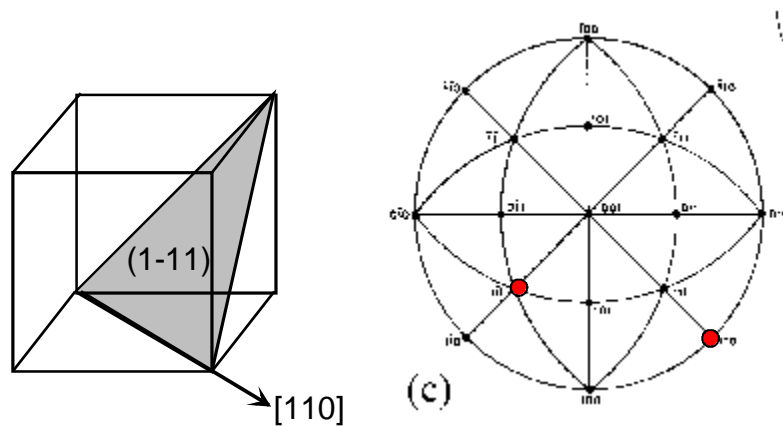


北京科技大学 2005~2006 学年第 1 学期, 2006.1

材料科学基础试题参考答案要点/评分标准

1. 本题 14 分

画出晶面 3 分; 画出晶向 3 分; 画出两个极点 5 分; 夹角为 90° , 3 分。



2. 16 分

(1) ①轨道角动量大小为: $\sqrt{2(2+1)}\eta = \sqrt{6}\eta$

②自旋角动量大小为: $\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)}\eta = \sqrt{3}\eta/2$

③轨道角动量在 z 方向上的分量的允许值为: $2\eta, \eta, 0, -\eta, -2\eta$ 。

(2). ①固体材料中内层电子状态通常用主量子数 n 、角(动量)量子数 l 、磁量子数 m 和自旋量子数 m_s 来描述。

②固体材料中外层电子状态通常用电子波矢 (k_x, k_y, k_z) 和自旋量子数 m_s 来描述。

(3). ①相同点——外层电子的波矢都是量子化的, 具有相同的允许取值条件

$k_{n1,n2,n3} = \left(\frac{2p}{L} n_1, \frac{2p}{L} n_2, \frac{2p}{L} n_3 \right)$, 因此能量也都是量子化的。

②不同点——量子自由电子理论给出的电子能级, 对于宏观材料时准连续的能级, 能量与波矢之间

的关系为 $e = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$; 而根据能带理论, 电子的能级之间可能产生相对于电子的相邻能级间隔来说很

宽的禁带(发生于相邻的布里渊区边界上), 而电子能级的能量与电子波矢之间的关系通常都偏离抛物线关系。

(4). ①自由电子的体积密度为: $N_v^e = \frac{4 \times 1}{(0.361 \times 10^{-9})^3} = 8.5 \times 10^{28} (\text{m}^{-3})$

②费米能:

$$e_F = \left(3p^2 N_v^e\right)^{2/3} \cdot \frac{\eta^2}{2m} = \left(3 \times p^2 \times 8.5 \times 10^{28}\right)^{2/3} \cdot \frac{(1.05 \times 10^{-34})^2}{2 \times 9.1 \times 10^{-31}} = 1.12 \times 10^{-18} (\text{J}) = 7.0 \text{ eV} \text{ ③ 费米}$$

波矢:

$$k_F = \left(\frac{2me_F}{\eta^2}\right)^{1/2} = \frac{(2 \times 9.1 \times 10^{-31} \times 1.12 \times 10^{-18})^{1/2}}{1.05 \times 10^{-34}} = 1.36 \times 10^{10} (\text{1/m})$$

④ 0K 下, 自由电子的平均动能为费米能的 3/5, 故为 4.2eV; 相对应的运动速度为:

$$v = \left(\frac{2e_F}{m}\right)^{1/2} = \sqrt{\frac{2 \times 1.12 \times 10^{-18}}{9.1 \times 10^{-31}}} = 1.57 \times 10^6 (\text{m/s})$$

3. 本题 10 分

八面体间隙数目 4 个, 3 分; 中心位置坐标[1/2, 1/2, 1/2], 2 分; 间隙半径 0.414r, 5 分。

4. 本题 10 分

(a) Pearson 符号 cF8, 3 分; 结构基元一个 Cl 离子、一个 Na 离子, 1 分;

(b) Pearson 符号 cF12, 3 分; 结构基元一个 Ca 离子、两个 F 离子, 1 分;

(c) Pearson 符号 cP2, 1 分; 结构基元一个 Cl 离子、一个 Cs 离子, 1 分;

