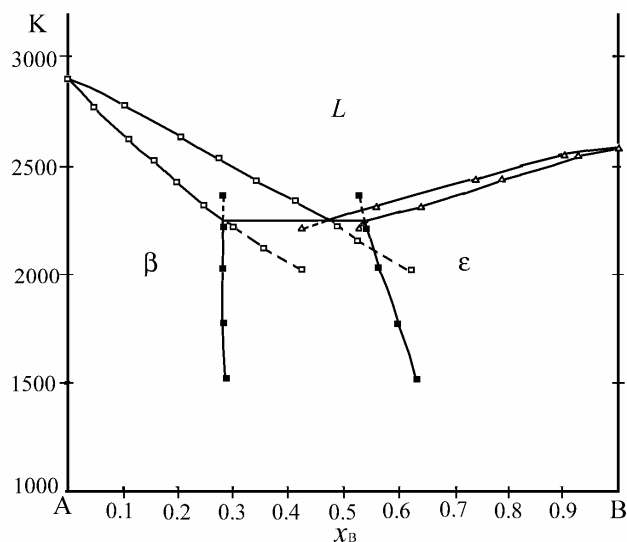
x_β	0.2867	0.2878	0.2888	0.2897	0.2906	0.2915
x_ε	0.5621	0.5680	0.5741	0.5804	0.5868	0.5935
$T(K)$	1750	1700	1650	1600	1550	1500
x_β	0.2922	0.2928	0.2934	0.2838	0.2941	0.2943
x_ε	0.6003	0.6073	0.6145	0.6200	0.6297	0.6377

根据计算得出的数据,画出相如右图所示,其中共晶温度约为 2250°C。

因为假设是理想溶体,也可以按如下办法作简单计算。设 A-B 二元系,有 $\nu_1 \leftrightarrow \nu_2$ 两相平衡,两相平衡时各组元在两相的化学势相等,因此得:

$$^*G_A^{\nu_1} - ^*G_A^{\nu_2} + RT \ln \frac{1-x_B^{\nu_1}}{1-x_B^{\nu_2}} = 0$$

$$^*G_B^{\nu_1} - ^*G_B^{\nu_2} + RT \ln \frac{x_B^{\nu_1}}{x_B^{\nu_2}} = 0$$



上两式整理得

$$\frac{1-x_B^{\nu_1}}{1-x_B^{\nu_2}} = \exp\left[-(^*G_A^{\nu_1} - ^*G_A^{\nu_2})/RT\right] = A_A^{\nu_1 \rightarrow \nu_2}$$

$$\frac{x_B^{\nu_1}}{x_B^{\nu_2}} = \exp\left[-(^*G_B^{\nu_1} - ^*G_B^{\nu_2})/RT\right] = A_B^{\nu_1 \rightarrow \nu_2}$$

解上述联立方程,得平衡成分与温度件的关系:

$$x_B^{\nu_1} = \frac{A_B^{\nu_1 \rightarrow \nu_2} (A_A^{\nu_1 \rightarrow \nu_2} - 1)}{A_A^{\nu_1 \rightarrow \nu_2} - A_B^{\nu_1 \rightarrow \nu_2}}$$

$$x_B^{\nu_2} = \frac{A_A^{\nu_1 \rightarrow \nu_2} - 1}{A_A^{\nu_1 \rightarrow \nu_2} - A_B^{\nu_1 \rightarrow \nu_2}}$$

用上式可以计算除两个平衡相的成分-温度曲线。

23. 设 A 和 B 的熔点分别为 1200K 和 800K,应用给出程序(见第三章附录),计算 $\alpha+L$ 两相平衡共轭线。

$\Omega^L=1$, $\Omega^S=2$, A 和 B 熔化熵均为 10J/(mol·K)

$\Omega^L=1$, $\Omega^S=2$, A 和 B 熔化熵均为 20J/(mol·K)

$\Omega^L=1$, $\Omega^S=2$, A 的熔化熵为 5, B 的熔化熵为 20J/(mol·K)

说明熔化熵对相线形状的影响。

解:把给出数据用第三章附录的程序计算, $\Omega^L=1$, $\Omega^S=2$, A 和 B 熔化熵均为 10J/(mol·K) 时两相平衡成分与温度间的关系:

$T(K)$	1200	1190	1170	1150	1130	1110	1090	1070	1050	1030	1010
x_B^S	0.000	0.020	0.062	0.103	0.146	0.189	0.233	0.277	0.322	0.369	0.416
x_B^L	0.000	0.030	0.090	0.149	0.207	0.264	0.320	0.375	0.429	0.482	0.534
$T(K)$	990	970	950	930	910	890	870	850	830	810	800
x_B^S	0.464	0.514	0.565	0.617	0.670	0.726	0.783	0.842	0.903	0.967	1.000

x_B^L	0.585	0.634	0.683	0.730	0.775	0.820	0.862	0.904	0.943	0.982	1.000
---------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

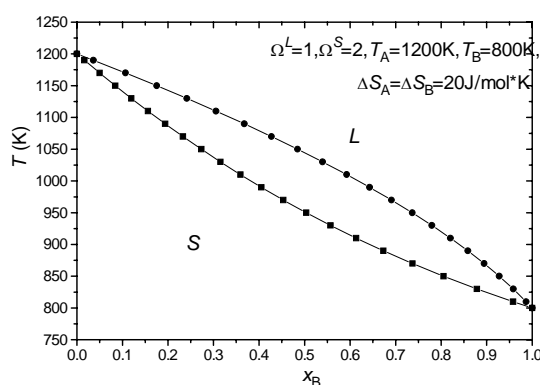
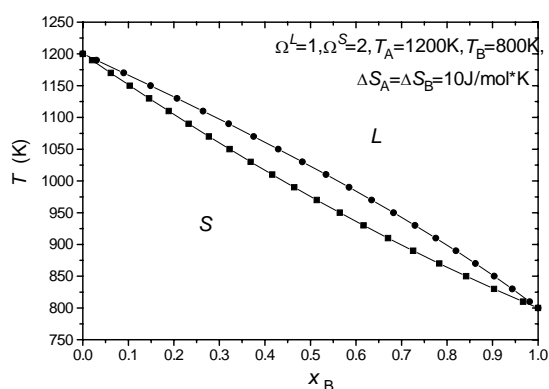
计算 $\Omega^L=1$, $\Omega^S=2$, A 和 B 熔化熵均为 20J/(mol·K)时两相平衡成分与温度间的关系：

$T(K)$	1200	1190	1170	1150	1130	1110	1090	1070	1050	1030	1010
x_B^S	0.000	0.016	0.050	0.084	0.120	0.156	0.194	0.233	0.273	0.315	0.359
x_B^L	0.000	0.036	0.107	0.175	0.242	0.306	0.368	0.427	0.485	0.540	0.592
$T(K)$	990	970	950	930	910	890	870	850	830	810	800
x_B^S	0.405	0.453	0.503	0.560	0.613	0.763	0.737	0.805	0.879	0.958	1.000
x_B^L	0.643	0.691	0.736	0.780	0.820	0.859	0.894	0.928	0.958	0.987	1.000

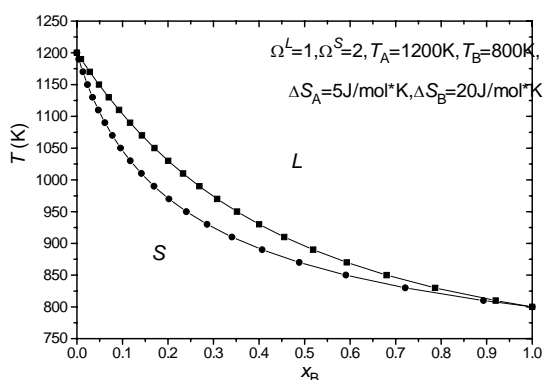
计算 $\Omega^L=1$, $\Omega^S=2$, A 的熔化熵为 5, B 的熔化熵为 20J/(mol·K)时两相平衡成分与温度间的关系：

$T(K)$	1200	1190	1170	1150	1130	1110	1090	1070	1050	1030	1010
x_B^S	0.000	0.004	0.013	0.023	0.035	0.047	0.062	0.078	0.096	0.117	0.141
x_B^L	0.000	0.009	0.028	0.049	0.070	0.093	0.117	0.143	0.171	0.201	0.233
$T(K)$	990	970	950	930	910	890	870	850	830	810	800
x_B^S	0.169	0.202	0.241	0.286	0.341	0.407	0.488	0.591	0.721	0.893	1.000
x_B^L	0.269	0.308	0.352	0.400	0.456	0.519	0.593	0.680	0.787	0.920	1.000

把上面的数据画出三个相图。如下所示。



比较下列三个相图，可以看出熔化熵对相图形状的影响。(b)图的 A 和 B 的熔化熵比(a)图的大，(b)图固液相区比(a)图的固液相区宽。(c)图中 A 的熔化熵比 B 的熔化熵小，靠近 B 段的液固相线间距比靠近 A 段的大，此时， $\Omega^L < \Omega^S$ 也起作用，使整个相区下凹。



第 4 章 扩散题解

1. 一块厚度为 d 的薄板, 在 T_1 温度下两侧的浓度分别为 w_1, w_0 ($w_1 > w_0$), 当扩散达到稳态后, 给出 扩散系数为常数, 扩散系数随浓度增加而增加, 扩散系数随浓度增加而减小等三种情况下浓度分布示意图。并求出 种情况板中部的浓度。

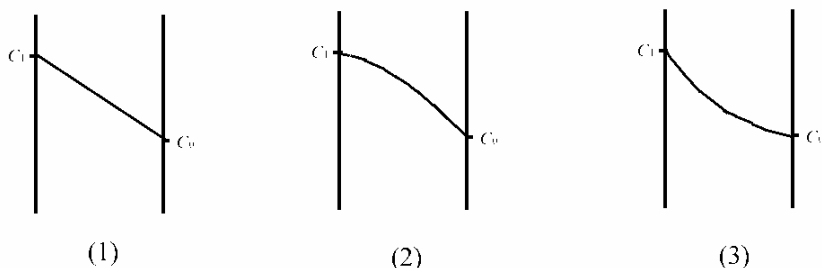
解: 一维扩散的稳态有 $D \frac{dC}{dx} = \text{常数}$

扩散系数为常数时, dC/dx 也应为常数, 故浓度分布是直线。

$$\text{其中部的浓度 } C = \frac{w_1 + w_0}{2}$$

扩散系数随浓度增加而增加时, dC/dx 应随浓度增加而减小, 浓度分布曲线是上凸的曲线。

扩散系数随浓度增加而减小时, dC/dx 应随浓度增加而增加, 浓度分布曲线是下凹的曲线。



2. 上题 $d=2\text{mm}$, $w_1=1.4\%$, $w_0=0.15\%$ 。在 T_1 温度下 w_1 和 w_0 浓度的扩散系数分别为 $D_{w1}=7.7 \times 10^{-11} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $D_{w0}=2.5 \times 10^{-11} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ 。问板的两侧表面的浓度梯度的比值为多大? 设 $w=0.8\%$ $\rho=60\text{kg/m}^3$, 问扩散流量为多少? (设扩散系数随浓度线性变化)

解: 两侧表面的浓度梯度的比值:

$$\text{因 } D_{w1} \frac{dC_1}{dx} = D_{w0} \frac{dC_0}{dx}, \text{ 故 } \frac{dC_1/dx}{dC_0/dx} = \frac{D_{w0}}{D_{w1}} = \frac{2.5}{7.7} = 0.325$$

因扩散系数随浓度线性变化, 设

$$D=a+bC$$

$$\text{因 } D_1 = a + bC_1 \quad D_0 = a + bC_0$$

$$\text{求得 } a = D_1 - \frac{D_1 - D_0}{C_1 - C_0} C_1 \quad b = \frac{D_1 - D_0}{C_1 - C_0}$$

$$\text{扩散流量 } J = -(a + bC) \frac{dC}{dx}$$

$$\text{上式积分得 } -Jx = aC + \frac{b}{2} C^2 + d$$

边界条件: $x=l$, $C=C_0$; 代入上式得:

$$J = -[a(C_1 - C_0) + \frac{b}{2}(C_1^2 - C_0^2)] \frac{1}{l}$$

把 a 和 b 代入得

$$J = -\{(D_1 - \frac{D_1 - D_0}{C_1 - C_0})(C_1 - C_0) + \frac{1}{2} \frac{D_1 - D_0}{C_1 - C_0} (C_1^2 - C_0^2)\} \frac{1}{l} = \frac{(D_1 - D_0)(C_1 - C_0)}{2l}$$

把重量百分数转化为体积浓度，因 $w=0.8\% \quad 60\text{kg/m}^3$

$$\text{故 } C_1 = \frac{1.4}{0.8} \times 60 = 105\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \quad C_0 = \frac{0.15}{0.8} \times 60 = 11.25\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$$

把浓度代入流量式子，最后得

$$J = \frac{(7.7 - 2.5)(105 - 11.25) \times 10^{-11}}{2 \times 10^{-3}} \text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1} = 2.44 \times 10^{-6} \text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$$

3. 根据图 4-5(b)和(c)给出的资料,计算 $x(\text{Ni})=0.4$ 以及 $x(\text{Ni})=0.6$ 两种合金在 900°C 时的互扩散系数。并和实测数据作比较。

解：从资料查得

x_{Ni}	φ	$D_{\text{Ni}^*}^{\text{Au-Ni}}$	$D_{\text{Au}^*}^{\text{Au-Ni}}$
0.4	0.4	8.8×10^{-14}	10^{-13}
0.6	0.24	2.45×10^{-14}	4.08×10^{-14}

把上列数据代入 $\tilde{D} = (x_A D_{B^*}^{\text{AB}} + x_B D_{A^*}^{\text{AB}}) \varphi$

$$\text{得 } \tilde{D}_{\text{Ni}=0.4} = 3.7 \times 10^{-14} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1} \quad \tilde{D}_{\text{Ni}=0.6} = 7.82 \times 10^{-15} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

和实测数据接近。

4. 一个封闭钢管，外径为 1.16cm，内径为 0.86cm，长度为 10cm。管内为渗碳气氛，管外为脱碳气氛。在 1000 保温 100h 后（达到平稳态扩散），共有 3.60g 碳逸出钢管。钢管的碳浓度分布如下所示：

r/cm	$w(\text{C})/\%$	r/cm	$w(\text{C})/\%$
0.553	0.28	0.491	1.09
0.540	0.46	0.479	1.20
0.527	0.65	0.466	1.32
0.516	0.82	0.449	1.42

计算各个浓度下的扩散系数，画出浓度-扩散系数曲线。

解：因稳态扩散，各处浓度不变，扩散 t 时刻后，扩散物质质量 Q 为：

$$Q = JAt$$

其中 $A = 2\pi rl$ 是长度为 l 的钢管在半径 r 处的圆管面积。故

$$J = \frac{Q}{2\pi rlt}$$

根据扩散定律

$$J = \frac{Q}{2\pi rlt} = -D \frac{dC}{dr}$$

把上式整理得

$$D = -\frac{Q}{2\pi rlt} \frac{dr}{dC}$$

根据 $w(\text{C})\% = 0.8 \approx 60\text{kg/m}^3$ ，把数据换成 r 与体积浓度 C

$r(\text{mm})$	$C \times 10^{-5} \text{kg/mm}^3$	$r(\text{mm})$	$C \times 10^{-5} \text{kg/mm}^3$
5.53	2.10	4.91	8.175
5.4	3.45	4.79	9.00
5.27	4.875	4.66	9.90
5.16	6.15	4.49	10.65

根据上表画图，如下图所示：

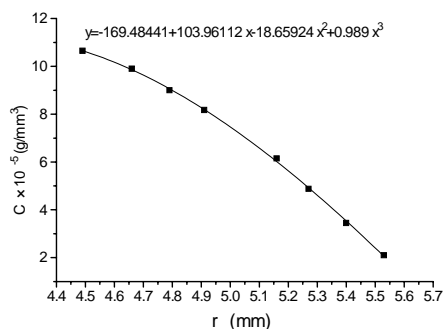
并拟合曲线方程：

$$C = -169.4844 + 103.96112r + 18.65924r^2 + 0.989r^3$$

$$\frac{dC}{dr} = 103.96112 - 37.31848r + 2.967r^2$$

$$D = -\frac{Q}{2\pi l t} \frac{1}{r} \frac{dr}{dC}$$

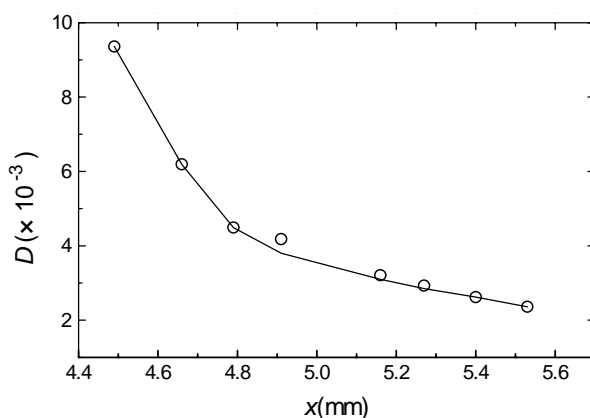
$$= -\frac{3.6}{2\pi \times 100 \times 3600} \frac{1}{r} \frac{dr}{dC} = -1.59 \frac{1}{r} \frac{dr}{dC}$$



计算各处的 D 如下：

r (mm)	dr/dC ($\times 10^3 \text{ mm}^4 \cdot \text{s}^{-1}$)	D ($\times 10^{-3} \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)	r (mm)	dr/dC ($\times 10^3 \text{ mm}^4 \cdot \text{s}^{-1}$)	D ($\times 10^{-3} \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)
5.53	-8.56	2.46	4.91	-12.91	4.18
5.40	-9.06	2.62	4.79	-14.88	4.94
5.27	-9.70	2.93	4.66	-18.14	6.19
5.16	-10.41	3.21	4.49	-26.43	9.36

扩散系数与距离的图示如下：



5. 一块厚钢板， $w(C)=0.1\%$ ，在 930 渗碳，表面碳浓度保持 $w(C)=1\%$ ，设扩散系数为常数， $D=0.738\exp[-158.98(\text{kJ/mol})/RT]$ ($\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)。问距表面 0.05cm 处碳浓度 $w(C)$ 升至 0.45% 所需要的时间。若在距表面 0.1cm 处获得同样的浓度 (0.45%) 所需时间又是多少？导出在扩散系数为常数时，在同一温度下渗入距离和时间关系的一般表达式。

解：先求出在 930 的扩散系数

$$D = 0.738\exp[-158.98(\text{kJ/mol})/RT] (\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$$

$$= 0.738\exp[-158.98/8.314 \times 1203] (\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}) = 9.22 \times 10^{-8} (\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$$

按题意，浓度分布符合误差函数解： $C = C_s - (C_s - C_0)\text{erf}(\frac{x}{2\sqrt{Dt}})$

$$C_s = 1 \quad C_0 = 0.1 \quad C = 0.45$$

$$\text{erf}(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}) = \frac{C_s - C}{C_s - C_0} = \frac{1 - 0.45}{1 - 0.1} = 0.611$$

查误差函数数值表，得

$$\frac{x}{2\sqrt{Dt}} = 0.61$$

$$x=0.05\text{cm},$$

$$t = \frac{x^2}{4D \times 0.61^2} = \frac{0.05^2}{4 \times 9.22 \times 10^{-8} \times 0.61^2} \text{s} = 1.822 \times 10^4 \text{s} = 5.061 \text{h}$$

因要求的渗入浓度与上面相同，故 $\text{erf}(\beta)=0.611$ ，即 β 为常数。在同一温度下，两个不同距离 x_1 和 x_2 所对应的时间 t_1 和 t_2 有如下关系：即

$$\frac{x_1}{\sqrt{Dt_1}} = \frac{x_2}{\sqrt{Dt_2}} \quad \text{即} \quad t_2 = \left(\frac{x_2}{x_1}\right)^2 t_1$$

故在距表面 0.1cm 处获得同样的浓度 (0.45%) 所需时间 t_2 为

$$t_2 = \left(\frac{0.1}{0.05}\right)^2 \times 1.822 \times 10^4 \text{s} = 7.288 \times 10^4 \text{s} = 20.24 \text{h}$$

根据 的解释，同一温度下渗入距离和时间关系的一般表达式为

$$x = k\sqrt{t} \quad \text{其中 } k \text{ 为某一常数。}$$

6. 上题，问要在什么温度下渗碳才能在上题求出距表面 0.05cm 处获得碳浓度 $w(\text{C})$ 为 0.45% 所需要的相同时间内使距表面 0.1cm 处获得 0.45% 的碳浓度？

解：因要求的渗入浓度与上面相同，故 $\text{erf}(\beta)=0.611$ ，即 β 为常数。即在相同时间内，两个不同温度 T_1 和 T_2 相对应的扩散系数 D_1 和 D_2 有如下关系

$$\frac{x_1}{\sqrt{D_1}} = \frac{x_2}{\sqrt{D_2}} \quad \text{即} \quad \frac{\exp(-Q/RT_2)}{\exp(-Q/RT_1)} = \left(\frac{x_2}{x_1}\right)^2$$

整理上式得

$$T_2 = \frac{T_1}{1 - 2T_1(R/Q)\ln(x_2/x_1)} = \frac{1203}{1 - 2 \times 1203 \times (8.314/158980)\ln 0.5} = 1318 \text{K}$$

7. 在纯铜圆柱体一个顶端电镀一层薄的放射性同位素铜。在高温退火 20h 后，对铜棒逐层剥层测量放射性强度 α (α 正比于浓度)，数据如下：

距顶端距离 x/cm	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
α (任意单位)	5012	3981	2512	1413	524.8

求铜的自扩散系数。

解：因放射性同位素强度 α 和浓度 C 成正比， $C=B\alpha$ ， B 为比例常数。根据高斯解有

$$B\alpha = \frac{M}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

上式取对数，得

$$\ln \alpha = \ln \frac{M}{\sqrt{\pi Dt}} - \frac{x^2}{4Dt}$$

把数据转换成 $\ln \alpha$ 和 x^2 ，得

$x^2 \times 10^{-2} = z$	0.01	0.04	0.09	0.16	0.25
$\ln \alpha = y$	8.52	8.29	7.83	7.25	6.26

用线性回归，方程 $y=a+bz$ 得

$$a=8.659 \quad b=-935.82$$

$$D = -\frac{1}{4bt} = \frac{1}{4 \times 935.82 \times 3600} \text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1} = 3.71 \times 10^{-9} \text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

8. α -Fe 薄板中含有一定量的氢，均匀分布。在 20 °C 下脱氢。设表面浓度为零，若薄板厚度为 10mm，问把全部氢的 90% 除掉要多长时间？氢在 α -Fe 中的扩散系数 $D_0=0.0011 \text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ， $Q=11.53 \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。除了用解析解外，设计一个程序，用计算机求解，对比所得结果。
解：这时浓度衰减过程，如果把原始浓度开拓为三角级数，可以利用三角级数解。

$$C = C_0 \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin \frac{n\pi x}{l}$$

式中 b_n 为

$$\begin{aligned} b_n &= \frac{1}{l} \int_0^l C_0 \sin \frac{n\pi x}{l} dx + \int_l^{2l} -C_0 \sin \frac{n\pi x}{l} dx \\ &= \frac{C_0}{l} \left\{ \left(-\frac{l}{n\pi} \cos n\pi + \frac{l}{n\pi} \right) + \left(\frac{l}{n\pi} \cos 2n\pi - \cos n\pi \right) \right\} \\ &= \frac{2C_0}{n\pi} [1 - \cos n\pi] \end{aligned}$$

$b_n = 4C_0/n\pi$ 其中 n 为奇数。

原始浓度可写为

$$C = \frac{4C_0}{\pi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{2j+1} \sin\left(\frac{2j+1}{l} \pi x\right)$$

扩散方程的解：

$$C = \frac{4C_0}{\pi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{2j+1} \sin\left(\frac{2j+1}{l} \pi x\right) \exp\left[-\left(\frac{2j+1}{l}\right)^2 Dt\right]$$

单位长度的板内在扩散前的物质量为 $C_0 l$ ，要求扩散后的物质量为 $C_0 l/10$ ，故

$$\begin{aligned} 0.1l &= \frac{4}{\pi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{2j+1} \left[\int_0^l \sin \frac{2j+1}{l} \pi x dx \right] \exp\left[-\left(\frac{2j+1}{l}\right)^2 Dt\right] \\ &= \frac{8l}{\pi^2} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(2j+1)^2} \exp\left[-\left(\frac{2j+1}{l}\right)^2 Dt\right] \end{aligned}$$

近似只取其主项，即 $j=0$ 项

$$\frac{0.1\pi^2}{8} = \exp\left[-\left(\frac{\pi}{l}\right)^2 Dt\right] \quad \text{即} \quad t = \frac{l^2}{D\pi^2} \ln \frac{0.1\pi^2}{8}$$

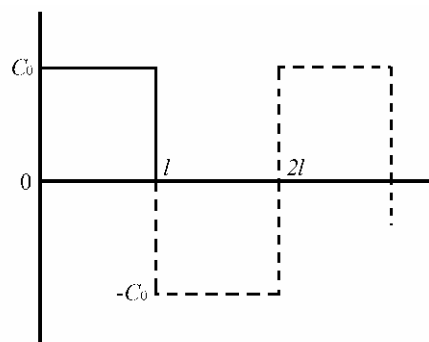
计算在 20°C 下氢的扩散系数

$$D = 0.0011 \exp\left(-\frac{11530}{8.314 \times 293}\right) = 9.678 \times 10^{-6} \text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

把各数据代入时间的方程，得

$$t = -\frac{0.1^2}{\pi^2 \times 9.678 \times 10^{-6}} \ln \frac{0.1\pi^2}{8} = 2.19 \times 10^4 \text{s} = 6.08 \text{h}$$

用计算机求解得 21906s



9. 设一钢板在 920 °C 分隔两种气氛，钢板的厚度为 10mm，原始碳含量 $w(\text{C})$ 为 0.1%，钢板一侧和气氛的平衡碳势为 0.9%，另一侧为 0.4%。求 20h 后钢板的浓度分布。问经历

多长时间钢板内的扩散达到平稳态?此时碳以多大的流量从钢板的一侧扩散到另一侧?

(用数值解。 $D=8.072 \times 10^{-8} \text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)

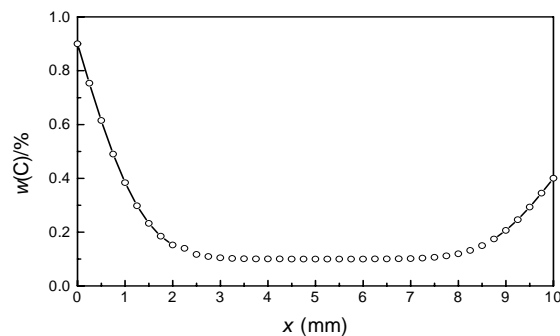
解：按教材给出的程序，设时间步长为 720s，距离步长为 0.25mm。

$$\text{则 } n=100, m=40 \quad T = \frac{Dt}{l^2} = \frac{8.07 \times 10^{-6} \times 72000}{10^2} = 5.8 \times 10^{-3}$$

$$R = T \frac{m^2}{n} = 5.8 \times 10^{-3} \frac{40^2}{100} = 9.29 \times 10^{-2} < 0.5$$

求解是稳定的。 $C_0=0.1$ 、 $C_r=0.9$ 、 $C_l=0.4$ 。 20h 后的浓度分布： $l=0$ $C=0.9$

l (mm)	$w(C)/\%$	l (mm)	$w(C)/\%$	l (mm)	$w(C)/\%$	l (mm)	$w(C)/\%$
0.25	0.7535262	2.75	0.1090982	5.25	0.1000061	7.75	0.1113975
0.5	0.6147078	3.00	0.1046513	5.50	0.1000127	8.00	0.1194679
0.75	0.4900116	3.25	0.1022729	5.75	0.1000312	8.25	0.1317958
1.00	0.3838322	3.50	0.1010618	6.00	0.1000761	8.50	0.1496764
1.25	0.2981085	3.75	0.1004743	6.25	0.1001779	8.75	0.1742907
1.50	0.2324704	4.00	0.1002027	6.50	0.1003982	9.00	0.2064371
1.75	0.1847887	4.25	0.1000892	6.75	0.1008524	9.25	0.2462544
2.00	0.1519143	4.50	0.1000326	7.00	0.1017443	9.50	0.2930154
2.25	0.1393032	4.75	0.1000127	7.25	0.1034119	9.75	0.3450723
2.50	0.1170093	5.00	0.1000060	7.50	0.1063785	10.0	0.4000000



扩散 506.6 小时达到平稳态。

10. 若以热扩散率 $a=\lambda/\rho c_p$ (其中 λ 是导热系数， ρ 是密度， c_p 是比恒压热容) 代替扩散方程的扩散系数，温度代替浓度，则可得到传热方程。钢的顶端淬火试样，如图所示。试样加热 915°C 后取出，在底端喷水冷却，水温维持 24°C ，设只从底面散热，冷却时钢的转变潜热可忽略，并设 λ 、 c_p 等不随温度而变。求冷却 5s 后以及 1min 后沿棒长的温度分布曲线 (描出距顶端 0, 0.2, 0.6, 1.0, 2.0, 4.0, 8.0cm 处的温度即可)，并求出各点在 725°C 时的冷却速度。 $a=0.127 \text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ 。

解：一维热传导方程为

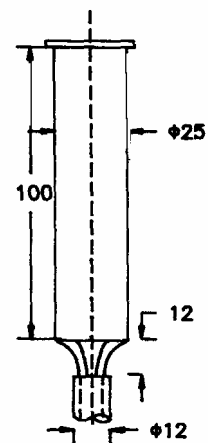
$$\frac{dT}{dt} = a \frac{d^2T}{dx^2}$$

现在的条件符合误差函数解，设解为

$$T = A + \text{Berf}(x/\sqrt{2at})$$

边界条件 $x=0$, $T=T_s=24^\circ\text{C}$; $x=\infty$, $T=915^\circ\text{C}$ 。得

$$A=24, B=915-24=891。 \quad \text{故解为}$$



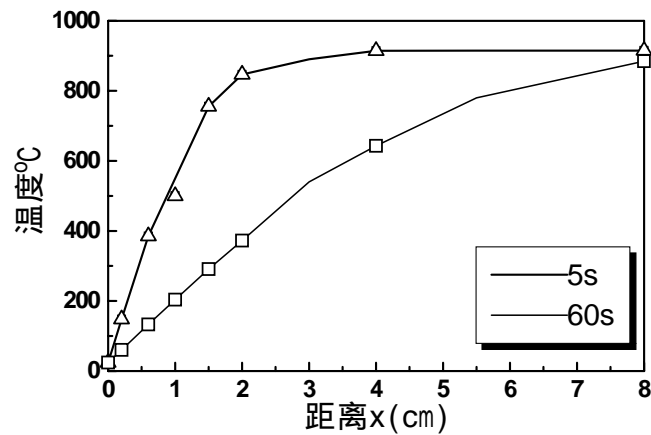
$$T = 24 + 891 \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right)$$

5s 后的温度分布

x cm	$x/2\sqrt{at}$	$\operatorname{erf}(\beta)$	T °C
0	0	0	24
0.2	0.125	0.1393	148.1
0.6	0.376	0.4051	384.0
1.0	0.627	0.6247	500.6
1.5	0.941	0.8209	755.4
2.0	1.255	0.9231	846.5
4.0	2.51	0.9992	914.3
8.0	5.02	0.9999	914.9

10s 后的温度分布

x cm	$x/2\sqrt{at}$	$\operatorname{erf}(\beta)$	T °C
0	0	0	24
0.2	0.036	0.0406	60.2
0.6	0.109	0.1225	133.0
1.0	0.181	0.2020	203.9
1.5	0.272	0.2995	291.0
2.0	0.362	0.3913	372.6
4.0	0.725	0.6948	643.0
8.0	1.449	0.9660	884.7



求各点在 725°C 的冷却速度

$$\begin{aligned} \frac{dT}{dt} &= 891 \frac{d}{dt} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right) \right] = 891 \frac{d}{dt} \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{x/2\sqrt{at}} e^{-\beta^2} d\beta \right] \\ &= 891 e^{-(x/2\sqrt{at})^2} \frac{d}{dt} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) = -891 \left[\frac{x}{t\sqrt{a\pi t}} \right] e^{-x^2/4at} \end{aligned}$$

把上式中的 t 换成 x 的函数，根据解，在 725°C 时

$$\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right) = \frac{725 - 24}{891} = 0.7868$$

查误差函数表，得

$$\frac{x}{2\sqrt{at}} = 0.88 \quad \text{即} \quad t = \frac{x^2}{4a(0.88)^2}$$

故在 725°C 时的冷却速度为

$$\left. \frac{dT}{dt} \right|_{725^\circ\text{C}} = -891 \frac{a(0.88)^3}{\sqrt{\pi x^2}} e^{-(0.88)^2} = -\frac{160.45}{x^2}$$

结果为

x (cm)	0	0.2	0.6	1.0	1.5	2.0	4.0	8.0
dT/dt (°C/s)	∞	4011.1	445.6	160	71.3	40.1	10.0	2.5

11. 在 $10^5\text{Pa}(1\text{atm})$ 25 °C 下，氢分子平均运动速度是 $13 \times 10^4 \text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$ ，运动的平均自由程是 $19 \times 10^{-6} \text{cm}$ ，计算氢分子的扩散系数。

解：平均速度 $\bar{v} = 13 \times 10^4 \text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$ ，平均自由程 $d = 19 \times 10^{-6} \text{cm}$

$$D = \frac{1}{6} \Gamma d^2 \quad \text{而} \quad \Gamma = \frac{\sqrt{v^2}}{d}$$

平均速度与均方根速度的关系为 $\bar{v}/\sqrt{v^2} = 0.921$ ，故

$$D = \frac{1}{6} \sqrt{v^2} d = \frac{13 \times 10^4 \times 19 \times 10^{-6}}{0.921} = 0.447 \text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

12. 在介质中放入一定量 M 的扩散物质，扩散物质近似为一个点，其体积可以忽略。扩散物质三维扩散，其扩散方程解为

$$C(r, t) = \frac{M}{8(\pi Dt)^{3/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{4Dt}\right)$$

给出在 $r \sim r+dr$ 球壳内发现扩散物质的几率；

给出 t 时刻扩散原子所走的平均距离 $\overline{r^2}$ ；

导出 $D = \Gamma d^2/6$ 。

解：

设几率密度为 p ，在 $r \sim r+dr$ 球壳内发现扩散物质的几率为

$$pdr = \frac{1}{M} 4\pi r^2 \frac{M}{8(\pi Dt)^{3/2}} e^{-r^2/4Dt} dr = \frac{r^2}{2\sqrt{\pi}(Dt)^{3/2}} e^{-r^2/4Dt} dr$$

根据平均值的定义，扩散原子所走的平均距离 $\overline{r^2}$ 为

$$\overline{r^2} = \int_0^\infty r^2 pdr = \int_0^\infty \frac{r^4}{2\sqrt{\pi}(Dt)^{3/2}} e^{-r^2/4Dt} dr = -\frac{4Dt}{2\sqrt{\pi}(Dt)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{r^3}{2} de^{-r^2/4Dt}$$

用分部积分

$$\overline{r^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \int_0^\infty e^{-r^2/4Dt} dr^3 = \frac{3}{\sqrt{\pi Dt}} \int_0^\infty r^2 e^{-r^2/4Dt} dr = -\frac{6\sqrt{Dt}}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty r de^{-r^2/4Dt}$$

再次用分部积分

$$\overline{r^2} = \frac{6\sqrt{Dt}}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-r^2/4Dt} dr = \frac{12Dt}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-r^2/4Dt} d\frac{r}{2\sqrt{Dt}} = 6Dt$$

这和无规行走导出的结论是一致的。

因 $\overline{r^2} = nd^2 = 6Dt$ ，而 $\Gamma = n/t$ ，所以

$$D = \frac{nd^2}{6t} = \frac{1}{6} \Gamma d^2$$

13. 在 α -Fe 固溶体中碳的平均振动频率为 10^{13} s^{-1} , α -Fe 的点阵常数 $a=2.904 \times 10^{-10} \text{ m}$, 根据表 4-5 资料, 求碳的扩散激活焓。

解: 查表得 $D_0=0.0081 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, 因 $D_0 = \frac{1}{6} d^2 Z \nu \exp\left(\frac{\Delta S_m}{R}\right)$, 碳处在 α -Fe 的八面体间隙, 每次跳动的距离 $d=a/2$, $a=2.904 \times 10^{-10} \text{ m}$ 是点阵常数。间隙的配位数 $Z=4$ 。

$$\Delta S_m = R \ln \frac{6D_0}{d^2 Z \nu} = 8.314 \frac{6 \times 0.0081}{(2.904 \times 10^{-8})^2 \times 4 \times 10^{13}} = 14.56 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$$

14. 在纯金属中若存在空位浓度梯度时会引起空位扩散流, 证明空位扩散系数 D_v 和自扩散系数 D_s 有如下关系: $D_v/D_s=(f_0 x_v)^{-1}$ 。其中 x_v 是空位的原子浓度。

解:

空位的配位数与原子的配位数相同, 跳动的距离 d 也相同, 并且相关系数 $f_0 \approx 1$ 。

$$D_s = \frac{1}{6} d^2 Z f_0 x_v \nu \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)$$

$$D_v = \frac{1}{6} d^2 Z (1 - x_v) \nu \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)$$

故
$$\frac{D_v}{D_s} = \frac{1 - x_v}{f_0 x_v} \approx \frac{1}{f_0 x_v}$$

15. 银的体积扩散系数 $D_1 = 7.2 \times 10^{-5} \exp\left(-\frac{190 \text{ kJ/mol}}{RT}\right) \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$; 晶界扩散系数

$D_b = 1.4 \times 10^{-5} \exp\left(-\frac{90 \text{ kJ/mol}}{RT}\right) \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$; 一个多晶体, 晶粒尺寸为 $2 \times 10^{-5} \text{ m}$, 晶界厚度为

$5 \times 10^{-10} \text{ m}$, 求 527°C 、 727°C 及 927°C 的有效扩散系数, 在哪个温度下晶界扩散的贡献可以忽略?

