

《晶体结构与缺陷》

第一章习题及答案

1-1. 布拉维点阵的基本特点是什么？

答：具有周期性和对称性，而且每个结点都是等同点。

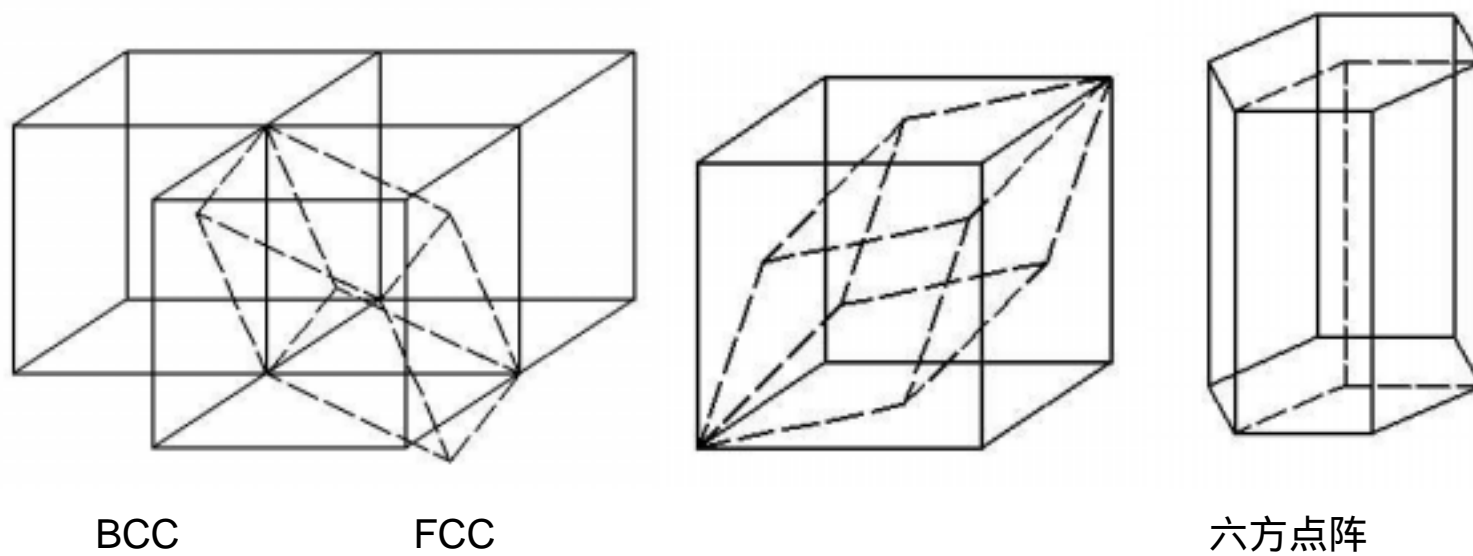
1-2. 论证为什么有且仅有 14 种 Bravais 点阵。

答：第一，不少于 14 种点阵。对于 14 种点阵中的任一种，不可能找到一种连接结点的方法，形成新的晶胞而对称性不变。

第二，不多于 14 种。如果每种晶系都包含简单、面心、体心、底心四种点阵，七种晶系共 28 种 Bravais 点阵。但这 28 种中有些可以连成 14 种点阵中的某一种而对称性不变。例如体心单斜可以连成底心单斜点阵，所以并不是新点阵类型。

1-3. 以 BCC、FCC 和六方点阵为例说明晶胞和原胞的异同。

答：晶胞和原胞都能反映点阵的周期性，即将晶胞和原胞无限堆积都可以得到完整的整个点阵。但晶胞要求反映点阵的对称性，在此前提下的最小体积单元就是晶胞；而原胞只要求体积最小，布拉维点阵的原胞都只含一个结点。例如：BCC 晶胞中结点数为 2，原胞为 1；FCC 晶胞中结点数为 4，原胞为 1；六方点阵晶胞中结点数为 3，原胞为 1。见下图，直线为晶胞，虚线为原胞。



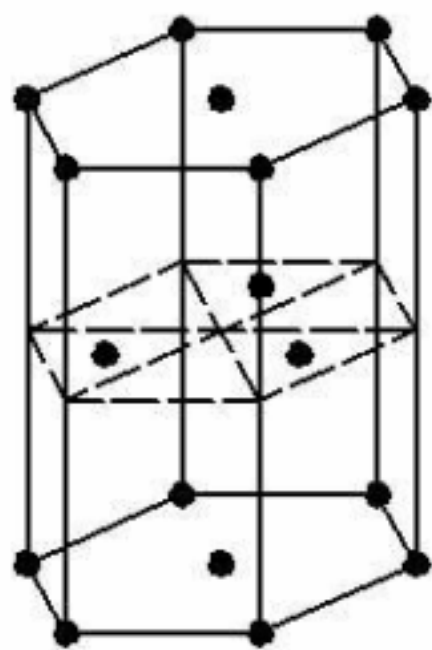
1-4. 什么是点阵常数？各种晶系各有几个点阵常数？

答：晶胞中相邻三条棱的长度 a 、 b 、 c 与这三条棱之间的夹角 α 、 β 、 γ 分别决定了晶胞的大小和形状，这六个参量就叫做点阵常数。

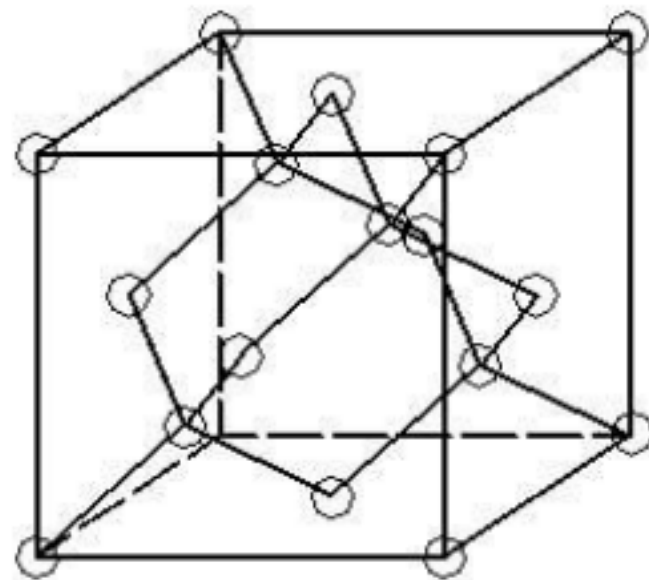
晶系	a 、 b 、 c ， α 、 β 、 γ 之间的关系	点阵常数的个数
三斜	$a \neq b \neq c$ ， $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	6 (a 、 b 、 c 、 α 、 β 、 γ)
单斜	$a \neq b \neq c$ ， $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 或 $\alpha = \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	4 (a 、 b 、 c 、 α 或 a 、 b 、 c 、 β)
斜方	$a \neq b \neq c$ ， $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	3 (a 、 b 、 c)
正方	$a = b \neq c$ ， $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	2 (a 、 c)
立方	$a = b = c$ ， $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	1 (a)
六方	$a = b \neq c$ ， $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma = 120^\circ$	2 (a 、 c)
菱方	$a = b = c$ ， $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	2 (a 、 α)

1-5. 分别画出锌和金刚石的晶胞，并指出其点阵和结构的差别。

答：点阵和结构不一定相同，因为点阵中的结点可以代表多个原子，而结构中的点只能代表一个原子。锌的点阵是六方点阵，但在非结点位置也存在原子，属于 HCP 结构；金刚石的点阵是 FCC 点阵，但在四个四面体间隙中也存在碳原子，属于金刚石结构。见下图。



锌的结构

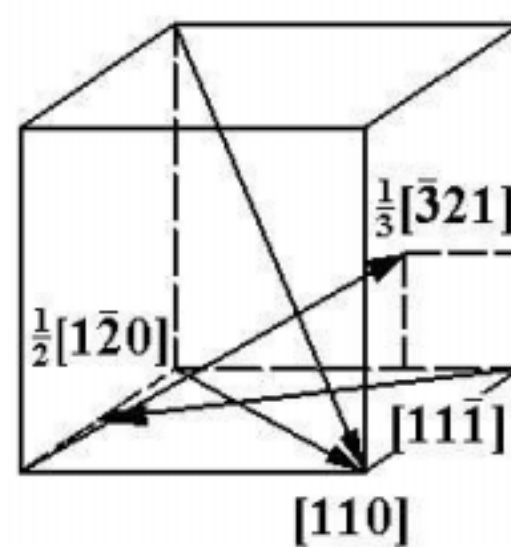
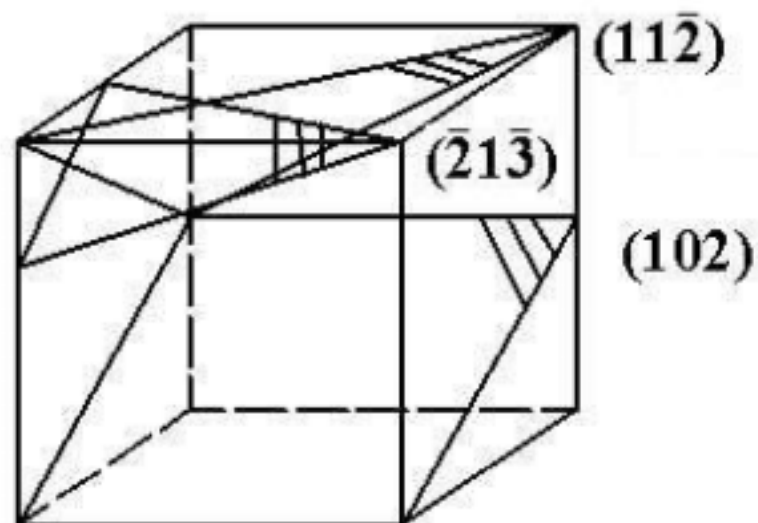


