

## 《材料科学基础》习题集（上）

- 一、体心单斜是否是一种新点阵？为什么？
- 二、画出立方晶系中(112)、(110)晶面， $[123]$ 、 $[101]$ 、 $[111]$ 晶向。
- 三、布拉菲点阵一共有多少种？它们分属于哪几大晶系？ $\text{CaF}_2$ 属性哪种点阵？
- 四、何为晶带和晶带轴？点阵平面(110)、(311)和(132)是否属于同一晶带？如果是，请指出其晶带轴；如果不是，为什么？
- 五、求(121)和(100)决定的晶带轴与(001)和(111)所决定的晶带轴所构成的晶面的晶面指数。
- 六、写出立方晶系中 $\langle 110 \rangle$ 晶向族所代表的所有晶向。
- 七、已知铜是面心立方结构的金属，其原子半径为 0.1278nm，摩尔质量为 63.54g/mol。求铜的密度
- 八、在金属中空位形成能为 2.0eV（或  $0.32 \times 10^{-18} J$ ）。在 800℃时， $1 \times 10^4$  个原子中有一个空位，试问在何种温度时 1000 个原子中含有 1 个空位？
- 九、已知 Al 晶体在 550℃时的空位平衡浓度  $C_v$  为  $2 \times 10^{-6}$ ，已知 Al 的原子直径为 0.287nm，假设空位在晶体中是均匀分布的，试计算这些空位均匀分布在晶体中时，空位之间的平均间距为多少？
- 十、已知 BCC 铁的密度为 7.87g/cm<sup>3</sup>，点阵常数为  $2.866 \times 10^{-8} \text{cm}$ ，铁的摩尔质量为 55.847g/mol，求一个铁晶胞中包含的空位数为多少？每 cm<sup>3</sup> 中包含的空位数是多少？
- 十一、在晶体中插入附加的柱状半排原子面能否形成位错环？为什么？
- 十二、已知铜为 FCC 结构，点阵常数为 0.36151nm，试计算铜中全位错的柏氏矢量长度。
- 十三、试分析在 FCC 中，位错反应  $\frac{a}{2}[10\bar{1}] + \frac{a}{6}[\bar{1}21] \rightarrow \frac{a}{3}[11\bar{1}]$  能否进行？指数式中三个位错的性质类型？反应后生成的新位错能否在滑移面上运动？
- 十四、设均匀形核时形成半径为  $r$  的球形晶核，晶体元素的相对原子质量为  $A$ ，密度为  $\rho$ ，阿伏伽德罗常数为  $N_A$ ，求临界晶核中所含原子数  $n^*$  的表达式。

十五、推导材料凝固的热力学条件。

十六、结合形核原理说明形核率与过冷度的关系。

十七、何为正、负温度梯度？简述纯金属枝晶形成条件和长大过程。

十八、何谓晶粒度？试论晶粒大小对材料性能的影响，并根据凝固理论回答细化晶粒的基本途径。

十九、Cu 在 20℃和熔点间的热容  $C_{p,m}=22.6+6.27\times 10^{-3}T$  J/(mol·K)，熔化热为 13290J/mol，平衡凝固温度为 1356K，试计算在绝热条件下 1mol 的 Cu 在多大的过冷度才能完全凝固不回升到熔点？实际上可能吗？