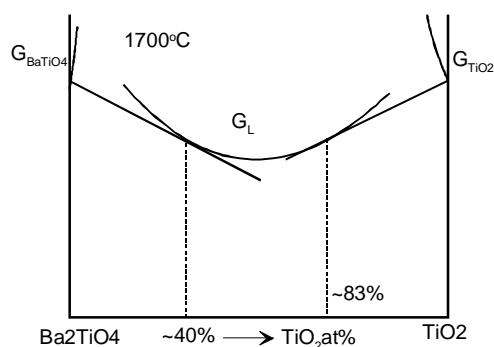
5. 本题 15 分

(1) 多型性转变为: Cubic-BaTiO₃ ↔ Hex.-BaTiO₃; 1460°C~1600°C。

(2) Ba₂TiO₄, hex.-BaTiO₃, Cubic-BaTiO₃, BaTi₂O₅, BaTi₃O₇, BaTi₄O₉, TiO₂。同分熔化: hex.-BaTiO₃; 异分熔化: BaTi₄O₉。

(3) $l \rightarrow \text{Ba}_2\text{TiO}_4 + \text{hex.-BaTiO}_3$; $l \rightarrow \text{BaTi}_2\text{O}_5 + \text{BaTi}_3\text{O}_7$; $l + \text{TiO}_2 \rightarrow \text{BaTi}_4\text{O}_9$ 。

(4)



6. 本题 10 分

$$J = -D \frac{dC}{dX}; \quad D = -\frac{J}{\frac{dC}{dX}} = -\frac{1.4 \times 10^{-8} \text{ kg/m}^2 \text{ s}}{\frac{-(0.9-0.3)}{1 \times 10^{-3} \text{ m}} \text{ kg/m}^3} = 2.3 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$$

7. 本题 10 分。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial^2 X} \quad \text{左边为浓度随时间的变化率; 右边为浓度对位置坐标的二阶导数, } D \text{ 为扩散系数。}$$

或 $\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial X}$ ；表示物质守恒关系，即浓度的变化率等于流量的散度（单位时间单位体积内的物质变化量）；5 分

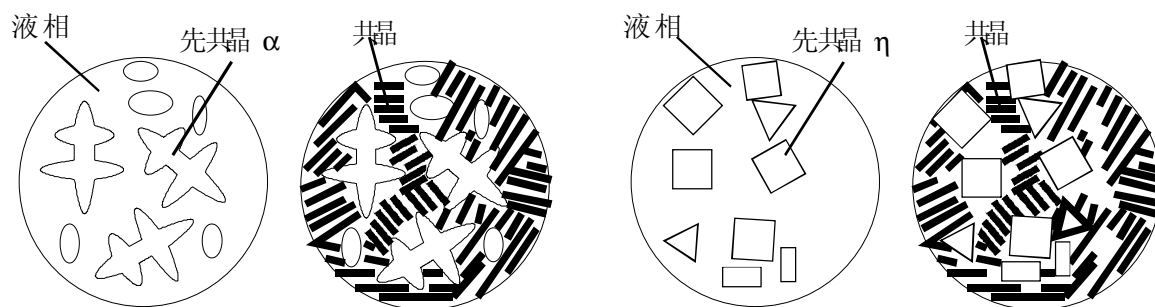
三个解：误差函数解、正弦函数解、高斯解。3 分

例如误差函数解，基本形式为： $C = A + B \operatorname{erf}\left(\frac{X}{2\sqrt{Dt}}\right)$ ；可解决渗碳脱碳、氧化过程等问题；其特

点是中间某处的浓度不随时间变化。2 分

8. 本题 15 分

(1) 两合金凝固过程示意图如下。左为 24%B 合金，右为 42%B 合金。



24%合金的组织相对量： $A_{\text{共晶}} = (24-20) / (35-20) = 26.7\%$ ； $A_{\alpha} = 73.3\%$ 。

相的相对量： $A_{\alpha} = (56-24)/(56-20) = 88.9\%$ ； $A_{\eta} = 11.1\%$ 。

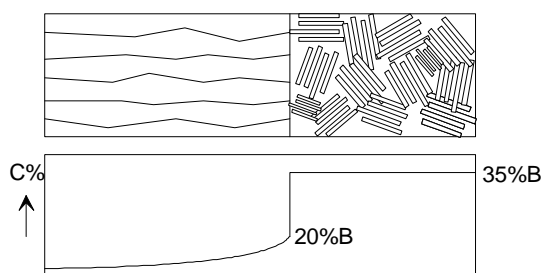
42%合金的组织相对量： $A_{\eta} = (42-35)/(56-35) = 33.3\%$ ， $A_{\text{共晶}} = 66.7\%$ 。

相的相对量： $A_{\alpha} = (56-42)/(56-20) = 38.9\%$ ， $A_{\eta} = 61.1\%$ 。8 分

$$(2) k_0 = \frac{20}{35} = 0.57; C_s = k_0 C_0 f_l^{k_0-1};$$

$$\text{所以，开始共晶时液相相对量：} f_l = \left(\frac{C_s}{k_0 C_0} \right)^{1/(k_0-1)} = \left(\frac{20}{0.57 \times 24} \right)^{1/(0.57-1)} = 41.5\%。$$

组织分布



浓度分布

5 分

(3) 非平衡凝固时，共晶组织量增多。其增量为 $41.5\% - 26.7\% = 14.8\%$ 。2 分