金刚石的结构

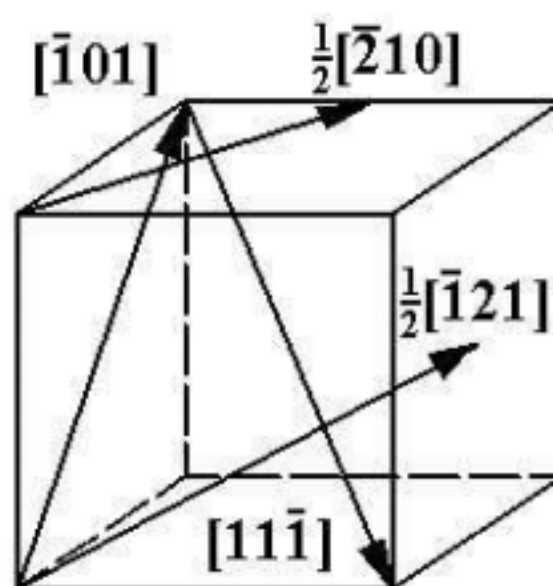
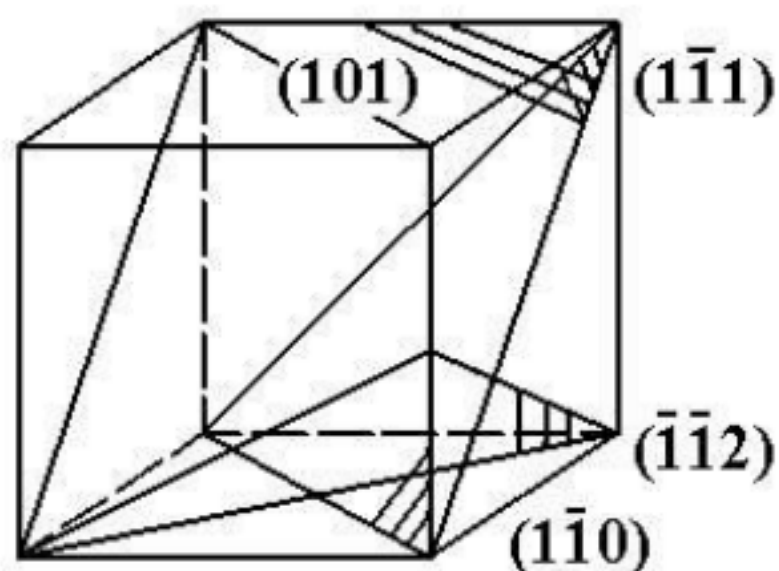
1-6. 写出立方晶系的 $\{123\}$ 晶面族和 $\langle 112 \rangle$ 晶向族中的全部等价晶面和晶向的具体指数。

答： $\{123\} = (123) + (\bar{1}23) + (1\bar{2}3) + (12\bar{3}) + (132) + (\bar{1}32) + (1\bar{3}2) + (13\bar{2}) + (213) + (\bar{2}13) + (2\bar{1}3) + (21\bar{3}) + (231) + (\bar{2}31) + (2\bar{3}1) + (23\bar{1}) + (312) + (\bar{3}12) + (3\bar{1}2) + (31\bar{2}) + (321) + (\bar{3}21) + (3\bar{2}1) + (32\bar{1})$
 $\langle 112 \rangle = [112] + [\bar{1}12] + [1\bar{1}2] + [11\bar{2}] + [12\bar{1}] + [\bar{1}21] + [1\bar{2}1] + [12\bar{1}] + [211] + [\bar{2}11] + [2\bar{1}1] + [21\bar{1}]$

1-7. 在立方晶系的晶胞图中画出以下晶面和晶向： (102) 、 $(11\bar{2})$ 、 $(\bar{2}1\bar{3})$ 、 $[110]$ 、 $[11\bar{1}]$ 、 $[1\bar{2}0]$ 和 $[\bar{3}21]$ 。



1-8. 标注图中所示立方晶胞中的各晶面及晶向指数。



1-9. 写出六方晶系的 $\{11\bar{2}0\}$ 、 $\{10\bar{1}2\}$ 晶面族和 $\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$ 、 $\langle \bar{1}011 \rangle$ 晶向族中的各等价晶面及等

价晶向的具体指数。

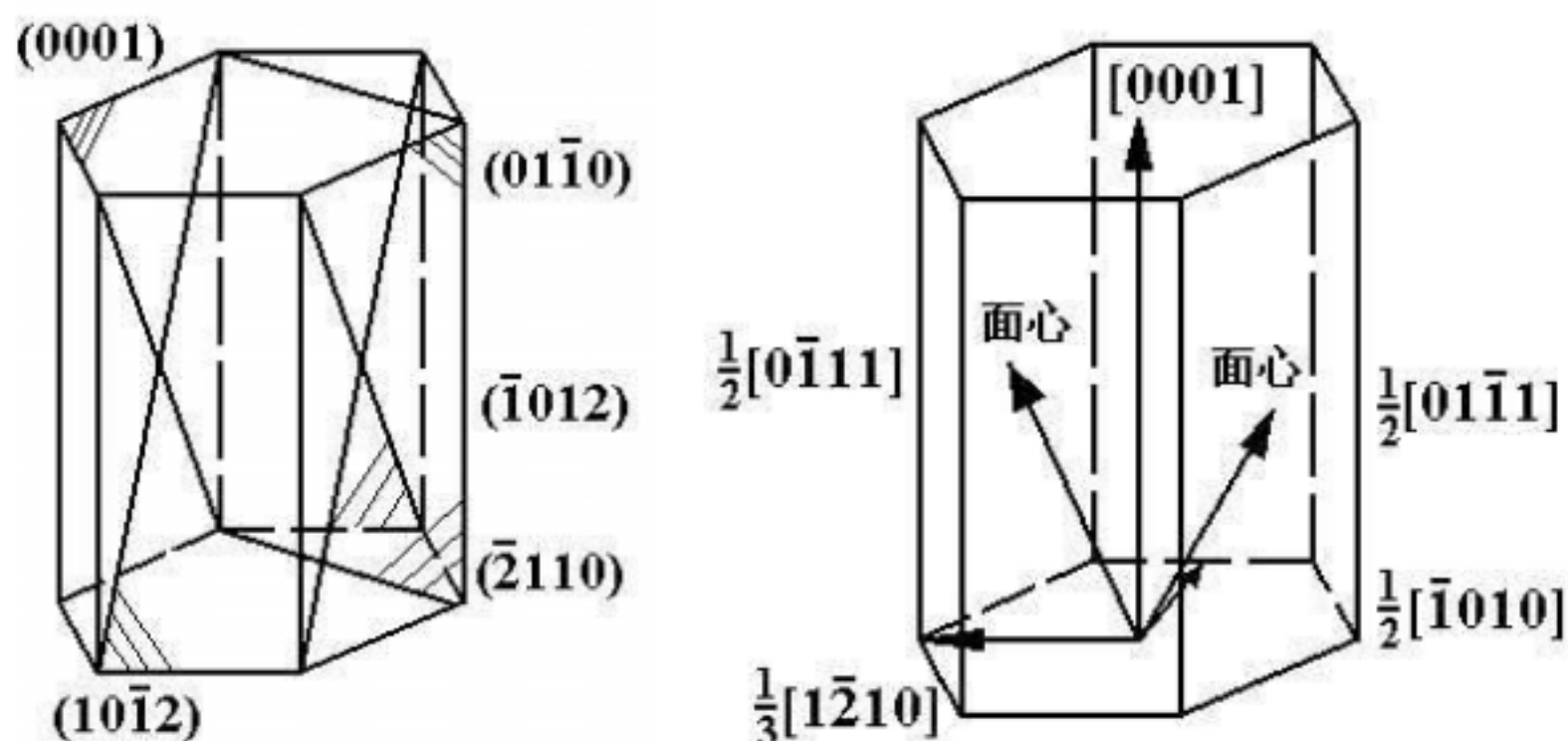
答： $\{11\bar{2}0\} = (11\bar{2}0) + (\bar{1}2\bar{1}0) + (2\bar{1}\bar{1}0)$

$\{10\bar{1}2\} = (10\bar{1}2) + (01\bar{1}2) + (\bar{1}102) + (\bar{1}012) + (0\bar{1}12) + (1\bar{1}02)$