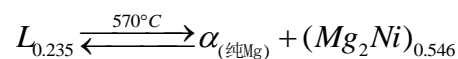
二十、简述凝固结晶的热力学、动力学、能量和结构条件。

二十一、铸锭组织有何特点？

二十二、论述固溶体与金属间化合物（中间相）的区别。

二十三、试问相图边界的纯组元线是否为一个单相区？

二十四、Mg-Ni 系的一个共晶反应为



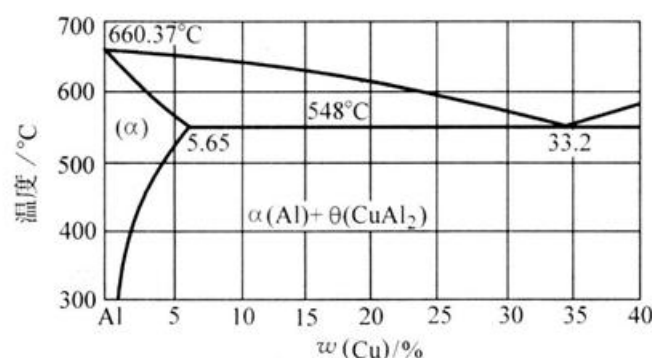
设  $W_{\text{Ni}}^1 = C_1$  为亚共晶合金， $W_{\text{Ni}}^2 = C_2$  为过共晶合金，这两种合金中的初晶的质量分数相等，但  $C_1$  合金中的  $\alpha$  相总量为  $C_2$  合金的 2.5 倍，试计算  $C_1$  和  $C_2$  的成分。

二十五、何为成分过冷？

二十六、Al-Cu 部分区域相图如图所示，假定 0.96Al-0.04Cu 合金在 620℃中达到平衡。然后，该合金又急速冷却至 550℃，以致原来的固体没有机会参与反应，并且液相依然存在。请问：

1. 该液体的成分为多少？

2. 此时液体占的比重为多少？



二十七、一碳钢在平衡冷却条件下，所得的显微组织中，含有 50%的珠光体和 50%的铁素体，请问：

1. 此合金中碳的含量为多少？
2. 若该合金加热到  $730^{\circ}\text{C}$ ，在平衡条件下将获得什么组织？
3. 若加热到  $850^{\circ}\text{C}$ ，又将得到什么组织？

二十八、共晶反应和包晶反应有何不同？

二十九、共晶成分合金有何特点？

三十、共晶反应和共析反应有何不同？

## 习题答案

一、答：不是，因为画图分析可知，体心单斜和简单单斜是同一点阵。

二、略

三、答：布拉菲点阵一共有 14 种，它们分别属于七大晶系（立方晶系、六方晶系、正方晶系、菱方晶系、正交晶系、单斜晶系、三斜晶系）。CaF<sub>2</sub> 属于面心立方点阵。

四、答：晶带是指许多不同的晶面组平行于同一个晶向时，这些晶面组总称为一个晶带，或者称为共带面，被平行的晶向称为晶带轴。

晶带轴  $[uvw]$  和晶带中任意一个晶面  $(hkl)$  组必然满足：

$$hu + kv + lw = 0$$

且若 2 个不平行的晶面  $(h_1k_1l_1)$ 、 $(h_2k_2l_2)$  同属于一个晶带，则晶带轴  $[uvw]$  可以通过下式求得：

$$u = k_1l_2 - k_2l_1, v = l_1h_2 - l_2h_1, w = h_1k_2 - h_2k_1$$

故  $(110)$ 、 $(311)$  面的晶带轴为  $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$ ， $(110)$  和  $(132)$  面的晶带轴为  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 。故三面不为同一晶带。

五、答： $(121)$  和  $(100)$  晶带轴为  $[01\bar{2}]$ ， $(001)$  和  $(111)$  晶带轴为  $[\bar{1}\bar{1}0]$ 。 $[01\bar{2}]$  和  $[\bar{1}\bar{1}0]$  决定的平面  $(221)$ 。

六、答：包括  $[110][101][011][\bar{1}10][\bar{1}01][0\bar{1}1][\bar{1}\bar{1}0][\bar{1}0\bar{1}][0\bar{1}\bar{1}][1\bar{1}0][10\bar{1}][01\bar{1}]$  12 个晶向。

七、解：由于铜为面心立方结构，所以  $\sqrt{2}a = 4r$  (其中  $a$  为晶胞边长， $r$  为原子半

径)。

则 
$$a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = \frac{4 \times 0.1278}{\sqrt{2}} nm = 0.361 nm$$

