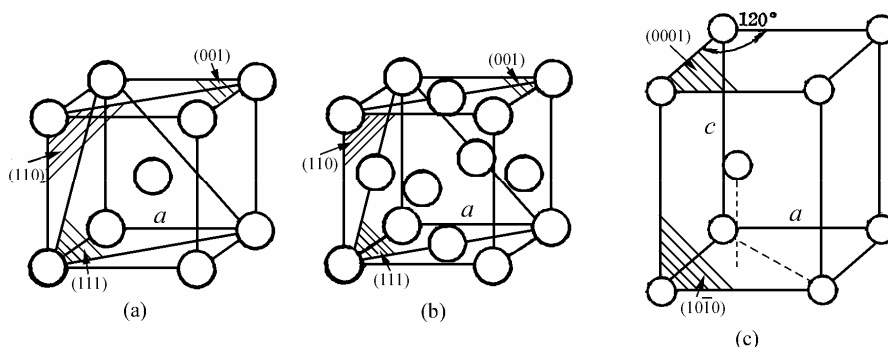


第2章 晶体结构习题题解

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。

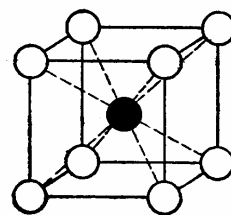
解：B2 结构如下图所示，白和黑的圆分别代表 Cs 和 I 的原子（离子）。从图看出，体对角线的长度是一个 Cs 和一个 I 的原子（离子）半径之和，设点阵常数为 a ，得

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

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

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。