

材料科学基础 A习题 -1 答案北理工考研基础 复习资料

材料科学基础 A 习题 1、在立方晶系晶胞中画出以下晶面和晶向： (102)、
(11) 、 (1) 、 [110] 、 [11] 、 [1 0] 和 [21] 。

z z

(11)

z

1/2 y

[1 0]

1/2 x 1/3

1/2

(1)

1/3

[11]

(102)

y x

2/3

[110]

x

[21]

y

2、标注图中所示立方晶胞中的各晶面及晶向指数。

z z z 1/3

(323) (211) (111)

1/2 1/2 x y x y x y 1/2

(121)

3、写出六方晶系的 $\{11\ 0\}$ 、 $\{10\ 2\}$ 晶面族和 $\langle 2\ 0 \rangle$ 、 $\langle 011 \rangle$ 晶向族中的各等价晶面及等价晶向的具体指数。 4、在六方晶胞图中画出以下晶面和晶向： (0001) 、 $(01\ 0)$ 、 110 、 $(10\ 2)$ 、 012 、 $[0001]$ 、 $[010]$ 、 $[1\ 10]$ 和 $[0\ 11]$ 。 (110) 、 $[0001]$

$[0\ 11]$

$(01\ 0)$ 、 $[010]$ 、 (0001)

1

5、标注图中所示的六方晶胞中的各晶面及晶向指数。 (1210) $[22]$ $[11\ 2]$
 (1102)

$[01\ 0]$ $[110]$

6、分别计算体心立方晶体中 (001) (111) 晶面的原子面密度。 、

7、已知金刚石晶胞中（下图）最近邻的原子间距为 0.1544nm ，试求金刚石的点阵常数 a ，配位数 CN 和致密度 K 。

8、判断 $(1\ 10)$ 、 (132) (311) 是否属于同一晶带？ 、

2

第二章 固体结构

1、面心立方、体心立方、密排六方晶格中，哪些是空间点阵，哪些不是空间点阵？ 答：面心立方、体心立方晶格是空间点阵，密排六方晶格不是空间点阵。 2、为什么单晶体具有各向异性，而多晶体一般却不显示各向异性？ 答：在单晶体中，不可能沿所有的晶体学方向，原子的排列都相同，从而使沿原子排列不同的晶体学方向，晶体的性质不同。一般情况下，在多晶体中，各晶粒空间取向随机分布，沿多晶体不同方向测出的其性质是沿各种晶体学取向的性质的平均值，故多晶体一般却不显示各向异性。 3、说明以下简单立方晶格中有几种宏观对称元素？

答：简单立方晶格中的宏观对称元素有：三次和四次旋转对称轴，反演对称中心，对称面。 4、在置换固溶体和间隙固溶体中，随着溶剂、溶质原子半径差增大，溶质的饱和固溶度如何变化，为什么？ 答：在置换固溶体中，随着溶剂、溶质原子半径差增大，溶质的饱和固溶度下降，这是因为随着溶剂、溶质原子半径差增大，晶格的畸变增大，为维持溶剂晶格的稳定存在，溶剂中可溶入的溶质最大固溶度下降；在间隙固溶体中，随着溶剂、溶质原子半径差增大，溶质的饱和固溶度上升，这是因为随着溶剂、溶质原子半径差增大，溶剂晶格的畸变减小，致使溶剂中可溶入的溶质最大固溶度上升。 5、有序合金的原子排列有何特点？有序合金的形成和结合键能有什么关系？为什么许多有序合金在高温下变成无序？ 答：有序合金中原子排列的特点是各组元原子按一定的排列规则和周期性占据各自的晶格结点，长程有序。其形成与组元之间结合键强度的大小有关，当合金组元原子之间的结合键强度高于每个组元各自的原子之间结合键强度时，则将形成有序合金。随温度升高，原子的热运动增强，当温度足够高时，热运动将使原子脱离原来的结点位置，破坏原子的有序排列，则合金的原子由有序排列转变为无序排列。