解: 表观扩散系数 $D_{\text{app}} = f D_b + (1 - f) D_1$, 其中 f 是缺陷 (晶界) 所占的分数。

设晶粒是立方体, 边长为 d , 与晶粒直径相当。立方体 6 个面为近邻的立方体共享, 故在一个立方体只有 3 个 $d^2 \delta$ 晶界, 所以

$$f \approx \frac{3d^2 \delta}{d^3} \approx \frac{3\delta}{d} = 7.5 \times 10^{-5}$$

$$\frac{D_{\text{app}}}{D_1} = f \frac{D_b}{D_1} + (1 - f) \approx f \frac{D_b}{D_1} + 1$$

计算结果如下:

温度 K	$D_1 \text{ (m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	$D_b \text{ (m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	$D_{\text{app}} \text{ (m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	D_{app}/D_1
800	2.82×10^{-17}	1.86×10^{-11}	1.42×10^{-15}	50.47
1000	8.5×10^{-15}	2.78×10^{-10}	2.94×10^{-14}	3.44
1200	3.86×10^{-13}	1.69×10^{-9}	5.13×10^{-13}	1.33

从数据看出, 在 1200K 时 D_{app} 和 D_b 的差别已很小, 晶界扩散的特殊贡献可忽略。

16. 图 4-26 中单晶体银在 500°C 时自扩散系数的实测值比高温外推所得值高约 2 个数量级, 可能的原因是什么? 设位错线每个原子面“包含”约 10 个原子, 沿位错线的扩散系数

$$D_d = 0.1 \exp\left(-\frac{82 \text{ kJ/mol}}{RT}\right) \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}, \text{ 估计晶体的位错密度 } \rho \text{ (cm/cm}^3\text{)}。$$

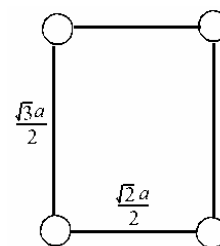
解：是由缺陷引起的，单晶体中的缺陷没有晶界，只有位错。按题意

$$\frac{D_{\text{app}}}{D_1} = f \frac{D_d}{D_1} + 1 \approx f \frac{D_d}{D_1} = 10^2$$

$$\text{故 } f = 10^2 \frac{D_1}{D_d} = \frac{7.2 \times 10^{-5} \exp(-190000/R \times 773)}{0.1 \times 10^{-4} \exp(-82000/R \times 773)} 10^2 = 3.62 \times 10^{-5}$$

位错露头在 $\{112\}$ 面，在 $\{112\}$ 面每个原子占的面积为 $(a\sqrt{3}/2) \times (a\sqrt{2}/2) = a^2\sqrt{6}/4$ ，故每个位错露头占的面积为 $10a^2\sqrt{6}/4$ ，故位错密度为

$$\rho = \frac{4f}{10a^2\sqrt{6}} = \frac{4 \times 3.62 \times 10^{-5}}{10a^2\sqrt{6}} = 5.92 \times 10^{-6}/a^2$$



17. 图 4-36 是 A-B 二元系在温度 T_1 时的摩尔自由能-成分（摩尔分数）图。设一块 B 浓度为 x_1 的 α 相和浓度为 x_2 的 β 相焊合在一起，问在这个温度下 A 和 B 原子迁移的方向是什么？指出到达两相平衡时两相的浓度。若原来 α 相厚度为 l_1 ， β 相厚度为 l_2 ，当整块合金达到平衡后，在成分-自由能图上表示系统的自由能降低量？两相界面距原来焊合面多远？（设 A 和 B 的相对原子质量分别为 A_A 和 A_B ，忽略 A 和 B 的摩尔体积的差异）。

解：从化学势看，A 从 x_1 一侧向 x_2 一侧扩散，B 从 x_2 一侧向 x_1 一侧扩散。平衡后，两相成分分别为 x^α 和 x^β 。

把各换成体积浓度，以 C 表示，下标的意义相同。

平衡后，设界面向 l_1 一侧移动了 Δz ，根据物质守恒应有

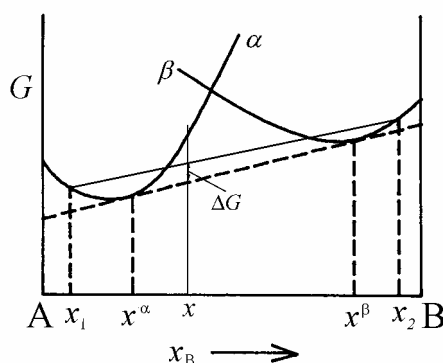
$$C^\alpha(l_1 - \Delta z) + C^\beta(l_2 + \Delta z) = C_1 l_1 + C_2 l_2$$

$$\text{即 } \Delta z = \frac{l_1(C_1 - C^\alpha) + l_2(C_2 - C^\beta)}{C^\alpha - C^\beta}$$

系统的平均成分 C （体积浓度）为

$$C = \frac{C_1 l_1 + C_2 l_2}{l_1 + l_2} \quad \text{相应换算成原子浓度为 } x_0$$

平衡后系统降低的能量 ΔG 如图上表示。



18. A-B 二元系如图 4-37 所示，A 和 B 组成扩散偶，在 T_1 温度保温，当 α 和 β 界面达到平衡后，求界面的推移速度。设扩散系数和成分无关，在 T_1 温度 B 原子在两相的扩散系数分别为 $D_B^\alpha = 7.4 \times 10^{-13} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ， $D_B^\beta = 2.0 \times 10^{-13} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ 。

解：按题意，在扩散偶界面两侧是平衡成分，保持不变，因此，两侧可看作是半无限大扩散偶，两侧扩散方程的解均为：

$$C = A + B \operatorname{erf}(x/2\sqrt{Dt})$$

浓度梯度为

$$\frac{dC}{dx} = B \frac{d}{dx} \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{x/2\sqrt{Dt}} e^{-\beta^2} d\beta \right]$$

$$= \frac{B}{\sqrt{\pi Dt}} e^{-x^2/4Dt}$$

在 α 一侧, 边界条件为

$$x=0, \quad C^\alpha = C^{\alpha/\beta} = 24.7;$$

$$x=-\infty, \quad C^\alpha = 0$$

得 $A=24.7, \quad B=24.7$ 。

把 A 和 B 代回浓度分布式子, 得

$$C^\alpha = 24.7 \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right)$$

在 β 一侧, 边界条件为

$$x=0, \quad C^\beta = C^{\beta/\alpha} = 80.4; \quad x=\infty, \quad C^\beta = 1. \quad \text{得} \quad A=80.4, \quad B=19.6$$

把 A 和 B 代回浓度分布式子, 得

$$C^\beta = 80.4 + 19.6 \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right)$$

界面向 β 侧推移速度 v 为

$$v = \frac{D_\beta (dC^\beta/dx)_{x=0} - D_\alpha (dC^\alpha/dx)_{x=0}}{(C^{\beta/\alpha} - C^{\alpha/\beta})}$$

在界面上 α 和 β 相的浓度梯度分别为

$$\left. \frac{dC^\alpha}{dx} \right|_{x=0} = \frac{24.7}{\sqrt{\pi D_\alpha t}} \quad \left. \frac{dC^\beta}{dx} \right|_{x=0} = \frac{19.6}{\sqrt{\pi D_\beta t}}$$

代入速度式子, 得

$$v = \frac{19.6\sqrt{D_\beta} - 24.7\sqrt{D_\alpha}}{\sqrt{\pi}(80.4 - 24.7)} = \frac{19.6\sqrt{2 \times 10^{-13}} - 24.7\sqrt{7.4 \times 10^{-13}}}{\sqrt{\pi}(80.4 - 24.7)} = \frac{1.26 \times 10^{-7}}{\sqrt{t}} \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$$

19. 用以下资料画出 $\ln D - 1/T$ 的曲线图, 假设所有误差集中在 D 上, 用最小二乘法求 D_0 和 Q 。

$D/\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	10^{-8}	10^{-9}	10^{-10}	10^{-11}
T/K	1350	1100	950	800

解: 先把数据换成 $\ln D$ 和 $1/T$

$\ln(D/\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	-18.421	-20.723	-23.026	-25.026
$1/T$	7.407×10^{-4}	9.09×10^{-4}	1.053×10^{-3}	1.25×10^{-3}

画图并作线性回归

得

$$\ln D = -8.315 - 13721.55 \frac{1}{T}$$

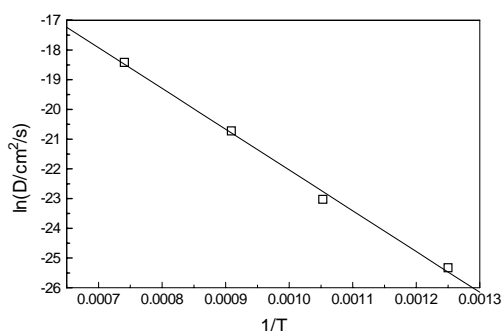
相关系数 $r=0.9982$ 。根据回归式子得

$$\ln D_0 = -8.315$$

$$D_0 = e^{-8.315} = 2.45 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

$$Q = R \times 13721.55 = 8.314 \times 13721.55$$

$$= 114.08 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$



第5章 凝固题解

1. 估计 1cm^3 的铜在熔点温度含 10 个原子和 60 个原子的原子团数目。液态下铜原子体积为 $1.6 \times 10^{-29} \text{m}^3$, σ_{SL} 为 $0.177 \text{J} \cdot \text{m}^{-2}$, $T_m = 1356 \text{K}$ 。

解：根据 $n_i = n \exp\left(\frac{-\Delta G_i}{kT}\right)$

先求 10 个原子及 60 个原子集团的能量 ΔG_i 。原子集团的体积 $V = N \times \Omega$, N 是原子数, Ω 是原子体积。设集团是球状, 半径为 r 。则

$$r = \left(\frac{3N\Omega}{4\pi}\right)^{1/3}$$

集团的表面积 $A = 4\pi r^2 = 4\pi \left(\frac{3N\Omega}{4\pi}\right)^{2/3}$

在熔点产生 10 个原子及 60 个原子集团的能量变化为

$$\Delta G_{10} = A_{10}\gamma = 4\pi \frac{(3N\Omega)^{2/3}}{(4\pi)^{2/3}} \gamma = 4\pi \left(\frac{3 \times 10 \times 1.6 \times 10^{-29}}{4\pi}\right)^{2/3} \times 0.177 = 25.2 \times 10^{-20} \text{J}$$

$$\Delta G_{60} = A_{60}\gamma = 4\pi \frac{(3N\Omega)^{2/3}}{(4\pi)^{2/3}} \gamma = 4\pi \left(\frac{3 \times 60 \times 1.6 \times 10^{-29}}{4\pi}\right)^{2/3} \times 0.177 = 83.3 \times 10^{-20} \text{J}$$

每 cm^3 有 Cu 的原子数 $n = \frac{1}{\Omega} = \frac{1}{1.6 \times 10^{-23}} = 6.25 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$

在 1cm^3 中 10 个原子及 60 个原子集团数

$$n_{10} = n \exp\left(\frac{-\Delta G_{10}}{kT}\right) = 6.25 \times 10^{22} \exp\left(-\frac{25.2 \times 10^{-20}}{1.38 \times 10^{-23} \times 1356}\right) = 8.85 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$$

$$n_{60} = n \exp\left(\frac{-\Delta G_{60}}{kT}\right) = 6.25 \times 10^{22} \exp\left(-\frac{83.3 \times 10^{-20}}{1.38 \times 10^{-23} \times 1356}\right) = 2905 \text{cm}^{-3}$$

2. 镍的平衡熔点为 1728K , 固相的 $V_s = 6.6 \text{cm}^3/\text{mol}$, 液/固相界面能 $\gamma = 2.25 \times 10^{-5} \text{J} \cdot \text{cm}^{-2}$, 如球形粒子半径是 1cm 、 $1\mu\text{m}$ 、 $0.01\mu\text{m}$ 时, 熔点各降低多少? 设 $\Delta H = 18066 \text{J/mol}$ 。

解：熔点与曲率半径的关系为 $T = T_m - \frac{2\kappa V_s \gamma T_m}{\Delta H_m}$

现讨论的是球体, 曲率半径就是球体半径 r 。把各不同半径数据代入得

$$r_{1\text{cm}} = 1728 - \frac{2 \times 1 \times 6.6 \times 2.25 \times 10^{-5} \times 1728}{18066} \approx 1728 \text{K}$$

$$r_{1\mu\text{m}} = 1728 - \frac{2 \times 10^4 \times 6.6 \times 2.25 \times 10^{-5} \times 1728}{18066} \approx 1727.71 \text{K}$$

$$r_{0.01\mu\text{m}} = 1728 - \frac{2 \times 10^6 \times 6.6 \times 2.25 \times 10^{-5} \times 1728}{18066} \approx 1699.5 \text{K}$$

3. 镍在获得过冷度为平衡熔点(K)的 0.18 倍时均匀形核, 问在大气压下的平衡熔点温度下能均匀形核所要求的压力多大? 凝固的体积变化为 $\Delta V = -0.26 \text{cm}^3/\text{mol}$ 。

解：题给出 $\Delta T = 0.18 \times 1728 = 311 \text{K}$

因 $\frac{dT}{dp} = -\frac{T_m \Delta V}{\Delta H_m}$, 故 $\Delta p = -\frac{\Delta H_m \Delta T}{T_m \Delta V}$

把数据代入。得

$$\Delta p = \frac{18066 \times 311}{1728 \times 0.26 \times 10^{-6}} \text{ Pa} = 1.25 \times 10^{10} \text{ Pa}$$

4. 为什么 r_{\max} 会随过冷度 ΔT 而变?

解：由 i 个原子组成的原子团的概率为 $\exp(-\Delta G_i/kT)$ ，随着原子团尺寸的增加，出现该尺寸原子团的概率会急剧降低。从仪器可观察到的角度看，每个温度都存在一个原子团尺寸，大于这个尺寸的原子团实际存在概率已小到难以观察到，这个尺寸定义为 r_{\max} 。如果定义原子团出现的某一概率的尺寸为 r_{\max} ，即定义 $n_i = \exp(-\Delta G_i/kT)$ 等于某一常数时对应的原子团尺寸为 r_{\max} 。当温度降低（即过冷度加大）到某一温度时， $\Delta G_i/kT$ 的分子和分母都减小，但是 ΔG_i 减小得更激烈，所以 $\Delta G_i/kT$ 的总体是减小的，结果使 n_i 增大。在保持 n_i 一定时，可以适当地提高 ΔG_i 的值，即 r_{\max} 可以增大，故 r_{\max} 随温度降低而增加。

5. 证明无论对非均匀形核和均匀形核下式均成立： $\Delta G^* = \frac{1}{2} V^* |\Delta G_v|$

解：不论均匀形核或非均匀形核的临界核心形成 ΔG^* 都等于 $1/3$ 临界核心的总表面能，故

$$\Delta G^* = V^* \Delta G_v + \text{临界核心的总表面能} = V^* + 3\Delta G^*, \text{ 所以}$$

$$\Delta G^* = -\frac{1}{2} V^* \Delta G_v$$

6. 讨论铸模壁的裂缝在表面的张角在非均匀形核中的作用。裂缝在表面张口宽度如何影响非均匀形核?

解：看一个半角为 α 的圆锥形裂缝，如图所示， θ 晶体与模壁件的浸润角。晶核的形状由 α 和 θ 决定。根据上题的解可知，在给定过冷度下，均匀形核与非均匀形核的临界核心形成功之比等于临界核心体积之比：

$$B = \frac{\Delta G_{\text{inh}}^*}{\Delta G_h^*} = \frac{V_{\text{inh}}^*}{V_h^*}$$

从图可以看出，形状因子 B 随 α 减小而减小。在 $\alpha=90^\circ-\theta$ 时得到平直的固/液界面，即 $r \rightarrow \infty$ ，对应非常小的（可忽略的）核心体积，所以 $B \rightarrow 0$ ，此时没有形核势垒。一旦核心形成后核心可以一直长大直至到达圆锥裂缝的棱边。进一步向液相中长大则要求固/液界面半径能越过其最小半径（圆锥的最大半径 R ）。这时晶体的曲率半径 r 与 R 相同，与曲率半径为 R 所对应的过冷 ΔT 为

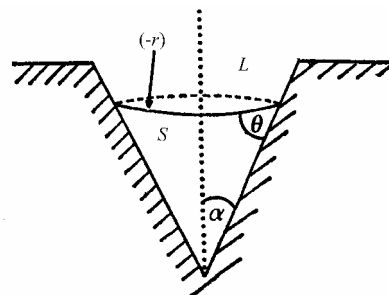
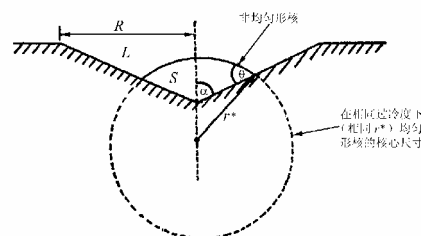
$$R = \frac{2\gamma T_m}{\Delta H_m \Delta T} \quad \text{即要求过冷为}$$

$$\Delta T = \frac{4\gamma T_m}{\Delta H_m D \sin \theta}$$

裂缝张口越大，进一步长大要求的过冷越小。

要求的过冷度为

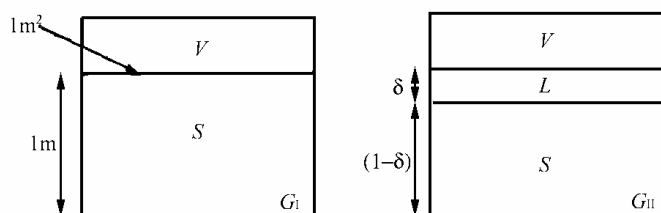
当 $\alpha \leq 90^\circ - \theta$ 时，固/液界面维持负的曲率，它在熔点以上保持稳定。



7. 金的 $T_m=1336\text{K}$, $\gamma_{SL}=0.132$, $\gamma_{LV}=1.128$, $\gamma_{SV}=1.400\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$, 其中下标 S、L 分别表示固相和液相, V 表示气相。说明金可在 T_m 以下熔化。(熔化潜热为 $1.2\times 10^9\text{J}\cdot\text{m}^{-3}$)。

解: 因为 $\gamma_{SL} + \gamma_{LV} < \gamma_{SV}$, 在溶化早期阶段自由能是降低的, 所以在固相表面有一层液相出现。开始时, 在单位体积系统中的自由能为 G_I , 如下左图所示。假设在单位厚度的表面上形成一层很薄的厚度为 δ 的液相膜, 忽略固、液向的摩尔体积差别, 固相厚度变为 $(1-\delta)$, 系统的自由能为 G_{II} , 如下右图所示。出现液层后的自由能变化 ΔG

$$\Delta G = G_{II} - G_I = \delta(G^L - G^S) + \gamma_{LV} + \gamma_{SL} - \gamma_{SV} = \delta \frac{\Delta H_m \Delta T}{T_m} + \Delta \gamma$$



式中 $\Delta \gamma = \gamma_{LV} + \gamma_{SL} - \gamma_{SV}$

注意到当 $\delta \rightarrow 0$ 时, $\Delta G \rightarrow 0$, 这意味着 $\Delta \gamma \rightarrow 0$, 即 $\gamma_{LV} + \gamma_{SL} \rightarrow \gamma_{SV}$, 这是固/液和气/液界面靠近到原子尺度后它们的交互作用的结果。液层厚度在某一个最优厚度 δ_0 对应的自由能最低, 然后按上面式子呈线性变化。 δ_0 的大小但很难计算这个数值, 可能是几个原子厚。当 $\Delta G=0$ 时对应最大的液层厚度 δ_{\max} , 即

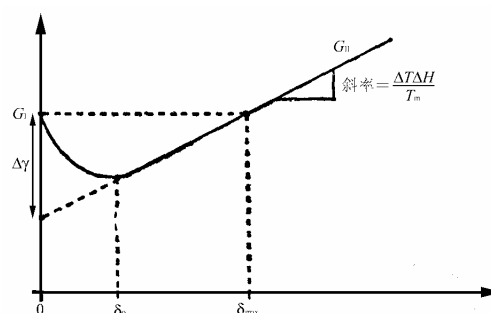
$$\delta_{\max} = \frac{\Delta \gamma T_m}{\Delta H_m \Delta T}$$

若 $\delta_{\max}=10\text{nm}$, 则可以有过冷度 ΔT 为

$$\Delta T = \frac{\Delta \gamma T_m}{\Delta H_m \delta_{\max}} = \frac{0.14 \times 1336}{1.2 \times 10^9 \times 10 \times 10^{-9}} = 15.6\text{K}$$

即在熔点以下 15.6K 就可以溶化。若

$\delta_{\max}=10\text{mm}$, 则过冷度为 $\Delta T=1.56 \times 10^{-5}\text{K}$ 。



8. 证明熔化熵 $\Delta S=4R$ (R 为气体普适常数) 时固液界面以粗糙界面最稳定, 设 $\xi=0.5$ 。

解: 因 $\alpha \leq 2$ 会产生非光滑界面, 而 $\Delta S_m = \Delta H_m / T_m$, 所以

$$\alpha = \xi \frac{\Delta H_m}{RT_m} = \xi \frac{\Delta S_m}{R}$$

时会产生非光滑界面, 又知 $\xi=0.5$, 所以

$$\Delta S_m = \frac{\alpha R}{\xi} = \frac{2R}{0.5} = 4R$$

时, 非光滑的粗糙界面最稳定。

9. 式(5-25)中的晶体学因子 $\xi = \frac{\eta}{z}$, η 为表面层最近邻原子数, z 为固体内部原子的最近邻原子数。界面指数越高, ξ 越小。对面心立方金属, ξ 最大为 0.5, 如何用熔化熵判别液固界面的类型。

解: 题意同上。 $\alpha \leq 2$ 时界面是非光滑的, 即 $\Delta S_m \leq 4R$ 时界面是非光滑的。

10. 一个铝锭厚 25cm, 在无过冷的情况下注入砂模。假设模/金属间的热阻和固态金属/液态金属间的热阻可以忽略不计。

a) 若砂模很薄 (设 3cm), 砂模外侧温度保持 300K, 砂模很快建立平稳态传热, 问多长

时间这个锭可以完成凝固。

b)若砂模很厚，凝固只靠砂模导热进行。问多长时间这个锭可以完成凝固。铝的熔点 $T_m=933\text{K}$ ，熔化潜热 $\Delta H=3.97\times 10^5\text{J/kg}$ ，铝的密度 $\rho_m=2.7\times 10^{-3}\text{kg/cm}^3$ ，砂型的比热 $c_{pm}=1.13\times 10^3\text{J/kg}\cdot\text{K}$ ，砂型的热导率 $\kappa_m=6.06\times 10^{-3}\text{W/cm}\cdot\text{K}$ ，密度为 1.58g/cm^3 。

解：a)砂模的导热是控制因素，并且导热很快，液相和固相温度都近似为熔点 T_m ，其温度分布如图所示。因为是稳态，所以在砂模中的温度是线性分布，模壁的温度梯度为 $(T_m-T_0)/\delta$ ， δ 为砂模厚度， T_0 是砂模外壁的温度。经 t 时间凝固后，单位面积砂模导出的热量为

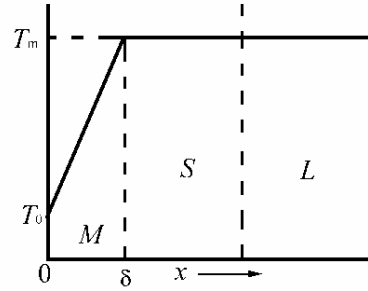
$$Q = -k \frac{dT}{dx} t = -k \frac{T_m - T_0}{\delta} t$$

凝固终了单位面积应导出的热量 Q 为(设两边导热)

$$Q = \Delta H \times 1 \times \frac{25}{2} \times \rho_m \quad \text{J} \cdot \text{cm}^2$$

上两式相等，得

$$\begin{aligned} t &= -\frac{\delta}{k(T_m - T_0)} \Delta H \times 1 \times \frac{25}{2} \times \rho_m \\ &= \frac{3 \times 3.97 \times 10^5 \times 12.5 \times 2.7 \times 10^{-3}}{6.06 \times 10^{-3} \times (933 - 300)} = 2.1 \times 10^4 \text{s} \end{aligned}$$



b)砂模很厚，凝固只靠砂模导热进行，砂模的温度分布如图所示，它符合热传到方程的误差函数解。在砂模温度分布为

$$T = T_m - (T_m - T_0) \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right)$$

热由模/固界面散出被模子吸收。在 $t \sim dt$ 时刻内通过模/固导出的热 $q_{(t)}dt$ 为

$$\text{而 } \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=0} = -\frac{T_m - T_0}{\sqrt{\pi at}}$$

从 $0 \sim t$ 时间内，共散出的热 Q 为

$$Q = -kA \frac{T_m - T_0}{\sqrt{\pi a}} \int_0^t \frac{dt}{\sqrt{t}} = 2kA \frac{T_m - T_0}{\sqrt{\pi a}} \sqrt{t}$$

完全凝固要求散出的热为(两边散热) $\Delta H \times \rho_m \times 25/2\text{J}$ ，故

$$\begin{aligned} t &= \left(\frac{25 \times \Delta H \times \rho_m}{2 \times k(T_m - T_0)} \right)^2 \times \pi a = \left(\frac{25 \times \Delta H}{2(T_m - T_0)} \right)^2 \times \pi \frac{\rho_m}{kc_p} \\ &= \left(\frac{25 \times 3.97 \times 10^5}{2(933 - 300)} \right)^2 \frac{2.7 \times 10^{-3} \times \pi}{6.06 \times 10^{-3} \times 1.13 \times 10^3} \text{s} = 7.61 \times 10^4 \text{s} \end{aligned}$$

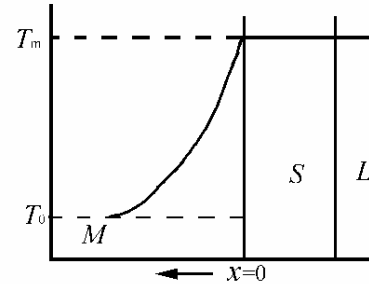
假设模凝固时间为 $7.61 \times 10^4\text{s}$ 时壁温度降为 310K 处的距离为 l ，如果上面分析能成立，模壁的厚度不能小于 l ， l 值的估算如下：根据温度分布式子，有

$$\frac{933 - 310}{933 - 300} = 0.984 = \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right)$$

用误差函数表查得 $x/2\sqrt{at} = 1.71$ ，计算得 $a = 1.98 \times 10^{-3}$ ，故摸壁不能小于

$$l > 1.71 \times 2 \times \sqrt{1.98 \times 10^{-3} \times 7.61 \times 10^4} = 42\text{cm}$$

这个厚度比锭子的厚度大得多，不大符合实际。



11. 铝在钢模中超高速冷却，钢模保持 300K，钢模/金属间的界面热阻为 $0.24\text{cm}^2\text{K}\cdot\text{W}^{-1}$ ， $\kappa_{\text{Al}}=2.2\text{W}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 。假定传热为界面控制（即牛顿冷却），问液/固界面推移速度是多大？这种情况是否符合原假设的界面控制传热？（可采用上题的数据）

解：根据牛顿冷却的方程，液/固界面推移速度是

$$\frac{ds}{dt} = \frac{h(T_m - T_0)}{\rho\Delta H} = \frac{933 - 300}{0.24 \times 2.7 \times 10^{-3} \times 3.97 \times 10^5} = 2.46\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$$

验算 Biot 数：

$$\text{boit} = \frac{hx}{k_L} = \frac{h}{k_L} \frac{V}{S}$$

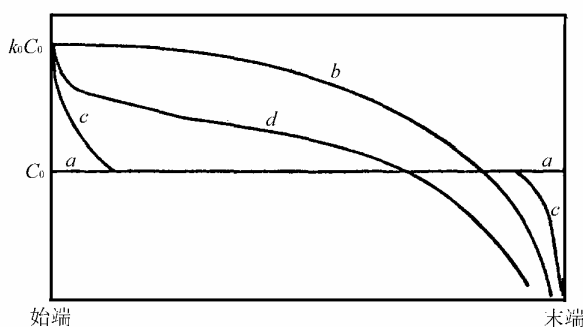
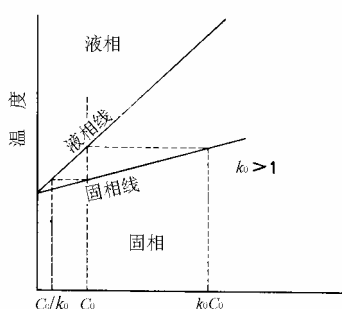
其中 V 和 S 是熔体的体积和面积，取单位高度锭子来分析，它们分别等于 25^2cm^3 和 $25/4\text{cm}^2$ （四面散热），故

$$\text{boit} = \frac{h}{k_L} \frac{V}{S} = \frac{25}{0.24 \times 2.2 \times 4} = 11.84 > 0.1$$

不符合牛顿冷却条件。

12. 画出 $k_0 > 1$ 时和图 5-31 对应的 a、b、c、d 各线。

相图如左下图所示。 C_0 成分的熔体，凝固后的浓度分布如右下图所示。其中 a 线是在固、液相中完全扩散、b 线是液相中完全混合、c 是在液相中仅有溶质扩散、d 线是液相中溶质部分混合的情况。



13. Al-Cu 相图可简化为： $T_m(\text{Al})=660^\circ\text{C}$ ，共晶温度 $T_E=546^\circ\text{C}$ ，铜在铝中的最大溶解度 $w(\text{Cu})=5.65\%$ ，共晶成分 $w(\text{Cu})=33\%$ ，固、液相线均为直线。液相中铜的扩散系数 $D_L=3 \times 10^{-9}\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$ ，设合金在无对流的条件下凝固，液/固界面是平面的，界面推移速度为 $5\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

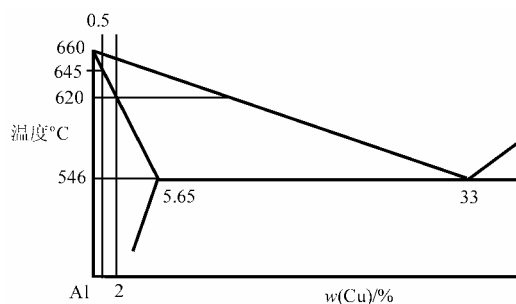
a) $w(\text{Cu})=0.5\%$ 的 Al-Cu 合金在平稳态下凝固时界面温度是什么？扩散层（即溶质富集的特征距离）厚度是多大？为了保持平面界面，根据组分过冷判据估算液相温度梯度应为多大。

b) 如合金成分为 $w(\text{Cu})=2\%$ ，和前面的条件相同，回答 a) 中的各个问题。

c) 如合金成分为 $w(\text{Cu})=2\%$ ，固相无扩散，液相充分混合，画出凝固后固相的成分分布，在固相百分比是多少时出现共晶组织？

解：计算液相斜率 m_L 、 k_0

$$m_L = -\frac{660 - 546}{33} = -3.454 \text{ K}\cdot(w(\text{Cu})\%)^{-1}$$



$$k_0 = \frac{C_s}{C_L} = \frac{5.65}{33} = 0.171$$

a) $w(\text{Cu})=0.5\%$ 合金在平稳态下凝固时界面温度 T_L 应是相应的固相线温度

$$\begin{aligned} T_L &= T_m - m_L(C_0/k_0) \\ &= 660 - 3.454(0.5/0.171) = 650^\circ\text{C} \end{aligned}$$

扩散层厚度 δ 为

$$\delta = \frac{D_L}{R} = \frac{3 \times 10^{-9}}{5 \times 10^{-6}} = 6 \times 10^{-4} \text{ m}$$

为了保持平面界面，根据组分过冷判据，液相温度梯度应为

$$G_L \geq R \frac{|m_L|C_0}{D_L} \frac{1-k_0}{k_0} = 5 \times 10^{-6} \frac{3.454 \times 0.5}{3 \times 10^{-9}} \frac{1-0.171}{0.171} = 1.39 \times 10^4 \text{ } ^\circ\text{C} \cdot \text{m}^{-1}$$

b) 按 a) 的计算方法，成分为 $w(\text{Cu})=2\%$ 的合金在平稳态下凝固时界面温度 T_L 应是相应的固相线温度

$$\begin{aligned} T_L &= T_m - m_L(C_0/k_0) \\ &= 660 - 3.454(2/0.171) = 620^\circ\text{C} \end{aligned}$$