由此可得铜的晶胞体积为

$$V = a^3 = 0.361^3 nm^3 = 4.7 \times 10^{-2} nm^3$$

所以单个铜原子的质量为：

$$\frac{63.54}{6.02 \times 10^{23}} g = 1.055 \times 10^{-22} g$$

因此，铜的密度为：

$$\begin{aligned} \rho_v &= \frac{\text{晶胞质量}}{\text{晶胞体积}} \\ &= \frac{m}{V} = \frac{4.22 \times 10^{-22} g}{4.70 \times 10^{-2} nm^3} = 8.98 g / cm^3 \end{aligned}$$

八、解：平衡状态下有：

$$\frac{n_e}{N} = C_v = A \cdot \exp \frac{-u}{kT}$$

即 
$$\ln \frac{n_e}{N} = \ln A - \frac{u}{kT}$$

由题目条件 
$$\ln 10^{-4} = \ln A - \frac{0.32 \times 10^{-18} J / \text{原子}}{[13.8 \times 10^{-24} J / (\text{原子} \cdot K)] \times 1073 K}$$

$$\ln 10^{-3} = \ln A - \frac{0.32 \times 10^{-18} J / \text{原子}}{[13.8 \times 10^{-24} J / (\text{原子} \cdot K)] \times T}$$

联立解得： 
$$T = 1201 K$$

九、解：Al 晶体为面心立方点阵，设点阵常数为 a，原子直径为 d，则有

$$a = \sqrt{2}d$$

设单位体积内的阵点数目为 n，则有：

$$n = \frac{4}{a^3} = \frac{\sqrt{2}}{d^3}$$

故单位体积内的空位数为

$$n_v = nC_e = \frac{\sqrt{2}}{d^3} \times 2 \times 10^{-6}$$

由题可知空位在晶体内均匀分布，故其平均间距 L 为：

$$L = \sqrt[3]{\frac{1}{n_v}} = \sqrt[3]{\frac{1}{2 \times \sqrt{2} \times 10^{-6}}} d^3 nm = 20.3 nm$$

十、解：设在考虑空位的情况下，BCC 铁每个晶胞中有 x 个原子，则

$$\rho = \frac{(x \text{ 原子 / 晶胞})(55.849 \text{ g / mol})}{(2.866 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 \times (6.02 \times 10^{23} \text{ 原子 / mol})} = 7.87 \text{ g / cm}^3$$

求得  $x = 1.9971$  原子/晶胞

由于理想 BCC 铁晶体中每个晶胞含 2 个铁原子，故此 BCC 铁晶胞中包含的空位数为：

$$2 - 1.9971 = 0.0029 \text{ 个}$$

每  $\text{cm}^3$  中包含的空位数为

$$\frac{0.0029 \text{ 空位 / 晶胞}}{(2.866 \times 10^{-8} \text{ cm})^3} = 1.23 \times 10^{20} \text{ 空位 / cm}^3$$

十一、答：不能形成位错环。假设能形成位错环，由于插入的是附加的柱状半原子面，则该位错环各处均为刃型位错，根据刃型位错的  $\vec{l} \perp \vec{b}$ ，则该位错环的每一个线元对应的柏氏矢量  $\vec{b}$  应沿着径向，也就是说环上各线元对应的  $\vec{b}$  不同，这与一条位错线只有一个  $\vec{b}$  相矛盾。

十二、解：Cu 为 FCC 结构，其密排方向  $\langle 110 \rangle$  则为柏氏矢量方向，则面对角线为：

$$\sqrt{2}a_0 = \sqrt{2} \times 0.36151 \text{ nm} = 0.51125 \text{ nm}$$

故全位错的柏氏矢量的长度为：

$$|\vec{b}| = \frac{1}{2} \times 0.51125 \text{ nm} = 0.25563 \text{ nm}$$

十三、解：  $\frac{a}{2}[10\bar{1}]$  为全位错，  $\frac{a}{6}[\bar{1}21]$  为肖克莱位错，  $\frac{a}{3}[11\bar{1}]$  为弗兰克位错。