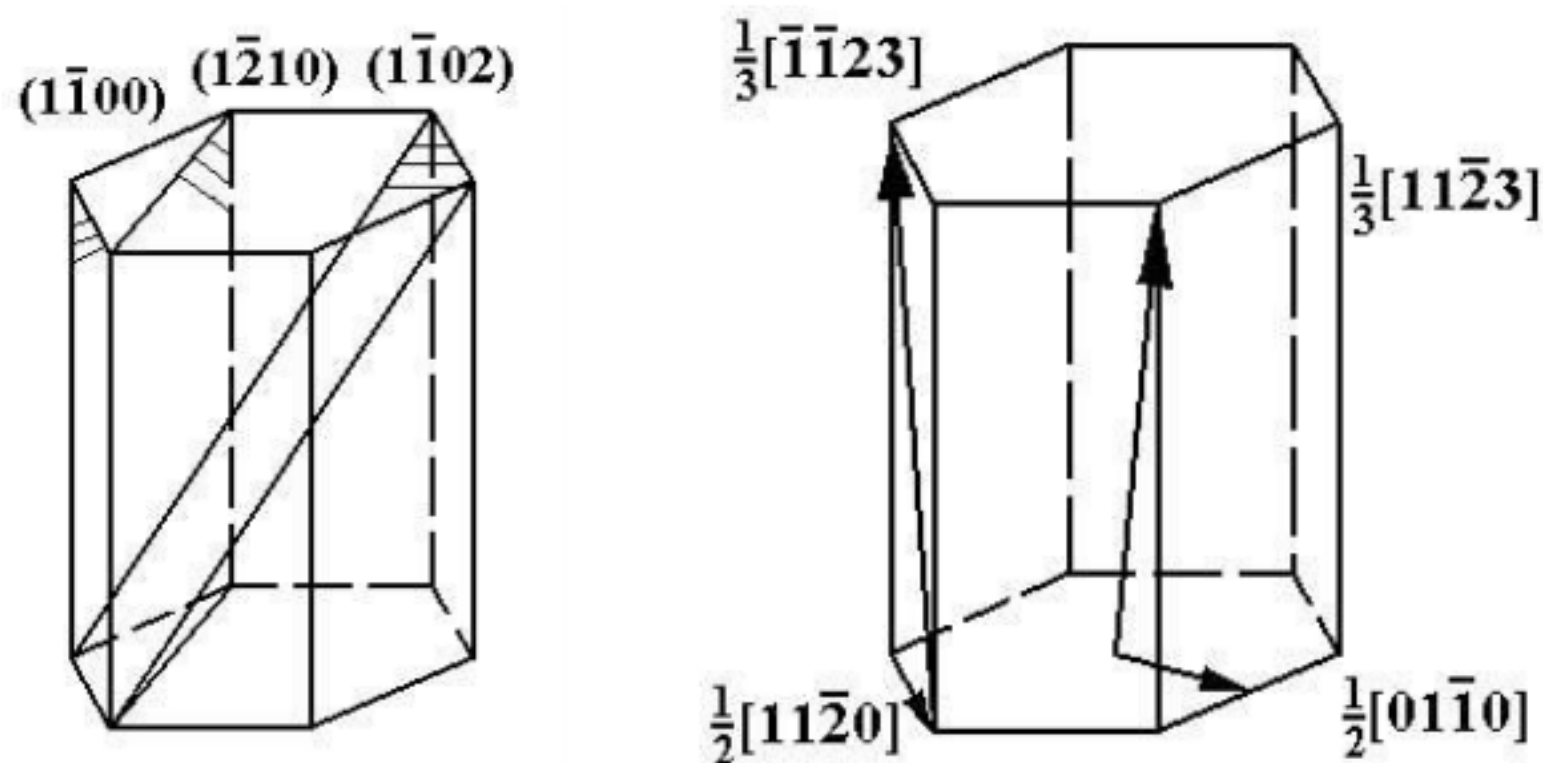
$\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle = [2\bar{1}\bar{1}0] + [11\bar{2}0] + [\bar{1}2\bar{1}0]$

$\langle \bar{1}011 \rangle = [\bar{1}011] + [0\bar{1}11] + [1\bar{1}01] + [10\bar{1}1] + [01\bar{1}1] + [\bar{1}101]$

- 1-10. 在六方晶胞图中画出以下晶面和晶向：(0001)、(01 $\bar{1}$ 0)、($\bar{2}$ 110)、(10 $\bar{1}$ 2)、($\bar{1}$ 012)、[0001]、 $[\bar{1}010]$ 、 $[1\bar{2}10]$ 、 $[01\bar{1}1]$ 和 $[0\bar{1}11]$ 。



- 1-11. 标注图中所示的六方晶胞中的各晶面及晶向指数。



- 1-12. 用解析法求 1-11 第二图中的各晶向指数 (按三指数 - 四指数变换公式)。

解：由三指数 $[U\ V\ W]$ 转化为四指数 $[u\ v\ t\ w]$ 可利用公式：

$$U = 2u + v, \quad V = 2v + u, \quad W = w$$

将 $[\bar{1}\bar{1}23]$ 、 $[11\bar{2}0]$ 、 $[11\bar{2}3]$ 、 $[01\bar{1}0]$ 中的 u 、 v 、 w 代入公式，得

$[\bar{1}\bar{1}1]$ 、 $[110]$ 、 $[111]$ 、 $[120]$ 。

- 1-13. 根据 FCC 和 HCP 晶体的堆垛特点论证这两种晶体中的八面体和四面体间隙的尺寸必相同。

答：研究 FCC 晶体的 (111) 密排面和 HCP 晶体的 (0001) 密排面，发现两者原子排列方式完全相同；再研究两者的相邻两层密排面，发现它们层与层之间的吻合方式也没有差别。

事实上只有研究相邻的三层面时，才会发现 FCC 和 HCP 的区别，而八面体间隙与四面体间隙都只跟两层密排原子有关，所以对于这两种间隙，FCC 与 HCP 提供的微观环

境完全相同，他们的尺寸也必相同。

1-14. 以六方晶体的三轴 a 、 b 、 c 为基，确定其八面体和四面体间隙中心的坐标。

答：八面体间隙有六个，坐标分别为：

$(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ 、 $(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 1)$ 、 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1)$ 、 $(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 1)$ ；

四面体间隙共有二十个，在中轴上的为： $(0,0, \frac{1}{4})$ 、 $(0,0, \frac{3}{4})$ ；

在六条棱上的为： $(1,0, \frac{1}{2})$ 、 $(1,1, \frac{1}{2})$ 、 $(0,1, \frac{1}{2})$ 、 $(-1,0, \frac{1}{2})$ 、 $(-1,-1, \frac{1}{2})$ 、 $(0,-1, \frac{1}{2})$ 、

$(1,0, \frac{3}{2})$ 、 $(1,1, \frac{3}{2})$ 、 $(0,1, \frac{3}{2})$ 、 $(-1,0, \frac{3}{2})$ 、 $(-1,-1, \frac{3}{2})$ 、 $(0,-1, \frac{3}{2})$ ；

在中部的为： $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 、 $(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 、 $(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 、 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ 、 $(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ 、 $(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ 。

1-15. 按解析几何证明立方晶系的 $[h\ k\ l]$ 方向垂直与 $(h\ k\ l)$ 面。

证明：根据定义， $(h\ k\ l)$ 面与三轴分别交于 a/h 、 a/k 、 a/l ，可以推出此面方程为

$$x/(a/h) + y/(a/k) + z/(a/l) = 1 \Rightarrow hx + ky + lz = a$$

平行移动得面 $hx + ky + lz = 0$ ；

又因为 $(h, k, l) \cdot (x, y, z) = hx + ky + lz = 0$ ，知矢量 (h, k, l) 恒垂直于此面，即 $[h\ k\ l]$ 方向垂直于 $hx + ky + lz = 0$ 面，所以垂直于 $hx + ky + lz = a$ 即 $(h\ k\ l)$ 面。

1-16. 由六方晶系的三指数晶带方程导出四指数晶带方程。

解：六方晶系三指数晶带方程为 $HU + KV + LW = 0$ ；

面 $(H\ K\ L)$ 化为四指数 $(h\ k\ i\ l)$ ，有

$$H = h, K = k, L = l$$

方向 $[U\ V\ W]$ 化为四指数 $[u\ v\ t\ w]$ 后，有

$$U = 2u + v, V = 2v + u, W = w$$

代入晶带方程，得

$$h(2u + v) + k(2v + u) + lw = 0$$

将 $i = -(h+k)$ ， $t = -(u+v)$ 代入上式，得 $hu + kv + it + lw = 0$ 。

1-21. 求出立方晶体中指数不大于 3 的低指数晶面的晶面距 d 和低指数晶向长度 L (以晶胞边长 a 为单位)。

解：晶面间距为 $d = a/\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ ，晶向长度为 $L = a \cdot \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$ ，可得

晶面族	$d(\times a)$	晶面族	$d(\times a)$	晶向族	$L(\times a)$	晶向族	$L(\times a)$
{100}	1	{311}	11/11	<100>	1	<311>	11
{110}	2/2	{222}	3/6	<110>	2	<222>	2 3
{111}	3/3	{320}	13/13	<111>	3	<320>	13
{200}	1/2	{321}	14/14	<200>	2	<321>	14
{210}	5/5	{322}	17/17	<210>	5	<322>	17
{211}	6/6	{330}	2/6	<211>	6	<330>	3 2
{220}	2/4	{331}	19/19	<220>	2 2	<331>	19
{221}	1/3	{332}	22/22	<221>	3	<332>	22
{300}	1/3	{333}	3/9	<300>	3	<333>	3 3

{310}	10/10			<310>	10		
-------	-------	--	--	-------	----	--	--

1-22. 求出六方晶体中 [0001]、[10 $\bar{1}$ 0]、[11 $\bar{2}$ 0]和[10 $\bar{1}$ 1]等晶向的长度（以点阵常数 a 和 c 为单位）。

解：六方晶体晶向长度公式：

$$L = a \cdot \sqrt{U^2 + V^2 + W^2 c^2 / a^2 - UV} \text{ ; (三指数)}$$

$$L = a \cdot \sqrt{u^2 + v^2 + 2t^2 + w^2 c^2 / a^2 - uv} \text{ ; (四指数)}$$

代入四指数公式，得长度分别为

c、3*a、3a、 $(3a^2 + c^2)$ 。

1-23. 计算立方晶体中指数不大于 3 的各低指数晶面间夹角（列表表示）。为什么夹角和点阵常数无关。

解：利用晶面夹角公式 $\cos = (h_1h_2+k_1k_2+l_1l_2)/\sqrt{(h_1^2+k_1^2+l_1^2)*(h_2^2+k_2^2+l_2^2)}$ 计算。两晶面族之间的夹角根据所选晶面的不同可能有多 个，下面只列出一个，其他这里不讨论。

cos	{100}	{110}	{111}	{210}	{211}	{221}	{310}
{100}	1	2/2	3/3	2 5/5	6/3	2/3	3 10/10
{110}		1	6/3	3 10/10	3/2	2 2/3	2 5/5
{111}			1	15/5	2 2/3	5 3/9	2 30/15
{210}				1	30/6	2 5/5	7 2/10
{211}					1	7 6/18	7 15/30
{221}						1	4 10/15
{310}							1