扩散层厚度 δ 为和 a) 的相同，等于 $6 \times 10^{-4} \text{ m}$ 。

为了保持平面界面，根据组分过冷判据，液相温度梯度应为

$$G_L \geq R \frac{|m_L|C_0}{D_L} \frac{1-k_0}{k_0} = 5 \times 10^{-6} \frac{3.454 \times 2}{3 \times 10^{-9}} \frac{1-0.171}{0.171} = 5.58 \times 10^4 \text{ } ^\circ\text{C} \cdot \text{m}^{-1}$$

c) 成分为 $w(\text{Cu})=2\%$ 的合金在固相无扩散，液相充分混合的情况下，当凝固固相的成分达 5.65% 时，液相便全部共晶结晶，根据 Scheil 方程

$$C_s = C_0 k_0 f_L^{1/(k_0-1)} = 2 \times 0.171 \times (f_L)^{1/(0.171-1)}$$

$$f_L = \left(\frac{5.65}{2 \times 0.171} \right)^{-0.829} = 0.0991 \quad \text{即共晶量为 } 9.91\%$$

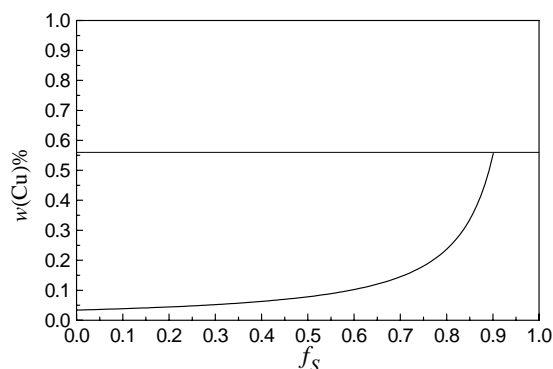
固相成分

$$C_s = C_0 k_0 (1 - f_s)^{1/(k_0-1)} = 2 \times 0.171 (1 - f_s)^{-1.206} = 0.342 (1 - f_s)^{-1.206}$$

根据上式计算

f_s	0.00	0.02	0.04	0.06	0.1	0.2	0.3
C_s	0.34	0.35	0.36	0.368	0.39	0.45	0.53
f_s	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.85	0.901
C_s	0.63	0.79	1.03	1.46	2.38	3.37	5.60

下图是凝固后固相的成分分布。



14. 根据界面稳定性的普遍判别式, $w(\text{Cu})=0.5\%$ 的 Al-Cu 合金界面推移速度为 $5\mu\text{m/s}$, 为了保持平面界面, 估算液相温度梯度应多大? 若界面绝对稳定时, 界面推移速度应多大? (设固体热导率为液体的一半, $\gamma=5\times 10^{-6}\text{J/cm}^2$, 其它需要的数据可从上面各题找出)。

解: 界面稳定的普遍判据为

$$\xi \frac{\kappa_s + \kappa_L}{2\kappa_L} \frac{|m_L| C_0 (1 - k_0)}{k_0 D_L} \leq \frac{G_L}{R} + \frac{\Delta H}{2\kappa_L}$$

现求 A_0

$$A_0 = \frac{k_0 T_m \gamma}{m_L G_C \Delta H} \left(\frac{R^2}{D_L^2} \right)$$

其中 G_C 为

$$G_C = - \frac{(1 - k_0) C_0 R}{k_0 D_L}$$

代入 A_0 式子得

$$A_0 = \frac{k_0^2 T_m \gamma R}{(1 - k_0) C_0 D_L m_L \rho_m \Delta H} = \frac{(0.171)^2 \times 933 \times 5 \times 10^{-6} \times 5 \times 10^{-2}}{(1 - 0.171) \times 0.5 \times 3 \times 10^{-9} \times 3.454 \times 2.7 \times 10^3 \times 3.95 \times 10^5} = 1.48 \times 10^{-7}$$

查 $A_0 \sim \xi$ 图, 得 $\xi \rightarrow 1$ 。故稳定判据为 (因 $(k_s + k_L)/k_L = 15/2$)

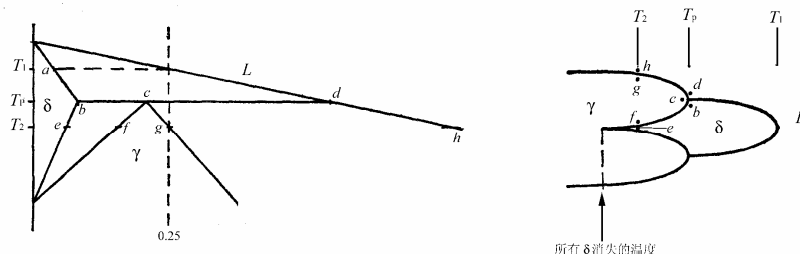
$$\begin{aligned} \frac{G_L}{R} &\geq \xi \frac{\kappa_s + \kappa_L}{2\kappa_L} \frac{|m_L| C_0 (1 - k_0)}{k_0 D_L} - \frac{\Delta H}{2\kappa_L} \\ &= \frac{15}{4} \frac{3.454 \times 0.5 \times (1 - 0.171) \times 5 \times 10^{-6}}{0.171 \times 3 \times 10^{-9}} - \frac{3.97 \times 10^5 \times 2.7 \times 10^3 \times 5 \times 10^{-6}}{2 \times 4.4 \times 10^2} \\ &\approx 5.23 \times 10^3 \text{ K} \cdot \text{m} \end{aligned}$$

若是绝对稳定, $A_0 \geq 1$, 要求长大速度 R 为

$$R \geq \frac{(1 - k_0) C_0 D_L \Delta H \rho_m |m_L|}{k_0^2 T_m \gamma} = \frac{(1 - 0.171) \times 0.5 \times 3 \times 10^{-9} \times 3.95 \times 10^5 \times 2.7 \times 10^3 \times 3.454}{(0.171)^2 \times 933 \times 5 \times 10^2} = 3.37 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

15. 如果界面前沿温度梯度很低, 碳在 δ 铁中扩散很快 (能完成包晶反应), 画出 $w(\text{C})=0.25\%$ 的 Fe-C 凝固界面附近的组织示意图。若温度梯度很大, 界面是稳定的, 设所有液、固相线都是直线, 忽略固相中的扩散, 并且液相完全均匀混合, 画出组织分布图, 并定量地说明各种组织的相对量。

解: $w(\text{C})=0.25\%$ 的 Fe-C 凝固界面附近的组织示意图如下



若界面是稳定的, 设所有液、固相线都是直线, 忽略固相中的扩散, 并且液相完全均匀混合, 在 δ 相结晶时, 当边界上 δ 相成分达到上图的 b 点 ($w(\text{C})=0.09\%$), 这时液相成分为上图的 d 点 ($w(\text{C})=0.5\%$), 液相就结晶出 γ 相。 γ 相结晶一直到其成分为 $w(\text{C})=2.11\%$, 液相成分为 $w(\text{C})=4.3\%$, 液相发生共晶转变。

根据 Scheil 方程 $C_s = C_0 k_0 f_L^{k_0-1}$, δ/L 间的平均分配系数为 $k_0=0.09/0.5=0.18$, 故 δ 相的量 f^δ 为

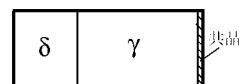
$$f^\delta = 1 - \left(\frac{C_s^\delta}{C_0 k_0} \right)^{1/(1-k_0)} = 1 - \left(\frac{0.09}{0.25 \times 0.18} \right)^{1/(0.18-1)} = 0.57$$

余下液相量为 0.43。在这部分液相中, 结晶出 γ 相的量 $(f^\gamma)'$ 为 (γ/L 间的平均分配系数为 $(k_0)'=2.11/4.3=0.49$)

$$(f^\gamma)' = 1 - \left(\frac{C_s^\gamma}{C_0' (k_0)'} \right)^{1/[1-(k_0)']} = 1 - \left(\frac{2.11}{0.5 \times 0.49} \right)^{1/(0.49-1)} = 0.985$$

γ 相占总体的量 f^γ 应为: $f^\gamma = 0.43 \times (f^\gamma)' = 0.43 \times 0.985 = 0.424$,

最后结晶的共晶量 $f^{\text{共晶}} = 1 - (0.57 + 0.424) = 0.006$ 。沿棒长的组织分布如右图所示。



16. 图 5-71 为 Pb-Bi 二元相图, $w(\text{Bi})=20\%$ 合金定向凝固, 设固相无扩散, 液相完全混合, 求共晶体的量。

解: 把固、液相线近似看作是直线, 根据相图, Pb/L 间的分配系数 $k_0=13.8/35.8=0.665$; 而 β/L 间的分配系数应先求固液相线的交点的成分, 作图得交点成分 $w(\text{Bi})=21.9\%$, 所以 $k_0'=(41.821.9)/(56.1-21.9)=0.58$ 。根据 Scheil 方程 $C_s = C_0 k_0 f_L^{k_0-1}$ Pb 固溶体的量 f^{Pb} 为

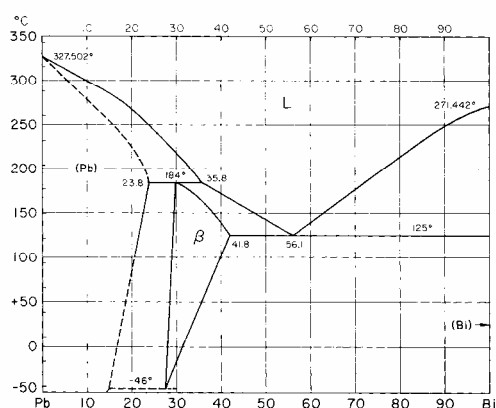
$$f^{\text{Pb}} = 1 - \left(\frac{C_s^{\text{Pb}}}{C_0^{\text{Pb}} k_0} \right)^{1/(1-k_0)} = 1 - \left(\frac{23.8}{20 \times 0.665} \right)^{1/(0.665-1)} = 0.824$$

余下液相量为 0.176。在这部分液相中, 结晶出 β 相的量 $(f^\beta)'$ 为

$$(f^\beta)' = 1 - \left(\frac{C_s^\beta}{C_0' (k_0)'} \right)^{1/[1-(k_0)']} = 1 - \left(\frac{41.8 - 21.9}{(35.8 - 21.9) \times 0.745} \right)^{1/(0.58-1)} = 0.884$$

β 相占总体的量 f^β 应为: $f^\beta = 0.176 \times (f^\beta)' = 0.176 \times 0.884 = 0.155$

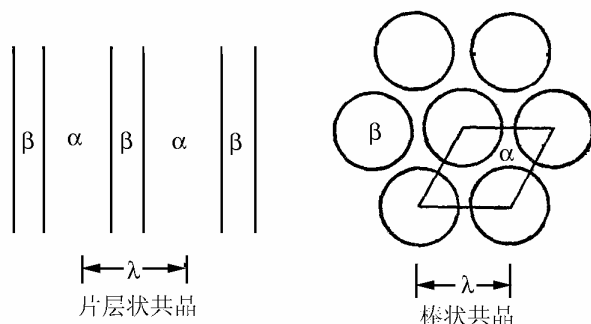
最后结晶的共晶量 $f^{\text{共晶}} = 1 - (0.824 + 0.155) = 0.021$



17. 如片层状和棒状共晶两相的中心间距相等, 并且两种形貌的共晶中的比界面能相等。证明存在一个相体积百分数的临界值, 大于这个临界值则形成棒状组织, 否则为片层状组织。

解: 两种共晶的形貌示意图如右图所示。

对于片层共晶, 单位体积共晶中总界面面积为 $2/\lambda$, 对于棒状共晶, 设棒为单位长度, 直径为 d 。在图中的四边性面积为 $A = \lambda^2 \sin 60^\circ = \sqrt{3} \lambda^2 / 2$ 。每这样的面积



含一根 β 相棒，界面积是 πd 。这样，单位体积共晶中相界面积为 $\frac{2\pi d}{\lambda^2\sqrt{3}}$ 。若使棒状共晶小界面积小于片层状的，则

$$\frac{2\pi d}{\lambda^2\sqrt{3}} < \frac{2}{\lambda} \quad \text{即} \quad \frac{d}{\lambda} < \frac{\sqrt{3}}{\pi}$$

d 取决与 β 相的体积分数 $f_\beta = \frac{\pi d^2}{2\sqrt{3}\lambda^2}$ ，即 $d = \lambda \left(\frac{f_\beta 2\sqrt{3}}{\pi} \right)^{1/2}$

把 d 代入上面的不等式，得

$$\left(\frac{f_\beta 2\sqrt{3}}{\pi} \right)^{1/2} < \frac{\sqrt{3}}{\pi} \quad \text{即} \quad f_\beta < \frac{\sqrt{3}}{2\pi} = 0.276$$

若 $f_\beta < 0.276$ 则棒状共晶的总界面积比片层状共晶的小，在界面能相同的情况下，系统的总界面能低，从而倾向于以棒状共晶存在；若 $f_\beta > 0.276$ 则倾向于以片层状共晶存在。

18. 含硅的低合金钢锭，存在枝晶偏析，枝晶臂距是 $500\mu\text{m}$ 。在 1200°C 下扩散退火，问偏析振幅减小到原来的 10%，应保温多长时间？设 1200°C 下碳在奥氏体的扩散系数是 $2.23 \times 10^{-6} \text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ，硅的扩散系数是 $7.03 \times 10^{-11} \text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ 。

解：存在枝晶偏析，浓度以枝晶臂间距为周期分布，周期 $2l$ 就是 $500\mu\text{m} = 0.05\text{cm}$ 。根据扩散方程的三角技术解可知，浓度振幅按衰减因子衰减，即

$$C = \bar{C} + C_0 \sin \frac{\pi x}{l} \exp\left(-\frac{\pi^2 D t}{l^2}\right)$$

先衰减为原来的 1/10，即 $\exp(-\pi^2 D t / l^2) = 0.1$ ，故

$$\text{对于 C 元素} \quad t = \frac{l^2}{\pi^2 D} \ln 0.1 = -\frac{(0.025)^2}{\pi^2 \times 2.23 \times 10^{-6}} \ln 0.1 = 65.3\text{s}$$

$$\text{对于 Si 元素} \quad t = \frac{l^2}{\pi^2 D} \ln 0.1 = -\frac{(0.025)^2}{\pi^2 \times 7.03 \times 10^{-11}} \ln 0.1 = 2.07 \times 10^6 \text{s}$$

Si 的均匀化速度比 C 的慢得多。

第 6 章 位错题解

1. 说明面心立方结构的潜在滑移系有 12 个，体心立方结构的潜在滑移系有 48 个。

解：面心立方晶体的滑移系是 $\{111\} \langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ ， $\{111\}$ 有四个，每个 $\{111\}$ 面上有三个 $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ 方向，所以共有 12 个潜在滑移系。体心立方晶体的滑移系是 $\{110\} \langle \bar{1}11 \rangle$ ， $\{211\} \langle \bar{1}11 \rangle$ 以及 $\{312\} \langle \bar{1}11 \rangle$ 。 $\{110\}$ 面共有 6 个，每个 $\{110\}$ 面上有两个 $\langle \bar{1}11 \rangle$ 方向，这种滑移系共有 12 个潜在滑移系； $\{211\}$ 面有 12 个，每个“211”面上有 1 个 $\langle \bar{1}11 \rangle$ 方向，这种滑移系共有 12 个潜在滑移系； $\{312\}$ 面共有 24 个，每个 $\{312\}$ 面上有 1 个 $\langle \bar{1}11 \rangle$ 方向，这种滑移系共有潜在滑移系 24 个，这样，体心立方晶体的潜在滑移系共有 48 个。

2. 单晶体铜受拉伸形变，拉伸轴是 $[001]$ ，应力为 10^4Pa 。求作用在 (111) 面 $[\bar{1}01]$ 方向的分切应力。

解：根据 $\tau = \sigma \cos \lambda \cos \varphi$

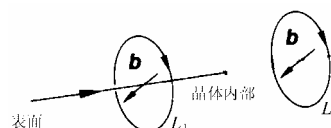
τ 是所求的分切应力， σ 是拉伸应力 λ 是 $[001] - [\bar{1}01]$ 的夹角， φ 是 $[001] - [111]$ 的夹角。根据立方系的晶向夹角公式，

$$\cos \lambda = \frac{1}{\sqrt{1}\sqrt{1+1}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \cos \varphi = \frac{1}{\sqrt{1}\sqrt{1+1+1}} = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

故 $\tau = 10^4 \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{3}} \text{Pa} = 4.08 \times 10^3 \text{Pa}$

3. 证明位错线不能终止在晶体内部。

解：设有一位错 C 终止在晶体内部，如图所示，终点为 A 。绕位错 C 作一柏氏回路 L_1 ，得柏氏矢量 b 。现把回路移动到 L_2 位置，按柏氏回路性质，柏氏回路在完整晶体中移动，它所得的柏氏矢量不会改变，仍为 b 。但从另一角度看， L_2 内是完整晶体，它对应的柏氏矢量应为 0。这二者是矛盾的，所以这时不可能的。



4. 一个位错环能否各部分都是螺位错？能否各部分都是刃位错？为什么？

解：螺位错的柏氏矢量与位错线平行，而一个位错只有一个柏氏矢量，一个位错环不可能与一个方向处处平行，所以一个位错环不能各部分都是螺位错。刃位错的柏氏矢量与位错线垂直，如果柏氏矢量垂直位错环所在的平面，则位错环处处都是刃位错。这种位错的滑移面是位错环与柏氏矢量方向组成的棱柱面，这种位错又称棱柱位错。

5. 单晶体受拉伸形变，拉伸轴是 $[001]$ ，求对 $b = a[\bar{1}01]/2$ 及 t 平行于 $[1\bar{2}1]$ 的位错滑移和攀移方向所受的力。已知 $a = 0.36 \text{nm}$ 。

解：单位长度位错线在滑移面上所受的力 F 是外加应力场在滑移面滑移方向的分切应力 τ 与柏氏矢量 b 的乘积： $F_s = \tau b$ 。在单向拉伸（应力为 σ ）的情况， $\tau = \sigma \cos \lambda \cos \varphi$ 。因 $b = a[\bar{1}01]/2$ 及 t 平行于 $[1\bar{2}1]$ ，所以滑移面是 (111) ，因此， λ 是 $[001] - [\bar{1}01]$ 的夹角， φ 是

[001]—[111] 的夹角。根据第 1 题的计算知 $\cos\lambda=1/\sqrt{2}$, $\cos\varphi=1/\sqrt{3}$; 故 $\tau=\sigma/\sqrt{6}=0.408\sigma$ 。
而 b 的模为 $a\sqrt{2}/2=0.36\times 10^{-9}\times\sqrt{2}/2=2.55\times 10^{-10}\text{m}$, 最后得

$$F_g = \tau b = 0.408 \times 2.55 \times 10^{-10} \sigma \text{ N/m} = 1.04 \times 10^{-10} \sigma \text{ N/m}$$

式中 σ 的单位为 Pa。

单位长度位错线在攀移方向上所受的力 F_c 是外加应力场在刃位错半原子面的正应力 σ_c 与柏氏矢量 b 的乘积: $F_c = -\sigma_c b$ 。因为 b 垂直于位错线, 所以讨论的位错是刃位错。其半原子面的法线矢量是 b , 即为 $[\bar{1}01]$, 故 $\sigma_c = \sigma \cos^2 \varphi' = \sigma/2$ 。作用在单位长度位错线上的攀移力为

$$F_c = \frac{\sigma}{2} 2.55 \times 10^{-10} \sigma \text{ N/m} = 1.275 \times 10^{-10} \sigma \text{ N/m}$$

式中 σ 的单位为 Pa。

6. 写出距位错中心为 R_1 范围内的位错弹性应变能。如果弹性应变能为 R_1 范围的一倍, 则所涉及的距位错中心距离 R_2 为多大?

解: 距位错中心为 R_1 范围内的位错弹性应变能为 $E = \frac{Gb^2}{4\pi K} \ln \frac{R_1}{\lambda b}$ 。

如果弹性应变能为 R_1 范围的一倍, 则所涉及的距位错中心距离 R_2 为

$$2 \frac{Gb^2}{4\pi K} \ln \frac{R_1}{\lambda b} = \frac{Gb^2}{4\pi K} \ln \frac{R_2}{\lambda b}$$

$$\text{即 } R_2 = \frac{R_1^2}{\lambda b}$$

7. 晶体滑移面上存在一个位错环, 外力场在其柏氏矢量方向的切应力为 $\tau=10^{-4}G$, 此位错环在晶体中能扩张的半径为多大? (用第 5 题的数据)

解: 第 5 题的 $b = 2.55 \times 10^{-10}\text{m}$, 单位长度位错受力为

$$F = \tau b = 10^{-4} G \times 2.55 \times 10^{-10} = 2.55 \times 10^{-14} G \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$$

曲率半径为 R 的位错因线张力而施加于单位长度位错线的力 $F_T \approx Gb^2/2R$, 当这力和外加应力场对位错的力相等所对应的 R 就是此位错环在晶体中能扩张的半径, 故

$$\frac{Gb^2}{2R} = 2.55 \times 10^{-14} G$$

$$\text{即 } R = \frac{(2.55 \times 10^{-10})^2}{2 \times 2.55 \times 10^{-14}} = 1.275 \times 10^{-6} \text{m}$$

8. 面心立方晶体中, 把 2 个平行的同号螺位错从 100nm 推进到 8nm 作功多少? 已知 $a=0.3\text{nm}$, $G=7 \times 10^{10}\text{Pa}$ 。

解: 两个同号螺位错 (单位长度) 间的作用力 F 与它们之间的距离 d 的关系为

$$F = \frac{Gb^2}{2\pi d}$$

位错的柏氏矢量 $b = a\sqrt{2}/2 = 0.3 \times \sqrt{2}/2 \text{ nm} = 0.212 \text{ nm} = 2.12 \times 10^{-10} \text{ m}$, 两螺位错从 100nm

推进到 8nm 做功为

$$W = \int_{d_1}^{d_2} \frac{Gb^2}{2\pi d} dd = \frac{Gb^2}{2\pi} \int_{d_1}^{d_2} \frac{dd}{d} = \frac{Gb}{2\pi} \ln \frac{d_2}{d_1}$$

$$= \frac{7 \times 10^{10} \times (0.211 \times 10^{-10})^2}{2\pi} \ln \frac{100}{8} = 0.125 \times 10^{-10} \text{ J} \cdot \text{m}^{-1}$$

9. 晶体中，在滑移面上有一对平行刃位错，它们的间距该多大才不致在它们的交互作用下发生移动？设位错的滑移阻力(切应力)为 $9.8 \times 10^5 \text{ Pa}$ ， $\nu=0.3$ ， $G=5 \times 10^{10} \text{ Pa}$ 。(答案以 b 表示)

解：两个位错间在滑移方向在单位长度上的作用力为 $F_x^{A \rightarrow B} = \frac{Gb_A b_B}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$ ，现两

个位错处于同一个滑移面，所以作用力为 $F_x^{A \rightarrow B} = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{x}$ ，其中 x 是两位错的距离。

当这个力等于和大于位错滑移需要克服的阻力 $\tau_{\text{阻}} b$ 时，两个位错就能滑动，所以当

$$x \leq \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{\tau_{\text{阻}}}$$

时两个位错就会滑动。即

$$x \leq \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{\tau_{\text{阻}}} = \frac{5 \times 10^{10} b}{2\pi(1-0.3) 9.8 \times 10^5} = 116 \times 10^3 b$$

两个位错在攀移方向的作用力为 0，所以不论两个位错的间距为何，都不会发生攀移。

10. 若空位形成能为 73 kJ/mol ，晶体从 1000 K 淬火至室温（约 300 K ）， b 约为 0.3 nm ，问刃位错能否攀移？

解：存在不平衡空位浓度使单位长度刃位错受的化学力为 $F_s = \frac{kT}{b^2} \ln \frac{c}{c_0}$ ，因为 $F_c = \sigma_c b$ ，

即刃位错收到的攀移正应力 $\sigma_s = \frac{kT}{b^3} \ln \frac{c}{c_0}$ ，这个应力达到足够大时位错会发生攀移。在

不同温度下空位的平衡浓度为 $c = \exp(-G_f/kT)$ ，所以，在 1000 K 和在 300 K 下的空位浓度分别是 $\exp(-G_f/1000k)$ 和 $\exp(-G_f/300k)$ 。这样，晶体从 1000 K 淬火至 300 K 刃位错受到的正应力 σ_c 为

$$\sigma_s = \frac{k300}{b^2} \frac{G_f}{k} \left(\frac{1}{300} - \frac{1}{1000} \right) = \frac{300}{(0.3 \times 10^{-9})^3} \times \frac{73000}{6.02 \times 10^{23}} \left(\frac{1}{300} - \frac{1}{1000} \right) \text{ Pa} = 3.14 \times 10^9 \text{ Pa}$$

这个正应力接近一般金属的理论切变强度，所以位错会发生攀移。

11. 当位错的柏氏矢量平行 x 轴，请证明不论位错线是什么方向，外应力场的 σ_{zz} 分量都不会对位错产生作用力。

解：在外加应力场下单位长度位错线受的滑移方向力和垂直滑移面的力分别为 τb 和 σb ，其中 τ 是外应力场在位错滑移面滑移方向的分切应力， σ 是外应力场在垂直滑移面和柏氏矢量的面上的正应力。可见，位错手里的大小和位错线的取向无关。现在外应力场是 σ_{zz} ，

没有切应力分量，所以滑移面上所受的力为 0；因位错的柏氏矢量是 x 方向，只有 σ_{xx} 才能使位错在垂直滑移面方向受力，所以受力亦为 0。

12. 当存在过饱和空位浓度时，请证明任意取向的位错环都受一力偶作用，这力偶使位错转动变成纯刃位错。

解：因为一根位错线只有一个柏氏矢量，由此一个任意的位错环某一小段与对面的的一小段必然是反号位错，并且在位错环上一定能找到某一个小段（及其对面的小段）的刃型分量最大，位错环在这两小段之间的中部的刃型分量最小。在过饱和空位作用下，位错受渗透力，位错环相对的两侧所有的渗透力方向相反，对位错环形成力偶，刃型分量最大的位错段受的力偶最大，这个力偶使位错转动，直至位错与柏氏矢量垂直后力偶为 0 为止。这时整个位错环成为刃型位错，如果仍有过饱和空位存在，整根位错攀移。

13. 若面心立方晶体(铜)中开动的滑移系为(111)[$\bar{1}01$]

(a) 若滑移是由刃位错运动引起的，给出位错线的方向。

(b) 若滑移是由螺位错引起的，给出位错线的方向。

(c) 如第 5 题的外力作用下，求刃位错及螺位错线受力的大小和方向。 $a=0.36\text{nm}$ 。

解：设位错线方向为 $[uvw]$ 。

(a) 因刃位错线与其柏氏矢量垂直，同时也垂直与滑移面法线，即

$$[uvw] = [111] \times [\bar{1}01] = [1\bar{2}1]$$

(b) 因螺位错与其柏氏矢量平行，故 $[uvw] = [\bar{1}01]$ 。

(c) 位错线受力的大小与位错线取向无关，根据第 5 题条件，位错受力和第 5 题的一样，即单位长度位错受的滑移力 F_g 和攀移力 F_c 分别为 $F_g = 1.04 \times 10^{-10} \text{Pa}$ 、 $F_c = 0.85 \times 10^{-10} \text{Pa}$ 。

位错线受力的方向垂直于位错线，设其方向与柏氏矢量间的夹角为 θ ，则

$$\tan \theta = \frac{0.85}{1.04} = 0.817 \quad \theta = 39.26^\circ$$

14. 设位错每隔 $10^3 b$ 长度有一个割阶，外力场在滑移面滑移方向的分切应力为 $5 \times 10^5 \text{Pa}$ ，求位错在室温（约 300K）下的滑移速度。 $b=0.3\text{nm}$ ，自扩散系数 $D_s=0.009\exp(-1.9\text{eV}/kT)\text{cm}^2\cdot\text{s}^{-1}$ 。

解：位错的滑移速度 v 取决与割阶的攀移 v_j 速度，即

$$v = v_j = \frac{D_s}{b} \exp\left(\frac{tb^2 L}{kT}\right)$$

在 300K 下的自扩散系数

$$D_s = 0.009\exp(-1.9\text{eV}/kT)\text{cm}^2\cdot\text{s}^{-1} = 0.009\exp[-1.9/(8.61 \times 10^{-5} \times 300)] = 1.02 \times 10^{-34} \text{cm}^2\cdot\text{s}^{-1}$$

$$v = \frac{1.02 \times 10^{-34}}{0.3 \times 10^{-7}} \exp\left(\frac{5 \times 10^5 \times (0.3 \times 10^{-9})^3 \times 10^3}{1.38 \times 10^{-23} \times 300}\right) = 8.64 \times 10^{-25} \text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$$

速度如此慢，可以说，这样的应力场下，位错无法滑动。

15. 在同一滑移面上有 2 个互相平行的位错, b 大小相等, 夹角为 30° , 这 2 个位错在滑移面上的相互作用力为零时, 柏氏矢量和各自位错的夹角是多大?

解: 设第一个位错的柏氏矢量与位错线夹角为 θ , 则另一个位错的柏氏矢量与位错线的夹角为 $\theta+30^\circ$ 。第 1 个位错的螺型分量和刃型分量分别为 $b_{s1}=b\cos\theta$ 和 $b_{e1}=b\sin\theta$; 第 2 个位错的螺型分量和刃型分量分别为 $b_{s2}=b\cos(\theta+30^\circ)$ 和 $b_{e2}=b\sin(\theta+30^\circ)$ 。平行直位错的刃型分量和螺型分量之间没有交互作用, 故两位错的交互作用力 F 为

$$F = \frac{Gb^2}{2\pi} \left[\cos\theta\cos(\theta+30^\circ) + \frac{1}{(1-\nu)} \sin\theta\sin(\theta+30^\circ) \right]$$

要求作用力为 0, 即

$$\left[\cos\theta\cos(\theta+30^\circ) + \frac{1}{(1-\nu)} \sin\theta\sin(\theta+30^\circ) \right] = 0$$

把上式展开、整理

$$\cos\theta[\cos\theta\cos30^\circ - \sin\theta\sin30^\circ] + \frac{\sin\theta}{1-\nu}[\sin\theta\cos30^\circ + \cos\theta\sin30^\circ] = 0$$

$$\cos^2\theta\cos30^\circ - \cos\theta\sin\theta\sin30^\circ + \frac{1}{1-\nu}[\sin^2\theta\cos30^\circ + \sin\theta\cos\theta\sin30^\circ] = 0$$

$$\cos^2\theta\cos30^\circ + \frac{1}{1-\nu}\sin^2\theta\cos30^\circ + \left(\frac{1}{1-\nu} - 1\right)\sin\theta\cos\theta\sin30^\circ = 0$$

$$\frac{\sqrt{3}}{2}\cos^2\theta + \frac{\sqrt{3}}{2(1-\nu)}\sin^2\theta + \frac{\nu}{2(1-\nu)}\sin\theta\cos\theta = 0$$

上式两端除以 $\cos^2\theta$, 得

$$\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2(1-\nu)}\tan^2\theta + \frac{\nu}{2(1-\nu)}\tan\theta = 0$$

$$\text{即 } \tan^2\theta + (\nu/\sqrt{3})\tan\theta + (1-\nu) = 0$$

解上面的一元二次方程:

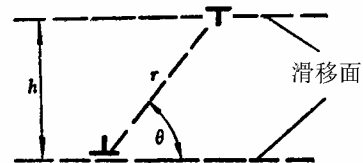
$$\tan\theta = \frac{-(\nu/\sqrt{3}) \pm \sqrt{\nu^2/3 - 4(1-\nu)}}{2}$$

因为 ν 是小于 0.5 的数值, 所以上式根号中的值一定为负数, $\tan\theta$ 没有实数解, 所以不论 θ 为何值, 两个位错间的交互作用力都不会为 0。

16. 若两位错的相对位置如图所示, 问外力场哪一个应力分量能使两位错在各自滑移面上滑移? 问要附加多大的切应力才能使两个位错相对滑过? $G=5 \times 10^{10} \text{Pa}$, 两滑移面相距 $h=20 \text{nm}$, $b=0.35 \text{nm}$, $\nu=0.3$ 。

解: 只有外力场在滑移面滑移方向的分切应力才会使位错在滑移面上滑动。在平行的滑移面上两个反号位错单位长度的滑动阻力最大值为

$$F_{\max} = \tau_{\max} b = 0.25 \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{h}$$



位错相对滑过要克服两位错的最大相互作用阻力，故应加的切应力 τ 应大于或等于 τ_{\max} 。
即

$$\tau \geq 0.25 \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{h} = 0.25 \frac{5 \times 10^{10} \times 0.35}{2\pi(1-0.3)100} \text{ Pa} = 9.95 \times 10^6 \text{ Pa}$$

17. 设使位错滑移需要克服的阻力(切应力)对铜为 $9.8 \times 10^5 \text{ Pa}$ ，对 3%Si-Fe 合金为 $1.5 \times 10^8 \text{ Pa}$ ，合金的切变模量 G 分别是 $4 \times 10^{10} \text{ Pa}$ 以及 $3.8 \times 10^{11} \text{ Pa}$ 。问在表面的低位错密度层有多厚？点阵常数 $a_{\text{Cu}}=0.36 \text{ nm}$ ， $a_{\text{Fe-Si}}=0.28 \text{ nm}$ 。

解：由于表面映像力的作用，在表面附近的位错受到的映像力大于或等于位错滑动阻力时，位错就滑出表面，使表面的位错密度降低。以螺位错为例，平行与表面的单位长度位错受的映像力为

$$F_{\text{im}} = \tau_{\text{im}} b = \frac{Gb^2}{4\pi d}$$

其中 d 是位错距表面的距离。 $\tau_{\text{im}} \geq \tau_{\text{阻}}$ 时的 d 就是表面的低位错密度层厚度。故

$$d \leq \frac{Gb}{4\pi\tau_{\text{阻}}}$$

铜是面心立方结构、铁-硅合金是体心立方结构，故铜和铁-硅合金的柏氏矢量分别是 $0.36/\sqrt{2} = 0.255 \text{ nm}$ 和 $0.28\sqrt{3}/2 = 0.242 \text{ nm}$ 。它们在表面的低位错密度层分别是

$$\text{铜} \quad d = \frac{Gb}{4\pi\tau_{\text{阻}}} = \frac{4 \times 10^{10} \times 0.255 \times 10^{-9}}{4\pi \times 9.8 \times 10^5} = 8.28 \times 10^{-7} \text{ m}$$

$$\text{铁硅合金} \quad d = \frac{Gb}{4\pi\tau_{\text{阻}}} = \frac{3.8 \times 10^{11} \times 0.242 \times 10^{-9}}{4\pi \times 1.5 \times 10^8} = 4.88 \times 10^{-8} \text{ m}$$

18. 拉伸试验的应变速度一般是 $1 \sim 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ，设能动的位错密度为 10^8 cm^{-2} ，计算位错的平均速度。 $b=0.3 \text{ nm}$ 。

解：应变速率 $\dot{\gamma}$ 与可动位错密度 ρ_v 及位错平均运动速度 \bar{v} 的关系是 $\dot{\gamma} = \rho_v \bar{v} b$ ，现 $\dot{\gamma}$ 是 $1 \sim 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ，故位错平均运动速度为

$$\bar{v} = \frac{\dot{\gamma}}{\rho_v b} = \frac{1}{10^8 \times 0.3 \times 10^{-7}} \sim \frac{10^{-6}}{10^8 \times 0.3 \times 10^{-7}} = (0.33 \sim 0.33 \times 10^{-7}) \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$$