位错反应可以进行必须满足几何条件和能量条件

对于反应式  $\frac{a}{2}[10\bar{1}] + \frac{a}{6}[\bar{1}21] \rightarrow \frac{a}{3}[11\bar{1}]$

位错反应几何条件：

$$\vec{b}_1 + \vec{b}_2 = (\frac{1}{2} - \frac{1}{6})\vec{a} + (0 + \frac{2}{6})\vec{b} + (-\frac{1}{2} + \frac{1}{6})\vec{c} = \frac{1}{3}\vec{a} + \frac{1}{3}\vec{b} - \frac{1}{3}\vec{c} = \frac{a}{3}[11\bar{1}]$$

故  $\sum b_{\text{前}} = \sum b_{\text{后}}$ ，满足几何条件。

位错反应能量条件：

$$\left| \frac{a}{2}\sqrt{2} \right|^2 + \left| \frac{a}{6}\sqrt{6} \right|^2 = (\frac{a^2}{2} + \frac{a^2}{6}) > \frac{a^2}{3}$$

故  $\sum b_{\text{前}}^2 > \sum b_{\text{后}}^2$ ，满足能量条件。故题述位错反应能够发生。

新位错  $\frac{a}{3}[11\bar{1}]$  的位错线为  $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$  和  $(11\bar{1})$  的交线，位于  $(001)$  面上，且系纯刃型位错。

由于  $(001)$  面系 FCC 非密排面，故不能运动，系固定位错。

十四、解：

形核功 
$$\Delta G = \frac{4}{3}\pi r^3 \Delta G_v + 4\pi r^2 \sigma$$

令 
$$\frac{\partial(\Delta G)}{\partial r} = 0$$

得临界晶核半径 
$$r^* = \frac{-2\sigma}{\Delta G_v}$$

则 
$$n^* = N_A \frac{\rho V^*}{A} = \frac{N_A \rho}{A} \frac{4}{3} \pi \left( \frac{-2\sigma}{\Delta G_v} \right)^3 = -\frac{32\pi\sigma^3 \rho N_A}{3A(\Delta G_v)^3}$$

十五、解：自由能

$$G = H - TS$$

式中，H 为焓，T 为热力学绝对温度，S 为熵。

根据热力学理论，在一定温度下，只有使体系自由能 G 降低，转变才会自发进行，即：

$$\Delta G = (\Delta H - T\Delta S) < 0$$

对于恒压凝固过程：

$$\Delta H = H_s - H_L = H_m$$

式中  $H_m$  为凝固时的相变热。

在熔点温度时 ( $T = T_m$ )，固液两相平衡， $\Delta G = 0$ ，则有：

$$\Delta S = \frac{H_m}{T_m}$$

故当温度在熔点温度附近时有：

$$\Delta G = (\Delta H - T\Delta S) = H_m - T \frac{H_m}{T_m} = \frac{H_m \Delta T}{T_m}$$

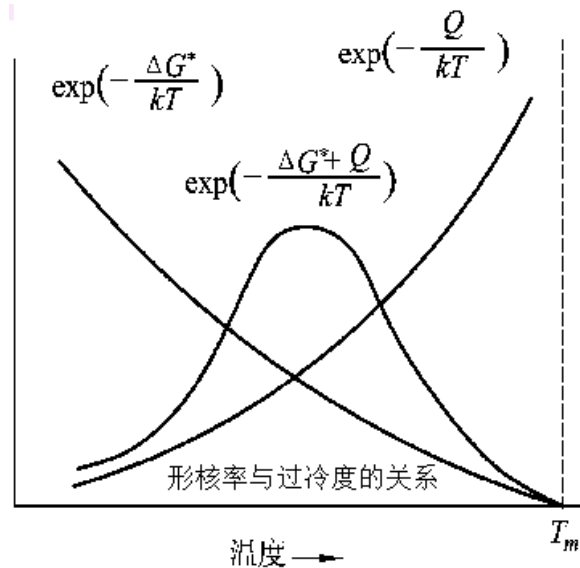
式中， $\Delta T = T_m - T$ ，即为实际凝固温度与熔点的温度之差，由于凝固过程中放热，则  $H_m < 0$ ，故欲使  $\Delta G < 0$ ，必然需要  $T < T_m$ ，即必须要有一定的过冷度，凝固过程才能发生，此即为材料凝固的热力学条件。