后面的结果略。

1-24. 计算立方晶体中指数不大于 3 的各低指数晶向间夹角（列表表示），并将所得结果和上题比较。

解：利用晶向夹角公式 $\cos = (u_1u_2+v_1v_2+w_1w_2)/\sqrt{(u_1^2+v_1^2+w_1^2)*(u_2^2+v_2^2+w_2^2)}$ 计算。两晶向族之间的夹角根据所选晶向的不同可能有多 个，所得结果与上题完全相同，只将表示晶面的“ {} ”替换为“ <> ”即可。从表面上看是因为晶向夹角公式与晶面夹角公式完全相同的原因，深入分析，发现晶向 [x y z] 是晶面 (x y z) 的法线方向，是垂直关系，所以两晶面的夹角恒等于同指数的晶向夹角。

1-25. 计算六方晶体中 (0001)、{10 $\bar{1}$ 0}和{11 $\bar{2}$ 0}之间的夹角。

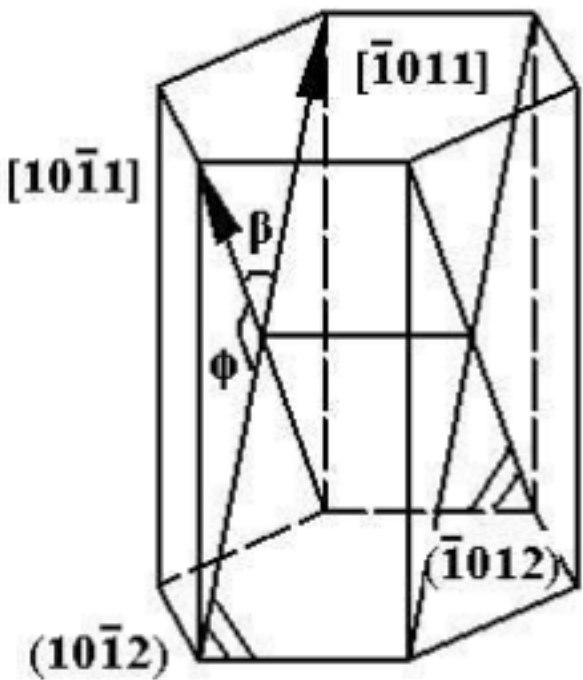
解：化为三指数为：(001)、(210)或(120)或(1 $\bar{1}$ 0)、(110)或(1 $\bar{2}$ 0)或(2 $\bar{1}$ 0)，利用六方晶系面夹角公式（P41 公式 1-39），分别代入求得

(0001) 与 {10 $\bar{1}$ 0}或{11 $\bar{2}$ 0}：夹角为 90o ；

{10 $\bar{1}$ 0} 与 {11 $\bar{2}$ 0}：夹角为 30o 或 90o 。

1-26. 分别用晶面夹角公式及几何法推导六方晶体中 (10 $\bar{1}$ 2)面和 ($\bar{1}$ 012)面的夹角公式（用点阵常数 a 和 c 表示）。

解：(1) 化为三指数为 (102)、($\bar{1}$ 02)，代入公式（P41 公式 1-39）得



$$\cos \theta_1 = \dots = (3a^2 - c^2)/(3a^2 + c^2)$$

(2) 如右图，利用余弦定律，可得

$$\cos \theta_2 = \dots = (3a^2 - c^2)/(3a^2 + c^2)$$

1-27. 利用上题所得的公式具体计算 Zn($c/a=1.86$)、Mg($c/a=1.62$) 和 Ti($c/a=1.59$) 三种金属的 $(10\bar{1}2)$ 面和 $(\bar{1}012)$ 面的夹角。

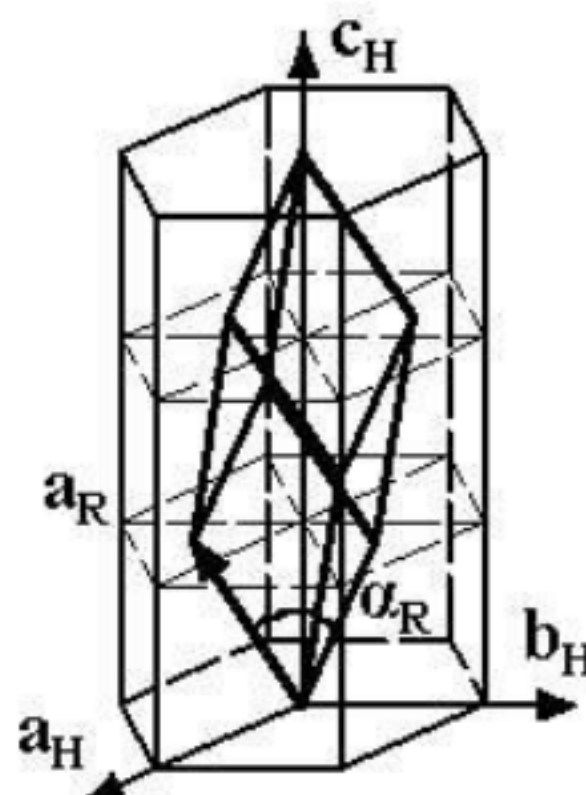
解：代入公式，得 $\cos \theta_1 = -0.0711$, $\cos \theta_2 = 0.0668$, $\cos \theta_3 = 0.0854$;
得夹角为 $\theta_1(\text{Zn}) = 94.1^\circ$, $\theta_2(\text{Mg}) = 86.2^\circ$, $\theta_3(\text{Ti}) = 85.1^\circ$ 。

1-28. 将 $(10\bar{1}2)$ 和 $(\bar{1}012)$ 分别换成 $[\bar{1}011]$ 和 $[10\bar{1}1]$ ，重做 1-26、1-27 题。

解：化为三指数为 $[\bar{2}\bar{1}1]$ 和 $[211]$ ，代入公式，得 $\cos \theta = \dots = (c^2 - 3a^2)/(3a^2 + c^2)$
见 1-26 题答案中的图，利用余弦定律，可得 $\cos \theta = \dots = (c^2 - 3a^2)/(3a^2 + c^2)$
代入公式，得 $\cos \theta_1 = 0.0711$, $\cos \theta_2 = -0.0668$, $\cos \theta_3 = -0.0854$;
得夹角为 $\theta_1(\text{Zn}) = 85.9^\circ$, $\theta_2(\text{Mg}) = 93.8^\circ$, $\theta_3(\text{Ti}) = 94.9^\circ$ 。

1-29. 推导菱方晶体在菱方轴下的点阵常数 a_R 和 c_R 和在六方轴下的点阵常数 a_H 、 c_H 之间的换算公式。

解：在 a_H 、 b_H 、 c_H 下， $a_R = ?$ $[\bar{1}\bar{1}1]$ ，
所以点阵常数 $a_R = L$
 $= a_H \cdot \sqrt{(U^2 + V^2 + W^2 c_H^2 / a_H^2 - UV)}$
 $= ? (3a_H^2 + c_H^2)$ ，
又因为 θ_R 是晶向 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 与 $[121]$ 的夹角，
所以点阵常数 θ_R
 $= \arccos((c_H^2/a_H^2 - 3/2)/(3 + c_H^2/a_H^2))$
 $= \arccos((2c_H^2 - 3a_H^2)/(6a_H^2 + 2c_H^2))$ 。
可得 $a_H = a_R \cdot \sqrt{2(1 - \cos \theta_R)}$;
 $c_H = a_R \cdot \sqrt{3(1 + 2\cos \theta_R)}$ 。



1-30. 已知 Al_2O_3 (菱方晶体) 的点阵常数为 $a_R = 5.12$

$\theta_R = 55^\circ 17'$ ，求它在六方轴下的点阵常数 a_H 和 c_H 。

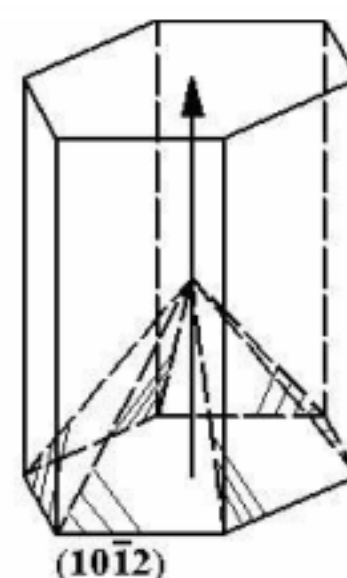
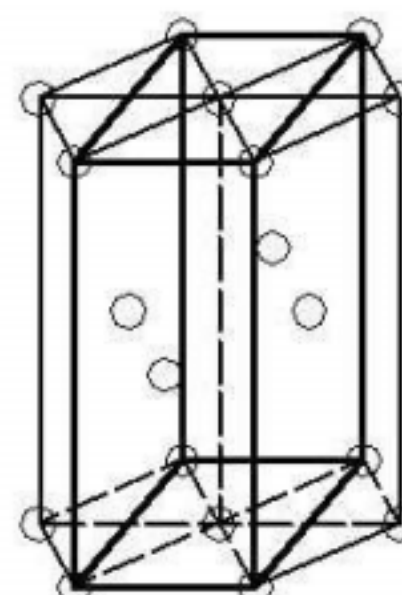
解：利用上题公式，将 a_R 、 θ_R 数值代入，可得 $a_H = 4.75$ Å、 $c_H = 12.97$ Å。