19. 以爆破成形加工工件，应力波持续的时间约 10^{-6} s ，若工件变形量为 10%，可动位错密度为 10^{10} cm^{-2} ，位错的平均速度多大？ $b=0.3 \text{ nm}$ 。

解：应力波持续的时间约 10^{-6} s 内工件变形量为 10%，即应变速率 $\dot{\gamma}$ 为

$$\dot{\gamma} = \frac{0.1}{10^{-6}} = 10^5 \text{ s}^{-1}$$

按上题的讨论，位错平均速度为

$$\bar{v} = \frac{\dot{\gamma}}{\rho_v b} = \frac{10^5}{10^{10} \times 0.3 \times 10^{-7}} = 3.3 \times 10^2 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$$

20.简单立方晶体(100)面有 1 个 $b=[0\bar{1}0]$ 的刃位错

(a)在(001)面有 1 个 $b=[010]$ 的刃位错和它相截，相截后 2 个位错产生弯结还是割阶？

(b)在(001)面有 1 个 $b=[100]$ 的螺位错和它相截，相截后 2 个位错产生弯结还是割阶？

解：两位错相割后，在位错留下一个大小和方向与对方位错的柏氏矢量相同的一小段位错，如果这小段位错在原位错的滑移面上，则它是弯结；否则是割阶。为了讨论方便，设(100)面上 $b=[0\bar{1}0]$ 的刃位错为 A 位错，(001)面上 $b=[010]$ 的刃位错为 B 位错，(001)面上 $b=[100]$ 的螺位错为 C 位错。

(a)A 位错与 B 位错相割后，A 位错产生方向为 $[010]$ 的小段位错，A 位错的滑移面是(100)， $[010] \cdot [100] = 0$ ，即小段位错是在 A 位错的滑移面上，所以它是弯结；而在 B 位错产生方向为 $[0\bar{1}0]$ 的小段位错，B 位错的滑移面是(001)， $[0\bar{1}0] \cdot [001] = 0$ ，即小段位错在 B 位错的滑移面上，所以它是弯结。

(b)A 位错与 C 位错相割后，A 位错产生方向为 $[100]$ 的小段位错，A 位错的滑移面是(100)， $[100] \cdot [100] \neq 0$ ，即小段位错不在 A 位错的滑移面上，所以它是割阶；而在 C 位错产生方向为 $[0\bar{1}0]$ 的小段位错，C 位错的滑移面是(001)， $[0\bar{1}0] \cdot [001] = 0$ ，即小段位错在 B 位错的滑移面上，所以它是弯结。

21.简单立方晶体(100)面有一个 $b=[001]$ 的螺位错。

(a)在(001)面有 1 个 $b=[010]$ 的刃位错和它相截，相截后 2 个位错产生弯结还是割阶？

(b)在(001)面有一个 $b=[100]$ 的螺位错和它相截，相截后 2 个位错产生弯结还是割阶？

解：和上题的讨论一样。为了讨论方便，设(100)面上 $b=[001]$ 的螺位错为 A 位错，(001)面上 $b=[010]$ 的刃位错为 B 位错，(001)面上 $b=[100]$ 的螺位错为 C 位错。

(a)A 位错与 B 位错相割后，A 位错产生方向为 $[010]$ 的小段位错，A 位错的滑移面是(100)， $[010] \cdot [100] = 0$ ，即小段位错是在 A 位错的滑移面上，所以它是弯结；而在 B 位错产生方向为 $[001]$ 的小段位错，B 位错的滑移面是(001)， $[001] \cdot [001] \neq 0$ ，即小段位错不在 B 位错的滑移面上，所以它是割阶。

(b)A 位错与 C 位错相割后，A 位错产生方向为 $[100]$ 的小段位错，A 位错的原滑移面是(100)， $[100] \cdot [100] \neq 0$ ，即小段位错不在 A 位错原来的滑移面上，但在(010)面上，它也是 C 位错的滑移面，所以它是弯结；而在 C 位错产生方向为 $[001]$ 的小段位错，C 位错的原滑移面是(001)， $[001] \cdot [001] \neq 0$ ，即小段位错不在 C 位错的原滑移面上，但它在(010)面上，它也是 C 位错的滑移面，所以它是弯结。

22.晶粒直径为 $50\mu\text{m}$ ，若在晶界萌生位错所需的应力约为 $G/10$ ，晶粒中有位错源，问要多大的外力才能使晶界萌生位错？塞积群中位错很多时，可以假设塞积群长度和位错源到领头位错的距离相同。 $b=0.3\text{nm}$ 。

解：在位错塞积群前沿有应力集中，如果塞积群的位错数目为 n ，则应力集中可大约为外应力的 n 倍。当外应力为 τ_0 、位错群塞积长度为 L 时，塞积群位错数目为

$$n = \frac{\pi(1-\nu)L\tau_0}{Gb}$$

当应力集中达到晶界萌生位错所需的应力($G/10$)时, 则会在晶界萌生位错。即

$$n\tau_0 = \frac{\pi(1-\nu)L\tau_0^2}{Gb} \geq \frac{G}{10}$$

时会萌生位错, 故外加应力

$$\tau_0 \geq G \left(\frac{b}{10\pi(1-\nu)L} \right)^{1/2} = G \left(\frac{0.3 \times 10^{-9}}{10\pi(1-0.3) \times 50 \times 10^{-6}} \right)^{1/2} = 5.22 \times 10^{-4} G$$

晶界会萌生位错。

23. 设三维位错密度 $\rho = 10^6 \sim 10^7 \text{ cm/cm}^3$, 粗略假设位错源开动是塑性变形的开始, 估算 Pb、Cu、Al 和 Ni 开始塑性变形的应力。已知它们的切变模量分别是 Al: $2.6 \times 10^{10} \text{ Pa}$; Cu: $4 \times 10^{10} \text{ Pa}$; Pb: $0.5 \times 10^9 \text{ Pa}$; Ni: $7.9 \times 10^{10} \text{ Pa}$ 。点阵常数分别是 Al: 0.40 nm ; Cu: 0.36 nm ; Pb: 0.49 nm ; Ni: 0.35 nm 。

解: 长度为 l 的位错源开动所需的切应力约为

$$\tau = \frac{Gb}{l}$$

可以把三维位错网络的结点之间的距离视为位错源的长度, 三维位错网络密度可近似为二维位错密度 ρ_s 。这样位错结点间距约为 $\sqrt{1/\rho_s}$, 故位错源的长度 $l \approx \sqrt{1/\rho} = (10^{-3} \sim 10^{-3.5}) \text{ cm}$ 。

所讨论的金属都是面心立方结构, $b = a/\sqrt{2}$, 根据它们的 a 计算 b , 得

Al, $b = 0.283 \text{ nm}$; Cu, $b = 0.255 \text{ nm}$; Pb, $b = 0.346 \text{ nm}$; Ni, $b = 0.247 \text{ nm}$ 。它们位错源开动所需的应力为

$$\text{Al, } \tau = \frac{Gb}{l} = \frac{2.6 \times 10^{10} \times 0.283 \times 10^{-9}}{10^{-5}} = 0.736 \times 10^6 \text{ Pa}$$

$$\text{Cu, } \tau = \frac{Gb}{l} = \frac{4 \times 10^{10} \times 0.255 \times 10^{-9}}{10^{-5}} = 1.02 \times 10^6 \text{ Pa}$$

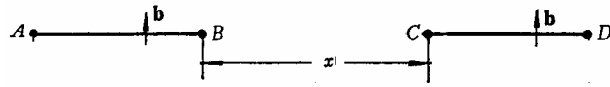
$$\text{Pb, } \tau = \frac{Gb}{l} = \frac{0.5 \times 10^9 \times 0.346 \times 10^{-9}}{10^{-5}} = 0.173 \times 10^6 \text{ Pa}$$

$$\text{Ni, } \tau = \frac{Gb}{l} = \frac{7.9 \times 10^{10} \times 0.247 \times 10^{-9}}{10^{-5}} = 1.9 \times 10^6 \text{ Pa}$$

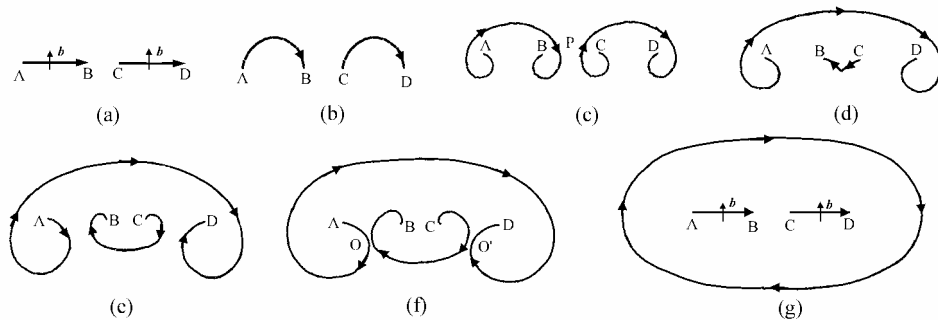
24. 下图表示在同一直线上有柏氏矢量相同的 2 个同号刃位错 AB 和 CD, 距离为 x , 他们作 F-R 源开动。

(a) 画出这 2 个 F-R 源增殖时的逐步过程, 二者发生交互作用时, 会发生什么情况?

(b) 若 2 位错是异号位错时, 情况又会怎样?



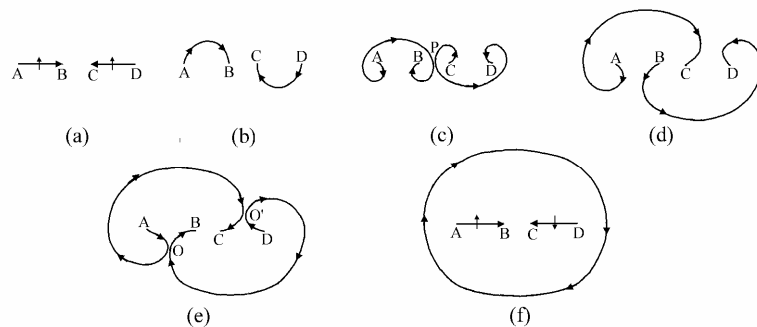
解：(a)两个位错是同号，当位错源开动时，两个位错向同一方向拱弯，如下图(b)所示。在外力作用下，位错继续拱弯，在相邻的位错段靠近，它们是反号的，互相吸引，如上图(c)中的P处所示。两段反号位错相吸抵消后，原来两个位错连接一起，即形成AD位错，余下一段位错，即BC位错，这段位错和原来的位错反号，如上图(d)所示。在外力作用下，BC位错也作位错源开动，但它的拱弯方向与原来的相反，如上图(e)所示。两



根位错继续拱弯在如图(f)的O及O'处再相遇，因为在相遇处它们是反号的，所以相吸抵消。最后，放出一个大位错环，并回复原来的AB和CD两段位错，如上图(g)所示。这个过程不断重复增值位错。

(b)两个位错是反号，当位错源开动时，两个位错向相反方向拱弯，如下图(b)所示。在外力作用下，位错继续拱弯，在相邻的位错段靠近，它们是反号的，互相吸引，如下图(c)中的P处所示。两段反号位错相吸抵消后，即形成AC和BD位错，如下图(d)所示。AC和BD位错继续滑动，它们在下图(e)的O及O'处又相遇，在相遇处的位错也是反号的。反号位错相吸并对消，放出一个大位错环，同时恢复原来的AB和CD两段位错，如下图(f)所示。这个过程不断重复增值位错。

上述过程是两段位错间的距离 x 不是很大的情况下发生的，如果 x 很大，两个位错单独作为位错环开动，他们各自放出一个位错环，然后两个位错再合并成一个大位错环。



25. 在 f.c.c 结构中，下面的 2 个位错反应 $a[\bar{1}10]/2 + a[101]/2$ 及 $a[\bar{1}10]/2 + a[110]/2$ ，哪一个能进行？对于后一个反应，2 个位错和 $[1\bar{2}1]$ 平行，假设位错心部能量为位错弹性应变能的 $1/10$ ， $\nu=1/3$ ，这时又会怎样？

解： $a[\bar{1}10]/2 + a[101]/2 \rightarrow a[011]/2$ ，式中三个位错的柏氏矢量平方都等于 $a^2/2$ ，根据位错反应的 Frank 判据，反应式左端柏氏矢量的平方和大于右端的柏氏矢量平方，所以位错反应是可行的。

$a[\bar{1}10]/2 + a[110]/2 \rightarrow a[010]$ ，反应式左端柏氏矢量的平方和与右端的柏氏矢量平方都等于 a^2 ，不能直接根据位错反应的 Frank 判据来判定位错是否能反应，所以应进一步分析。因为位错都平行于 $[011]$ ， $a[\bar{1}10]/2$ 位错及 $a[110]/2$ 与 $[011]$ 的夹角均为 60° ，他们的螺型分量为 $(a\sqrt{2}/2)\cos 60^\circ = a\sqrt{2}/4$ ，刃型分量为 $(a\sqrt{2}/2)\sin 60^\circ = a\sqrt{6}/4$ ，这两个位错的总能量是

$$\frac{Ga^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0} \left[\frac{2}{16} \times 2 + \frac{6}{16(1-1/3)} \times 2 \right] = \frac{Ga^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0} \times \frac{11}{8}$$

反应后生成的 $a[010]$ 位错，它和 $[011]$ 的夹角是 45° ，其刃型分量和螺型分量均为 $a\cos 45^\circ = a\sqrt{2}/2$ ，这位错的能量为

$$\frac{Ga^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0} \left[\frac{2}{4} + \frac{2}{4(1-1/3)} \right] = \frac{Ga^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0} \times \frac{5}{4}$$

因 $11/8 > 5/4$ ，所以反应是可行的。

26. 证明面心立方结构中，如果 $a[100]$ 位错是纯螺位错，下式的反应是可行的： $a[110]/2 + a[1\bar{1}0]/2 \rightarrow [100]$ 。如果是纯刃位错则是不可行的。若 $a[110]/2$ 位错滑移运动，上式反应在哪些面上进行？

解：按照 Frank 判据讨论，因为 $a[110]/2 + a[1\bar{1}0]/2 \rightarrow a[100]$ 反应的两端的柏氏矢量平方和都等于 a^2 ，无法确定反应是否能进行。但是，如果 $[100]$ 位错是纯螺位错，则左端的两个位错不可能都是纯螺位错，考虑到它们有刃型分量，它们的能量比螺型的高，即反应前的能量比反应后的高，所以反应是可行的；同理，如果 $[100]$ 位错是纯刃位错，则左端的两个位错不可能都是纯刃位错，考虑到它们有螺型分量，它们的能量比刃型的低，即反应前的能量比反应后的低，所以反应是不可行的。上面的讨论是没有考虑晶体学的具体情况得出的，事实上，因为面心立方的滑移面是 $\{111\}$ ，所以，在 $a[110]/2 + a[1\bar{1}0]/2 \rightarrow [100]$ 反应中， $a[110]/2$ 位错应在 $(\bar{1}11)$ 上， $a[1\bar{1}0]/2$ 位错应在 (111) 面上，两位错反应生成的位错的取向只能是 $(\bar{1}11)$ 面和 (111) 面的交线方向，即在 $[0\bar{1}1]$ 方向上，而反应后的位错的柏氏矢量是 $[100]$ ，它永远不可能是纯螺或纯刃位错。

27. 写出位错反应 $a[01\bar{1}]/2 + a[2\bar{1}1]/2$ 的反应结果，这个反应能否进行？形成的位错能不能滑动？为什么？

解： $a[01\bar{1}]/2 + a[2\bar{1}1]/2 \rightarrow a[100]$ ，根据位错反应的 Frank 判据，反应式左端的柏氏矢量平方和为 $a^2/2 + a^2 \cdot 3/2 = 2a^2$ ，而右端的柏氏矢量平方为 a^2 ，因 $2a^2 > a^2$ ，所以反应可以

进行。 $a[01\bar{1}]/2$ 位错的滑移面是 (111), $a[2\bar{1}1]/2$ 位错的滑移面是 (11 $\bar{1}$), 所以反应生成的位错线在 (111) 与 (11 $\bar{1}$) 的交线 $[\bar{1}10]$ 上, 这个位错的滑移面是 (001), 它不是面心立方容易滑移的滑移面, 所以不易滑动。

28. 有一反应: $a[10\bar{1}]/2 \rightarrow a[11\bar{2}]/6 + a[2\bar{1}\bar{1}]/6$ 。设 2 个 Shockley 部分位错的间距为 d

(a) 若 $a[10\bar{1}]/2$ 是纯刃位错, 计算两个 Shockley 部分位错间的作用力; 若 $a[10\bar{1}]/2$ 是螺位错, 作用力又是多少?

(b) 设层错能 $\gamma=10^{-6}\text{J}/\text{cm}^2$, $G=7\times 10^{10}\text{Pa}$, 点阵常数为 0.3nm , $\nu=1/3$ 。求上述两部分位错的扩展宽度。

(c) 问把这扩展位错从平衡距离拉到 2nm , 要做功多少?

解: 两个 Shockley 部分位错的柏氏矢量间夹角为 120° 。并且 $[11\bar{2}]$ 与 $[10\bar{1}]$ 的夹角为 30° 。

(a) 若 $a[10\bar{1}]/2$ 是纯刃位错, 则分解前的位错的柏氏矢量与位错线的夹角 φ 应为 90° 。两个间距为 d 单位长度的 Shockley 部分位错间的作用力 F 为

$$F = \frac{Gb^2}{8\pi d} \frac{2-\nu}{1-\nu} \left(1 - \frac{2\nu \cos 2\varphi}{2-\nu}\right)$$

故作用力为

$$F = \frac{Gb^2}{8\pi d} \frac{2-\nu}{1-\nu} \left(1 - \frac{2\nu \cos(2 \times 90^\circ)}{2-\nu}\right) = \frac{Gb^2}{8\pi d} \frac{2-\nu}{1-\nu} \left(1 + \frac{2\nu}{2-\nu}\right) = \frac{Gb^2}{8\pi g} \frac{2+\nu}{1-\nu}$$

若 $a[10\bar{1}]/2$ 是纯螺位错, 则分解前的位错的柏氏矢量与位错线的夹角 φ 应为 0° 。两个间距为 d 单位长度的 Shockley 部分位错间的作用力 F 为

$$F = \frac{Gb^2}{8\pi d} \frac{2-\nu}{1-\nu} \left(1 - \frac{2\nu \cos 0^\circ}{2-\nu}\right) = \frac{Gb^2}{8\pi d} \frac{2-\nu}{1-\nu} \left(1 - \frac{2\nu}{2-\nu}\right) = \frac{Gb^2}{8\pi d} \frac{2-3\nu}{1-\nu}$$

(b) 位错间的斥力大小和层错能的大小相等时两部分位错处于平衡, 故位错的扩展的平衡宽度 d_0 为

$$d_0 = \frac{Gb^2}{8\pi\gamma} \frac{2-\nu}{1-\nu} \left(1 - \frac{2\nu \cos 2\varphi}{2-\nu}\right)$$

因为讨论的是面心立方结构, $b = a\sqrt{2}/2 = 0.3\sqrt{2}/2\text{nm} = 0.212\text{nm}$ 。当 $a[10\bar{1}]/2$ 是纯刃位错时

$$\begin{aligned} d_0 &= \frac{Gb^2}{8\pi\gamma} \frac{2+\nu}{1-\nu} = \frac{7 \times 10^{10} \times (0.212 \times 10^{-9})^2}{8\pi \times 10^{-2}} \frac{2+1/3}{1-1/3} \\ &= \frac{7 \times 10^{10} \times (0.212 \times 10^{-9})^2}{8\pi \times 10^{-2}} \times 3.5 = 4.38 \times 10^{-8}\text{m} \end{aligned}$$

当 $a[10\bar{1}]/2$ 是纯螺位错时

$$\begin{aligned} d_0 &= \frac{Gb^2}{8\pi\gamma} \frac{2-3\nu}{1-\nu} = \frac{7 \times 10^{10} \times (0.212 \times 10^{-9})^2}{8\pi \times 10^{-2}} \frac{2-1}{1-1/3} \\ &= \frac{7 \times 10^{10} \times (0.212 \times 10^{-9})^2}{8\pi \times 10^{-2}} \times 1.5 = 1.88 \times 10^{-8}\text{m} \end{aligned}$$

(c)位错间的作用力是斥力，并随位错间的距离 d 而变，把位错推近要作功，位错间的距离减小，减少总的层错能。所以，把两位错从平衡距离 d_0 推近至 d ，作的总功 ΔW 为

$$\begin{aligned}\Delta W &= \int_d^{d_0} (F - \gamma) dd = \int_d^{d_0} \left[\frac{Gb^2}{8\pi d} \frac{2-\nu}{1-\nu} \left(1 - \frac{2\nu \cos 2\varphi}{2-\nu}\right) - \gamma \right] dd \\ &= \frac{Gb^2}{8\pi} \frac{2-\nu}{1-\nu} \left(1 - \frac{2\nu \cos 2\varphi}{2-\nu}\right) \ln \frac{d_0}{d} - \gamma(d_0 - d)\end{aligned}$$

当 $a[10\bar{1}]/2$ 是纯刃位错时， $d_0=4.38 \times 10^{-8} \text{m}$

$$\begin{aligned}\Delta W &= \frac{Gb^2}{8\pi} \frac{2+\nu}{1-\nu} \ln \frac{3.75 \times 10^{-8}}{2 \times 10^{-9}} - 10^{-2} (4.38 \times 10^{-8} - 2 \times 10^{-9}) \\ &= \frac{7 \times 10^{10} \times (0.212 \times 10^{-9})^2}{8\pi} \frac{2+1/3}{1-1/3} \ln \frac{37.5}{2} - 10^{-2} (4.38 \times 10^{-8} - 2 \times 10^{-9}) \text{J} \\ &= 4.38 \times 10^{-10} \times 2.93 - 4.18 \times 10^{-10} \text{J} = 8.65 \times 10^{-10} \text{J}\end{aligned}$$

当 $a[10\bar{1}]/2$ 是纯螺位错时， $d_0=1.88 \times 10^{-8} \text{m}$

$$\begin{aligned}\Delta W &= \frac{Gb^2}{8\pi} \frac{2-3\nu}{1-\nu} \ln \frac{2.5 \times 10^{-8}}{2 \times 10^{-9}} - 10^{-2} (1.88 \times 10^{-8} - 2 \times 10^{-9}) \\ &= \frac{7 \times 10^{10} \times (0.212 \times 10^{-9})^2}{8\pi} \frac{2-1}{1-1/3} \ln \frac{25}{2} - 10^{-2} (1.88 \times 10^{-8} - 2 \times 10^{-9}) \text{J} \\ &= 1.88 \times 10^{-10} \times 2.53 - 1.68 \times 10^{-10} \text{J} = 3.07 \times 10^{-10} \text{J}\end{aligned}$$

29.以螺位错为例，计算 Al、Ni 和 Cu 的扩展位错的平衡宽度。切变模量见第 23 题，层错能数据见 6.8.1 节。

解：扩展位错的平衡宽度为

$$d_0 = \frac{Gb^2}{8\pi\gamma} \frac{2-\nu}{1-\nu} \left(1 - \frac{2\nu \cos 2\varphi}{2-\nu}\right)$$

因为讨论的是螺位错， $\varphi=0^\circ$ ，上式变为

$$d_0 = \frac{Gb^2}{8\pi\gamma} \frac{2-\nu}{1-\nu} \left(1 - \frac{2\nu}{2-\nu}\right)$$

Al、Ni 和 Cu 的层错能 γ 分别是 $200 \times 10^{-3} \text{J/m}^2$ 、 $400 \times 10^{-3} \text{J/m}^2$ 和 $73 \times 10^{-3} \text{J/m}^2$ ；切变模量 G 分别是 $2.6 \times 10^{10} \text{Pa}$ 、 $7.9 \times 10^{10} \text{Pa}$ 和 $4 \times 10^{10} \text{Pa}$ ，点阵常数分别是 0.40nm 、 0.35nm 和 0.36nm ；泊松比 ν 分别是 0.4 、 0.4 、 0.36 。Al、Ni 和 Cu 都是面心立方结构， $b = a\sqrt{2}/2$ ，因此他们的柏氏矢量分别是 0.283 、 0.247 和 0.255nm ，故他们的层错扩展宽度 d_0 分别是

$$\text{Al: } d_0 = \frac{2.6 \times 10^{10} \times (0.283 \times 10^{-9})^2}{8\pi \times 200 \times 10^{-3}} \frac{2-0.4}{1-0.4} \left(1 - \frac{2 \times 0.4}{2-0.4}\right) \text{m} = 5.52 \times 10^{-10} \text{m}$$

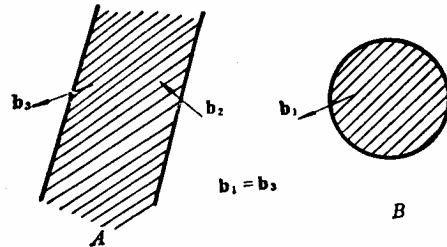
$$\text{Ni: } d_0 = \frac{7.9 \times 10^{10} \times (0.247 \times 10^{-9})^2}{8\pi \times 400 \times 10^{-3}} \frac{2-0.4}{1-0.4} \left(1 - \frac{2 \times 0.4}{2-0.4}\right) \text{m} = 6.39 \times 10^{-10} \text{m}$$

$$\text{Cu: } d_0 = \frac{4 \times 10^{10} \times (0.255 \times 10^{-9})^2}{8\pi \times 73 \times 10^{-3}} \frac{2-0.36}{1-0.36} \left(1 - \frac{2 \times 0.36}{2-0.36}\right) \text{m} = 2.03 \times 10^{-9} \text{m}$$

Al 和 Ni 的扩展距离和原子间距相当，所以，它们实质上是没有扩展的。

30.图 6-68 中 A 是面心立方结构中的扩展位错, B 是封闭的位错环, 它的柏氏矢量和 A 左边的部分位错的相同。 A 和 B 向左移动时, 不改变其形状和尺寸, 问位错扫过后滑移面两侧原子的移动方式是否相同?

解: A 扩展位错向左移动时, 滑移面上下两侧原子相对跳动 b_3 然后跳动 b_2 , 即移动后滑移面两侧原子总跳动了 b_3+b_2 ; 而 B 位错环向左移动时, 滑移面上下两侧原子相对跳动 b_1 然后再跳动 $-b_1$, 即位错环移动后滑移面两侧原子复原, 好像没有发生跳动。



31. AB 是 B_2 型有序结构

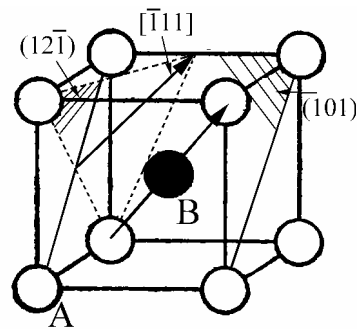
(a)画出垂直于 (101) 并包含 $[\bar{1}11]$ 方向的面上的原子排列。

(b)利用上图画出一个纯刃位错, 它的滑移面为 (101) , $b=a[\bar{1}11]/2$ 。

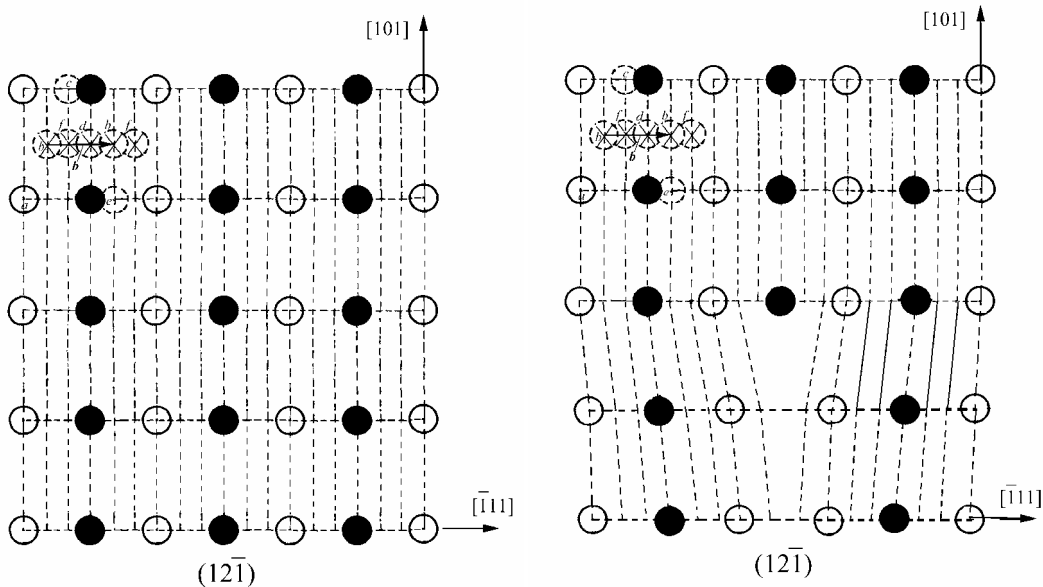
(c)位错移动后是如何破坏有序排列的?

(d)若此时有序合金中有一对平行的同号位错, 它们一起移动会有什么效果? 试推测这对位错是否稳定。

解: B_2 结构的单胞如右图所示。它可看作是又 A 和 B 的简单立方点阵穿插而成。



(a) (101) 面的法线是 $[101]$ 方向, 垂直于 (101) 并包含 $[\bar{1}11]$ 方向的面是含 $[101]$ 和 $[\bar{1}11]$ 的面, 即 $(12\bar{1})$ 面, 如右图所示。 $(12\bar{1})$ 面的原子排列如下左图所示。 $(12\bar{1})$ 面是按每 6 层重复排列, 以 $\dots abcdef abcdef \dots$ 表示排列顺序, 在图中把其余 5 层的投影位置(只用一个或两个原子位置)表示出来。其中虚线的 \otimes 表示 B 原子, 虚线的 \odot 表示 A 原子。



(b)上右图是在 $(12\bar{1})$ 看滑移面为 (101) , $b=a[\bar{1}11]/2$ 的纯刃位错的原子排列情况。这刃位错是抽去了 3 排半原子面而成。

(c)从上右图看出,滑移面为 (101) , $b=a[\bar{1}11]/2$ 的纯刃位错使半原子面的下侧已经是层错,如果位错移动更会在滑移面上产生层错,引起很大的能量增加,所以同是不稳定的。

(d)如果有有一对平行的这样的同号位错组成一个超位错,即抽除 6 层原子面。这样的位错的能量比单个位错存在时的能量大,但它存在时不会产生层错,在滑动后也不产生层错,它就有可能稳定存在。

第7章 表面和界面题解

1. 估计 fcc 结构以{111}、{100}和{110}作表面的表面能。设升华热为 L_S (J/mol)，点阵常数为 a 。

解：升华热相当把晶体所有结合键断开的能量。设 U_b 为平均键能，每摩尔有 N_0 （亚佛加德罗常数）个原子，fcc 结构的配位数为 12，所以

$$L_S = 12N_0 \frac{U_b}{2} \quad \text{即} \quad U_b = \frac{L_S}{6N_0}$$

求晶体表面能的式子是

$$E_s = \gamma_s = \frac{1}{2} \sum_j \rho_{(q_j)} \varphi_{(q_j)} = \frac{1}{2} \sum_j \frac{q_j \cdot n}{V_A} \varphi_{(q_j)}$$

fcc 结构每个晶胞含 4 个原子，所以原子体积 $V_A = a^3/4$ 。

- (1) 对于{111}为表面，单位法线矢量 $n = [111]/\sqrt{3}$ ，它割断最近邻的键矢量为 $a[101]/2$ 、 $a[110]/2$ 和 $a[011]/2$ 。故表面能为

$$\begin{aligned} \gamma_s &= \frac{1}{2} \sum_j \frac{q_j \cdot n}{V_A} \varphi_{(q_j)} = \frac{U_b}{2} \frac{4}{a^3} \frac{\sqrt{3}}{3} \frac{a}{2} [111] \cdot \{[101] + [110] + [011]\} \\ &= \frac{2\sqrt{3}}{a^2} U_b = \frac{L_S \sqrt{3}}{3a^2 N_0} \end{aligned}$$

- (2) 对于{110}为表面，单位法线矢量 $n = [110]/\sqrt{2}$ ，它割断最近邻的键矢量为 $a[101]/2$ 、 $a[011]/2$ 、 $a[10\bar{1}]/2$ 、 $a[01\bar{1}]/2$ 和 $a[110]/4$ ，因为(110)面的面间距为 $a[110]/4$ ， $a[110]/2$ 穿过两个(110)面，所以对于[110]方向的键矢量为 $a[110]/4$ 。表面能为

$$\begin{aligned} \gamma_s &= \frac{1}{2} \sum_j \frac{q_j \cdot n}{V_A} \varphi_{(q_j)} = \frac{U_b}{2} \frac{4}{a^3} \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{a}{2} [100] \cdot \{[101] + [011] + [10\bar{1}] + [01\bar{1}] + \frac{1}{2}[110]\} \\ &= \frac{5\sqrt{2}}{2a^2} U_b = \frac{L_S 5\sqrt{2}}{12a^2 N_0} \end{aligned}$$

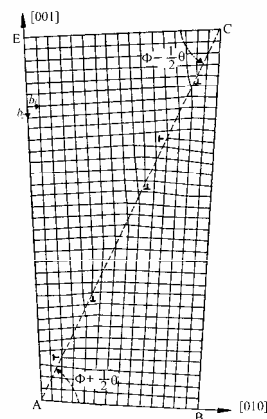
- (3) 对于{100}为表面，单位法线矢量 $n = [100]$ ，它割断最近邻的键矢量为 $a[101]/2$ 、 $a[011]/2$ 、 $a[10\bar{1}]/2$ 和 $a[01\bar{1}]/2$ 。故表面能为

$$\begin{aligned} \gamma_s &= \frac{1}{2} \sum_j \frac{q_j \cdot n}{V_A} \varphi_{(q_j)} = \frac{U_b}{2} \frac{4}{a^3} \frac{a}{2} [100] \cdot \{[101] + [110] + [10\bar{1}] + [1\bar{1}0]\} \\ &= \frac{4}{a^2} U_b = \frac{4L_S}{6a^2 N_0} \end{aligned}$$

2. 简单立方晶体的[100]轴倾转晶界，晶界上排列柏氏矢量为 $[00\bar{1}]$ 的位错的平均距离为 4nm，柏氏矢量为 $[010]$ 的位错的平均距离为 8nm，点阵常数 $a=0.3\text{nm}$ 。这是具有几个自由度的晶界？取向差多大？求出晶界的法线与 $[010]$ 夹角。

解：右图给出(100)面，晶界的位置如的 AB 表示，设两晶粒的取向差为 θ ，故 AC 与 CD 的夹角为 $\varphi - \theta/2$ ；AC 与 AB 的夹角为 $\varphi + \theta/2$ 。设 AC 长度为 1，柏氏矢量为 $[00\bar{1}]$ 的位错 $n = (DC - AB)/b$ ，即

$$n = \frac{1}{b} [\cos(\varphi - \theta/2) - \cos(\varphi + \theta/2)] \approx \frac{\theta}{b} \sin \varphi$$