十六、答：形核率  $N$  可用下式表示：

$$N = N_1 \cdot N_2 = C \cdot e^{-\frac{\Delta G^*}{kT}} \cdot e^{-\frac{Q}{kT}}$$

式中， $C$  为常数， $\Delta G^*$  为形核功， $Q$  为原子越过液、固相界面的扩散激活能， $k$  为玻尔兹曼常数， $T$  为绝对温度。在这一公式中  $N$  为总的形核率， $N_1$  为受  $\Delta G^*$  影响的形核率因子， $N_2$  为受原子扩散影响的形核率因子。当温度低于  $T_m$  时， $N$  受两个因素的控制：一方面随着过冷度增大，晶核的临界晶核半径和形核功减小，因而需要的能量起伏小，稳定的晶核容易形成；另一方面随着过冷度的增大，原子的活动性降低，它从液相转移到固相上的几率降低，不利于晶核的形成。因此，总形核率随着过冷度增加先增加再降低，具体如图所示。





十七、答：正的温度梯度是指随着离开液-固界面的距离增大，液相温度随之升高的情况。负的温度梯度是指液相温度随着离开液-固界面距离增大，液相温度随之降低的情况。

纯金属以枝晶方式长大，除了需要过冷条件外，还必须在负的温度梯度下才能实现。枝晶的长大过程，即在负的温度梯度下，固体表面上的偶然凸起可深入到过冷度更大的前面液相中，因而得到更有利的生长条件。此时固体表面形成了一些向内部伸长的晶轴，在这些晶轴的侧面，由于结晶潜热释放又会造成负的温度梯度的分布。在这种情况下，液-固界面就不可能保持平面状而会形成许多伸向液体的分枝（沿一定的晶向轴），同时在这些枝晶上又可能会长出二次枝晶，在二次枝晶再长出三次枝晶……这样不断地枝上生枝，同时各级晶轴不断长大，直到它们相互接触，晶轴间液相耗尽，形成一个充实的树枝状晶体为止。

十八、答：所谓晶粒度是表示晶粒大小的一种方式。若将晶粒近似看成球体，晶粒度通常采用它们的平均面积( $\text{mm}^2$ )或平均直径( $\text{mm}$ )来表示，也可用单位体积中的晶粒数目( $\text{个}/\text{mm}^3$ )来衡量。目前生产中采用晶粒度等级来表示晶粒的大小。标准晶粒度共分为八级，一级晶粒度最粗，平均直径为  $0.25\text{mm}$ ，八级晶粒度最细，平均直径为  $0.022\text{mm}$ 。有时根据需要，对不同的材料的晶粒度等级还可以向八级两边扩展。

晶粒大小对材料的力学性能有重要的影响。在常温下，材料的晶粒越细小，

其强度、硬度越高，同时塑性、韧性也越好，这就是细晶强化的手段。因此，应用凝固理论控制结晶后晶粒大小对提高和改善材料的力学性能具有重要的实际意义。细化晶粒可采取以下途径：1.增加过冷度；2.变质处理；3.振动与搅拌。

十九、解：  $\Delta H = \int C_p dT$

由题意有

$$13290 = \int_T^{1356} (22.6 + 6.27 \times 10^{-3} T) dT$$

整理得

$$3.135 \times 10^{-3} T^2 + 22.6T - 23120 = 0$$

解得

$$T = 908K$$

因此过冷度

$$\Delta T = 1356 - 908 = 448K$$

一般纯金属发生均匀形核的最大过冷度约为  $0.2T_m$ 。对 Cu 而言  $0.2T_m = 271K$ ，故实际上不可能达到题述过冷度。

二十、答：凝固（结晶）的热力学条件是固相的自由能  $G_s$  低于液相的自由能  $G_L$ ，即  $\Delta G = G_s - G_L < 0$ ，欲使  $\Delta G < 0$ ，只有过冷度  $\Delta T > 0$ ，且  $\Delta T$  越大，凝固的驱动力越大。