6、有 A、B 两种元素形成了合金，该合金较其组元具有熔点高、硬度高的特点，问该合金是 固溶体还是中间相，为什么？若该合金较其组元硬度高，但熔点低于其一组元，问该合金是 固溶体还是中间相，为什么？ 答：该合金是中间相，因为所形成的合金熔点高于其组元，说明合金的结合键较其组元 更强，应含有离子键或共价键，故其为中间相。若该合金较其组元硬度高，但熔点低于其一组元，说明该合金的结合键并未得到增强，其硬度高是固溶强化的结果，所以合金应为固溶体。

7、有一种晶体物质，其化学成分可在一定范围内变化，问是否可以由此判断该物质为中间相 或固溶体，为什么？ 答：不能由此判断该物质为中间相或固溶体，因为固溶体成分可在一定范围内变化，而 中间相若形成二次固溶体，其成分也可在一定范围内变化。

8、为什么拓扑密堆相可以具有很高的配位数？ 答：拓扑密堆相晶体是以半径大小不同的原子匹配所形成的密堆结构，故可具有很高的 配位数。

9、鲍林第三规则从什么角度反映了离子晶体的结构稳定性？ 答：鲍林第三规则反映了在离子晶体中，相邻正离子之间的距离不能太近，否则，因其 之间的静电排斥力将使晶体结构的稳定性下降。

10、为什么金属往往具有较高的密度，而陶瓷却具有较低的密度？ 答：金属以金属键结合，金属键无方向性、无饱和性，使得金属原子可以实现密堆排列， 因而使得金属往往具有较高的密度。陶瓷以离子键或共价键结合，离子键结合的陶瓷中，同 号离子之间具有排斥性，使得离子晶体中离子不能达到密堆排列；共价键具有饱和性和方向 性，使得共价键晶体中的原子也不能实现密堆排列，故以离子键或共价键结合的陶瓷具有较 低的密度。

11、按照硅氧四面体的不同组合，硅酸盐的晶体结构可分为哪几种类型？ 答：分为孤岛状、组群状、链状、层状和架状结构几种类型。

12、为什么在镁橄榄石晶体（ $\text{Mg}_2[\text{SiO}_4]$ ）中，硅氧四面体是通过镁氧八面体而连接？其物理 意义为何？ 答：根据鲍林第四规则，在镁橄榄石晶体（ $\text{Mg}_2[\text{SiO}_4]$ ）中，具有高电价、配位数较低的正离子硅氧四面体趋于不结合，因此，硅氧四面体通过镁橄榄石中的镁氧八面体而结合。其

物理意义在于高电价、配位数较低的硅氧四面体之间的正离子静电排斥力较强，因此，硅氧四面体直接结合将导致晶体能量升高。若硅氧四面体通过具有较低电价、配位数较高的正离子镁氧八面体相连，则将降低正离子配位多面体之间的静电排斥力，提高晶体结构的稳定性。

13、 ZrO_2 离子晶体中，在若以一个 Ca^{2+} 置换一个 Zr^{4+} ，则在 Ca^{2+} 附近将形成一个什么离子空位，为什么？

答：在 ZrO_2 离子晶体中，若以一个 Ca^{2+} 置换一个 Zr^{4+} ，则在 Ca^{2+} 附近将形成一个氧离子空位。这是为了保持晶体局部正、负电荷的平衡所需。

14、为什么高分子材料不能在较高的温度下使用？

答：高分子材料的大分子之间是依靠分子键或氢键结合，由于分子键或氢键结合力较小，很容易受到高温的破坏，故高分子材料不能在较高的温度下使用

第三章 晶体缺陷

1、为什么说点缺陷是热力学平衡缺陷，而位错则不是？

答：在晶体中形成点缺陷将导致晶格畸变，使内能增加 U ，并导致自由能增加，同时点缺陷形成也可使熵增加 S ，导致自由能降低。由于在一定点缺陷浓度范围内，熵增 S 导致的负的自由能增量可抵消内能增量 U 导致的正的自由能增量，由 $G = U - TS$ ， $U - TS$ 可在点缺陷为某浓度时达到平衡，二者共同作用可使晶体自由能在晶体中存在一定浓度的点缺陷时最低，故点缺陷是热力学平衡缺陷。对于位错而言，其存在也使内能和熵增加，但熵增 S 远低于内能增量 U ，熵增 S 导致的负的自由能增量不能抵消内能增量 U 导致的正的自由能增量，故位错不是热力学平衡缺陷。