柏氏矢量为[010]的位错 $n'=(AD-BC)/b$, 即

$$n' = \frac{1}{b} [\sin(\varphi - \theta/2) - \sin(\varphi + \theta/2)] \approx \frac{\theta}{b} \cos \varphi$$

按题意

$$D = \frac{1}{n} = \frac{b}{\theta \sin \varphi} = 8\text{nm}$$

$$D' = \frac{1}{n'} = \frac{b}{\theta \cos \varphi} = 4\text{nm}$$

上两式相除, 得

$$\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} = \cot \varphi = 2 \quad \text{故 } \varphi = 26.57^\circ$$

把 φ 代入前面式子, 得取向差 θ

$$\theta = \frac{b}{D \sin \varphi} = \frac{0.3}{8 \sin 26.57^\circ} = 0.0839 \text{ 弧度}$$

$$\theta = 0.0839 \frac{180}{\pi} = 4.81^\circ$$

3. 简单立方晶体中, 3 个倾转晶界相交 1 个晶粒棱上, 它们两两之间获得取向差的转轴相同, 各晶界与倾转对称位置夹角分别为 φ_1 、 φ_2 和 φ_3 , 位错密度分别为 ρ_1 、 ρ_2 和 ρ_3 。求证:

$$\sum_i \frac{\rho_i}{\sin \varphi_i + \cos \varphi_i} = 0 \quad (i=1,2,3)$$

说明用这一式子来验证位错界面模型的优点。如图 7-53 三个晶界, 测量得到如下数据, 根据这些数据验证上述式子。

晶界	与[100]方向的夹角 φ	ρ/cm^{-1}
CD	6	2.01×10^3
AB	56	1.95×10^3
EF	32.5	4.46×10^3

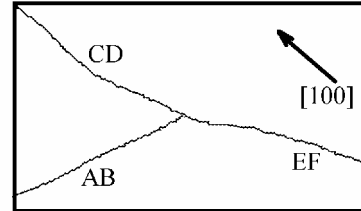


图 7-53

解: 讨论的是简单立方, 设各个亚晶界的位向差为 θ_i , 因为晶粒两两之间的转轴相同, 都为 [100], 所以绕三个晶界的相交的晶棱转一圈后没有取向差, 即 $\sum \theta_i = 0$, 而

$\theta_i = \rho_i b / (\cos \varphi_i + \sin \varphi_i)$, 故

$$\sum \theta_i = \sum \frac{\rho_i b}{\cos \varphi_i + \sin \varphi_i} = 0 \quad \text{即} \quad \sum \frac{\rho_i}{\cos \varphi_i + \sin \varphi_i} = 0$$

用这样的式子来验算晶界模型的优点是可以不测定每个晶界两侧的取向差。

验证: 把给出的数据代入上式得

$$\frac{2.01}{\cos 6^\circ + \sin 6^\circ} + \frac{1.95}{\cos 56^\circ + \sin 56^\circ} - \frac{4.46}{\cos 32.5^\circ + \sin 32.5^\circ} = 1.829 + 1.405 - 3.230 = 0$$

4. 测量 Fe 和 Pb 的小角度晶界能和取向差的数据如下, 证明它们符合 $\gamma_b = E_0 \theta (A - \ln \theta)$ 的关系, 设 $A \approx 1$, 估计 E_0 值。把估计的 E_0 值和理论计算的 E_0 值作比较。 $G_{\text{Fe}} = 8.8 \times 10^{10} \text{Pa}$, $G_{\text{Pb}} = 1.01 \times 10^{10} \text{Pa}$, $a_{\text{Fe}} = 0.286 \text{nm}$, $a_{\text{Pb}} = 0.494 \text{nm}$, 设泊桑比 ν 都为 1/3。

Fe	$\theta(\text{度})$	2.13	4.73	5.32	5.90	7.69	13.4
	$\gamma/\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$	0.227	0.473	0.587	0.612	0.761	0.973
Pb	$\theta(\text{度})$	2.85	3.42	6.27	8.00	12.00	
	$\gamma/\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$	0.065	0.081	0.115	0.122	0.149	

解： $\gamma_b = E_0 \theta (A - \ln \theta)$ 是非线性方程，其形式比较复杂，用正规的拟合方法求式中的系数是很复杂的，这里用简单的试探办法来求其系数。因为系数 $A = W_{co}/E_0 b$ ，可把它近似看作 1。这样，方程变为 $\gamma_b/E_0 = \theta - \theta \ln \theta$ 。因为式中的 θ 的单位是弧度，所以把题目给出的角度换成弧度，并且为了试探方便，也算出 $\theta \ln \theta$ 的值。

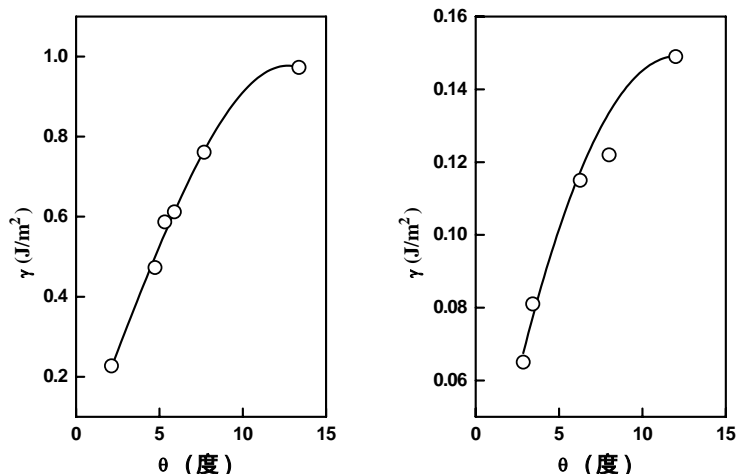
Fe	$\gamma/\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$	0.227	0.473	0.587	0.612	0.761	0.973
	$\theta(\text{弧度})$	0.0372	0.0826	0.0929	0.1030	0.1342	0.2334
	$\theta \ln \theta$	-0.1224	-0.2060	-0.2208	0.2341	-0.2695	-0.3391
Pb	$\gamma/\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$	0.065	0.081	0.115	0.122	0.149	
	$\theta(\text{弧度})$	0.0498	0.0597	0.1094	0.1396	0.2094	
	$\theta \ln \theta$	-0.1494	-0.1683	-0.2420	-0.2748	-0.3274	

对于 Fe，根据数据试探得 E_0 约为 1.8；对于铅，根据数据试探得 E_0 约为 0.35。根据给出的数据，计算 Fe 和 Pb 的理论 E_0 值。首先算出 Fe 和 Pb 的柏氏矢量 b ，Fe 属于体心立方结构， $b = a\sqrt{3}/2 = 0.286\sqrt{3}/2\text{nm} = 0.2477\text{nm}$ ，Pb 属于面心立方结构， $b = a\sqrt{2}/2 = 0.494\sqrt{2}/2\text{nm} = 0.3493\text{nm}$ 。

$$\text{Fe: } E_0 = \frac{Gb}{4\pi(1-\nu)} = \frac{8.8 \times 10^{10} \times 0.2477 \times 10^{-9}}{4\pi(1-1/3)} \text{Jm}^{-2} = 2.6 \text{Jm}^{-2}$$

$$\text{Pb: } E_0 = \frac{Gb}{4\pi(1-\nu)} = \frac{1.01 \times 10^{10} \times 0.3493 \times 10^{-9}}{4\pi(1-1/3)} \text{Jm}^{-2} = 0.41 \text{Jm}^{-2}$$

这些数值和实验估算的值接近，但是由于假设 $A=1$ ，并且对 E_0 没有最佳拟合，故所得的值是有一定的差距。下面左图和右图分别是 Fe 和 Pb 的晶界能与取向差的关系。



5. f.c.c 晶体以[100]为轴转动多大的角度才会出现 $\Sigma=5$ 的相符点阵？画图加以证明。

解：对于立方结构点阵，一个点阵 L_1 绕 $[u \ v \ w]$ 轴转动 θ 获得 L_2 ，2 个穿插点阵能形成某一 Σ 值的 CSL 要满足以下条件

$$\Sigma = X^2 + NY^2$$

$$N = u^2 + v^2 + w^2$$

$$\theta = 2 \arctan(Y\sqrt{N}/X)$$

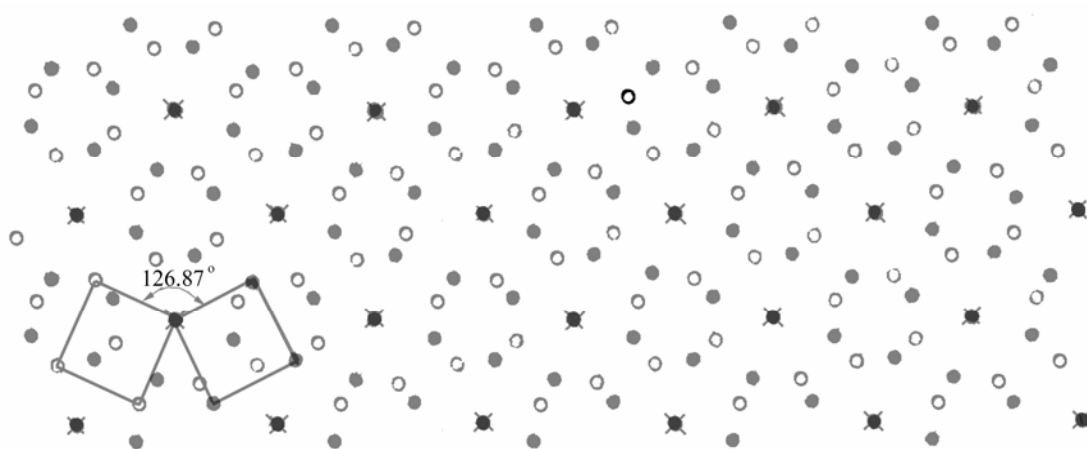
现在 $N = u^2 + v^2 + w^2 = 1$ 、 $\sum = 5$ ，故

$$\sum = x^2 + y^2 = 5 \quad \theta = 2 \arctan(y/x)$$

可能选择的方案是： $x=1$ 、 $y=2$ 或 $x=2$ ， $y=1$ 。

对于 $x=1$ ， $\theta = 2 \arctan 2 = 126.87^\circ$ ，对于 $x=2$ ， $\theta = 2 \arctan(1/2) = 53.13^\circ$ 。因为这两者相加为 180° ，即这两者可按任一种角度转动的方向相反获得，而面心立方的[100]轴包含 2 此对称轴，因而它们是等效的。

下图是一个面心立方晶体(黑点)以[100]轴相对另一面心立方晶体(白点)转动 126.87° 后相互穿插的(100)面，其中黑点并带×号的点是重合的点。从图可以看出，每 5 个阵点有一个重合，说明上面的计算是对的。



6. Bi 在 Cu 的晶界上偏聚后按 ($C_B/C_B^0=0.99$) 使 Cu 变脆，估算室温下 Bi 在晶内的浓度为多大? 设 Cu 的晶粒直径约为 0.01mm ，估计 Bi 的平均浓度多大时能发生这种现象。设 Bi 原子在晶内引起的畸变能为 $6.6 \times 10^4 \text{J/mol}$ ，Bi 在 Cu 晶界上的畸变能可忽略，晶界为单原子层， $C_B^0 \approx 1$ 。原子体积约为 0.0425nm^3 。

解：晶界偏聚的式子是： $\frac{C_B}{C_B^0 - C_B} = \frac{C_C}{1 - C_C} \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT}\right)$ ，其中 C_B^0 是在晶界的原子位置分数； C_B 和 C_C 分别是晶界中和晶内的溶质原子分数； ΔG 是溶质原子在晶界与在晶内的自由能差。上式可以改写成

$$\frac{1}{C_B^0/C_B - 1} = \frac{C_C}{1 - C_C} \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT}\right)$$

现在 $C_B/C_B^0=0.99$ ， $\Delta G=-6.6 \times 10^4 \text{J/mol}$ ， $T=298\text{K}$ ，故

$$\frac{1}{1/0.99 - 1} = \frac{C_C}{1 - C_C} \exp\left(\frac{6.6 \times 10^4}{8.314 \times 298}\right)$$

即 $99(1 - C_C) = 3.708 \times 10^{11} C_C$

结果 $C_C = \frac{99}{3.708 \times 10^{11} + 99} = 2.67 \times 10^{-10}$

对于平均浓度，首先要将单位晶体内所有溶质原子数计算出来。以立方体表示一个晶粒，设原子体积为 Ω ，则单位体积中的总原子数为 $1/\Omega$ ；晶界厚度约为 $\sqrt[3]{\Omega}$ 、晶粒直径为 d (立

方体的边长)、单位体积中晶界面积为 $3\sqrt{\Omega}/d$, 则单位体积中晶界的原子位置数为 $3\sqrt{\Omega}/d\Omega$; 单位体积中晶粒内的体积为 $(1-3\sqrt{\Omega}/d)\Omega$, 则单位体积中晶粒内的原子位置数为 $(1-3\sqrt{\Omega}/d)\Omega$ 。平均浓度 \bar{C} 等于在单位体积中在晶界的 Bi 原子数加上单位体积中在晶内的 Bi 原子数再除以单位体积中的总原子数, 即

$$\begin{aligned}\bar{C} &= \frac{3\sqrt{\Omega}(C_B/C_{B_0})/d\Omega + (1-3\sqrt{\Omega}/d)C_C/\Omega}{1/\Omega} = \frac{3\sqrt{\Omega}(C_B/C_{B_0})}{d} + (1-\frac{3\sqrt{\Omega}}{d})C_C \\ &= \frac{3\sqrt{0.0425}}{0.01 \times 10^6} \times 0.99 + (1-\frac{3\sqrt{0.0425}}{0.01 \times 10^6}) \times 2.67 \times 10^{-10} \approx 1.036 \times 10^{-4}\end{aligned}$$

这说明很低的平均浓度下就会发生这种危害的偏聚。

7. 如果 Bi 在 Cu 晶界中含量是饱和浓度的 1/3 就可以消除 Cu 的脆性, 问要加热到什么温度淬火才能消除其脆性?

解: 根据晶界偏聚的式子 $\frac{C_B}{C_B^0 - C_B} = \frac{C_C}{1 - C_C} \exp(-\frac{\Delta G}{kT})$, 可以看出晶界偏聚程度随温度升高而减小。当晶界的溶质原子浓度降时, 晶内的浓度会增加。设晶界的饱和浓度为 1, 晶界浓度降低为饱和浓度的 1/3, 即单位体积晶体中有 $2(3\sqrt{\Omega}/d\Omega)/3$ 溶质原子转移进晶内。晶内浓度增加量 C'_C

$$C'_C = \frac{2}{3} \frac{3\sqrt{\Omega}/d\Omega}{1/\Omega - 3\sqrt{\Omega}/d\Omega} = \frac{2}{3} \frac{3\sqrt{\Omega}}{d - 3\sqrt{\Omega}} = \frac{2}{3} \frac{3\sqrt{0.0425}}{0.01 \times 10^6 - 3\sqrt{0.0425}} = 6.98 \times 10^{-5}$$

因为原来晶内的浓度比这低几个数量级, 所以可以近似认为晶界浓度就是 C'_C 。把所有数据代入偏聚浓度式子, 即

$$\frac{1/3}{1-1/3} = \frac{6.98 \times 10^{-5}}{1-6.98 \times 10^{-5}} \exp(\frac{6.6 \times 10^4}{8.314 \times T})$$

$$\text{即 } \exp(\frac{6.6 \times 10^4}{8.314 \times T}) = 7.15 \times 10^3$$

$$\text{故 } T = \frac{6.6 \times 10^4}{8.314 \times \ln(7.15 \times 10^3)} = 894.5\text{K}$$

加热到 894.5K 后, 晶界偏聚可降到不发生脆性的程度。

8. 硫在 α -Fe 晶界中富集, 在 700°C 时富集率 C_B/C_0 为 7170; 在 500°C 时富集率为 15700, 估算硫原子与 α -Fe 原子的键合能 (答案以 kJ/mol 表示)。

解: 因为晶界和晶内的浓度都比 1 小很多, 所以用偏聚的简化式子 $C_B = C_0 \exp(-\frac{\Delta G}{kT})$,

即 $-\Delta G = RT \ln(C_B/C_0)$ 。

在 700°C (973K) 时, $-\Delta G = 8.314 \times 973 \times \ln 7170 = 71.8\text{KJ/mol}$;

在 550°C (823K) 时, $-\Delta G = 8.314 \times 823 \times \ln 15700 = 66.1\text{KJ/mol}$ 。

这两个温度下平均, 得 $-\Delta G = 69\text{KJ/mol}$ 。

9. 有一个 fcc 结构和 hcp 结构的共格界面, 两相取向关系为 $\{111\}_{\text{fcc}} \parallel \{0001\}_{\text{hcp}}$; $\langle 110 \rangle_{\text{fcc}} \parallel \langle 11\bar{2}0 \rangle_{\text{hcp}}$, 点阵常数 $a_{\text{fcc}}=0.33\text{nm}$, $a_{\text{hcp}}=0.26\text{nm}$ 。问晶界上有什么样的位错? 位错是如何布置的? 位错间距有多大?

解：fcc 结构的{111}面和 hcp 结构的{0001}面的原子排布是相同的，按题给出的取向关系，他们的原子排布的位向相同，只是点阵间距不同。fcc 的{111}面的原子间距 $d_{\text{fcc}} = a_{\text{fcc}} \sqrt{2}/2 = 0.33\sqrt{2}/2 = 0.233\text{nm}$ ，hcp 的{0001}面的原子间距 $d_{\text{hcp}} = a_{\text{hcp}} = 0.26\text{nm}$ 。共格时在 $\langle 111 \rangle_{\text{fcc}}$ 方向的错配 δ 为

$$\delta = \frac{d_{\text{hcp}} - d_{\text{fcc}}}{(d_{\text{hcp}} + d_{\text{fcc}})/2} = \frac{0.26 - 0.233}{(0.26 + 0.233)/2} = 0.1095$$

这些错配由错配位错容纳。在界面上错配的柏氏矢量 $b = (d_{\alpha} + d_{\beta})/2$ ，所以，错配位错的间距 D 为

$$D = \frac{b}{\delta} = \frac{(d_{\text{hcp}} + d_{\text{fcc}})}{2\delta} = \frac{(0.26 + 0.233)}{2 \times 0.1095} = 2.25\text{nm}$$

因 $\langle 110 \rangle_{\text{fcc}}$ 有三个方向，故 $\langle 110 \rangle_{\text{fcc}}$ 上有三组这样的位错。

10. 设二维长方形晶体，边长为 L_1 和 L_2 ， L_1 和 L_2 两边的界面能分别为 γ_1 和 γ_2 ，若面积保持不变，求证其平衡形状有 $L_1/L_2 = \gamma_2/\gamma_1$ 的关系。

解：此晶体的总表面能 $E = 2(L_1\gamma_1 + L_2\gamma_2)$ ，形状平衡时，有如下关系：

$$dE = 2(L_1 d\gamma_1 + \gamma_1 dL_1 + L_2 d\gamma_2 + \gamma_2 dL_2) = 0$$

因 γ_2 和 γ_1 与长度无关，上式变成

$$\gamma_1 dL_1 + \gamma_2 dL_2 = 0$$

因为面积 $L_1 L_2 = \text{常数}$ ，即 $L_1 dL_2 + L_2 dL_1 = 0$ ，把这一关系代入上式，得 $L_1/L_2 = \gamma_2/\gamma_1$ 。证毕。

11. 一种金属板，其中含有稳定的第二相粒子（在退火时不溶解），体积分数为 2×10^2 ，平均直径为 $0.5\mu\text{m}$ 。问退火后晶粒直径能否超过 $50\mu\text{m}$ ？（基体与第二相的界面能是常数）

解：按比较粗略的分析，第二相粒子半径 r 和体积分数 f 与基体晶粒长大极限半径 R^* 间的关系为 $R^* = \frac{4r}{3f}$ ，故

$$d^* = \frac{8r}{3f} = \frac{8 \times 0.5/2}{3 \times 2 \times 10^{-2}} \mu\text{m} = 33\mu\text{m}$$

所以不可能超过 $50\mu\text{m}$ 。

12. 一根很细的铜丝，一个大角度晶界贯穿其截面，晶界和丝轴成 25° 。经退火后，晶界发生什么变化？变化的驱动力随界面与丝轴的夹角 θ 如何变化？若上述的晶界是孪晶界，退火时会发生什么变化，为什么？

解：界面转动的驱动力是总界面能 ($E = S\gamma$ ， S 为界面的面积， γ 为界面能) 随位置的改变 ($\Delta E/\Delta\theta$)。即

$$\frac{\Delta E}{\Delta\theta} = S \frac{\Delta\gamma}{\Delta\theta} + \gamma \frac{\Delta S}{\Delta\theta}$$

式中第一项表示界面离开原来晶界位置因单位界面能随位置改变而使总界面能改变，第二项表示晶界离开原来晶界位置因界面面积改变而使总界面能改变。

于大角度晶界，一般晶界能量不随其位置而变化，减小晶界面积可以减少系统的总界面能。退火时，晶界向减小晶界面积方向转动，即向晶界面与丝轴垂直的方向转动，到达垂直位置后，此时界面面积最小，所以停止转动。

对于孪晶界，以 γ_t 和 γ_b 分别表示孪晶界和普通大角度晶界的界面能，界面离开原来孪晶界位置即变为普通大角度晶界，而大角度晶界能量不随其位置变化，所以 $\Delta\gamma/\Delta\theta$ 可以直接用

$(\gamma_b - \gamma_t)$ 表示。设铜丝的横截面积为 1，现在位置的界面积 $S = 1/\sin 25^\circ = 2.366$ ，转动时的界面面积改变 $\Delta S = -(\cos \theta / \sin^2 \theta) \Delta \theta = -5.074 \Delta \theta$ 。故

$$\frac{\Delta E}{\Delta \theta} = S(\gamma_b - \gamma_t) + \gamma_b \Delta S = S(1 - \frac{\gamma_t}{\gamma_b}) + \Delta S = 2.366(1 - \frac{\gamma_t}{\gamma_b}) + 5.074$$

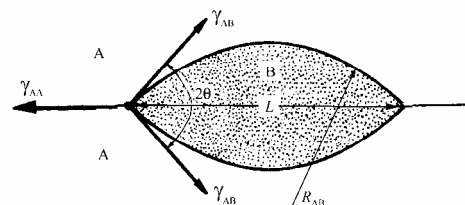
如果 $\Delta E / \Delta \theta > 0$ ，则晶界不能转动，即

$$\frac{\gamma_t}{\gamma_b} < 1 + \frac{5.074}{2.366} = 3.145$$

时晶界不能动。孪晶的界面能比非孪晶的晶面能低很多，铜的普通大角度晶界能是孪晶界能的 10 倍多，所以此孪晶界不能转动。

13. 金属 A 中的第二相在晶内为球状，在 A 的界面上为双球冠状。设 B 在 A 上的二面角 2θ 为 120° 以及 0° ，问在这两种情况下，B 在晶界上还是在晶内稳定？双球冠体积为 $2\{\pi R^3[(2-3\cos\theta+\cos^3\theta)/3]\}$ ；双球冠的表面积为 $2\{2\pi R^2[(1-\cos\theta)]\}$ ，其中 R 是球冠的曲率半径。

解：第二相在晶粒内呈球状，半径为 R ，体积 $V = 4\pi R^3/3$ ，表面积 $S = 4\pi R^2$ 。双球冠体积 $V' = 2\{\pi R^3[(2-3\cos\theta+\cos^3\theta)/3]\}$ ，双球冠的表面积 $S' = 2\{2\pi R^2[(1-\cos\theta)]\}$ ，其中 R 为球冠的曲率半径。当在晶界形成双球冠后，减少了直径 $L = 2R\sin\theta$ 的圆的 A 晶界面积，如右图所示。



当 $2\theta = 120^\circ$ 时， $\gamma_{AA} = 2\gamma_{AB}\cos 60^\circ = \gamma_{AB}$ 。若 B 相在 A 晶粒的晶界成双冠球状，增加的总界面能 ΔE 为

$$\begin{aligned} \Delta E &= \gamma_{AB} \times 4\pi R_{AB}^2 (1 - \cos 60^\circ) - \pi (L/2)^2 \gamma_{AA} \\ &= \gamma_{AB} \times 2\pi R_{AB}^2 - \pi R_{AB}^2 \sin^2 60^\circ \gamma_{AB} = \gamma_{AB} \times \pi R_{AB}^2 (2 - \frac{3}{4}) = \frac{5}{4} \pi R_{AB}^2 \gamma_{AB} \end{aligned}$$

若 B 相在晶内呈球状时，因 B 相的体积相同，球的半径 R 作如下计算：

$$\frac{4}{3} \pi R^3 = 2\pi R_{AB}^3 \left(\frac{2 - 3\cos 60^\circ + \cos^3 60^\circ}{3} \right) = 2\pi R_{AB}^3 \left(\frac{2 - 3 \times 0.5 + (0.5)^3}{3} \right) = 0.125 \times 2\pi R_{AB}^3$$

$$\text{即 } R = (1.5 \times 0.125)^{1/3} R_{AB} = 0.572 R_{AB}$$

增加的总界面能 $\Delta E'$ 为

$$\Delta E' = 4\pi R^2 \gamma_{AB} = 4\pi \times 0.572 R_{AB} \gamma_{AB} = 7.188 R_{AB} \gamma_{AB}$$

$\Delta E' > \Delta E$ ，所以在晶界稳定。

当 $2\theta = 0^\circ$ 时， $\gamma_{AA} = 2\gamma_{AB}\cos 0^\circ = 2\gamma_{AB}$ 。B 相在 A 晶粒的晶界铺开，设铺开的面积为 S ，增加的总界面能 ΔE 为

$$\Delta E = 2S\gamma_{AB} - S\gamma_{AA} = 2S\gamma_{AB} - 2S\gamma_{AB} = 0$$

若 B 相在晶内呈球状时，增加的总界面能 $\Delta E'$ 为

$$\Delta E' = 4\pi R^2 \gamma_{AB} > 0$$

$\Delta E'$ 永远大于 0，所以还是在晶界稳定。

第 8 章 晶体的塑性形变题解

1. 细铜棒两端固定，从 100°C 冷却到 0°C ，问发生的内应力有多大？铜的热膨胀系数 $=1.5 \times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ ，弹性模量 $E=1.103 \times 10^{11} \text{ Pa}$ 。

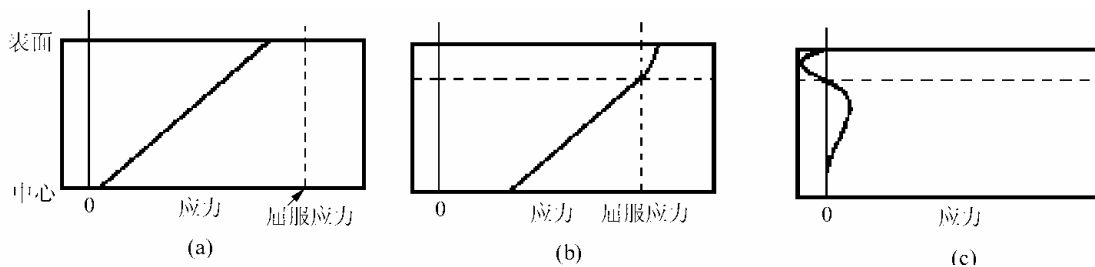
解：设棒长为 1，热膨胀系数 $\alpha=1.5 \times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ ，从 100°C 冷却到 0°C 棒收缩量 $\Delta L=\alpha\Delta T=1.5 \times 10^{-6} \times 100=1.5 \times 10^{-4}$ ，如果棒仍保持弹性范围，根据胡克定律，内应力 σ 应为：

$$\sigma = E\varepsilon = 1.103 \times 10^{11} \times 1.5 \times 10^{-4} \text{ Pa} = 1.65 \times 10^7 \text{ Pa}$$

2. 板材轧制时，设弹性变形量从表面到中心是线性的。(a)压下量不大时，表面仍处在弹性范围，画出加载及卸载时从表面到中心的应力分布；(b)表面发生了塑性形变，但中心仍处于弹性范围，画出加载及卸载时从表面到中心的应力分布。

解：(a)当压下量不大表面仍处在弹性范围时，因表面变形量最大，所以整个板处于弹性范围，加载时，应力与应变成正比，所以应力从表面到中心亦呈线性分布，如下图(a)所示。卸载后，弹性应变完全回复，板内无应力存在。

(b)当表面发生了塑性形变但中心仍处于弹性范围时，表面层已屈服，它的应力与应变关系不再符合胡克定律，所以表层应力的增加斜率降低，如下图(b)所示；卸载后，表层的塑性形变不能回复，内部的弹性变形要回复，因此，表层受内部收缩而产生压应力，因表层留下的永久变形不能回复而使内部产生拉伸应力，这些残余应力的分布如下图(c)所示。

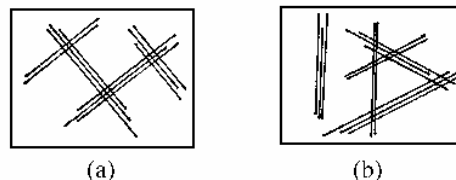


3. 体心立方晶体可能的滑移面是 $\{110\}$ 、 $\{112\}$ 及 $\{123\}$ ，若滑移方向为 $[\bar{1}\bar{1}1]$ ，具体的滑移系是哪些？

解：一个具体的滑移系的滑移方向必在滑移面上，根据晶带定律可知，滑移方向为 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 时，对于 $\{110\}$ 滑移面，可能的滑移面是 (110) 、 (011) 和 $(10\bar{1})$ 。对于 $\{112\}$ 滑移面，可能的滑移面是 (121) 、 $(21\bar{1})$ 和 $(\bar{1}12)$ 。对于 $\{123\}$ 滑移面，可能的滑移面是 (132) 、 (231) 、 $(32\bar{1})$ 、 $(\bar{1}23)$ 、 $(\bar{2}13)$ 和 $(31\bar{2})$ 。

4. 铜单晶表面平行于 (001) 面，若晶体可以在各个滑移系滑移，画出表面出现的滑移线的痕迹，求出滑移线间的角度。若铜晶体表面平行于 (111) 面，情况又如何？

解：铜的晶体结构是 fcc，滑移系是 $\{111\} \langle \bar{1}10 \rangle$ 。当滑移方向（柏氏矢量）与表面不平行时，位错滑出此表面就会留下滑移痕迹，这个痕迹是表面与开动的滑移面的交线。



对于 (001) 表面， (001) 面与四个 $\{111\}$ 面只有两个交线，它们的方向是 $[110]$ 与 $[\bar{1}\bar{1}0]$ ，这两个方向的夹角为 90° ，故在 (001) 面上的滑移痕迹如右图(a)所示。

对于(111)面，六个 $\{110\}$ 方向中只有 $[110]$ 、 $[011]$ 和 $[101]$ 三个方向与它不平行，它们分别处于除(111)面外的三个 $\{111\}$ 面上，即在 $(\bar{1}11)$ 、 $(1\bar{1}1)$ 和 $(11\bar{1})$ 上。这三个面与(111)面的交线分别为 $[1\bar{1}0]$ 、 $[01\bar{1}]$ 和 $[10\bar{1}]$ ，它们间互相的交角都为 60° ，故在(001)面上的滑移痕迹如上图(b)所示。

5. 铝的临界分切应力为 $2.40 \times 10^5 \text{ Pa}$ ，当拉伸轴为 $[001]$ 时，引起屈服所需要的拉伸应力是多大？

解：拉伸应力 σ 与滑移系上的分切应力 τ 间的关系为 $\tau = \sigma \cos \lambda \cos \varphi$ ，其中 λ 和 φ 分别是拉伸方向与滑移方向以及滑移面法向的夹角。铝的晶体结构是 fcc，滑移系是 $\{111\}\langle 110 \rangle$ 。拉伸轴是 $[001]$ 时，因它与 $[110]$ 及 $[\bar{1}10]$ 垂直，所以由它组成的滑移系上的分切应力为 0，它们不会开动。而 $[001]$ 轴对其它的滑移系的集合关系是等同的，在它们的分切应力相等。以 $(\bar{1}11)[0\bar{1}1]$ 滑移系为例计算引起屈服所需要的拉伸应力。 $[001]$ 与滑移面法线 $[\bar{1}11]$ 夹角 φ 的余弦 $\cos \varphi$ 以及 $[001]$ 与滑移方向 $[0\bar{1}1]$ 夹角 λ 的余弦 $\cos \lambda$ 分别是

$$\cos \varphi = \frac{1}{\sqrt{1}\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad \cos \lambda = \frac{1}{\sqrt{1}\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

当临界分切应力 τ_c 为 $2.40 \times 10^5 \text{ Pa}$ 时对应的应力 σ_c 就是屈服应力：

$$\sigma_c = \frac{\tau_c}{\cos \varphi \cos \lambda} = 2.4 \times 10^5 \times \sqrt{3} \times \sqrt{2} \text{ Pa} = 5.89 \times 10^5 \text{ Pa}$$

6. 一个简单立方晶系的双晶，它们滑移系为 $\{100\}\langle 100 \rangle$ ，双晶体的取向及力轴取向如图 8-64 所示，问哪一个晶体首先滑移？在哪个滑移系滑移？

解：简单立方晶系的滑移系是 $\{100\}\langle 100 \rangle$ 。从图可知，对于II晶体，拉伸应力垂直于 $[001]$ 与 $[100]$ 共面的(010)面，即拉伸方向是 $[010]$ 。 $[010]$ 方向不是与 $\{100\}$ 面平行就是与 $\{100\}$ 面垂直，所以这个方向上的拉伸应力在任何一个滑移系上的分切应力都为 0，II晶体不能滑移。

对于I晶体，拉伸应力垂直于 $[100]$ 与 $[0\bar{1}1]$ 共面的(011)面，即拉伸方向是 $[011]$ 。 $[011]$ 与(100)面垂直，故在以(100)为滑移系的滑移系上的分切应力为 0，它们不能开动；

$[011]$ 又与(010)面平行，故在以(010)为滑移系的滑移系上的分切应力为 0，它们也不能开动；这样，拉伸轴为 $[011]$ 时只有(010) $[001]$ 和(001) $[010]$ 两个滑移系上的分切应力不为 0。由于 $[011]$ 轴与这两个滑移系的几何关系等效，故分切应力相等。在拉伸应力足够大时，可以在这两个滑移系开动。

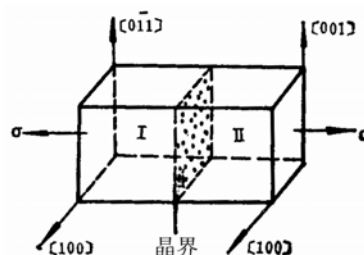
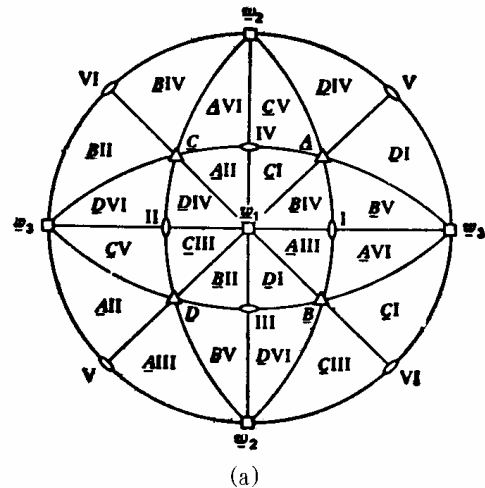