凝固的动力学条件为动态过冷，即液相凝固时，液-固界面将不断地向液相中迁移，故必须在界面处有一定的过冷，才能实现在界面处从液相向固相的净原子输送。

凝固的能量条件是需要具有结构起伏。因为形成一个临界晶核时，必须靠能量起伏来补偿界面能的  $1/3$ 。

凝固的结构条件是具有结构起伏，即在液相中出现时聚时散的短程有序区现象、它是结晶核心形成的基础。

总而言之，凝固的必要条件是过冷度  $\Delta T > 0$ ；充分条件是动态过冷，能量起伏和结构起伏。

二十一、答：在铸锭组织中，一般有 3 层晶区：

1. 最外层为细晶区。其形成是由于模壁的温度较低，液体的过冷度较大，因而形核率较高所致。

2. 中间为柱状晶区。其形成主要是模壁的温度升高，晶核的成长率大于晶核的形成率，且沿垂直于模壁方向的散热较为有利。在细晶区中取向有利的晶粒优先生长为柱状晶。

3. 中心为等轴晶区。其形成是由于模壁温度进一步升高，液体过冷度进一步降低，剩余液体的散热方向性已不明显，处于均匀冷却状态；未熔杂质、破断枝晶等易集中于剩余的液体中，这些都促进了等轴晶的形成。

应当指出，铸锭的组织并不是都具有 3 层晶区。由于凝固条件的不同，也会形成在铸锭中只有某一种晶区，或只有某两种晶区。

二十二、答：固溶体与金属间化合物（中间相）的区别主要表现在以下方面：

1. 在相图中的位置不同：单相固溶体区位于相图两端（也称端际固溶体或第一类固溶体），紧挨纯组元，而金属间化合物（中间相）位于相图中部。

2. 晶体结构特点不同：固溶体的结构与溶剂相同，而中间相的结构与形成中间相的元素均不同。

3. 成分特点不同：固溶体的成分不符合特定比例，可以连续变化，而中间相的成分符合特定的比例。

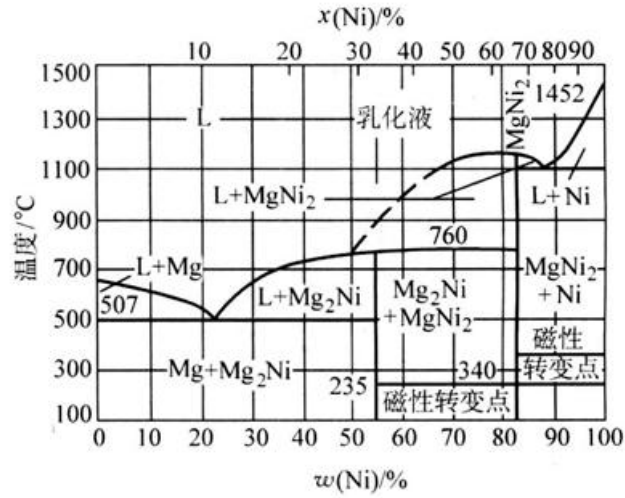
4. 原子分布特点不同：溶质原子在固溶体中呈无规则分布，而金属间化合物中的原子均呈规则分布。

5. 标记符号不同：固溶体一般用置于小括号内的溶剂元素符号标记（有时也简单标记为 $\alpha$ 、 $\beta$ 等），如铝基固溶体标记为（Al）或 $\alpha$ ，而金属间化合物可用化学势标记（有时也简单标记为 $\epsilon$ 、 $\eta$ 等），如渗碳体标记为 $\text{Fe}_3\text{C}$ 。