第一章补充题：

1. Prove that the A-face-centered hexagonal lattice is not a new type of lattice in addition to the 14 space lattice.

答：如图，六方点阵加入 a 面面心以后，对称性降低，可以连成一个面心斜方点阵。所以它不是一个新点阵。

2. Draw a primitive cell of BCC lattice. (答案见 1-3)
3. Prove that the sizes of both octahedral and tetrahedral interstitials in HCP are same as there in FCC. (答案见 1-13，计算在课本 P18、P20)
4. Determine the coordinates of centers of both the octahedral and the tetrahedral interstitial in HCP



referred to a, b and c. (答案见 1-14)

5. Prove that $[h\ k\ l] \perp (h\ k\ l)$ for cubic crystal. (答案见 1-15)

6. Show all possible $\{10\bar{1}2\}$ planes in the hexagonal unit cell and label the specific indices for each plane.

答： $\{10\bar{1}2\} = (10\bar{1}2) + (01\bar{1}2) + (\bar{1}102) + (\bar{1}012) + (0\bar{1}12) + (1\bar{1}02)$

如图，顺序按逆时针排列。

7. Point out all the $\langle 110 \rangle$ on (111) planes both analytically and graphically.

答：画图法：下图。

解析法：(111) 面的面方程为 $x+y+z = 1$ ，列出所有可能的 $\langle 110 \rangle = [110] + [011] + [101] + [\bar{1}10] + [0\bar{1}1] + [10\bar{1}]$ (其他为这六个的反方向)，将 $(x\ y\ z)$ 代入面方程，得知前三个不满足，后三个满足，即 $[\bar{1}10]$ 、 $[0\bar{1}1]$ 、 $[10\bar{1}]$ 在(111)面上。

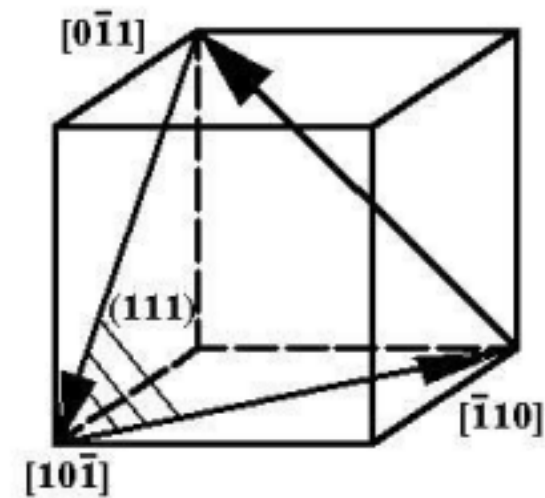
8. Prove that the zone equation holds for cubic system.

证明：已知在立方晶系中 $[h\ k\ l]$ 方向垂直与 $(h\ k\ l)$ 面，

由于 $[u\ v\ w]$ 方向属于 $(h\ k\ l)$ 面，

必有 $[h\ k\ l] \perp [u\ v\ w]$ ，

即 $[h\ k\ l][u\ v\ w] = 0$ ，得 $hu + kv + lw = 0$ 。



第二章习题及答案

2-11. 比较石墨和金刚石的晶体结构、结合键和性能。

答：金刚石晶体结构为带四面体间隙的 FCC, 碳原子位于 FCC点阵的结合点和四个不相邻的四面体间隙位置（见 1-6 题答案），碳原子之间都由共价键结合，因此金刚石硬度高，结构致密。石墨晶体结构为简单六方点阵，碳原子位于点阵结点上，同层之间由共价键结合，邻层之间由范德华力结合，因此石墨组织稀松，有一定的导电性，常用作润滑剂。

2-12. 为什么元素的性质随原子序数周期性的变化？短周期元素和长周期元素的变化有何不同？原因何在？

答：因为元素的性质主要由外层价电子数目决定，而价电子数目是随原子序数周期性变化的，所以反映出元素性质的周期性变化。长周期元素性质的变化较为连续、逐渐过渡，而短周期元素性质差别较大，这是因为长周期过渡族元素的亚层电子数对元素性质也有影响造成的。

2-13. 讨论各类固体中原子半径的意义及其影响因素，并举例说明。

答：对于金属和共价晶体，原子半径定义为同种元素的晶体中最近邻原子核之间距离之半。共价晶体中原子间结合键是单键、双键或三键将会影响原子半径，所以一般使用数值最大的单键原子半径 $r(1)$ ；金属晶体中，配位数会影响原子半径，例如 γ -Fe (CN=8) 比 α -Fe (CN=12) 的原子半径小 3%，一般采用 CN=12的原子半径。

对于非金属的分子晶体，同时存在两个原子半径：一是共价半径，另一是范德华原子半径（相邻分子间距离之半）。例如氯分子晶体中，两半径分别为 0.099nm 和 0.180nm。

对于离子晶体，用离子半径 r^+ 、 r^- 表示正、负离子尺寸。在假设同一离子在不同离子晶体中有相同半径的情况下，可以大致确定离子半径。但离子半径只是一个近似的概念，电子不可能完全脱离正离子，因此许多离子键或多或少带有共价键的成分，当这种特点较为突出时，离子半径的意义就不确切了。

2-14. 解释下列术语：

合金——由金属和其它一种或多种元素通过化学键结合而成的材料。

组元——组成合金的每种元素（金属、非金属）。

相——合金内部具有相同的（或连续变化的）成分、结构和性能的部分或区域。

组织——一定外界条件下，组成一定成分的合金的若干种不同的相的总体。

固溶体——溶质和溶剂的原子占据了一个共同的布拉维点阵，且此点阵类型与溶剂点阵类型相同；组元的含量可在一定范围内改变而不会导致点阵类型的改变。

具有以上两性质的金属或非金属合成物就叫做固溶体。

金属间化合物——金属与金属形成的化合物。

超结构（超点阵）——有序固溶体中的各组元分点阵组成的复杂点阵。

分点阵（次点阵）——有序固溶体中各组元原子分别占据的各自的布拉维点阵。

负电性——表示元素在和其它元素形成化合物或固溶体时吸引电子的能力的参量。

电子浓度——合金中每个原子的平均价电子数。

2-15. 有序合金的原子排列有何特点？这种排列和结合键有什么关系？为什么许多有序合金在高温下变成无序？从理论上如何确定有序 - 无序转变的温度（居里温度）？

答：有序合金中各组元原子占据各自的布拉维点阵，整个合金就是这些分点阵组成的超点阵。这种排列是由原子间金属键造成的，是价电子集体将原子规则排列。高温下由于原子的热运动加剧，到一定程度就会摆脱原来的结点位置，造成原子排列的无序性。理论上可以利用金属键的强度与分子平均自由能的大小关系确定有序合金的转变温度。

2-16. 试将图 2-43 中的各种有序合金结构分解为次点阵（指出次点阵的数量和类型）。

答：(a) 两个次点阵，简单立方点阵。 Cu、Zn 各一个。
(b) 四个次点阵，简单立方点阵。 Au 一个，Cu 三个。
(c) 四个次点阵，简单立方点阵。 Cu、Au 各两个。
(d) 四个次点阵，面心立方点阵。 a、b、c、d 各一个。
(e) 四十个次点阵，简单立方点阵。 Cu、Au 各二十个。

2-17. 简述 Hume-Rothery 规则及其实际意义。

答：(1) 形成合金的元素原子半径之差超过 14% ~ 15%，则固溶度极为有限；
(2) 如果合金组元的负电性相差很大，固溶度就极小；
(3) 两元素的固溶度与它们的原子价有关，高价元素在低价元素中的固溶度大于低价元素在高价元素中的固溶度；
(4) B ~ B 族溶质元素在 B 族溶剂元素中的固溶度都相同 ($e/a=1.36$)，与具体的元素种类无关；
(5) 两组元只有具有相同的晶体结构才能形成无限（或连续）固溶体。

Hume-Rothery 规则虽然只是否定规则（(1)、(2)），只是定性或半定量的规则，而且后三条都只限于特定情况。但它总结除了合金固溶度的一些规律，帮助预计固溶度的大小，因而对确定合金的性能和热处理行为有很大帮助。

2-18. 利用 Darken-Gurry 图分析在 Mg 中的固溶度可能比较大的元素（所需数据参看表 2-7）。

答：Mg 元素的原子半径 $r=0.16\text{nm}$ ， $x=1.2$ ，根据 Hume-Rothery 规则，在 r (0.136, 0.184)， x (0.8, 1.6) 范围内寻找元素，做一椭圆，由课本 P100 图 2-45 可以看出，可能的元素有 Cd、Nb、Ti、Ce、Hf、Zr、Am、P、Sc 及镧系元素。

2-19. 什么是 Vegard 定律？为什么实际固溶体往往不符合 Vegard 定律？

答：实验发现两种同晶型的盐形成连续固溶体时，固溶体的点阵常数与成分呈直线关系，即点阵常数正比于任一组元的浓度，这就是 Vegard 定律。因为 Vegard 定律反映了成分对合金相结构的影响，但对合金相结构有影响的不只是成分，还有其它因素（如电子浓度、负电性等），这些因素导致了实际固溶体与 Vegard 定律不符。

2-20. 固溶体的力学和物理性能和纯组元的性能有何关系？请定性地加以解释。

答：固溶体的强度和硬度往往高于各组元，而塑性则较低，这是因为：（1）对于间隙固溶体，溶质原子往往择优分布在位错线上，形成间隙原子“气团”，将位错牢牢钉扎住，起到了强化作用；（2）对于置换固溶体，溶质原子往往均匀分布在点阵内，造成点阵畸变，从而增加位错运动的阻力，这种强化作用较小。