图 8-64

7. 面心立方晶体拉伸时，力轴处在 $[001]$ 及 $[110]$ 组成的面上，它的等效滑移系有几个？是哪些？

解： $[001]$ 及 $[110]$ 组成的面是 $(1\bar{1}0)$ ，当力轴在 $(1\bar{1}0)$ 面上时，可能的方向很多。看 $[001]$ 标准极射投影图（见右图），其中 A： $(\bar{1}11)$ 面，B： (111) 面，C： $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面，D： $(1\bar{1}1)$ 面。I： $[011]$ 极点，II： $[0\bar{1}1]$ 极点，III： $[101]$ 极点，IV： $[\bar{1}01]$ 极点，V： $[1\bar{1}0]$ 极点，VI： $[110]$ 。以 $[1\bar{1}0]$ 为法线的面的迹痕是右图圆的VI-C- w_1 -B-VI线（直径）。如果力轴处于VI极点方向，它的等效滑移系为 CI、CIII、BIV和 BII，这四个滑移系可以开动；如果力轴处于VI-C 线上的极点方向，它的等效滑移系为 BIV和 BII，这两个滑移系可以开动；如果力轴处于 C 极点方向，它的等效滑移系为 BII、BIV、AII、AIV、DIV和 DVI，这六

个滑移系可以开动；如果力轴处于 $C-w_1$ 线上的极点方向，它的等效滑移系为 DIV 和 AII ，这两个滑移系可以开动；如果力轴处于 w_1 极点 ($[001]$) 方向，它的等效滑移系为 DIV 、 AII 、 CI 、 $CIII$ 、 BII 、 BIV 、 DI 和 $AIII$ ，这八个滑移系可以开动；如果力轴处于 w_1-B 线上的极点方向，它的等效滑移系为 DI 和 $AIII$ ，这两个滑移系可以开动；如果力轴处于 B 的极点方向，它的等效滑移系为 DI 、 $AIII$ 、 AVI 、 DVI 、 CI 和 $CIII$ ，这六个滑移系可以开动。如果力轴处于 $B-VI$ 线上的极点方向，它的等效滑移系为 CI 、 $CIII$ ，这两个滑移系可以开动。



8. 面心立方晶体拉伸时，力轴为 $[1\bar{1}0]$ ，写出滑移的等效的滑移系。
解：力轴为 $[1\bar{1}0]$ 相当上题极图上的 V 点，从图看出，它的等效滑移系 AII 、 $AIII$ 、 DI 和 DIV ，即 $(\bar{1}11)[0\bar{1}1]$ 、 $(\bar{1}11)[101]$ 、 $(1\bar{1}1)[011]$ 和 $(1\bar{1}1)[\bar{1}01]$ 。
9. 面心立方晶体沿 $[131]$ 轴拉伸，确定如下滑移系的分切应力： $(111)[0\bar{1}1]$ 、 $(111)[10\bar{1}]$ 、 $(111)[1\bar{1}0]$ 。拉伸应力为 $6.9 \times 10^5 \text{ Pa}$ 。

解：根据拉伸应力 σ 与滑移系上的分切应力 τ 间的关系为 $\tau = \sigma \cos \lambda \cos \varphi$ ，对于 $(111)[0\bar{1}1]$ 滑移系， $[131]$ 与滑移面法线 $[111]$ 夹角 φ 的余弦 $\cos \varphi$ 以及 $[131]$ 与滑移方向 $[0\bar{1}1]$ 夹角 λ 的余弦 $\cos \lambda$ 分别是

$$\cos \varphi = \frac{1+3+1}{\sqrt{1+1+1}\sqrt{1+3^2+1}} = \frac{5}{\sqrt{3}\sqrt{11}} = 0.870$$

$$\cos \lambda = \frac{-3+1}{\sqrt{1+1}\sqrt{1+3^2+1}} = \frac{-2}{\sqrt{2}\sqrt{11}} = -0.426$$

故 $\tau = \sigma \cos \lambda \cos \varphi = -6.9 \times 10^5 \times 0.426 \times 0.870 \text{ Pa} = -2.56 \times 10^5 \text{ Pa}$

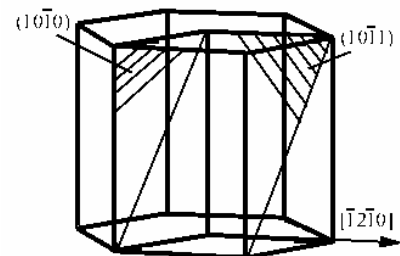
对于 $(111)[10\bar{1}]$ 滑移系， $[131]$ 与滑移方向 $[10\bar{1}]$ 垂直，所以这个滑移系的分切应力为 0。

10. Mg 可在 $\{10\bar{1}0\}$ 及基面间交滑移，又可在 $\{10\bar{1}1\}$ 及基面间交滑移；

(a) 以一单胞表示出这两种交滑移的可能性。

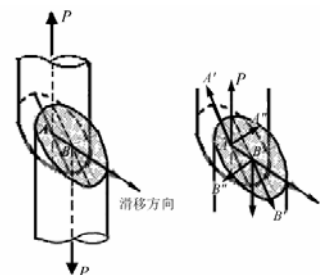
(b) 在 $(10\bar{1}0)$ 及 $(10\bar{1}1)$ 间能否交滑移？说明之。

解：Mg 的晶体结构是 hcp，滑移方向是 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 。从右图的例子可以看出， $(10\bar{1}0)$ 面和基面 (0001) 以及 $(10\bar{1}1)$ 面和基面 (0001) 都共有 $[\bar{1}2\bar{1}0]$ 方向，所以它们之间可以交滑移。同样 $(10\bar{1}0)$ 面和 $(10\bar{1}1)$ 面共有 $[\bar{1}2\bar{1}0]$ 方向，所以他们之间也可以交滑移。



11. 分析单晶体拉伸时所发生的转动方向，说明原因。

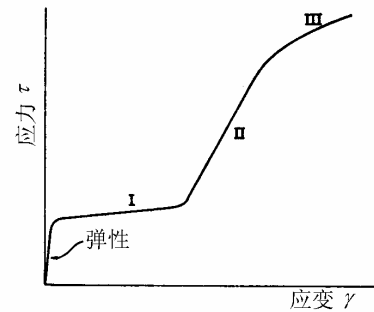
解：设一个圆柱体两端受拉伸力，拉伸时，滑移面两侧晶体相对于滑移方向滑动，这样，滑移面两侧的力轴错开不再在一直线上，上下力轴错开了如右图中的 AB 距离。滑移面上下的力在滑移面的法线方向的分力分别为 AA' 和



BB' ，他们构成一对力偶，使滑移面向平行轴向的方向转动。滑移面上下面的力在滑移面上的分力分别为 AA'' 和 BB'' ，他们也构成一对力偶，使滑移方向向滑移面椭圆截面的长轴方向转动。上述的两种转动综合的结果是使滑移方向向力轴方向转动。

12. 示意画出单晶的应力-应变 ($\tau-\gamma$) 曲线，并表出各阶段。铝 (层错能约为 200mJ/m^2) 和不锈钢 (层错能约为 10mJ/m^2) 哪一种材料形变第 III 阶段开始得更早? 这两种材料滑移特征有什么区别?

解：右图是单晶的应力-应变 ($\tau-\gamma$) 曲线的示意图。
第 III 阶段是动态回复阶段，主要的机制是在塞积群中的螺位错交滑移，使得塞积群前的应力集中得以松弛，从而使硬化率下降。所以越容易交滑移的材料第 III 阶段开始越早。铝的层错能很高，位错一般不能扩展，所以其螺位错容易交滑移；而不锈钢的层错能很低，位错通常都会扩展，所以螺位错不容易交滑移。所以铝在受力时更早进入第 III 阶段。



13. 一个圆柱形面心立方单晶，晶体的原始取向是 $[517]$ 平行于圆柱中心轴线。(a) 在 (001) 标准极射赤面投影图上标出加载轴线的起始位置；(b) 开始滑移的滑移系是什么？(c) 确定第一次超射的加载轴线位置。(d) 在这一阶段形变中，晶体转动角度有多大？(e) 计算在第一次超射时的切应变变量。

解：设在 (001) 标准极射赤面投影图上以 (001) 极点到 (100) 极点的线为 y 坐标轴， (001) 极点到 (010) 极点的线为 x 坐标轴，轴长都为 1。计算加载轴 $[517]$ 极点在这个坐标下的坐标 (x, y) 来标出它的位置。 (x, y) 为

$$x = \frac{[1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta]^{1/2}}{1 + \cos \alpha}$$

$$y = \frac{\cos \beta}{1 + \cos \alpha}$$

其中 α 是 $[517]$ 与 $[001]$ 的夹角， β 是 $[517]$ 与 $[100]$ 的夹角。 $\cos \alpha$ 和 $\cos \beta$ 分别为

$$\cos \alpha = \frac{7}{\sqrt{5^2 + 1^2 + 7^2} \sqrt{1}} = \frac{7}{\sqrt{75}} = 0.808$$

$$\cos \beta = \frac{5}{\sqrt{5^2 + 1^2 + 7^2} \sqrt{1}} = \frac{5}{\sqrt{75}} = 0.577$$

$[517]$ 极点的 x 、 y 分别是

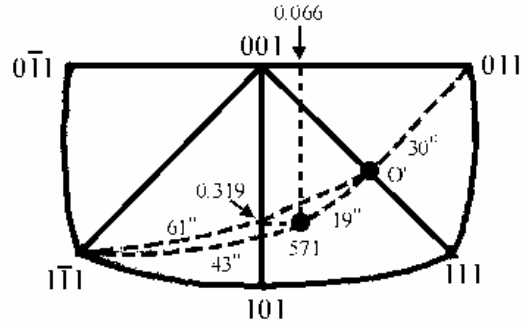
$$x = \frac{[1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta]^{1/2}}{1 + \cos \alpha} = \frac{[1 - 0.808^2 - 0.577^2]^{1/2}}{1 + 0.808} = 0.066$$

$$y = \frac{\cos \beta}{1 + \cos \alpha} = \frac{0.577}{1 + 0.808} = 0.319$$

在 (001) 标准极射赤面投影图上标出 $[517]$ 极点的位置 (见下图)，它处于第 7 题给出的 (001) 极图的 DI 区，开动的滑移系是 $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$ 。这个滑移系开动伴随 $[517]$ 向 $[011]$ 方向转动，转动的轨迹是 $[517]$ 和 $[011]$ 组成的面在极图上的迹痕，如图所示。当转动到 $w-B$ 线上时，即力轴和 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 面重合时 (下图中的 O' 点)，有两个等效滑移系 $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$ 和 $(\bar{1}\bar{1}1)[101]$ 可以开动，这个位置就是第一次超射的加载轴线位置。用吴氏网量出 $[517]$ 到这个极点间的角度是 19° 。

如果知道拉伸轴原始位置与滑移面及滑移方向的夹角 χ_0 和 λ_0 以及转动后拉伸轴与滑移面及滑移方向的夹角 χ_1 和 λ_1 的话,则产生的切应变 γ 可以按下式计算

$$\gamma = \frac{\cos \lambda_1}{\sin \chi_1} - \frac{\cos \lambda_0}{\sin \chi_0}$$



在吴氏网上量出[517]极点与 $[1\bar{1}1]$ 极点间的

角度为 43° , 即拉伸轴原始方向与滑移面 $(1\bar{1}1)$ 的夹角是 $\chi_0 = 90^\circ - 43^\circ = 47^\circ$; 在吴氏网上量出[517]极点与滑移方向[011]极点间的角度 λ_0 为 49° 。另外, 再在吴氏网上量出转动到开始发生超射的极点与 $[1\bar{1}1]$ 极点间的角度为 61° , 即此方向与滑移面的夹角 $\chi_1 = 90^\circ - 61^\circ = 29^\circ$; 在吴氏网上量出开始发生超射的极点与滑移方向[011]极点间的角度为 $\lambda_1 = 30^\circ$ 。把 χ_0 、 λ_0 、 χ_1 和 λ_1 代入上式, 求得在发生超射前的切应变 γ

$$\gamma = \frac{\cos \lambda_1}{\sin \chi_1} - \frac{\cos \lambda_0}{\sin \chi_0} = \frac{\cos 30^\circ}{\sin 29^\circ} - \frac{\cos 49^\circ}{\sin 47^\circ} = 0.889$$

上面所述的过程也可以不用画图而用计算的方法得出结果。因开始滑移的滑移系是 $(1\bar{1}1)[011]$, 变形时[517]向[011]转动, 即拉伸轴在[517]和[011]组成的面 $(\bar{6}55)$ 面上转动。当拉伸轴转动到 $(\bar{1}10)$ 面上时发生超射, 这个超射的位置的方向应该是 $(\bar{6}55)$ 面与 $(\bar{1}10)$ 的交线的方向, 计算出 $(\bar{6}55)$ 面与 $(\bar{1}10)$ 的交线的方向是 $[5511]$, 即超射的位置的方向是 $[5511]$ 。力轴原始取向[517]与发生超射的取向 $[5511]$ 间夹角 θ 是

$$\cos \theta = \frac{5 \times 5 + 5 + 7 \times 11}{\sqrt{5^2 + 1 + 7^2} \sqrt{5^2 + 5^2 + 11^2}} = \frac{107}{\sqrt{75} \sqrt{171}} = 0.949$$

$$\theta = 19.1^\circ$$

即力轴转到开始发生超射位置时已经转了 65.48° 。

力轴原始取向[517]与开动滑移系的滑移面 $(1\bar{1}1)$ 面法线的夹角 φ_0 是

$$\cos \varphi = \frac{5 - 1 + 7}{\sqrt{5^2 + 1 + 7^2} \sqrt{3}} = \frac{11}{\sqrt{75} \sqrt{3}} = 0.7333$$

$$\varphi = 42.83^\circ$$

而原始取向[517]与开动滑移系的滑移面 $(1\bar{1}1)$ 面法线的夹角 χ_0 是 $90^\circ - \varphi_0 = 47.17^\circ$ 。原始取向[517]与开动滑移系的滑移方向[011]的夹角 λ_0 是

$$\cos \lambda_0 = \frac{1 + 7}{\sqrt{5^2 + 1 + 7^2} \sqrt{1 + 1}} = \frac{8}{\sqrt{75} \sqrt{2}} = 0.653$$

$$\lambda_0 = 49.22^\circ$$

超射的位置的方向 $[5511]$ 与开动滑移系的滑移面 $(1\bar{1}1)$ 面法线的夹角 φ_1 是

$$\cos \varphi_1 = \frac{5 - 5 + 11}{\sqrt{5^2 + 5^2 + 11^2} \sqrt{3}} = \frac{11}{\sqrt{171} \sqrt{3}} = 0.486$$

$$\varphi_1 = 60.94^\circ$$

即超射的位置的方向 $[5511]$ 与开动滑移系的滑移面 $(1\bar{1}1)$ 面的夹角 χ_1 是 $90^\circ - \varphi_1 = 29.06^\circ$,

超射的位置的方向 $[5511]$ 与开动滑移系的滑移方向[011]的夹角 λ_1 是

$$\cos \lambda_1 = \frac{5 + 11}{\sqrt{5^2 + 5^2 + 11^2} \sqrt{2}} = \frac{16}{\sqrt{171} \sqrt{2}} = 0.865$$

$$\lambda_1 = 30.09^\circ$$

在发生超射前的切应变 γ

$$\gamma = \frac{\cos \lambda_1}{\sin \chi_1} - \frac{\cos \lambda_0}{\sin \chi_0} = \frac{\cos 30.09^\circ}{\sin 29.06^\circ} - \frac{\cos 49.22^\circ}{\sin 47.17^\circ} = \frac{0.865}{0.486} - \frac{0.653}{0.733} = 0.889$$

这和上面用吴氏网测量的结果是吻合的。

14. 面心立方金属孪生的 K_1 和 K_2 都是 $\{111\}$ ，在一个特定的 $\{111\}$ 面，例如 (111) 面有几种产生孪晶的方法，写出它们的 η_1 的方向指数。

面心立方金属孪生的孪生方向 η_1 是 $\langle 11\bar{2} \rangle$ 方向， η_1 必在 K_1 面上。如果在 (111) 面上发生孪晶，根据晶带定律，在 (111) 面上的 η_1 是 $[11\bar{2}]$ 、 $[\bar{1}21]$ 和 $[2\bar{1}1]$ 三种。

15. 计算 Be 和 Zr 孪生时的切应变变量。Be 和 Zr 的孪生元素如下：

Be: $c/a=1.5847$, $K_1=\{10\bar{1}2\}$, $K_2=\{\bar{1}012\}$

Zr: $c/a=1.589$, $K_1=\{11\bar{2}2\}$, $K_2=\{11\bar{2}\bar{4}\}$

解：对于 Be，以孪生面 K_1 为 $(10\bar{1}2)$ 、 K_2 面为 $(\bar{1}012)$ 讨论，它们的三轴坐标指数分别为 (102) 和 $(10\bar{2})$ ，设 (102) 面为 $(h_1k_1l_1)$ 、 $(10\bar{2})$ 面为 $(h_2k_2l_2)$ ，它们的夹角 α 是

$$\begin{aligned} \cos \alpha &= \frac{4[h_1h_2 + (h_1k_2 + h_2k_1)/2 + k_1k_2]/3 + l_1l_2a^2/c^2}{[4(h_1^2 + h_1k_1 + k_1^2)/3 + l_1^2a^2/c^2]^{1/2}[4(h_2^2 + h_2k_2 + k_2^2)/3 + l_2^2a^2/c^2]^{1/2}} \\ &= \frac{4[1+0]/3 - 2 \times 2 \times (1/1.5847)^2}{[4/3 + 4 \times (1/1.5847)^2]^{1/2}[4/3 + 4 \times (1/1.587)^2]^{1/2}} = \frac{-0.2595}{2.926} = -0.0886 \end{aligned}$$

$$\alpha = 95.08^\circ$$

孪生切变 S 为

$$S = 2 \cot \alpha = 2 \cot 95.08^\circ = -0.178$$

对于 Zr，以孪生面 K_1 为 $(11\bar{2}2)$ 、 K_2 面为 $(11\bar{2}\bar{4})$ 讨论，它们的三轴坐标指数分别为 (112) 和 $(11\bar{4})$ ，设 (112) 面为 $(h_1k_1l_1)$ 、 $(11\bar{4})$ 面为 $(h_2k_2l_2)$ ，它们的夹角 α 是

$$\begin{aligned} \cos \alpha &= \frac{4[h_1h_2 + (h_1k_2 + h_2k_1)/2 + k_1k_2]/3 + l_1l_2a^2/c^2}{[4(h_1^2 + h_1k_1 + k_1^2)/3 + l_1^2a^2/c^2]^{1/2}[4(h_2^2 + h_2k_2 + k_2^2)/3 + l_2^2a^2/c^2]^{1/2}} \\ &= \frac{4[1 + (1+1)/2 + 1]/3 - 2 \times 4 \times (1/1.589)^2}{[4(1+1+1)/3 + 4 \times (1/1.589)^2]^{1/2}[4(1+1+1)/3 + 16 \times (1/1.589)^2]^{1/2}} = \frac{0.832}{7.597} = 0.1095 \end{aligned}$$

$$\alpha = 83.71^\circ$$

孪生切变 S 为

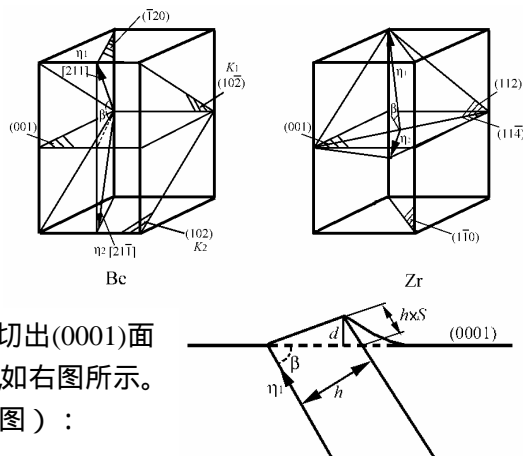
$$S = 2 \cot \alpha = 2 \cot 83.71^\circ = 0.2203$$

Be 和 Zr 的 K_1 、 K_2 、 η_1 和 η_2 与基面 (0001) 间的关系如右图所示：

以垂直于 K_1 和 K_2 面（也垂直于 (0001) 面）并包含 η_1 和 η_2 的面来看发生孪生时的情况。对于 Be 这个面是 $(\bar{1}2\bar{1}0)$ 面，对于 Zr 这个面是 $(1\bar{1}00)$ 面。在这个面上 η_1 与 (0001) 面的夹角 β 也是 K_1 面与 (0001) 面的夹角。若表面是 (0001) 面，当产生孪晶时切出 (0001) 面的距离为孪晶厚度 h 和孪生切变 S 的乘积 如右图所示。这样，孪生凸初表面的高度 d 应是（见右图）：

$$d = h \times S \sin \beta$$

Be 的 K_1 面 (102) 与基面 (001) 的夹角 β_1 为



$$\cos \beta_1 = \frac{2 \times (1/1.5847)^2}{[4/3 + 4 \times (1/1.5847)^2]^{1/2} [(1/1.5847)^2]^{1/2}} = \frac{0.796}{1.0794} = 0.7374$$

$$\beta_1 = 42.48^\circ$$

Zr 的 K_1 面(112)与基面(001)的夹角 β_2 为

$$\cos \beta_2 = \frac{2 \times (1/1.589)^2}{[4(1+1+1)/3 + 4 \times (1/1.589)^2]^{1/2} [(1/1.589)^2]^{1/2}} = \frac{0.792}{1.4871} = 0.5326$$

$$\beta_2 = 57.82^\circ$$

把 β 代入计算 d 的式子, 得 Be 和 Zr 孪生后在(0001)表面的浮凸的高度 d_1 和 d_2 :

$$d_1 = h \times S \sin \beta = h \times 0.178 \sin 42.48^\circ = 0.1205h$$

$$d_2 = h \times S \sin \beta = h \times 0.2203 \sin 57.82^\circ = 0.1865h$$

注意, Be 和 Zr 孪生的切变方向相反, 上面的切变示意图上应该是一个向外切动, 一个向内切动, 但作为计算其式子是一样的。

16. $c/a=1.800$ 的 hcp 金属, 它最可能的滑移系是什么? 如图 8-65 的三种取向及加载方式, 确定哪一种方式会产生滑移, 哪一种方式会产生孪生 (只考虑 $\{10\bar{1}2\}$ 的孪生)。

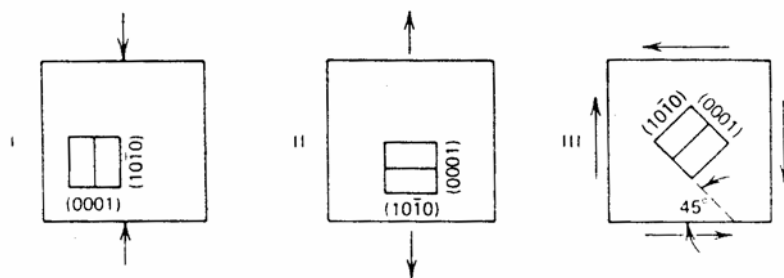
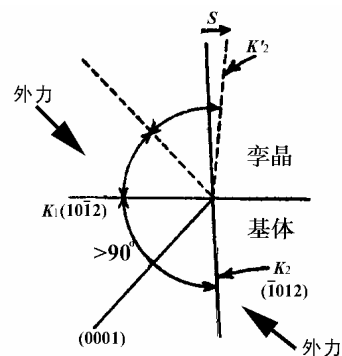


图 8-65

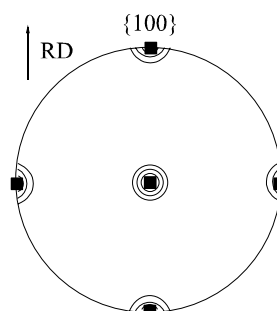
解: $c/a=1.800$ 的 hcp 晶体, 开动的滑移系是 $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ 。上图 I 的(0001)面与力轴垂直, 图 II 的(0001)面与力轴平行, 所以在滑移系的分切应力都为 0, 这两种情况都不能滑移。图 III 的应力状态相当于在 45° 对角线方向上受拉伸应力, 这时力轴和(0001)面平行, 相当于图 II 的情况, 所以也不能滑移。

$c/a=1.800$ 的 hcp 晶体, 孪生元素 K_1 为 $\{10\bar{1}2\}$, η_1 为 $\langle 10\bar{1}1 \rangle$ 。上图 I 的压缩力在 $(10\bar{1}2)$ 面及上有分切应力, 又因 $c/a > \sqrt{3}$, 分切应力的方向必须如右图的 S 方向。现加的外力是垂直(0001)面的压应力, 从图看出, 它在 K_1 面的分切应力的方向是可以产生孪晶的, 如果所加的力足够大, 可以发生孪生。上图 II 的拉伸力平行于(0001)面, 拉伸也可形成孪晶。上图 III 的受力情况与图 II 的等效, 所以也能产生孪晶。



17. 画出立方系(100)[001]轧制织构的(100)极图的示意图。

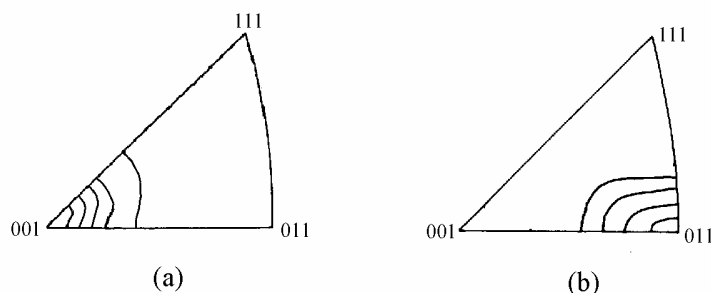
解: 极图是表示被测材料中各个晶粒的某一选定晶面 $\{hkl\}$ 的取向分布的图形。对于轧制织构的 $\{hkl\}$ 极图, 以轧向 RD、横向 TD 和轧面法线 ND 作坐标架, 以轧面作为投影面, 作出各晶粒某晶面 $\{hkl\}$ 极点在球面上极密度分布的投影。立方系



(100)[001]轧制织构在(100)极图表现为晶粒的{100}面极点密集于(100)极图上的{100}极点上，如右示意图所示

18.画出铝的[100]拔丝织构及铁的[110]拔丝织构的反极图。

解：反极图是描述多晶体材料中平行于材料的某一外观特征方向的晶向在晶体坐标架的空间分布的图形，参考坐标架的3个轴一般取晶体的3个晶轴（或低指数的晶向）。铝的[100]拔丝织构是各晶粒的[100]方向趋向平行于拉拔轴，以3个晶轴为坐标，在(001)极图上把拉拔轴相对于各晶粒的取向密度画出，得反极图如下图(a)所示。按同样道理，铁的[110]拔丝织构的反极图如下图(b)所示。



19.对低碳钢测得不同晶粒大小的下屈服点数据如下：

$d/\mu\text{m}$	250	111	37	18	10	6.9	5.4	3.0
σ_s/MPa	103	131	193	207	275	303	341	428

问 d 和 σ_s 间是否符合 Hall-Petch 关系?用最小二乘法求出 Hall-Petch 关系中的常数。

解：Hall-Petch 关系是

$$\sigma_s = \sigma_0 + k_y d^{-1/2}$$

为了处理方便，把上表 d 的数据变换成 $d^{-1/2}$ ：

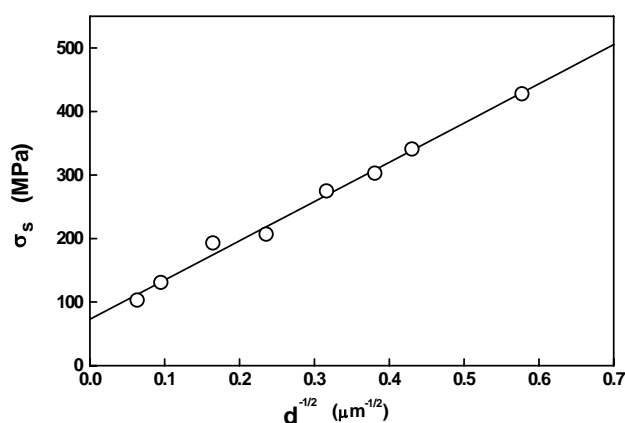
$d^{-1/2}/\mu\text{m}^{-1/2}$	0.0632	0.0949	0.104	0.236	0.316	0.381	0.430	0.577
σ_s/MPa	103	131	193	207	275	303	341	428

把上表数据画图，并进行线性

回归，得

$$\sigma_s = 72.86 + 617.84 d^{-1/2} \text{ (Mpa)}$$

其中 d 的单位是 μm 。回归所得方程的相关系数 $R=0.996$ ，说明 d 和 σ_s 间是符合 Hall-Petch 关系的。



第9章 回复和再结晶题解

1. 纯金属在不同温度加热后在水中淬火，它的电阻率比缓慢冷却时的高 $\Delta\rho_0$ ， $\Delta\rho_0$ 正比于空位浓度。

如果忽略了淬火过程中消失在阱中的空位，根据图9-48的实验数据求出空位形成能。

该金属经700°C加热淬火并在不同温度恒温退火后，测得电阻变化 $\Delta\rho/\Delta\rho_0$ （ $\Delta\rho_0$ 是淬火后电阻的增加值， $\Delta\rho$ 是退火后的电阻和不经淬火的电阻差）数据如下： $\Delta\rho/\Delta\rho_0 = 2 \times 10^{-2}$ 时，在165°C及140°C退火分别需要保温时间为17.65min和61.76min； $\Delta\rho/\Delta\rho_0 = 5 \times 10^{-2}$ 时，在165°C、140°C及118°C退火分别需要保温时间为13.24min、46.16min及167.65min，求出电阻回复的激活能。

这种金属的自扩散激活能有多大？

解：宏观热膨胀及微观热膨胀所引起的体积变化为 $3\Delta L/L$ 及 $3\Delta a/a$ ，这两种变化的差异是由空位的存在引起的，所以空位浓度 x_v 是

$$x_v = 3\left(\frac{\Delta L}{L} - \frac{\Delta a}{a}\right)$$

在 T_1 和 T_2 两个温度下的空位浓度 x_{v1} 和 x_{v2} 之比为

$$\frac{x_{v1}}{x_{v2}} = \frac{\exp(-Q/kT_1)}{\exp(-Q/kT_2)}$$

由图量出在650°C时 $(\Delta L/L - \Delta a/a) = 0.303 \times 10^{-3}$ ，在600°C时 $(\Delta L/L - \Delta a/a) = 0.167 \times 10^{-3}$ ，即在650°C和600°C温度下的空位浓度分别为 $3 \times 0.303 \times 10^{-3}$ 和 $3 \times 0.167 \times 10^{-3}$ 。

其中 Q 是空位形成能。按上式得

$$\frac{0.303}{0.167} = \exp\left[-\frac{Q}{k}\left(\frac{1}{923} - \frac{1}{873}\right)\right]$$

如果 Q 的单位为eV，则 $k = 8.61 \times 10^{-5}$ （eV/K）。上式两边取对数，整理得

$$Q = -8.61 \times 10^{-5} \frac{\ln(0.303/0.167)}{(1/923 - 1/873)} \text{ eV} = 0.83 \text{ eV}$$

电阻回复动力学是一型动力学，电阻的相对变化 $\Delta\rho/\Delta\rho_0$ 随时间的变化率 $d(\Delta\rho/\Delta\rho_0)/dt$ 符合如下关系

$$\frac{d(\Delta\rho/\Delta\rho_0)}{dt} = \frac{a}{t} = A \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right)$$

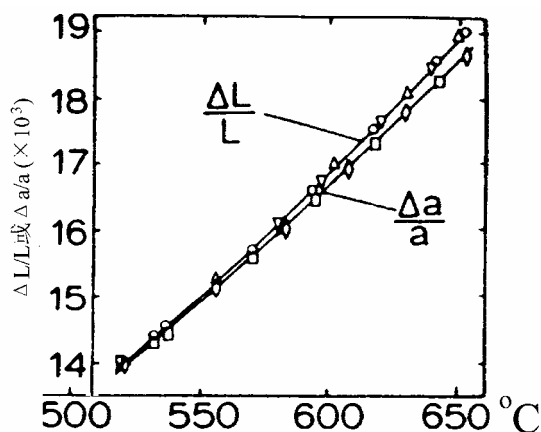
式中 a 和 A 是常数， t 是回复时间， Q 是回复激活能。若电阻相对变化 $\Delta\rho/\Delta\rho_0$ 一定，在 T_1 和 T_2 下回复所需时间为 t_1 和 t_2 ，则

$$\ln \frac{t_1}{t_2} = \frac{Q}{k} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

现知 $\Delta\rho/\Delta\rho_0 = 2 \times 10^{-2}$ 时，在165°C及140°C退火分别需要保温时间为17.65min和61.76min； $\Delta\rho/\Delta\rho_0 = 5 \times 10^{-2}$ 时，在165°C、140°C及118°C退火分别需要保温时间为13.24min、46.16min及167.65min。根据上式，当 $\Delta\rho/\Delta\rho_0 = 2 \times 10^{-2}$ 时

$$\ln \frac{61.76}{17.65} = \frac{Q(\text{eV})}{8.61 \times 10^{-5}} \left(\frac{1}{413} - \frac{1}{438} \right) = \frac{Q(\text{eV})}{8.61 \times 10^{-5}} 1.382 \times 10^{-4}$$

$$\text{即 } Q = \frac{0.861}{1.382} \times \ln \frac{61.76}{17.65} = 0.78 \text{ eV}$$



当 $\Delta\rho/\Delta\rho_0 = 5 \times 10^{-2}$ 时

$$\ln \frac{167.65}{13.34} = \frac{Q(\text{eV})}{8.61 \times 10^{-5}} \left(\frac{1}{391} - \frac{1}{438} \right) = \frac{Q(\text{eV})}{8.61 \times 10^{-5}} 2.744 \times 10^{-4}$$

$$\text{即 } Q = \frac{0.861}{2.744} \times \ln \frac{167.65}{13.34} = 0.79 \text{ eV}$$

在两种回复程度的激活能基本是一样的，说明在这回复范围的回复机制是相同的。

因为电阻的大小主要取决于空位浓度，电阻的降低是空位散逸的结果，这个过程是空位移动，即其激活能应与空位移动激活能相当。金属的自扩散激活能是空位形成能和空位移动激活能（换位机制）之和，故自扩散激活能为 $(0.83+0.78)\text{eV}=1.61\text{eV}$ 。

2. 如图 9-49 所示，1 个单晶体经弯曲后，估计导致弯曲的同号刃位错的总柏氏矢量的大小。

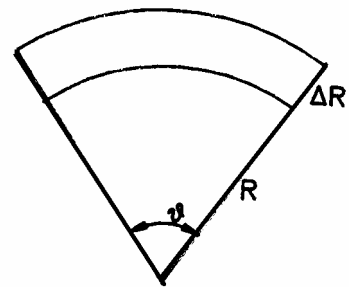
求这些位错的位错密度。（设单个位错的柏氏矢量为 b ）

解：根据右图知弯曲的上边和下边长度之差为 $\theta\Delta R$ （ θ 为对应圆心角的弧度数），所以一定有同号正刃位错存在，由于每个位错的柏氏矢量为 b ，所以共有位错的数目 $n=\theta\Delta R/b$ 。用单位面积穿过的位错数目表示位错密度 ρ_s ，现在面积 S 为

$$S=\theta[(R+\Delta R)^2-R^2]/2=\theta[2R\Delta R+(\Delta R)^2]/2$$

故位错密度 ρ_s 为

$$\rho_s = \frac{2\theta\Delta R}{b\theta\Delta R(2R+\Delta R)} = \frac{2}{b(2R+\Delta R)}$$