6. 性能特点不同：相比较而言，固溶体的力学性能特点为软而韧，而中间相的力学性能特点为硬而脆。

二十三、答：当纯组元线与单相区相连接，就不是单相区；当纯组元线与两相区相连接，纯组元线就是单相区。

二十四、解： Mg-Ni 相图如图所示：



根据已知条件，由杠杆定律得初晶相的质量分数为：

$$m_{\alpha_{\text{初}}} = \frac{0.235 - W_B^{C_1}}{0.235}$$

$$m_{\beta_{\text{初}}} = \frac{W_B^{C_2} - 0.235}{0.546 - 0.235}$$

由题意得：

$$m_{\alpha_{\text{初}}} = m_{\beta_{\text{初}}}$$

故可得：

$$W_B^{C_2} = 0.546 - 1.323W_B^{C_1} \quad (1)$$

令  $C_1$  中  $\alpha$  总量为  $\alpha_{\text{总}}^1$ ， $C_2$  中  $\alpha$  总量为  $\alpha_{\text{总}}^2$ ，则可得：

$$\alpha_{\text{总}}^1 = \frac{0.546 - W_B^{C_1}}{0.546}$$

$$\alpha_{\text{总}}^2 = \frac{0.546 - W_B^{C_2}}{0.546}$$

由题意可得：

$$\alpha_{\text{总}}^1 = 2.5\alpha_{\text{总}}^2$$

即

$$\frac{0.546 - W_B^{C_1}}{0.546} = \frac{0.546 - W_B^{C_2}}{0.546} \times 2.5 \quad (2)$$

联立 (1) (2), 可以求得:

C<sub>1</sub> 合金的成分为 0.873Mg-0.127Ni;

C<sub>2</sub> 合金的称为 0.66Mg-0.378Ni。

二十五、答: 凝固时由于溶质再分配造成固液界面前沿溶质浓度变化, 引起理论凝固温度的改变而在液固界面前沿液相内形成的过冷。这种由固-液界面前沿溶质再分配引起的过冷, 称为成分过冷。

二十六、解题思路: 先求出 620℃时液体的成分和数量。在降温的过程中, 固体来不及参加反应。故降温过程中可以把液相当成一个新的成分的“合金”, 并以此合金成分来计算 550℃时液相的成分和含量。

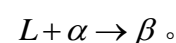
二十七、解: 1. 设该合金中含碳量为  $x$ , 则由杠杆定律得:

$$50\% = \frac{0.0077 - x}{0.0077}$$

2. 730℃时该成分合金的组织为铁素体+奥氏体组织 (F+A)。

3. 850℃时该成分合金的组织为全奥氏体组织 (A)。

二十八、答: 1. 共晶反应为分解型反应  $L \rightarrow \alpha + \beta$ , 包晶反应为成型反应



2. 共晶线为固相线, 线上的合金在共晶温度全部凝固完毕, 而包晶线仅有部分为固相线。

3. 凡进行共晶转变后的组织均为两相混合物, 组织较细; 而进行包晶转变后的组织仅在一定成分区间内为混合物, 但组织较粗。

4. 共晶反应中的液相成分点位于共晶线中间, 而两个固相 (生成相) 则位于共晶线两端; 包晶反应的两个反应相的成分点位于包晶线的两端, 而生成相位于包晶线的中间。

二十九、答: 在一个合金系中, 共晶成分点合金的熔点最低; 合金熔化后几乎完

全没有固相，故共晶合金在液相中具有良好的流动性；故共晶成分合金简化熔化和铸造工艺，降低能源消耗和坩埚腐蚀，具有好的铸造性能。同时低的熔点使共晶成分合金可以做为焊料合金或者保险丝材料使用。

三十、答：共析转变  $\gamma \rightarrow \alpha + \beta$  和共晶转变  $L \rightarrow \alpha + \beta$  同为分解型反应。区别在于共析反应的反应物为固相，由于是固相分解，其原子扩散比较困难，晶核的形成和长大速率较慢，容易产生较大的过冷，所以共析组织远比共晶组织细密，但仍然为两相交叠排列的混合组织。