固溶体的电学、热学、磁学等物理性质也随成分而连续变化，但一般都不是线性关系，这是因为溶质原子一般会破坏溶剂原来的物理性能，但合金呈有序状态时，物理性能又会突变，显示出良好的物理性能。

2-21. 叙述有关离子化合物结构的 Pauling 规则，并用此规则分析金红石的晶体结构。

答：（1）在正离子周围形成一负离子配位多面体，正负离子之间的距离取决于离子半径之和，而配位数则取决于正负离子半径之比；
（2）正离子给出的价电子数等于负离子得到的价电子数，所以有 $Z_+/CN_+ = Z_-/CN_-$ ；
（3）在一个配位结构中，当配位多面体共用棱、特别是共用面时，其稳定性会降低，而且正离子的电价越高、配位数越低，则上述效应越显著；
（4）在含有一种以上正离子的晶体中，电价大、配位数小的正离子周围的负离子配位多面体力图共顶连接；
（5）晶体中配位多面体的类型力图最少。

对于金红石：（1）正负离子半径比为 0.48，根据课本 P104 表 2-8，可知负离子多面体为八面体，正离子配位数为 6；（2） $Z_+ = 4$ ， $Z_- = 2$ ，所以 $CN_- = CN_+ \cdot Z_- / Z_+ = 6/2 = 3$ 。

2-22. 讨论氧化物结构的一般规律。

答：氧化物结构的重要特点就是氧离子密排。大多数简单的氧化物结构中氧离子都排成面心立方、密排六方或近似密排的简单立方，而正离子则位于八面体间隙、四面体间隙或简单立方的体心。

2-23. 讨论硅酸盐结构的基本特点和类型。

答：基本特点：（1）硅酸盐的基本结构单元是 $[SiO_4]$ 四面体，硅原子位于氧原子四面体的间隙中；（2）每个氧最多只能被两个 $[SiO_4]$ 四面体共有；（3） $[SiO_4]$ 四面体可以互相孤立地在结构中存在，也可以通过共顶点互相连接；（4）Si-O-Si 的结合键形成一折线。
按照硅氧四面体在空间的组合情况可以分为：岛状、链状、层状、骨架状。

2-24. 从以下六个方面总结比较价化合物、电子化合物、TCP相和间隙相（间隙化合物）等各种金属间化合物。

	价化合物	电子化合物	TCP相	间隙相
组成元素	金属与金属， 金属与准金属	贵金属与 B 族元素， 族（铁族）元素和某些 B 族元素	原子半径相差不大的金属元素	原子半径较大的过渡族金属元素和原子半径较小的准金属元素（H、B、C、N、Si 等）
结构特点	通过电子的转移或共用，形成 8 电子稳定组态	结构主要由电子浓度决定	由密排四面体按一定次序堆垛而成	通常金属原子排成 FCC 或 CPH 结构，准金属原子位于四面体或八面体间隙
结合键	离子键、共价键或离子 -	主要是金属键	金属键	混合型：金属原子之间为金属键，金属与

	共价键			准金属原子键为共价键
决定结构的主要因素及理论基础	负电性，电子层理论	电子浓度，电子论	组元原子半径比，拓扑学	组元原子半径比，空间几何学
性能特点	非金属性质或半导体性质	明显的金属特性	相硬而脆， Cr_3Si 型结构合金大都具有超导性质	宽相互固溶范围，明显的金属性质，很高的熔点、极高的硬度和脆性
典型例子	MgSe Pt_2P 、 MgSi 、 MnS MgS MnAs	CuZn Cu_5Zn_8 、 CuZn_8	MgCu MgZn 、 MgNi_2 (Laves相)、 Fe-Cr 合金(相)、 Cr_3Si	Fe_4N Fe_2N NaH TiH_2 (简单)； Fe_3C Cr_{23}C_6 、 Fe_4WC (复杂)

第三章习题及答案

3-1. 写出 FCC晶体在室温下所有可能的滑移系统 (要求写出具体的晶面、晶向指数)。

答：共有 12 个可能的滑移系统： $(111)[10\bar{1}]$ 、 $(111)[01\bar{1}]$ 、 $(111)[1\bar{1}0]$ 、 $(\bar{1}11)[110]$ 、 $(\bar{1}11)[0\bar{1}1]$ 、 $(\bar{1}11)[101]$ 、 $(1\bar{1}1)[110]$ 、 $(1\bar{1}1)[10\bar{1}]$ 、 $(1\bar{1}1)[011]$ 、 $(11\bar{1})[011]$ 、 $(11\bar{1})[101]$ 、 $(11\bar{1})[1\bar{1}0]$ 。

3-2. 已知某铜单晶试样的两个外表面分别是 (001) 和 (111) 。请分析当此晶体在室温下滑移时在上述每个外表面上可能出现的滑移线彼此成什么角度？

答：可能的滑移面为 $\{111\}$ 晶面族，它们与 (001) 面的交线只可能有 $[110]$ 和 $[1\bar{1}0]$ ，所以滑移线彼此平行或垂直。滑移面与 (111) 面的交线可能有 $[\bar{1}10]$ 、 $[0\bar{1}1]$ 、 $[10\bar{1}]$ ，所以滑移线彼此平行或成 60° 角。

3-3. 若直径为 5mm 的单晶铝棒在沿棒轴 $[123]$ 方向加 40N 的拉力时即开始滑移，求铝在滑移时的临界分切应力。

解：单晶铝为 FCC 结构，滑移系统为 $\{111\}\langle 110 \rangle$ ，利用映象规则，知滑移面和滑移方向为 $(\bar{1}11)[101]$ ，它们与轴夹角分别为

$$\cos \theta_1 = [123] \cdot [\bar{1}11] / (|[123]| |[\bar{1}11]|) = 4 / \sqrt{42} ;$$

$$\cos \theta_2 = [123] \cdot [101] / (|[123]| |[101]|) = 2 / \sqrt{7} ;$$

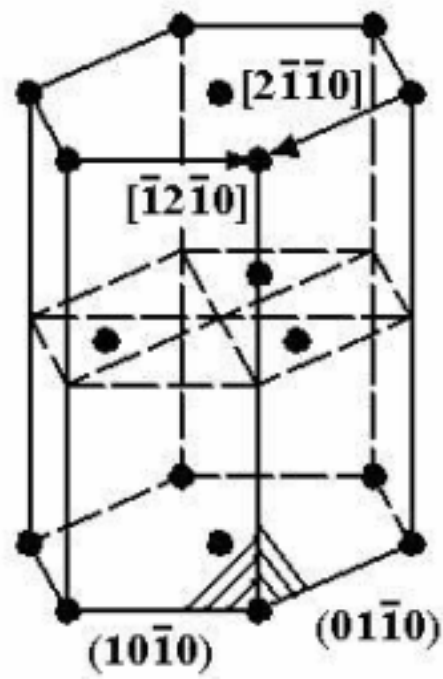
所以临界分切应力 $\tau_c = F \cos \theta_1 \cos \theta_2 / A_0 = \dots = 0.95 \text{MPa}$ 。

3-4. 利用计算机验证，决定滑移系统的映象规则对 FCC 晶体和具有 $\{110\}\langle 111 \rangle$ 滑移系统的 BCC 晶体均适用。(提示：对于任意设定的外力方向，用计算机计算所有等价滑移系统的取向因子。)

答： $\mu = \cos \theta_1 \cos \theta_2$ ，计算所有等价滑移系的 μ ，可发现 μ_{\max} 必对应映象规则所选择的滑移系。

3-5. 如果沿 FCC 晶体的 $[110]$ 方向拉伸，请写出可能起动的滑移系统。

答：可能起动的滑移系统有四个，分别为 $(11\bar{1})[101]$ 、 $(11\bar{1})[011]$ 、 $(111)[10\bar{1}]$ 、 $(111)[01\bar{1}]$ 。



3-6. 请在 Mg 的晶胞图中画出任一对可能的双滑移系统，并标出具体指数。

答：Mg 为 HCP 结构，其滑移系统为 $\{0001\}\langle 11\bar{2}0\rangle$ 和 $\{10\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0\rangle$ ，右图中标出一组可能的双滑移系统： $(01\bar{1}0)[2\bar{1}\bar{1}0]$ 和 $(10\bar{1}0)[\bar{1}2\bar{1}0]$ 。

3-7. 证明取向因子的最大值为 0.5 ($\mu_{\max}=0.5$)。

证：如右图， $\alpha = \langle F, b \rangle$ ， $\beta = \langle F, n \rangle$ ，所以 $\cos \alpha = OA/OP$ ，

$\cos \beta = OB/OP$ ，C 为 P 的投影， $\angle POC = \gamma$ ，所以

$$\cos^2 \gamma = OC^2/OP^2 = (OA^2 + OB^2)/OP^2,$$

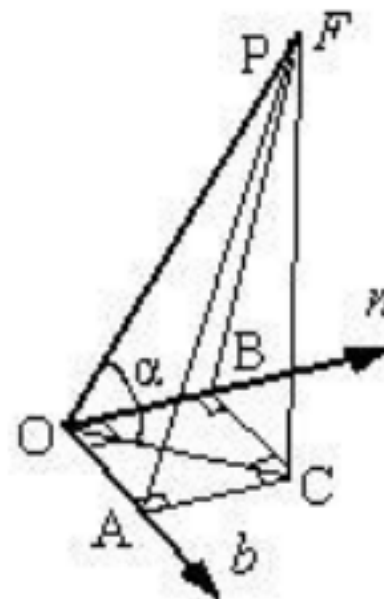
由此可得

$$\mu = \cos \alpha \cos \beta = OA \cdot OB/OP^2$$

$$= \cos^2 \gamma \cdot OA \cdot OB/(OA^2 + OB^2)$$

$$= OA \cdot OB/(OA^2 + OB^2) \leq 0.5,$$

当 $\alpha=0$ 或 $\beta=0$ ，OA=OB 时， μ 取最大值 0.5，此时 F、n、b 共面且 $\alpha=\beta$ 。



3-8. 如果沿铝单晶的 $[2\bar{1}3]$ 方向拉伸，请确定：(1) 初始滑移系统；(2) 转动规律和转轴；(3) 双滑移系统；(4) 双滑移开始时晶体的取向和切变量；(5) 双滑移过程中晶体的转动规律和转轴；(6) 晶体的最终取向（稳定取向）。