3. 多边形化后形成的亚晶界包含 n 个刃位错，亚晶间的取向差为 10^{-3} 弧度。设多边形化前位错间无交互作用，问多边形化后释放了多少能量（以百分数表示）。（晶界能 $E_B=E_0\theta(A-\ln\theta)$ ，设其中 A 等于 0.5）。

如果 2 个这样的亚晶界合并形成 1 个新的亚晶界，问取向差加大多少？合并前后释放能量多少？

解：亚晶间的取向差 θ 与位错柏氏矢量 b 以及位错间距 D 的关系是 $D=b/\theta$ 。讨论 1×1 面积的晶界，因包含 n 个位错，故

$$n = \frac{1}{D} = \frac{\theta}{b}$$

多边形化前位错无交互作用，即和独立存在时的能量一样，假设位错是刃型位错，这 n 个位错单独存在时，它们的总能量 E_1 为 nE_e ， E_e 是单位长度刃位错的能量：

$$E_1 = nE_e = \frac{\theta}{b} \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0} \approx 10\theta E_0$$

式中 $E_0 = \frac{Gb}{4\pi(1-\nu)}$ ，并用了 $\ln \frac{R}{r_0} \approx 10$ 的近似。多边形化后， n 个位错构成的这个面积为

单位面积的晶界的能量 E_b 为

$$E_b = E_0\theta(0.5 - \ln\theta)$$

多边形化前后单位面积晶界释放的能量相对 $\Delta E/E_1$ 为

$$\frac{\Delta E}{E_1} = \frac{E_1 - E_b}{E_1} = \frac{10\theta E_0 - E_0\theta(0.5 - \ln\theta)}{10\theta E_0} = \frac{10 - 0.5 + \ln 10^{-3}}{10} = 25.9\%$$

如果 2 个这样的亚晶界合并形成 1 个新的亚晶界，晶界上的位错密度增加一倍，取向差与位错密度成正比，即取向差为 $2\theta=2\times10^{-3}$ 弧度。合并后的单位面积晶界能量为 $2\theta E_0(A-\ln 2\theta)$ 。合并前两个晶界的能量为 $2\theta E_0(A-\ln \theta)$ ，合并前后释放能量相对变化 ΔE 为

$$\Delta E = \frac{2\theta E_0(A-\ln \theta) - 2\theta E_0(A-\ln 2\theta)}{2\theta E_0(A-\ln \theta)} = \frac{\ln 2\theta - \ln \theta}{0.5 - \ln \theta}$$

$$= \frac{\ln(2\times10^{-3}) - \ln 10^{-3}}{0.5 - \ln 10^{-3}} = 9.35\%$$

4. 经大形变量的冷加工的铜块，储存能为 $2\times10^6 \text{J}\cdot\text{m}^{-2}$ ，大角度界面能的典型值为 $0.5 \text{J}\cdot\text{m}^{-2}$ 。如果按照经典的均匀形核理论，形成再结晶临界晶核尺寸有多大？若储存能主要由位错贡献，建立位错密度和临界核心尺寸的关系。如果形成 1 个半径为 2nm 的核心，要求形核处的位错密度多大？评论经典形核的可能性。（ $G\approx 4\times 10^{10} \text{Pa}$ ， $b\approx 0.25 \text{nm}$ ）

解：按经典形核理论，临界核心半径 $r^*=2\gamma/\Delta G$ ，其中 γ 是界面能， ΔG 是提供形核的驱动能。现在 ΔG 应是单位体积的储存能。把界面能及储存能代入，得

$$r^* = \frac{2\gamma}{\Delta G} = \frac{2\times 0.5}{2\times 10^6} \text{m} = 5\times 10^{-7} \text{m}$$

单位长度位错的能量约为 $Gb^2/2$ ，设位错密度为 ρ ，单位体积的位错能量为 $\rho Gb^2/2$ 。如果储存能 E 主要是由位错贡献，则临界晶核半径与位错密度的关系为

$$r^* = \frac{4\gamma}{\rho Gb^2}$$

如果形成一个半径为 2nm 的核心，要求的位错密度 ρ 为：

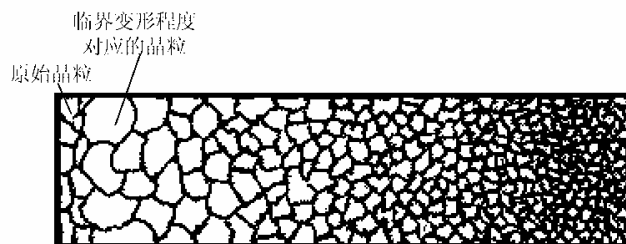
$$\rho = \frac{4\gamma}{r^* Gb^2} = \frac{4\times 0.5}{2\times 10^{-9} \times 4\times 10^{10} \times (0.25\times 10^{-9})^2} \text{m}^{-2} = 4\times 10^{17} \text{m}^{-2}$$

大加工量的金属材料的位错密度大约为 10^{16}m^{-2} ，这样大小的邻接半径核心基本上是不可能形成，上面讨论的经典形核的临界核心半径为 $5\times 10^{-7} \text{m}$ ，即 500nm，显然是不可能用经典形核的方式形核的。

5. 厚度为 40mm 厚的铝板，轧制成一侧为 20mm 另一侧仍保持为 40mm 的楔形板，经再结晶退火后，画出从 20mm 的一侧到 40mm 一侧的截面的组织示意图。并说明。

厚度为 40mm 厚的铝板，轧制成一侧为 20mm 另一侧仍保持为 40mm 的楔形板，经再结晶退火后，画出从 20mm 的一侧到 40mm 一侧的截面的组织示意图。并说明。

解：这铝板轧制后，沿板长度的变形量是不同的，在轧成 20mm 一侧的变形量最大，而在 40mm 一侧变形量为 0。因此。在靠近 40mm 一侧在临界变形量（大约为百分之几）的地方在再结晶退火后获得最大的晶粒，在小于临界变形量的地方，晶粒尺寸和未再结晶（未变形）时的一样；在大于临界变形量的一侧，晶粒尺寸随变形量加大而逐渐减小。组织示意图如下图所示



6. 厚度为 $5 \times 10^{-4} \text{m}$ 的铁硅合金板，其中的晶粒已穿透合金板的厚度。一个表面为 $\{110\}$ 在板面上截面为圆形的圆柱体晶粒，被表面为 $\{100\}$ 的基体所包围，若 $\{100\}$ 表面能比 $\{110\}$ 表面能高 $0.1 \text{J} \cdot \text{m}^{-2}$ ，大角度晶界能为 $0.5 \text{J} \cdot \text{m}^{-2}$ ，估计圆柱体晶粒能长大的最小半径。

解：设表面为 $\{110\}$ 的圆柱体晶粒的圆柱半径为 r ，这个晶粒的表面能和界面能总和 G 为

$$G = 2\pi r h \gamma_b + 2\pi r^2 \gamma_{s(110)}$$

这个晶粒移动时，移动部分的表面由 $\{110\}$ 转变为 $\{100\}$ ，这部分表面的比表面能变化为 $\gamma_{s(100)} - \gamma_{s(110)}$ 。所以，圆柱晶粒的晶界移动引起的能量变化率 dG/dr 为

$$\frac{dG}{dr} = 2\pi h \gamma_b + 4\pi r (\gamma_{s(100)} - \gamma_{s(110)})$$

当这变化率为 0 时，晶粒不能移动，这时的半径 r^* 就是圆柱体晶粒能长大的最小半径。即

$$r^* = \frac{h \gamma_b}{2(\gamma_{s(100)} - \gamma_{s(110)})} = \frac{5 \times 10^{-4} \times 0.5}{2 \times 0.1} \text{m} = 1.25 \times 10^{-3} \text{m}$$

7. 高纯度铜经冷加工后，其屈服强度提高 4 倍，经不同温度再结晶退火，获得 50% 再结晶的时间 t 和退火温度的关系如下

温度/ $^{\circ}\text{C}$	50	80	110	140	170
时间	$1.47 \times$	$2.8 \times$	$1.02 \times$	$5.93 \times$	$5.07 \times$
t/min	10^8	10^6	10^5	10^3	10^2

它们符合 $\ln t = A + \frac{B}{T}$ 关系。其中 A 和 B 为常数， T 是热力学温度。

上述材料制成电器元件分别在 100°C 及 140°C 下工作，若零件设计时要求强度为完全再结晶时的强度，并且用的安全系数为 2，求元件的寿命。（性能恢复大体正比于再结晶量）。

解：根据再结晶动力学方程 $X = 1 - \exp(-Bt^k)$ ，设再结晶晶粒是块状长大， k 近似为 4。

两种再结晶量 X_1 和 X_2 所对应的再结晶时间 t_1 和 t_2 ，则

$$\left[\frac{t_1}{t_2} \right]^4 = \frac{\ln(1 - X_1)}{\ln(1 - X_2)}$$

因为理论上的时间为无限大，所以假设再结晶量为 0.9999 时为“完全再结晶”，这样完全再结晶时间 t 和 0.5 再结晶时间 $t_{0.5}$ 的关系是

$$t = \left[\frac{\ln 0.00001}{\ln 0.5} \right]^{1/4} t_{0.5} = 2.02 t_{0.5} \approx 2 t_{0.5}$$

即完全再结晶时间是 50% 再结晶时间的一倍。高纯度铜经冷加工后制成的电器元件在 100°C 及 140°C 下工作时会发生再结晶，使其强度下降，下降量与再结晶量成正比。若零件设计时要求强度为完全再结晶时的强度，但安全系数为 2，即恰好在再结晶 50% 的时间时达到元件要求的最低强度，即 50% 再结晶时间是元件的寿命。

因为获得 50% 再结晶的时间 t 和退火温度 T 的关系是 $\ln t = A + B/T$ ，根据给出的数据，把温度换成热力学温度的倒数，时间取对数，得

$1/T \times 10^{-3}$	3.10	2.83	2.61	2.42	2.66
$\ln t / \ln(\text{min})$	18.8	14.8	11.5	8.69	6.23
)	1	5	3		

对上列数据画图（右图），并进行线性回归，得

$$\ln t = -27.95 + 15.13 \times 10^3 (1/T)$$

相关系数是 0.9999。上式又可写成

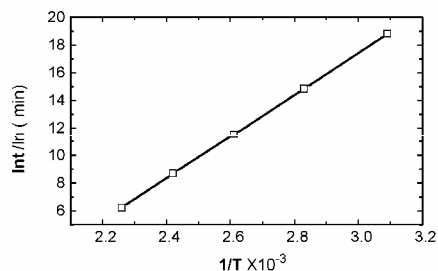
$$t = \exp[-27.95 + 15.13 \times 10^3 (1/T)]$$

在 100°C 下的寿命为

$$\begin{aligned} t &= \exp[-27.95 + 15.13 \times 10^3 (1/373)] \\ &= 300440 \text{ min} = 5007.3 \text{ h} \end{aligned}$$

在 140°C 下的寿命为

$$\begin{aligned} t &= \exp[-27.95 + 15.13 \times 10^3 (1/413)] \\ &= 5910 \text{ min} = 98.5 \text{ h} \end{aligned}$$



8. 下面是在不同温度下保温晶粒长大实验所测得的数据，如果忽略了晶粒开始长大时的尺寸，问晶粒界移动速度是否和驱动力成正比。求出晶界迁移的激活能。

保温时间/h		0.25	0.5	1	2
平均晶粒尺寸 / 10 ⁻³ cm	475°C	1.1	1.5	2.1	3.0
	500°C	1.6	2.2	3.2	4.5
	600°C	2.8	3.9	5.5	7.8
	650°C	3.3	4.7	6.6	9.4

解：如果忽略了晶粒开始长大时的尺寸，晶粒界移动速度和驱动力成正比时，晶粒长大的等温动力学方程是

$$\bar{D}^2 = Kt$$

式中 \bar{D} 为晶粒平均直径，在恒温下， K 是常数；但它是温度的函数： $K = B \exp(-Q/RT)$ ， Q 是晶界移动激活能。为了验证晶粒界移动速度是否和驱动力成正比，把上式写成

$$\bar{D} = K' t^n$$

式中 $K' = K^n$ 。如果求得 n 为 0.5，则说明晶粒界移动速度是和驱动力成正比。两端取对数，得

$$\ln \bar{D} = \ln K' + n \ln t$$

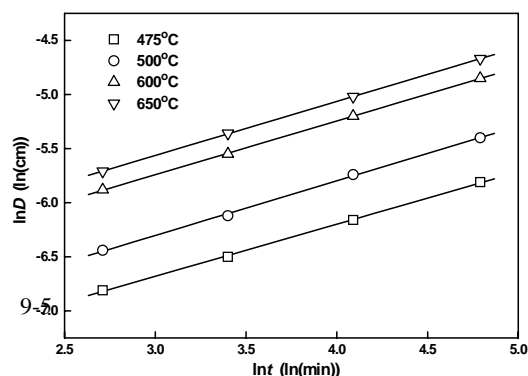
把给出的数据换成对数，得

ln t / ln (min)		2.71	3.40	4.09	4.79
平均晶粒尺寸 / 10 ⁻³ cm	475°C	-6.81	-6.50	-6.16	-5.81
	500°C	-6.44	-6.12	-5.74	-5.40
	600°C	-5.88	-5.55	-5.20	-4.85
	650°C	-5.71	-5.36	-5.02	-4.67

对四个温度的 $\ln \bar{D}$ 与 $\ln t$ 画图，如下图所示。进行线性回归，得

T (°C)	475	500	600	650
$1/T$ (1/K)	0.00134	0.00130	0.00115	0.00108
$\ln K'$	-8.126	-7.817	-7.23	-7.06
n	0.482	0.505	0.496	0.499

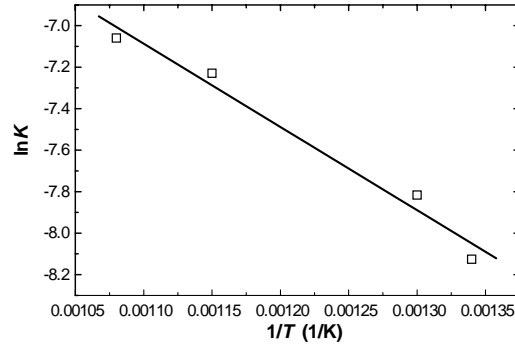
求得的 n 值都非常接近 0.5，说明晶粒移动速度和驱动力成正比。因为 $K' = K^n$ ，现在 $n = 0.5$ ，即 $K'^2 = K$ 。而 $K = B \exp(-Q/RT)$ ，即 $K'^2 = B \exp(-Q/RT)$ 。把这个式子两端取对数，得



$$\ln K' = \ln B - Q/2RT$$

把 $\ln K'$ 与 $1/T$ 的数据也列于上表，作图，如下图所示。对数据进行线性回归，得斜率为 -4010，相关系数为 0.988。由上式可知，斜率等于 $-Q/2R$ ，故晶界移动激活能 Q 为

$$Q = 2R \times 4010 = 2 \times 8.314 \times 4010 \text{ J/mol} = 66678 \text{ J/mol}$$



第 10 章 固态转变题解

1. 由内耗法测出 Fe_3C 在 $\alpha\text{-Fe}$ 中的平衡溶解度为

$$C = 0.736 \exp\left(\frac{-4850}{T}\right)$$

其中 $T(\text{K})$ 为温度。求在 627 Fe_3C 的颗粒半径为 10nm、100nm 以及 1000nm 时它在 $\alpha\text{-Fe}$ 中的溶解度。问颗粒的曲率半径多大才对溶解度有实质性的影响。 $\alpha/\text{Fe}_3\text{C}$ 的界面能为 0.71J/m^2 , Fe_3C 的摩尔体积为 $23.4\text{cm}^3/\text{mol}$ 。

解：根据吉布斯方程

$$\ln \frac{C_r}{C_\infty} = \frac{2M\gamma}{RT\rho r} \quad \text{即} \quad \ln C_r = \frac{2M\gamma}{RT\rho r} + \ln C_\infty$$

式中 C_r 和 C_∞ 分别是颗粒曲率半径为 r 和 ∞ 时的平衡浓度、 M 是摩尔量, ρ 是密度, 即 M/ρ 等于摩尔体积、 γ 是界面能、 $R=8.314\text{J/mol}\cdot\text{K}$ 是气体常数。根据给出的平衡溶解度为公式求出 627 (即 900K) 下 Fe_3C 在 $\alpha\text{-Fe}$ 中的平衡溶解度

$$C_\infty = 0.736 \exp\left(\frac{-4850}{T}\right) = 0.736 \exp\left(\frac{-4850}{900}\right) = 3.36 \times 10^{-3}$$

当 Fe_3C 的颗粒半径为 10nm 时在 $\alpha\text{-Fe}$ 中的溶解度为

$$\ln \frac{C_r}{3.36 \times 10^{-3}} = C_r = \frac{2 \times 24.4 \times 10^{-6} \times 0.71}{8.314 \times 900 \times 10 \times 10^{-9}} = 0.463$$

$$C_r = 0.00534$$

当 Fe_3C 的颗粒半径为 100nm 时在 $\alpha\text{-Fe}$ 中的溶解度为

$$\ln \frac{C_r}{3.36 \times 10^{-3}} = C_r = \frac{2 \times 24.4 \times 10^{-6} \times 0.71}{8.314 \times 900 \times 100 \times 10^{-9}} = 0.0463$$

$$C_r = 0.00352$$

当 Fe_3C 的颗粒半径为 1000nm 时在 $\alpha\text{-Fe}$ 中的溶解度为

$$\ln \frac{C_r}{3.36 \times 10^{-3}} = C_r = \frac{2 \times 24.4 \times 10^{-6} \times 0.71}{8.314 \times 900 \times 1000 \times 10^{-9}} = 0.00463$$

$$C_r = 0.00338$$

可见, 当颗粒比较大时, 曲率半径对溶解度的影响很快减低。

2. 纯金属多形性转变 $\alpha \rightarrow \beta$ 在某一过冷度下两相体积吉布斯自由能差为 $7 \times 10^5 \text{kJ/m}^3$, α/β 界面能为 0.6J/m^2 。若忽略形核的应变能, 求形成球状、立方体以及直径(D)和厚度(t)比(D/t)为 20 的圆盘状核心的临界核心尺寸和临界核心形成功。

解：如果忽略形核的应变能, 临界核心形成功 $\Delta G^* = \gamma A^*/3$, 式中 A^* 临界核心的界面积。

对于球状核心, 临界核心半径 $r^* = \frac{2\gamma}{\Delta G_v}$, $A^* = 4\pi(r^*)^2$, 故

$$r^* = \frac{2\gamma}{\Delta G_v} = \frac{2 \times 0.6}{7 \times 10^8} \text{m} = 1.71 \times 10^{-9} \text{m}$$

$$\Delta G^* = \gamma A^*/3 = 0.6 \times 4\pi \times (1.71 \times 10^{-9})^2 / 3 \text{J} = 7.35 \times 10^{-18} \text{J}$$

对于立方体状核心，设 a 为边长，形核时的自由能变化 ΔG 为

$$\Delta G = a^3 \Delta G_v + 6a^2 \gamma$$

上式对 a 的导数等于 0 时，求出临界核心的边长 a^* ，

$$\frac{d\Delta G}{da} = 3a^2 \Delta G_v + 12a\gamma = 0$$

得
$$a^* = -\frac{4\gamma}{\Delta G_v} = \frac{4 \times 0.6}{7 \times 10^8} \text{ m} = 1.43 \times 10^{-9} \text{ m}$$

$$\Delta G^* = \frac{1}{3} \gamma a^* = \frac{1}{3} 6(a^*)^2 \gamma = 2 \times (3.43 \times 10^{-9})^2 \times 0.6 \text{ J} = 1.41 \times 10^{-17} \text{ J}$$

对于直径(D)和厚度(t)比(D/t)为 20 的圆盘状核心，形核时的自由能变化 ΔG 为

$$\begin{aligned} \Delta G &= \pi(D/2)^2 \times (D/20) \Delta G_v + [2\pi(D/2)^2 + 2\pi(D/2) \times (D/20)]\gamma \\ &= \frac{\pi}{80} D^3 \Delta G_v + \frac{11}{20} D^2 \gamma \end{aligned}$$

上式对 D 的导数等于 0 时，求出临界核心圆盘直径 D^*

$$\frac{d\Delta G}{dD} = \frac{3\pi}{80} D^2 \Delta G_v + \frac{11\pi}{10} D\gamma = 0$$

得
$$D^* = -\frac{88}{3} \frac{\gamma}{\Delta G_v} = \frac{88 \times 0.6}{3 \times 7 \times 10^{-8}} \text{ m} = 2.51 \times 10^{-8} \text{ m}$$

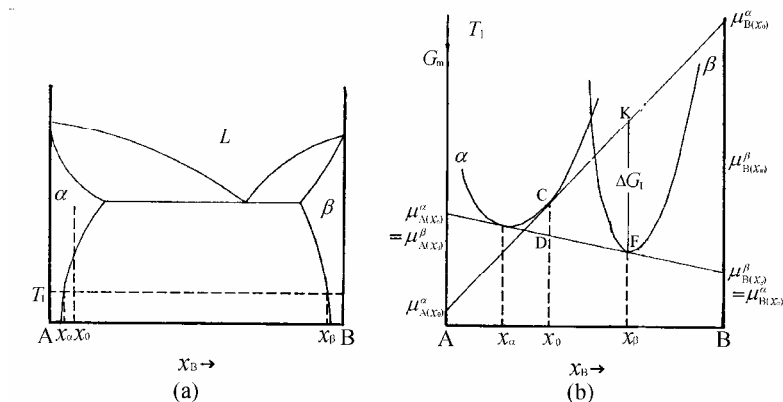
$$\begin{aligned} \Delta G^* &= \frac{\pi}{80} (D^*)^3 \Delta G_v + \frac{11}{20} (D^*)^2 \pi \gamma \\ &= \left[-\frac{\pi}{80} \times (2.51 \times 10^{-8})^3 \times 7 \times 10^8 + \frac{11\pi}{20} \times (2.51 \times 10^{-8})^2 \times 0.6 \right] \text{ J} \\ &= (-4.35 \times 10^{-16} + 6.50 \times 10^{-16}) \text{ J} = 2.15 \times 10^{-16} \text{ J} \end{aligned}$$

比较三种形状核心的临界形核功可知，在忽略应变能时，球状核心的形核功最小。

3. 导出二元合金中母相 α 和析出相 β 均为理想溶体以及规则溶体的相变总驱动力和形核驱动力 (以 J/mol 表示)。设原始成分为 x_0 ，在脱溶温度 α 相平衡成分为 x_α ，脱溶物核心成分和 β 相平衡成分近似相等为 x_β ，交互作用系数为 Ω_2 。

解：(1) 设 A-B 二元合金 (如下图 a 所示)， x_0 成分的 α 相在 T_1 下脱溶，相变总驱动力为下图 b 中的 DC 段。从图看出，C 点的自由能 $G_{x_0}^\alpha$ 为

$$G_{x_0}^\alpha = (1-x_0)\mu_{A(x_0)}^\alpha + x_0\mu_{B(x_0)}^\alpha$$



D 点的自由能 $G_{x_0}^{\alpha'+\beta}$ 为

$$G_{x_0}^{\alpha'+\beta} = (1-x_0)\mu_{A(x_\alpha)}^\alpha + x_0\mu_{B(x_\alpha)}^\alpha$$

所以溶体的相变总驱动力 $\Delta G_{x_0}^{\alpha \rightarrow \alpha'+\beta}$ 为

$$\begin{aligned}\Delta G_{x_0}^{\alpha \rightarrow \alpha'+\beta} &= G_{x_0}^{\alpha'+\beta} - G_{x_0}^\alpha = (1-x_0)\mu_{A(x_\alpha)}^\alpha + x_0\mu_{B(x_\alpha)}^\alpha - (1-x_0)\mu_{A(x_0)}^\alpha - x_0\mu_{B(x_0)}^\alpha \\ &= (1-x_0)(\mu_{A(x_\alpha)}^\alpha - \mu_{A(x_0)}^\alpha) + x_0(\mu_{B(x_\alpha)}^\alpha - \mu_{B(x_0)}^\alpha)\end{aligned}$$

因 $\mu_i^\phi = G_i^\phi + RT \ln a_i^\phi$, 其中 a_i^ϕ 是 i 组元在 ϕ 相中的活度, 代入上式, 得

$$\Delta G_{x_0}^{\alpha \rightarrow \alpha'+\beta} = RT \left[(1-x_0) \ln \frac{a_{A(x_\alpha)}^\alpha}{a_{A(x_0)}^\alpha} + x_0 \ln \frac{a_{B(x_\alpha)}^\alpha}{a_{B(x_0)}^\alpha} \right]$$

如果 α 相和 β 相是理想溶体, 活度和成分相等, 则相变总驱动力 $\Delta G_{x_0}^{\alpha \rightarrow \alpha'+\beta}$ 为

$$\Delta G_m^{\alpha \rightarrow \alpha'+\beta} = RT \left[(1-x_0) \ln \frac{1-x_\alpha}{1-x_0} + x_0 \ln \frac{x_\alpha}{x_0} \right]$$

如果 α 相和 β 相是规则溶液, 则 $\mu_i^\phi = G_i^\phi + RT \ln x_i^\phi + \Omega(1-x_i^\phi)^2$, 其中 Ω 是交互作用参数。

代入 $\Delta G_{x_0}^{\alpha \rightarrow \alpha'+\beta} = (1-x_0)(\mu_{A(x_\alpha)}^\alpha - \mu_{A(x_0)}^\alpha) + x_0(\mu_{B(x_\alpha)}^\alpha - \mu_{B(x_0)}^\alpha)$, 得

$$\begin{aligned}\Delta G_m^{\alpha \rightarrow \alpha'+\beta} &= RT \left[(1-x_0) \ln \frac{1-x_\alpha}{1-x_0} + x_0 \ln \frac{x_\alpha}{x_0} \right] + \Omega \{ (1-x_0)(x_\alpha^2 - x_0^2) + x_0(1-x_\alpha)^2 - x_0(1-x_0)^2 \} \\ &= RT \left[(1-x_0) \ln \frac{1-x_\alpha}{1-x_0} + x_0 \ln \frac{x_\alpha}{x_0} \right] + \Omega(x_\alpha - x_0)^2\end{aligned}$$

(2) 若脱溶物核心成分和 β 相平衡成分近似相等为 x_β 则形核驱动力 ΔG_I 为图(b)中的 FK 段。

K 点的自由能 $G_{x_\beta}^\alpha$ 为

$$G_{x_\beta}^\alpha = (1-x_\beta)\mu_{A(x_0)}^\alpha + x_\beta\mu_{B(x_0)}^\alpha$$

F 点的自由能 $G_{x_\beta}^\beta$ 为

$$G_{x_\beta}^\beta = (1-x_\beta)\mu_{A(x_\alpha)}^\alpha + x_\beta\mu_{B(x_\alpha)}^\alpha$$

所以溶体形成成份为 x_β 核心的形核驱动力 ΔG_I 为

$$\begin{aligned}\Delta G_I &= G_{x_\beta}^\beta - G_{x_\beta}^\alpha = (1-x_\beta)\mu_{A(x_\alpha)}^\alpha + x_\beta\mu_{B(x_\alpha)}^\alpha - (1-x_\beta)\mu_{A(x_0)}^\alpha - x_\beta\mu_{B(x_0)}^\alpha \\ &= (1-x_\beta)(\mu_{A(x_\alpha)}^\alpha - \mu_{A(x_0)}^\alpha) + x_\beta(\mu_{B(x_\alpha)}^\alpha - \mu_{B(x_0)}^\alpha)\end{aligned}$$

因 $\mu_i^\phi = G_i^\phi + RT \ln a_i^\phi$, 故

$$\begin{aligned}\Delta G_1 &= (1-x_\beta)\mu_{A(x_\alpha)}^\alpha + x_\beta\mu_{B(x_\alpha)}^\alpha - [(1-x_\beta)\mu_{A(x_0)}^\alpha + x_\beta\mu_{B(x_0)}^\alpha] \\ &= RT \left[(1-x_\beta) \ln \frac{a_{A(x_\alpha)}^\alpha}{a_{A(x_0)}^\alpha} + x_\beta \ln \frac{a_{B(x_\alpha)}^\alpha}{a_{B(x_0)}^\alpha} \right]\end{aligned}$$

如果 α 相和 β 相是理想溶体，活度和成分相等，形成成份为 x_β 核心的形核驱动力 ΔG_1 为

$$\Delta G_1 = RT \left[(1-x_\beta) \ln \frac{1-x_\alpha}{1-x_0} + x_\beta \ln \frac{x_\alpha}{x_0} \right]$$

如果 α 相和 β 相是规则溶液， $\mu_i^\phi = G_i^\phi + RT \ln x_i^\phi + \Omega(1-x_i^\phi)^2$ ，代入

$\Delta G_1 = (1-x_\beta)(\mu_{A(x_\alpha)}^\alpha - \mu_{A(x_0)}^\alpha) + x_\beta(\mu_{B(x_\alpha)}^\alpha - \mu_{B(x_0)}^\alpha)$ ，得

$$\begin{aligned}\Delta G_1 &= RT \left[(1-x_\beta) \ln \frac{1-x_\alpha}{1-x_0} + x_\beta \ln \frac{x_\alpha}{x_0} \right] + \Omega \{ (1-x_\beta)(x_\alpha^2 - x_0^2) + x_\beta(1-x_\alpha)^2 - x_\beta(1-x_0)^2 \} \\ &= RT \left[(1-x_\beta) \ln \frac{1-x_\alpha}{1-x_0} + x_\beta \ln \frac{x_\alpha}{x_0} \right] + \Omega [x_\alpha^2 + 2x_\beta(x_0 - x_\alpha) - x_0^2]\end{aligned}$$

4. 本题讨论符号和上题相同，现讨论 α 和 β 均为理想溶体的情况。在 600K， $x_0=0.1$ ， $x_\alpha=0.02$ ， $x_\beta=0.95$ ， α/β 界面能为 $0.5\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$ ，两相偏摩尔体积同为 $10^{-3}\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$ 。

(1)求相变总驱动力和形核驱动力（以单位体积的吉布斯自由能表示）

(2)求均匀形核的临界核心尺寸（球状）。

(3)脱溶后，脱溶粒子间距为 50nm，问粒子平均半径为临界核心半径 r^* 的多少倍？

(4)转变前后总吉布斯自由能降低多少？还有多少以界面能形式保留下来？

解：(1)若 α 和 β 均为理想溶体，在 600K 相变总驱动力 ΔG_m 为

$$\begin{aligned}\Delta G_m &= RT \left[(1-x_0) \ln \frac{1-x_\alpha}{1-x_0} + x_0 \ln \frac{x_\alpha}{x_0} \right] \\ &= 8.314 \times 600 \left[(1-0.1) \ln \frac{1-0.02}{1-0.1} + 0.1 \ln \frac{0.02}{0.1} \right] \text{J} \cdot \text{mol}^{-1} = -420.33 \text{J} \cdot \text{mol}^{-1}\end{aligned}$$

以体积自由能 ΔG_v 表示相变总驱动力

$$\Delta G_v = \frac{\Delta G_m}{V_m} = -\frac{420.33}{10^{-5}} \text{J} \cdot \text{m}^{-3} = -420.33 \times 10^5 \text{J} \cdot \text{m}^{-3}$$

形核驱动力 ΔG_{lm} 为

$$\begin{aligned}\Delta G_{lm} &= RT \left[(1-x_\beta) \ln \frac{1-x_\alpha}{1-x_0} + x_\beta \ln \frac{x_\alpha}{x_0} \right] \\ &= 8.31 \times 600 \left[(1-0.95) \ln \frac{1-0.02}{1-0.1} + 0.95 \ln \frac{0.02}{0.1} \right] \text{J} \cdot \text{mol}^{-1} = -7.6 \times 10^3 \text{J} \cdot \text{mol}^{-1}\end{aligned}$$

以体积自由能 ΔG_l^v 表示形核驱动力

$$\Delta G_1^V = \frac{\Delta G_{1m}}{V_m} = -\frac{7.6 \times 10^3}{10^{-5}} \text{J} \cdot \text{m}^3 = 7.6 \times 10^8 \text{J} \cdot \text{m}^{-3}$$

(2)若核心为球状，均匀形核的临界核心尺寸 r^* 为

$$r^* = \frac{2\gamma}{\Delta G_1^V} = \frac{2 \times 0.5}{7.6 \times 10^8} \text{m} = 1.31 \times 10^{-9} \text{m}$$

(3)脱溶后， α 和 β 相的成份近似为平衡成份，则 β 相的相对量 f_β 为

$$f_\beta = \frac{x_0 - x_\alpha}{x_\beta - x_\alpha} = \frac{0.1 - 0.02}{0.95 - 0.02} = 0.086$$

因为两相的摩尔体积相同，所以上述的相对量以为体积相对量。设例子分布是简单立方阵列排列，粒子间距为 50nm，即每 $(50\text{nm})^3$ 体积中有一个粒子，每 m^3 中的粒子数 n 为

$$n = \frac{1}{(50 \times 10^{-9})^3} \text{m}^{-3} = 8 \times 10^{21} \text{m}^{-3}$$

设脱溶后粒子半径为 r ，粒子体积为 V_r ，则 nV_r 应等于体积分数 f_β ，即 $4\pi r^3 n/3 = f_\beta$ ，故

$$r = \left(\frac{3f_\beta}{4\pi} \right)^{1/3} = \left(\frac{3 \times 0.086}{4\pi \times 8 \times 10^{21}} \right)^{1/3} \text{m} = 1.37 \times 10^{-8} \text{m}$$

设脱溶后粒子半径 r 与临界核心半径 r^* 的关系是

$$r = \frac{1.37 \times 10^{-8}}{1.31 \times 10^{-9}} r^* = 10.45 r^*$$

(4)转变前后总吉布斯自由能降低量 ΔG 为

$$\begin{aligned} \Delta G &= \Delta G_V f_\beta + nA\gamma = [-420.33 \times 10^5 + 8 \times 10^{21} \times 4\pi (1.37 \times 10^{-8})^2 \times 0.5] \text{J} \cdot \text{m}^{-3} \\ &= -3.26 \times 10^7 \text{J} \cdot \text{m}^{-3} \end{aligned}$$

其中有 $nA\gamma = 8 \times 10^{21} \times 4\pi (1.37 \times 10^{-8})^2 \times 0.5 \text{J} \cdot \text{m}^{-3} = 9.43 \times 10^6 \text{J} \cdot \text{m}^{-3}$ 以界面能的形式保留下来。

5. Al-Mg 置换固溶体，估计溶质原子 Mg 产生的错配应变能，以 $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$ 和 $\text{eV}/\text{原子}$ 表达。说明你估算时所用的假设。Al 的原子半径为 0.143nm、切变模量 $G = 2.5 \times 10^{10} \text{Pa}$ ，Mg 的 a 轴长 0.32nm。