2、同一金属中，间隙原子的平衡浓度和空位的平衡浓度哪一个高？金属与陶瓷相比，哪一个中的点缺陷浓度高？为什么？

答：由于形成一个间隙原子所产生的晶格畸变能高于产生一个空位的畸变能，由点缺陷平衡浓度公式可知，同一金属中，间隙原子的平衡浓度比空位的平衡浓度高。金属与陶瓷相比，由于陶瓷为键能高于金属键的离子键或共价键结合，因此，在陶瓷中形成一个点缺陷所产生的畸变能高于金属中，同时，在离子陶瓷晶体中，点缺陷还必须成对出现，其形成较金属中更为困难，故陶瓷中的点缺陷浓度低于金属中。

3、为什么在固溶体中，当溶剂、溶质原子半径相差太大时，不能形成置换固溶体？而当溶剂、溶质原子半径相差不大时，不能形成间隙固溶体？

答：在固溶体中，当溶剂、溶质原子半径相差太大时，以小原子置换大原子造成的晶格畸变高于小原子处于大原子构成的晶格间隙中时所造成的晶格畸变，故二者不能形成置换固溶体。而当溶剂、溶质原子半径相差不大时，若小原子处于大原子晶格的间隙中，造成的晶

格畸变比小原子置换大原子造成的晶格畸变更高，故二者不能形成间隙固溶体。

4、为什么陶瓷中位错的密度低于金属中，且陶瓷中位错的滑移系少于金属中？

答：由于陶瓷为键能高于金属键的离子键或共价键结合，因此，在陶瓷中形成一条位错所产生的畸变能高于金属中，另外在离子晶体中，为保持电荷平衡，刃位错还必须以正、负半离子面同时出现，增加了形成刃位错的难度，故陶瓷中的位错密度低于金属中。又由于在离子键晶体中，一些位错滑移面和滑移方向因位错沿其的滑移受到静电排斥力的阻碍，使其不能成为位错真正的滑移系，在共价晶体中由于共价键的方向性也限制了晶体中位错可进行滑移的晶面和晶向的数量，故陶瓷中位错的滑移系少于金属中。

5、如图，在晶体中的同一滑移面上有两个柏氏矢量和半径分别为 b_1 、 r_1 和 b_2 、 r_2 的位错环，已知 $r_1 < r_2$ ， $b_1 = b_2$ 。（1）在图示切应力的作用下，哪一个位错环先开始滑移。为什么？（2）滑移开始后，两个位错环将如何变化？

b_1 b_2

答：（1）柏氏矢量为 b_2 的位错环先开始滑移，这是因为对于弯曲的位错线，其线张力与外加切应力平衡时有 $Gb/2r$ ，要使位错运动，应大于 $Gb/2r$ ，因柏氏矢量为 b_2 的位错环半径大于柏氏矢量为 b_1 的位错环半径，故使其开始滑移的最小外加应切力 $\tau_2 < \tau_1$ ，因此，其先开始滑移。（2）两个位错环开始滑移后，两个位错环在应力作用下将向外扩展并接触，在接触点处，两根位错为异号位错，故其将发生合并，最后两个位错环合并为一个大的位错环。

6、为什么位错线总是力图保持为直线？答：位错导致晶格畸变，从而具有能量，为使其能量最低，位错总是尽量保持最短，故其总是力图保持为直线。

7、回答以下问题（1）什么是肖脱基空位与弗兰克尔空位？（2）一个位错环能否各部分都是螺型位错或都是刃型位错？请说明之。（3）请指出面心立方晶体中单位位错和不全位错的柏氏矢量？答：（1）当脱离其平衡位置的原子、离子迁移至晶界、表面等处消失，则因该原子、离

子脱离平衡位置而形成的空位称为肖脱基空位。 若原子、离子脱离平衡位置迁移至晶格的间隙中，则因原子、离子脱离平衡位置而形成的空位与处于晶格间隙的原子、离子合称弗兰克-肖脱基空位。 (2) 一个位错环可以各部分都为刃位错，如当柏氏矢量垂直于一个位错环时。由于柏氏矢量不可能与位错环各处都保持平行状态，故位错环不可能各部分都是螺位错。 (3) 面心立方晶体中单位位错的柏氏矢量为 $a\sqrt{2}/2$ ，肖克莱不全位错的柏氏矢量为 $a\sqrt{2}/6$ ，弗兰克不全位错的柏氏矢量为 $a\sqrt{3}/3$ 。