解：(1) 铝单晶为 FCC 结构， $[2\bar{1}3]$ 位于取向三角形 $[001]$ $[1\bar{1}1]$ $[101]$ 中，所以初始滑移系统为 $(111)[0\bar{1}1]$ ；

(2) 试样轴转向 $[0\bar{1}1]$ ，转轴为 $[2\bar{1}3] \times [0\bar{1}1] = [2\bar{2}\bar{2}]$ ，即 $[1\bar{1}\bar{1}]$ ；

(3) 双滑移系统为 $(111)[0\bar{1}1] - (\bar{1}\bar{1}1)[101]$ ；

(4) 利用 $L = l + (l \cdot n)b$ ，设 $L = [u\bar{v}w]$ ，得

$$L = [2\bar{1}3] + 4[0\bar{1}1]/6, \text{ 由此可知 } u=2, w=4, \gamma = 6/4,$$

所以晶体取向为 $[2\bar{2}4]$ ，即 $[1\bar{1}2]$ ，切变量为 $6/4$ ；

(5) 双滑移时，试样轴一方面转向 $[0\bar{1}1]$ ，转轴 $n_1 = [1\bar{1}2] \times [0\bar{1}1] = [1\bar{1}\bar{1}]$ ，同时转向 $[101]$ ，转轴 $n_2 = [1\bar{1}2] \times [101] = [\bar{1}11]$ ，合成转轴为 $[000]$ ，所以晶体不再转动；

(6) 由(5)可知晶体最终取向为 $[1\bar{1}2]$ 。

3-9. 将上题中的拉伸改为压缩，重解上题。

解：(1) $[2\bar{1}3]$ 位于取向三角形 $[001]$ $[1\bar{1}1]$ $[101]$ 中，所以初始滑移系统为 $(111)[0\bar{1}1]$ ；

(2) 试样轴转向 $[111]$ ，转轴为 $[2\bar{1}3] \times [111] = [\bar{4}13]$ ；

(3) 双滑移系统为 $(111)[0\bar{1}1] - (\bar{1}\bar{1}1)[011]$ ；

(4) 利用 $A = a - (a \cdot b)n$ ，设 $A = [u0w]$ ，得

$$A = [2\bar{1}3] - 4[111]/6, \text{ 由此可知 } u=3, w=4, \gamma = -6/4,$$

所以晶体取向为 $[304]$ ，切变量为 $-6/4$ ；

(5) 双滑移时，试样轴一方面转向 $[111]$ ，转轴 $n_1 = [304] \times [111] = [\bar{4}13]$ ，同时转向 $[1\bar{1}1]$ ，转轴 $n_2 = [304] \times [1\bar{1}1] = [41\bar{3}]$ ，合成转轴为 $[020]$ 即 $[010]$ ，所以双滑移后 F 点沿 $[001] - [101]$ 边移动；

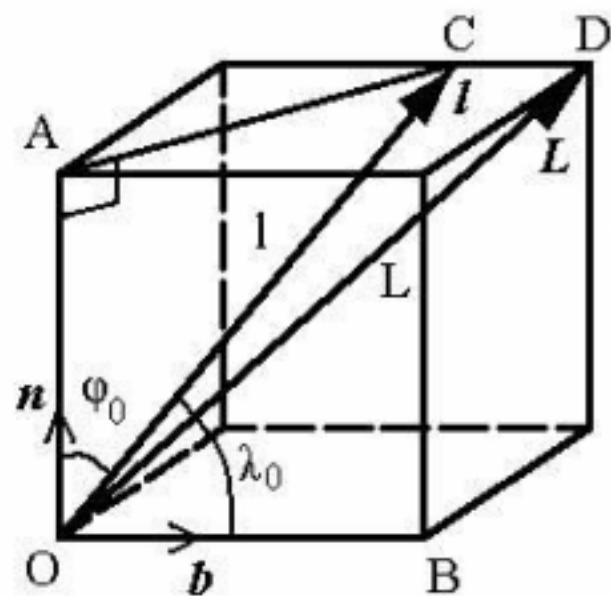
(6) 设稳定取向为 $[u'0w']$ ，要使 $n=[000]$ ，需有 $[u'0w'] \times ([111]+[1\bar{1}1]) = [000]$ ，即 $u' = w'$ ，故稳定取向为 $[101]$ 。

3-10. 将 3-8 题中的铝单晶改为铌单晶，重解该题。

- 解：(1) 铌单晶为 BCC 结构， $[2\bar{1}3]$ 位于取向三角形 $[001]$ $[1\bar{1}1]$ $[101]$ 中，所以初始滑移系统为 $(0\bar{1}1)[111]$ ；
- (2) 试样轴转向 $[111]$ ，转轴为 $[2\bar{1}3] \times [111] = [\bar{4}13]$ ；
- (3) 双滑移系统为 $(0\bar{1}1)[111]$ - $(011)[1\bar{1}1]$ ；
- (4) 利用 $L = l + (l \cdot n)b$ ，设 $L = [u\ 0\ w]$ ，得
 $L = [2\bar{1}3] + 4[111]/6$ ，由此可知 $u=3$ ， $w=4$ ， $\gamma = 6/4$ ，
 所以晶体取向为 $[304]$ ，切变量为 $6/4$ ；
- (5) 双滑移时，试样轴一方面转向 $[111]$ ，转轴 $n_1 = [304] \times [111] = [\bar{4}13]$ ，同时转向 $[1\bar{1}1]$ ，转轴 $n_2 = [304] \times [1\bar{1}1] = [41\bar{3}]$ ，合成转轴为 $[020]$ 即 $[010]$ ，所以双滑移后 F 点沿 $[001]$ - $[101]$ 边移动；
- (6) 设稳定取向为 $[u'\ 0\ w']$ ，要使 $n = [000]$ ，需有 $[u'\ 0\ w'] \times ([111] + [1\bar{1}1]) = [000]$ ，即 $u' = w'$ ，故稳定取向为 $[101]$ 。

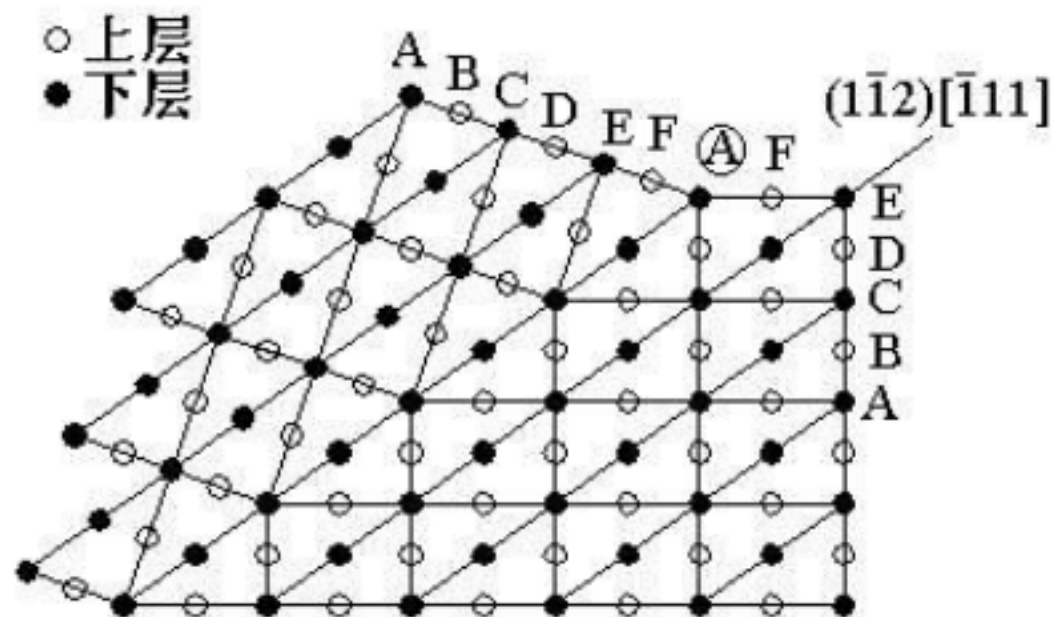
3-11. 分别用矢量代数法和解析几何法推导单晶试棒在拉伸时的长度变化公式。

- 解：(1) 设试棒原来的方向矢量为 l ，拉伸后变为 L ， n 和 b 方向如图，则由此知
 $L = l + (l \cdot n)b$ ；
 $L^2 = L \cdot L = [l + (l \cdot n)b] \cdot [l + (l \cdot n)b] = l^2 + 2(l \cdot n)(l \cdot b) + (l \cdot n)^2 b^2$
 $= l^2(1 + 2 \cos \phi_0 \cos \lambda_0 + \cos^2 \phi_0)$
 $L = l \cdot \sqrt{1 + 2 \cos \phi_0 \cos \lambda_0 + \cos^2 \phi_0}$
- (2) $OA = AC$
 $OA = OC \cdot \cos \phi_0 = l \cos \phi_0$
 $CD = l \cdot \cos \phi_0$
 又 $OB \parallel CD$
 $\angle OCD = \angle COB = \lambda_0$ ，可知
 $\cos(\phi_0 - \lambda_0) = (OC^2 + CD^2 + OD^2) / (2OC \cdot OD)$
 $= (l^2 + l^2 \cos^2 \phi_0 - L^2) / (2l^2 \cos^2 \phi_0)$
 $\Rightarrow L^2 = l^2(1 + 2 \cos \phi_0 \cos \lambda_0 + \cos^2 \phi_0)$
 $\Rightarrow L = l \cdot \sqrt{1 + 2 \cos \phi_0 \cos \lambda_0 + \cos^2 \phi_0}$