解：假设 基体是各向同性的连续介质，单个原子相距很远，认为每个原子的应力场不重叠。可以用如下式子估计溶质原子 Mg 产生的错配应变能：

$$\Delta G_{st} = 4G\delta^2 V$$

其中 δ 点阵错配度为

$$\delta = \frac{a_{\text{Mg}} - a_{\text{Al}}}{a_{\text{Al}}} = \frac{0.16 - 0.143}{0.143} = 0.1189$$

V 是 Al 的原子体积：

$$V = \frac{4}{3} \pi r_{\text{Al}}^3 = \frac{4}{3} \pi (0.143 \times 10^{-9})^3 = 1.225 \times 10^{-29} \text{m}^3$$

故 $\Delta G_{st} = 4G\delta^2 V = 4 \times 2.5 \times 10^{10} \times (0.1189)^2 \times 1.225 \times 10^{-29} \text{ J/at} = 1.73 \times 10^{-20} \text{ J/at}$

每一个 eV 等于 $1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$ ，所以

$$\Delta G_{st} = 1.73 \times 10^{-20} / 1.602 \times 10^{-19} \text{ eV/at} = 0.108 \text{ eV/at}$$

把以 J/at 表达的数值乘以亚佛加德罗常数 N 得以 J/mol 表达的值

$$\Delta G_{st} = 1.73 \times 10^{-20} \times 6.025 \times 10^{23} \text{ J/mol} = 10.4 \times 10^3 \text{ J/mol}$$

6. 设母相和析出相的切变模量 G 相同，母相是各向同性连续介质。若形成共格的核心，导出球状和圆盘状核心长大丧失共格时的尺寸的表达式。

解：球状时，共格破坏前的错配应变能及界面能之和等于

$$\frac{4}{3}\pi r^3 \times 4G\delta^2 + 4\pi r^2 \gamma_{co}$$

丧失共格后没有错配应变能，界面由共格变为非共格，故能量为 $4\pi r^2(\gamma_{in} - \gamma_{co})$ ，前二者相等求得的尺寸就是丧失共格的尺寸 r^* ，即

$$\frac{4}{3}\pi (r^*)^3 \times 4G\delta^2 + 4\pi (r^*)^2 \gamma_{co} = 4\pi (r^*)^2 (\gamma_{in} - \gamma_{co})$$

即
$$r^* = \frac{3(\gamma_{in} - \gamma_{co})}{4G\delta^2}$$

圆盘状时，设半径为 r 、厚度为 t 。圆盘体积等于 $\pi r^2 t$ ，圆盘面面积等于 $2\pi r^2$ ，圆盘侧面面积等于 $2\pi r t$ 。共格破坏前的错配应变能及界面能之和等于

$$\pi r^2 t \times 4G\delta^2 + 2\pi r^2 \gamma_{co} + 2\pi r t \gamma_{in}$$

丧失共格后没有错配应变能，圆盘面界面由共格变为非共格，故能量为

$$2\pi r^2 (\gamma_{in} - \gamma_{co}) + 2\pi r t \gamma_{in}$$

前二者相等求得的尺寸就是丧失共格的尺寸 t^* ，即

$$\pi r^2 t^* \times 4G\delta^2 + 2\pi r^2 \gamma_{co} + 2\pi r t^* \gamma_{in} = 2\pi r^2 (\gamma_{in} - \gamma_{co}) + 2\pi r t^* \gamma_{in}$$

即
$$\pi r^2 t^* \times 4G\delta^2 = 2\pi r^2 (\gamma_{in} - \gamma_{co})$$

结果
$$t^* = \frac{(\gamma_{in} - \gamma_{co})}{2G\delta^2}$$

7. Al-Ag 和 Al-Cu 合金中，从以 Al 为基的固溶体中分别析出富 Ag 和富 Cu 的析出物。Al、Ag 和 Cu 的原子半径为 1.43nm、1.44nm 和 1.28nm。若简单地由原子半径估计错配度 δ ，并简单地认为析出物的非共格界面能为 $0.5 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$ ，共格界面能为 $0.05 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$ 。Al 的切变模量 $G = 2.6 \times 10^{10} \text{ Pa}$ ，又设析出物的切变模量和 Al 的相同，估计这两种析出物丧失共格的尺寸。

解：对于 Al-Ag 合金，错配度 $\delta = \frac{r_{Ag} - r_{Al}}{r_{Al}} = \frac{1.44 - 1.43}{1.43} = 0.007$ 。因析出物的错配度 $\delta < 0.05$ ，

它是球状，按上题的式子，丧失共格的尺寸 r^* 为

$$r^* = \frac{3(\gamma_{in} - \gamma_{co})}{4G\delta^2} = \frac{3(0.5 - 0.05)}{4 \times 2.6 \times 10^{10} \times (0.007)^2} \text{m} = 2.65 \times 10^{-7} \text{m}$$

对于 Al-Cu 合金，错配度 $\delta = \frac{r_{Cu} - r_{Al}}{r_{Al}} = \frac{1.28 - 1.43}{1.43} = -0.105$ ，因析出物的错配度 $\delta > 0.05$ ，

它是圆片状，按上题的式子，丧失共格的尺寸 t^* 为

$$t^* = \frac{(\gamma_{in} - \gamma_{co})}{2G\delta^2} = \frac{(0.5 - 0.05)}{2 \times 2.6 \times 10^{10} \times (0.105)^2} \text{m} = 7.85 \times 10^{-10} \text{m}$$

8. α 为母相， β 为析出相， α/β 界面能为 $0.5 \text{J} \cdot \text{m}^{-2}$ ， α/α 界面能为 $0.6 \text{J} \cdot \text{m}^{-2}$ 。

(1) 求 β 相在 α 相界面上形核（双球冠状）的接触角 θ 以及在界面上形核的 $f(\theta)$ 因子。

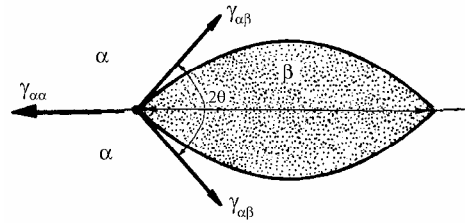
(2) 利用第 4 题中数据的结果，设 α 相界面厚度 δ 和晶粒直径 D 之比 $\delta/D = 10^{-5}$ ，求 $\ln(I_2/I_3)$ 。

（ I_2 和 I_3 分别为在界面和在晶粒内形核的形核率）

解：(1) β 相在 α 相界面上形核（双球冠状）的

接触角 θ 为

$$\cos \theta = \frac{\gamma_{\alpha/\alpha}}{2\gamma_{\alpha/\beta}} = \frac{0.6}{2 \times 0.5} = 0.6$$



故 $\theta = \arccos 0.6 = 53.13^\circ$

在界面上形核的 $f(\theta)$ 因子为

$$f(\theta) = \frac{1}{2}[2 - 3\cos\theta + \cos^3\theta] = \frac{1}{2}[2 - 3 \times 0.6 + (0.6)^3] = 0.208$$

(2) 根据第 4 题得出的形核驱动力 $\Delta G_1^v = 7.6 \times 10^8 \text{J} \cdot \text{m}^{-3}$ ，若忽略形核的弹性畸变能，均匀形

核的形核功 ΔG^*

$$\Delta G^* = \frac{16\pi}{3} \frac{\gamma^3}{(\Delta G_1^v)^2} = \frac{16\pi}{3} \frac{0.5^3}{(7.6 \times 10^8)^2} \text{J} = 3.63 \times 10^{-18} \text{J}$$

在 i 和 j 位置形核比值的的关系为

$$\frac{I_i}{I_j} = \left(\frac{d}{L}\right)^{j-i} \exp\left\{-\frac{(f_i - f_j)\Delta G^*}{kT}\right\}$$

I_2 和 I_3 位置形核的形核率比为

$$\begin{aligned} \frac{I_2}{I_3} &= \left(\frac{d}{L}\right)^{3-2} \exp\left\{-\frac{(f_2 - f_3)\Delta G^*}{kT}\right\} = 10^{-5} \times \exp\left(-\frac{(0.208 - 1) \times 3.63 \times 10^{-18}}{1.38 \times 10^{-23} \times 600}\right) \\ &= 10^{-5} \times \exp(347.22) \end{aligned}$$

即 $\ln \frac{I_2}{I_3} = \ln 10^{-5} + 347.22 = 335.7$

在晶界上形核是主要的，晶粒内形核可以忽略。

9. γ 相晶粒直径为 1mm ，晶界厚度为 1nm ，在 1000K 析出 α 相， γ/α 非共格界面能为 $0.5 \text{J} \cdot \text{m}^{-2}$ ，

共格界面能 0.05J/m^2 ， α 相在 γ 晶界上接触角为 60° ，形核驱动力 $\Delta G_1^v = 5 \times 10^8 \text{J/m}^3$ ， α 和 γ 相

的摩尔体积约为 10^{-5}m^3 。问若在晶内以共格圆盘状（直径 D 和厚度 t 之比 $D/t=10$ ）均匀形核以及在晶界上非均匀形核（双球冠状，界面都是非共格），哪一种情况的形核率大？

解：根据题意，圆盘半径 r 和厚度 t 的关系是： $t=r/5$ ，则圆盘体积等于 $\pi r^2 t = \pi r^3/5$ ，圆盘面面积等于 $2\pi r^2$ ，圆盘侧面面积等于 $2\pi r t = 2\pi r^2/5$ 。

晶内形核时，形成尺寸为 r 圆盘晶体所需能量 ΔG 为

$$\Delta G = \frac{\pi r^3}{5} \Delta G_1^v + 2\pi r^2 \gamma_{co} + \frac{2\pi r^2}{5} \gamma_{in}$$

求 r 的极值

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial r} = \frac{3\pi r^2}{5} \Delta G_1^v + 4\pi r \gamma_{co} + \frac{4\pi r}{5} \gamma_{in} = 0$$

得
$$r^* = \frac{4 \times 5 \gamma_{co} + 4 \gamma_{in}}{3 \Delta G_1^v} = \frac{4 \times 5 \times 0.05 + 4 \times 0.5}{3 \times 5 \times 10^8} \text{m} = 2 \times 10^{-9} \text{m}$$

把 r^* 代回 ΔG 式子，求得临界核心形成功 ΔG^*

$$\begin{aligned} \Delta G^* &= \frac{\pi (r^*)^3}{5} \Delta G_1^v + 2\pi (r^*)^2 \gamma_{co} + \frac{2\pi (r^*)^2}{5} \gamma_{in} \\ &= \left[-\frac{\pi (2 \times 10^{-9})^3}{5} \times 5 \times 10^8 + 2\pi \times (2 \times 10^{-9})^2 \times 0.05 + \frac{2\pi (2 \times 10^{-9})^2}{5} \times 0.5 \right] \text{J} \\ &= 1.26 \times 10^{-18} \text{J} \end{aligned}$$

晶界形核时，因 α 相在 γ 晶界上接触角为 60° ，故 $f(\theta)$ 为

$$f(\theta) = \frac{1}{2} (2 - 3\cos\theta + \cos^3\theta) = 0.5 \times (2 - 3\cos 60^\circ + \cos^3 60^\circ) = 0.3125$$

若在晶内以非共格界面均匀形核(球状)，临界核心半径 r_{in}^* 为

$$r_{in}^* = \frac{2\gamma_{in}}{\Delta G_1^v} = \frac{2 \times 0.5}{5 \times 10^8} \text{m} = 2 \times 10^{-7} \text{m}$$

所需的临界核心形成功 ΔG_{in}^* 为

$$\Delta G_{in}^* = \frac{16\pi}{3} \frac{\gamma_{in}^3}{\Delta G_1^v} = \frac{16\pi}{3} \frac{(0.5)^3}{(5 \times 10^8)^2} = 8.37 \times 10^{-18} \text{J}$$

在晶界上非均匀形核方式形成双球冠状核心的临界核心形成功 ΔG_b^* 为

$$\Delta G_b^* = f(\theta) \Delta G_{in}^* = 8.37 \times 10^{-18} \times 0.3125 \text{J} = 2.615 \times 10^{-18} \text{J}$$

在晶界上非均匀形核(双球冠状)的形核率 I_2 与在晶粒内共格均匀形核(圆盘状)的形核率 I_3 的比值为

$$\frac{I_2}{I_3} = \left(\frac{d}{L} \right) \exp \left\{ -\frac{\Delta G_b^* - \Delta G^*}{kT} \right\} = \frac{10^{-9}}{10^{-3}} \exp \left(-\frac{2.615 \times 10^{-18} - 1.26 \times 10^{-18}}{1.38 \times 10^{-23} \times 1000} \right) = 1.8 \times 10^{-2}$$

在晶内共格形核的形核率比在晶界非共格形核率高。

10.利用第 4 题的结果,设母相(fcc 结构)的 $G=5 \times 10^{10}\text{Pa}$, $\nu=0.3$,最近邻原子间距 0.14nm 。

若在刃位错上形核,如果简单地假设核心是圆柱状,长度为直径的两倍,又设位错密度为 10^6cm^{-2} (简单地认为都是刃位错),位错线上每原子面包含 10 个原子,大约估计 $\ln(I_{\text{位错}}/I_{\text{均匀}})$,求核心临界直径。

解:在位错上形核(圆柱状)的临界半径 r^* 为

$$r^* = \frac{\gamma}{2\Delta G_1^v} \left[1 \pm \left\{ 1 + \frac{2A\Delta G_1^v}{\pi\gamma^2} \right\}^{\frac{1}{2}} \right]$$

其中 $A=Gb^2/4\pi(1-\nu)$ 。利用第 4 题的数据, $\gamma=0.5\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$,形核驱动力 $\Delta G_1^v = 7.6 \times 10^8 \text{J}\cdot\text{m}^{-3}$ 。

临界半径 r^* 为

$$\begin{aligned} r^* &= \frac{\gamma}{2\Delta G_1^v} \left[1 \pm \left\{ 1 + \frac{Gb^2\Delta G_1^v}{2\pi^2\gamma^2(1-\nu)} \right\}^{\frac{1}{2}} \right] \\ &= \frac{0.5}{2 \times 7.6 \times 10^8} \left[1 \pm \left\{ 1 - \frac{5 \times 10^{10} (0.14 \times 10^{-9})^2 \times 7.6 \times 10^8}{2\pi^2 \times (0.5)^2 (1-0.3)} \right\}^{1/2} \right] \text{m} \end{aligned}$$

上式得 $r^*=6.2 \times 10^{-10}\text{m}$, $3.75 \times 10^{-11}\text{m}$ 。 $r^*=6.2 \times 10^{-10}\text{m}$ 是临界半径, $3.75 \times 10^{-11}\text{m}$ 大小相当位错的 r_0 。临界形核功为

$$\begin{aligned} \Delta G^* &= [\pi(r^*)^2 \Delta G_1^v + 2\pi r^* \gamma - \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln(\frac{r^*}{r_0})] 4r^* \\ &= [-4\pi(6.2 \times 10^{-10})^3 \times 7.6 \times 10^8 + 8\pi(6.2 \times 10^{-10})^2 \times 0.5 - \frac{5 \times 10^{10} (0.14 \times 10^{-9})^2 \times 6.2 \times 10^{-10}}{4\pi(1-0.3)} \ln \frac{6.2}{3.75}] \text{J} \\ &= 2.36 \times 10^{-18} \text{J} \end{aligned}$$

单位长度位错所占的体积 $V_d=10\Omega$, Ω 为原子体积。现在是 fcc 结构,点阵常数 $a=\sqrt{2}b$,

一个晶胞含有 4 个原子,原子体积 Ω 是

$$\Omega = a^3/4 = (\sqrt{2}b)^3/4 = (\sqrt{2} \times 0.14 \times 10^{-9})^3/4 = 1.94 \times 10^{-30} \text{m}^3$$

故单位长度位错所占的体积 $V=10\Omega=1.94 \times 10^{-29}\text{m}^3$ 。单位体积中位错所占的体积 V_d 为

$$V_d = V\rho = 1.94 \times 10^{-29} \times 10^{10} = 1.94 \times 10^{-18}$$

按第 4 题数据,温度为 600K,在晶内形成非共格核心所需的形核功 ΔG_m^* 为 $8.37 \times 10^{-18}\text{J}$,

故在位错上形核率 I_1 与在晶内形核率 I_3 之比

$$\begin{aligned} \ln \frac{I_1}{I_3} &= \ln(V_d)^2 - \frac{\Delta G_d^* - \Delta G^*}{kT} = \ln(1.94 \times 10^{-18})^2 - \frac{2.36 \times 10^{-18} - 8.37 \times 10^{-18}}{1.38 \times 10^{-23} \times 600} \\ &= -81.57 + 725.84 = 644.27 \end{aligned}$$

说明主要在位错上形核,在晶内均匀形核可以忽略。

11. 纯铁发生 $\gamma \rightarrow \alpha$ 多形性转变，界面是非共格的，估计在 1150K 以及 900K 时 α -Fe 界面迁移速度。晶界扩散激活能近似为 120kJ/mol，原子间距 $\approx 0.248\text{nm}$ 。

$$\Delta G^{\alpha \rightarrow \gamma} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 \quad (\text{J/mol})$$

其中系数:

温度范围/K	A	B	C	D	E
740 < T 860	-269693	1294.373	-2.288242	1.7794×10^{-3}	-5.156663×10^{-7}
860 < T 940	5442896	-24104.31	40.02958	-2.953537×10^{-2}	8.167968×10^{-6}
940 < T 1080	243631.7	-932.2832	1.350039	-8.736977×10^{-4}	2.126265×10^{-7}
1080 < T 1240	587297	-1967.562	2.473726	-1.382798×10^{-3}	2.898708×10^{-7}

解：根据商标的数据，1150K 的 $RT=8.314 \times 1150\text{J/mol}=9561.1\text{J/mol}$ ； $\Delta G^{\alpha \rightarrow \gamma}$ 为

$$\begin{aligned} \Delta G^{\alpha \rightarrow \gamma} &= [587297 - 1967.562 \times 1150 + 2.473726(1150)^2 - \\ &\quad - 1.382798 \times 10^{-3}(1150)^3 + 2.898708 \times 10^{-7}(1150)^4] \text{J/mol} \\ &= 26.23 \text{J/mol} \end{aligned}$$

900K 的 $RT=8.314 \times 900\text{J/mol}=7482.6\text{J/mol}$ ； $\Delta G^{\alpha \rightarrow \gamma}$ 为

$$\begin{aligned} \Delta G^{\alpha \rightarrow \gamma} &= [5442896 - 24104.31(900) + 40.02958(900)^2 - \\ &\quad - 2.953537 \times 10^{-2} \times (900)^3 + 8.167968 \times 10^{-6} \times (900)^4] \text{J/mol} \\ &= 695.87 \text{J/mol} \end{aligned}$$

因为在这两个温度下 $\Delta G^{\alpha \rightarrow \gamma} < RT$ ，多形性转变界面迁移速度为

$$v = B \frac{\Delta G^{\gamma \rightarrow \alpha}}{kT} \exp\left(-\frac{\Delta G_m}{kT}\right) \approx \frac{D_b}{kT} \frac{\Delta G^{\gamma \rightarrow \alpha}}{d}$$

晶界扩散系数 $D_b \approx b^2 \nu \exp(-\Delta G_m/RT)$ ，简单假设晶界厚度 $d \approx b$ ，则在 1150K 温度下界面迁移速度为

$$\begin{aligned} v &\approx b \nu \frac{\Delta G^{\gamma \rightarrow \alpha}}{kT} \exp\left(-\frac{\Delta G_m}{kT}\right) = 0.248 \times 10^{-9} \times 10^{13} \frac{26.23}{8.314 \times 1150} \exp\left(-\frac{120 \times 10^3}{8.314 \times 1150}\right) \text{m/s} \\ &= 2.41 \times 10^{-5} \text{m/s} \end{aligned}$$

在 900K 温度下界面迁移速度为

$$\begin{aligned} v &\approx b \nu \frac{\Delta G^{\gamma \rightarrow \alpha}}{kT} \exp\left(-\frac{\Delta G_m}{kT}\right) = 0.248 \times 10^{-9} \times 10^{13} \frac{695.87}{8.314 \times 900} \exp\left(-\frac{120 \times 10^3}{8.314 \times 900}\right) \text{m/s} \\ &= 2.5 \times 10^{-5} \text{m/s} \end{aligned}$$

12. $w(\text{C})=0.25\%$ 的 Fe-C 合金， γ 相在 800°C 保温析出 α 相， α 相只在 γ 相的晶界形核，很快形核位置饱和，即 α 铺满了所有 γ 相的晶界，再增厚长大。 α/γ 界面是非共格界面， γ 相的晶粒直径为 0.04mm ，平衡成分为 $C(\gamma)=0.32\%$ ； $C(\alpha)=0.02\%$ 。在 800°C 时，碳在 γ -Fe 中的扩散系数为 $1.34 \times 10^{-8} \text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ， α 长大时以 γ 相中浓度梯度为线性近似，求平衡时 α 相的厚度以及达到平衡时的时间（忽略形核饱和的时间）。

解： α 相在 γ 相的晶界形核并且位置饱和后， α 相在两侧增厚长大，这是平面一维长大的情况。若近似把界面前浓度梯度看作线性，如右图所示。 α 相厚度 η 与长大时间 t 的关系为

$$\eta = \alpha_1 \sqrt{Dt}$$

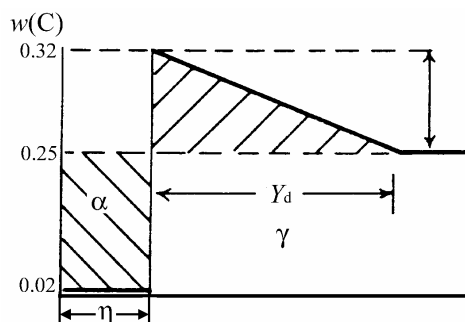
其中 α_1 为长大系数，

$$\alpha_1 = \frac{C_\gamma - C_0}{(C_0 - C_\alpha)^{1/2} (C_\gamma - C_\alpha)^{1/2}}$$

即：

$$\eta = \frac{C_\gamma - C_0}{(C_0 - C_\alpha)^{1/2} (C_\gamma - C_\alpha)^{1/2}} \sqrt{Dt} = \frac{0.32 - 0.25}{(0.25 - 0.02)^{1/2} (0.32 - 0.02)^{1/2}} \sqrt{1.34 \times 10^{-8}} \sqrt{t} \text{ cm}/\sqrt{s}$$

$$= 3.08 \times 10^{-4} \sqrt{t} \text{ cm}/\sqrt{s}$$



为了计算 α 相最终的厚度，要知道平衡时 α 相的体积分数(约等于重量分数) f^α

$$f^\alpha = \frac{0.32 - 0.25}{0.32 - 0.02} = 23.33\%$$

设奥氏体晶粒为立方体，边长为 d ，厚度为 h ，则体积分数 f^α 与 d 和 h 的关系为

$$f^\alpha = \frac{3d^2h}{d^3} = \frac{3h}{d}$$

故 $h = \frac{1}{3} f^\alpha d = \frac{1}{3} \times 0.1333 \times 0.04 \text{ mm} = 3.11 \times 10^{-6} \text{ m}$

当 $\eta = h$ 时达到平衡，所需时间 t 为

$$t = \left(\frac{\eta}{3.08 \times 10^{-4}} \right)^2 = \left(\frac{3.11 \times 10^{-6}}{3.08 \times 10^{-4}} \right)^2 \text{ s} = 1 \times 10^{-2} \text{ s}$$

13. 锰在 282°C 时 $\beta \rightarrow \alpha$ 等温转变的转变量摩尔分数 x 和转变时间的关系如下所列

x	0.04	0.18	0.49	0.89
t/s	1260	2000	2820	3900

假设转变动力学服从 Avrami 关系，求出其中指数 n ，并推断可能的形核及长大的方式。

解：Avrami 关系是 $X = 1 - \exp(-Bt^n)$ 。设 β 和 α 相的摩尔体积相等，则摩尔分数 x 和体积分

分数 X 相等。对 Avrami 关系左右两端去对数，得 $kt^n = -\ln(1 - X)$ ，再取对数得

$$\ln k + n \ln t = \ln[-\ln(1 - X)]$$

把数据换成 $\ln t$ 及 $\ln[-\ln(1 - X)]$ ，得下表

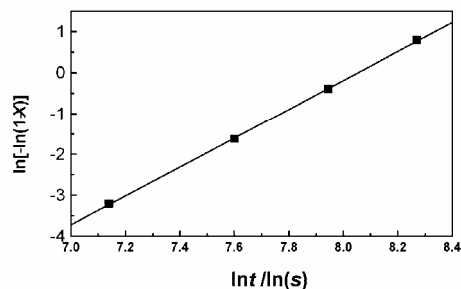
$\ln[-\ln(1 - X)]$	-3.199	-1.617	-0.395	0.792
$\ln t / \ln s$	7.139	7.601	7.945	8.269

对上列数据画图(右图)，并进行线性回归，

得

$$\ln[-\ln(1 - X)] = -28.406 + 3.53 \ln t$$

锰的 $\beta \rightarrow \alpha$ 等转变是多形性转变，因为 n 在 3~4 之间，可以推断转变过程是形核率随时间减小。



14. 当转变时间很短时，Avrami 方程可作怎样的简化？

(1) 若形核都是在晶粒角上，并且假设晶核都是在转变开始瞬间形成，形核位置饱和，核心以恒速长大，以简单的模型，利用 Avrami 简化式子，证明指数 $n=3$ 。

(2) 若在晶界形核，并且假设晶核都是在转变开始瞬间形成，形核位置饱和，核心以恒速长大，以简单的模型，利用 Avrami 简化式子，证明指数 $n=1$ 。

解：Avrami 关系是 $X = 1 - \exp(-Bt^n)$ ，当时间很短时， $\exp(-kt^n) \approx kt^n$ ，即 $X = kt^n$ 。

(1) 形核都是在晶粒角上，瞬间形核位置饱和的情况。设核心是球状，核心界面推移速度是 v ，则在 t 时刻新相粒子的体积 $V = 4\pi(vt)^3/3$ 。又设晶粒是立方体，边长为 d ，每个角隅上都形核，即每 d^3 含一个新相粒子，故新相的体积分数 X 应为

$$X = \frac{4\pi v^3}{3d^3} t^3$$

即 $n=3$ 。

(2) 形核都在晶界，瞬间形核位置饱和的情况。因晶界形核饱和，即新相片状向两侧长大。核心界面推移速度是 v ，则在 t 时刻每新相片单位面积增加的体积 $V = (vt)$ 。又设晶粒是立方体，边长为 d ，新相片的面积为 $3d^2$ ，故新相的体积分数 X 应为

$$X = \frac{3d^2 v}{d^3} t = \frac{3v}{d} t$$

即 $n=1$ 。

15. A-B 二元系相图如图下所示，在 500K 发生 $\gamma \rightarrow \alpha + \beta$ 共析转变。设共析长大是由体积扩散控制的，求共析片层间距及共析体的长大速度。共析转变的熵变 $\Delta S = 10^5 \text{ J/m}^3$ ， α/β 界面能 $0.5 \text{ J}\cdot\text{m}^{-2}$ ，扩散系数 $D = 5 \times 10^{-13} \text{ cm}^2\cdot\text{s}^{-1}$ 。

解：从右图知共析转变的过冷度为 200K，在这个温度共析最小片层间距 λ_{sc} 为

$$\begin{aligned} \lambda_{sc} &= \frac{2\gamma T_E V_m}{\Delta H \Delta T} = \frac{2\gamma}{\Delta S_V \Delta T} \\ &= \frac{2 \times 0.5}{10^5 \times 200} \text{ m} = 5 \times 10^{-8} \text{ m} \end{aligned}$$

对于体积扩散机制实际的片层间距 $\lambda_s = 3\lambda_{sc} = 1.5 \times 10^{-7} \text{ m}$ 。

共析体的长大速度 v 为

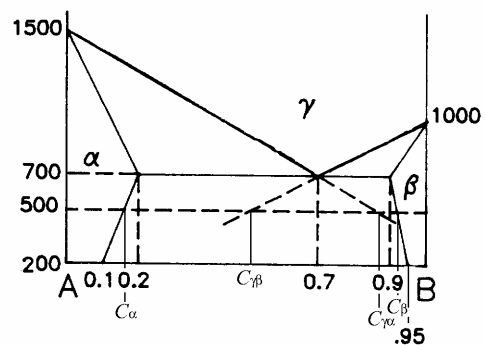
$$v = \frac{2D\Delta C_\gamma}{f_\alpha f_\beta (C_\beta - C_\alpha)} \frac{1}{\lambda_s} \left(1 - \frac{\lambda_{sc}}{\lambda_s} \right)$$

根据相图，求出在 500K 下的 C_α 、 C_β 、 $C_{\gamma\alpha}$ 和 $C_{\gamma\beta}$ 。因各相线都是直线，故

$$C_\alpha = \frac{0.2 - 0.1}{500} \times 300 + 0.1 = 0.14 \quad C_\beta = \frac{0.95 - 0.9}{500} \times 300 + 0.9 = 0.93$$

$$C_{\alpha\gamma} = \frac{0.7}{800} \times 1000 = 0.875 \quad C_{\beta\gamma} = 1 - \frac{1 - 0.7}{300} \times 500 = 0.5$$

在共析体 α 相 β 相前 γ 的浓度差 $\Delta C_\gamma = C_{\alpha\gamma} - C_{\beta\gamma} = 0.875 - 0.5 = 0.375$ 。两相平衡时的相对量为



$$f_{\alpha} = \frac{0.93-0.7}{0.93-0.14} = 0.291 \quad f_{\beta} = 1 - f_{\alpha} = 1 - 0.291 = 0.709$$

把这些数据代入速度式子，得

$$v = \frac{2D\Delta C_{\gamma}}{f_{\alpha}f_{\beta}(C_{\beta}-C_{\alpha})} \frac{1}{\lambda_s} \left(1 - \frac{\lambda_{sc}}{\lambda_s}\right) = \frac{2 \times 5 \times 10^{-17} \times 0.375}{0.291 \times 0.709 \times (0.93 - 0.14)} \frac{1}{1.5 \times 10^{-7}} \left(1 - \frac{1}{3}\right) \text{m/s}$$

$$= 1.02 \times 10^{-9} \text{m/s}$$

16. A-B 二元系，富 B 的 β 相颗粒分布在 α 相中，颗粒尺寸不均匀，平均半径为 $0.1\mu\text{m}$ 。 α/β 界面能为 $0.5\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$ ，在 1000K ，在 α 相中扩散系数为 $10^{-11}\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$ ，两相的摩尔体积近似为 $2 \times 10^{-7}\text{m}^3$ ，在 1000K ， α 相和 β 相的平衡浓度分别为 2% 和 90%。

(1) 在此时，半径为 $0.05\mu\text{m}$ 及 $1.5\mu\text{m}$ 的颗粒的界面移动速度是多大？

(2) 求平均半径从 $0.1\mu\text{m}$ 长大到 $0.3\mu\text{m}$ 所需要的时间？

解：(1) 根据题目给出的数据，代入颗粒界面移动速度 v 式子

$$v = \frac{2D\gamma V_m C_{\infty}}{(C_{\beta} - C_{\infty})RT} \frac{1}{r_1} \left(\frac{1}{\bar{r}_1} - \frac{1}{r_1} \right)$$

当半径为 $0.05\mu\text{m}$ 时，颗粒界面移动速度 v 为

$$v = \frac{2 \times 10^{-11} \times 0.5 \times 2 \times 10^{-7} \times 0.02}{8.314 \times 1000 (0.9 - 0.02)} \frac{1}{0.05 \times 10^{-6}} \left[\frac{1}{0.1 \times 10^{-6}} - \frac{1}{0.05 \times 10^{-6}} \right] \text{m/s}$$

$$= -1.09 \times 10^{-9} \text{m/s}$$

当半径为 $1.5\mu\text{m}$ 时，颗粒界面移动速度 v 为

$$v = \frac{2 \times 10^{-11} \times 0.5 \times 2 \times 10^{-7} \times 0.02}{8.314 \times 1000 (0.9 - 0.02)} \frac{1}{1.5 \times 10^{-6}} \left[\frac{1}{0.1 \times 10^{-6}} - \frac{1}{1.5 \times 10^{-6}} \right] \text{m/s}$$

$$= 3.40 \times 10^{-11} \text{m/s}$$

说明半径为 $0.05\mu\text{m}$ 的粒子溶解，半径为 $1.5\mu\text{m}$ 的粒子长大。

(2) 在 t 时刻平均粒子半径 \bar{r}_1 为

$$\bar{r}_1^3 = \bar{r}_0^3 + \frac{3}{2} \frac{\gamma D C_{\infty} V_m t}{RT(C_{\beta} - C_{\infty})}$$

即

$$t = (\bar{r}_1^3 - \bar{r}_0^3) \frac{2RT(C_{\beta} - C_{\infty})}{3\gamma D C_{\infty} V_m} = [(0.3 \times 10^{-6})^3 - (0.1 \times 10^{-6})^3] \frac{2}{3} \times \frac{8.314(0.9 - 0.02) \times 1000}{0.5 \times 10^{-11} \times 0.02 \times 10^{-7}} \text{s}$$

$$= 1.27 \times 10^4 \text{s}$$

17. A-B 二元系固态完全互溶 (α 相)，并存在溶解度间隙，间隙的 $T_c=800\text{K}$ 。在 550K 的

摩尔分数 $x_B=0.4$ 时，自由能-成分曲线 $d^2G/dx^2 = -95.32\text{J}$ ，测得在该成分下

$D_{A^*}^{AB} = 9 \times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{s}$, $D_{B^*}^{AB} = 2 \times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{s}$ 。若调幅分解的 $\lambda_m = 100 \text{ nm}$, 问以多大的冷却速度

从高温 850K 冷却下来才可以避免在 550K 发生调幅分解?

解: 因为调幅分解的 $\lambda_m = 100 \text{ nm}$, 调幅分解所需的扩散距离就是 $100 \text{ nm}/2 = 50 \text{ nm}$, 根据估

计扩散这段距离 x 和所需的时间 t 的关系 $x \approx \sqrt{6\tilde{D}t}$, 其中 \tilde{D} 是互扩散系数, 它是

$$\begin{aligned}\tilde{D} &= (x_A D_{B^*}^{AB} + x_B D_{A^*}^{AB}) \frac{x_A x_B}{RT} \frac{d^2 G}{dx_B^2} \\ &= -(0.6 \times 2 \times 10^{-16} + 0.4 \times 9 \times 10^{-16}) \frac{0.6 \times 0.4}{8.314 \times 550} \times 95.32 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1} = -2.4 \times 10^{-18} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}\end{aligned}$$

扩散距离为 50nm 所需时间 t 为

$$t = \frac{(\lambda_m/2)^2}{6\tilde{D}} = \frac{(50 \times 10^{-9})^2}{6 \times 2.4 \times 10^{-18}} \text{ s} = 173.6 \text{ s}$$

若从 800K 冷却到 550K 的时间小于 173.6s 就没有足够的时间发生调幅分解, 故冷却速度 v 应大于

$$v > \frac{800 - 550}{173.6} \text{ K} \cdot \text{s}^{-1} = 1.44 \text{ K} \cdot \text{s}^{-1}$$

上面的分析是过低估计, 因为采用的是 550K 的扩散系数, 而冷却是从 800K 到 550K, 整个过程的扩散都比 550K 时的快。