8、在面心立方晶体中，(111)面上有一根柏氏矢量 $b_1 = a[101]/2$ 的位错，另在(001)面上(111)面有一根柏氏矢量 $b_2 = a[110]/2$ 的位错，在外力作用下，两位错滑移并在(111)面与(001)面相交处相遇，问：(1) 两根位错能否发生位错反应，为什么？写出反应形成的新位错柏氏矢量。(2) 新位错能否在(111)面上滑移，为什么？ 答：设新形成的位错柏氏矢量为 $b = b_1 + b_2 = a[011]/2$ ，(1) 由于 $b = a/2 < b_1 + b_2 = a/2 + a/2$ ，故两个位错能发生位错反应。(2) 位错反应形成的位错柏氏矢量位于(111)面上，故该位错可以在(111)面上滑移。

9、肖克莱不全位错和弗兰克不全位错的运动形式是什么？若溶质原子在肖克莱不全位错处发生平衡偏聚，对层错面的扩大或缩小有何影响，为什么？ 答：肖克莱不全位错的运动形式是滑移。若溶质原子在肖克莱不全位错处发生平衡偏聚，则将在肖克莱不全位错处形成低能态的溶质原子分布，从而阻碍肖克莱不全位错的运动。由于层错面的扩大或缩小来自于肖克莱不全位错的滑移运动，故溶质原子在肖克莱不全位错处平衡偏聚将阻碍层错面的扩大或缩小。

10、为什么位错的攀移运动通常只能发生在高温下？ 答：位错的攀移依赖于原子的扩散，而原子的明显扩散通常只能发生在高温下，故位错的攀移运动通常只能发生在高温下。

11、下图为两根处于不同滑移面上的位错线相向运动。(1) 请画出两个位错线交割后各自的形状。(2) 交割后，哪根位错线的滑移会变得更加困难，为什么？

??

?

2

2

2

2

2

2

位错线运动方向

b1

7

b2

答：（1）两个位错线交割后各自的形状如下：

b2 b1

（2）交割后，柏氏矢量为 b_2 的位错线的滑移会变得更加困难。这是因为交割后在此位错线上形成了一段刃型割阶，该割阶不在位错原滑移面上，并因此阻碍原位错在其原滑移面上的滑移。

12、金属固溶体的强度与其组元相比有何不同，为什么？答：固溶体的强度高于其组元。因为形成固溶体后，溶质原子在位错处会形成低能态分布阻碍位错的运动，从而提高固溶体的强度。

13、为什么层错没有造成晶格畸变，但却具有层错能？答：由于层错的形成破坏了晶体原子排列的周期性，故其也导致晶体的能量升高，故层错具有层错能。

14、若溶质原子在全位错处发生平衡偏聚，问对扩展位错的交滑移有何影响，为什么？答：溶质原子在全位错处发生的平衡偏聚将钉扎全位错阻碍其运动，从而使扩展位错不易发生束集，导致扩展位错交滑移困难。

15、为什么固体表面易吸附气体分子？溶质原子在晶界处的平衡偏析对晶粒的长大（晶界的迁移）有何影响，为什么？答：固体表面的原子、离子等具有不饱和结合键，为降低其能量，故其易吸附气体分子以求降低表面能。溶质原子在晶界处发生平衡偏析表明该偏析可降低晶体的自由能。晶粒长大需要晶界发生迁移，而晶界迁移必然破坏溶质原子在晶界处平衡偏析所形成的低能态，故溶质原子在晶界处的平衡偏析阻碍晶界的迁移，即阻碍晶粒的长大。

16、为了尽量降低晶界能，晶粒有长大的趋势，试分析对于出现重合位置点阵的大角度晶界和无重合位置点阵的大角度晶界，在哪一种情况下，晶粒不易长大，为什么？答：当大角度晶界出现重合位置点阵时，晶粒不易长大。这是因为当大角度晶界出现重合位置点阵时，其晶界能低于无重合位置点阵的大角度晶界，从而使其较无重合位置点阵的

大角度晶界更为稳定，晶界迁移率更低的缘故。