3-12. 用适当的原子投影图表示 BCC 晶体孪生时原子的运动，并由此图计算孪生时的切变，分析孪生引起的堆垛次序变化和引起的层错的最短滑动矢量。

- 解：孪生面与孪生方向分别为 $(1\bar{1}2)[\bar{1}11]$ 时原子投影图如图， $\gamma = |[\bar{1}11]/6| / (d(1\bar{1}2)) = 1/\sqrt{2} = 0.707$
 基体部分堆垛次序为 ABCDEF，孪生面为 \textcircled{A} ，孪晶部分堆垛次序为 \textcircled{A} FEDCBA，最短滑动矢量为 $1/6[\bar{1}11]$ 。



3-13. 用适当的原子投影图表示锌 ($c/a=1.86$) 单晶在孪生时原子的运动，并由图计算切变。

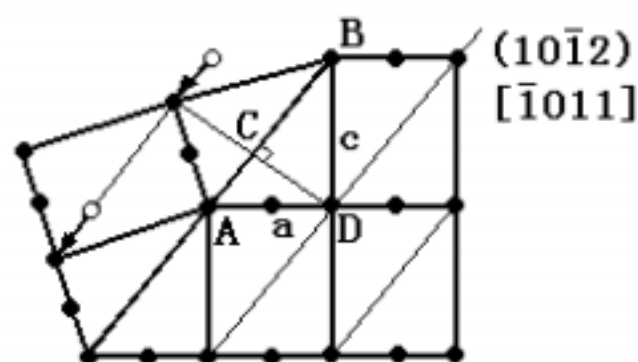
解:位移为 $AB-2AC = \frac{(3a^2+c^2) - 2*3a^2}{(3a^2+c^2)}$

$$= \frac{(c^2 - 3a^2)}{(3a^2+c^2)}$$

面间距为 $CD = \frac{3ac}{(3a^2+c^2)}$

$$= \frac{(AB-2AC)}{CD} = \frac{(c^2 - 3a^2)}{(3ac)}$$

$$= \frac{(1.86^2 - 3)}{(3*1.86)} = 0.143$$



3-14. 用解析法 (代公式法) 计算锌在孪生时的切变, 并和上题的结果相比较。

解: $\gamma = [(c/a)^2 - 3] / (3c/a) = 0.143$, 与上题结果相同。

3-15. 已知镁 ($c/a=1.62$) 单晶在孪生时所需的临界分切应力比滑移时大好几倍, 试问当沿着 Mg 单晶的 $[0001]$ 方向拉伸或者压缩时, 晶体的变形方式如何?

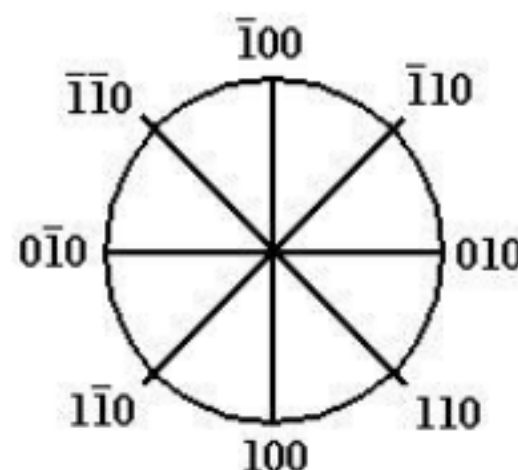
答: 镁单晶的滑移系统为 $(0001)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 、 $\{10\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$, 可能的滑移方向均垂直于 $[0001]$, 所以此时不发生滑移; $c/a=1.62 < 3$, 所以 $[0001]$ 在 K_1 、 K_2 钝角区, 孪生时会增长。因此在 $[0001]$ 方向拉伸时会发生孪生, 孪生使晶体位向发生变化, 因而可能进一步滑移; 而压缩时, 滑移和孪生都不能发生, 晶体表现出很强的脆性。

3-20. 什么是织构 (或择优取向)? 形成形变织构 (或加工织构) 的基本原因是什么?

答: 金属在冷加工以后, 各晶粒的位向就有一定的关系, 这样的一种位向分布就称为择优取向, 即织构。形成形变织构的根本原因是在加工过程中每个晶粒都沿一定的滑移面滑移, 并按一定的规律转动, 使滑移方向趋向于主应变方向或使滑移面趋向于压缩面。因此当形变量足够大时, 大量晶粒的滑移方向或滑移面都将和拉伸方向或压缩面平行, 从而形成织构。

3-22. 高度冷轧的铝板在高温退火后会形成完善的 $\{001\}\langle 100 \rangle$ 织构 (立方织构)。如果将这种铝板深冲成杯, 会产生几个制耳? 在何位置?

答: 深冲时, 平行于 $\langle 100 \rangle$ 方向拉伸时, 8 个滑移系统比较易滑移, 故在 $[010]$ 、 $[0\bar{1}0]$ 、 $[100]$ 、 $[\bar{1}00]$ 方向出现四个制耳, 此时 $\mu = 1/6$; 同时在 $\langle 110 \rangle$ 、 $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ 、 $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ 、 $\langle \bar{1}10 \rangle$ 方向可能产生四个小制耳。



3-23. 实践表明, 高度冷轧的镁板在深冲时往往会裂开, 试分析其原因。

答: 镁板冷轧后会产生 $(0001)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 织构, 在平行或垂直于板面方向施加应力, 取向因子为零, 几乎没有塑性, 进一步加工就很易开裂。

第四章习题及答案

4-1. 在晶体中插入附加的柱状半原子面能否形成位错环？为什么？

答：不能形成位错环。假设能形成位错环，则该位错环各处均为刃型位错，根据 $\mathbf{l} \perp \mathbf{b}$ ，则该位错环每一点处的 \mathbf{b} 应沿着径向，也就是说环上各点的 \mathbf{b} 不同，这与一条位错线只有一个 \mathbf{b} 矛盾。

4-2. 请分析下述局部塑性变形会形成什么样的位错（要求指出位错线的方向和柏氏矢量）。

(1) 简单立方晶体，(010) 面绕 [001] 轴发生纯弯曲。

(2) 简单立方晶体，(110) 面绕 [001] 轴发生纯弯曲。

(3) FCC晶体，(110) 面绕 [001] 轴发生纯弯曲。

(4) 简单立方晶体绕 [001] 轴扭转 θ 角。

答：(1) 刃型， $\mathbf{l} = [001]$ ， $\mathbf{b} = a[010]$ ；(2) 刃型， $\mathbf{l} = [001]$ ， $\mathbf{b} = a[100]$ 或 $a[010]$ ；

(3) 刃型， $\mathbf{l} = [001]$ ， $\mathbf{b} = a[110]/2$ ；(4) 螺型， $\mathbf{l} = [001]$ ， $\mathbf{b} = a[001]$ 。

4-3. 怎样的一对位错等价与一系列空位（或一系列间隙原子）？

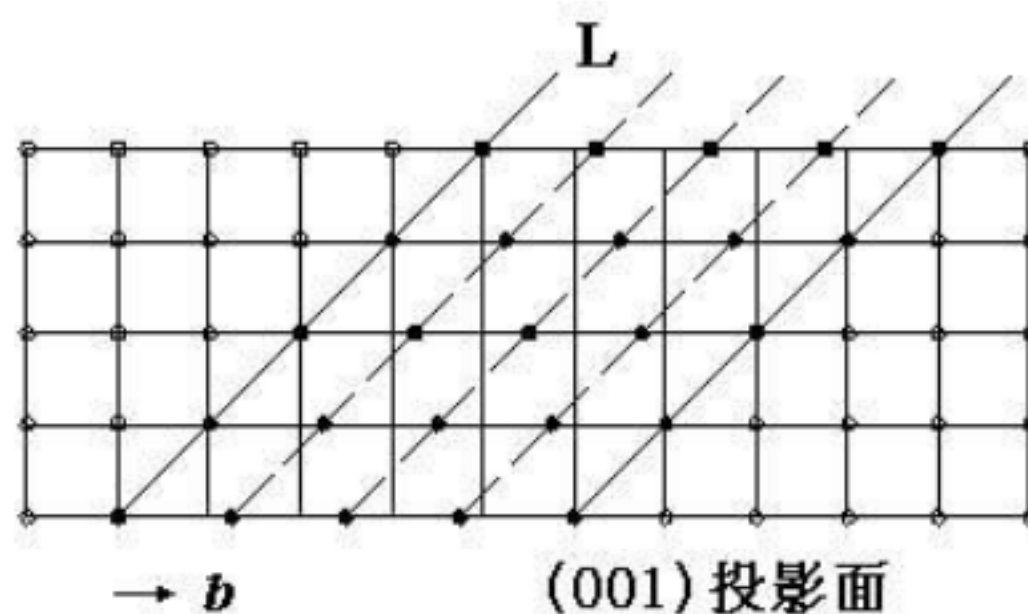
答：一个正刃型位错和一个负刃型位错的半原子面位于同一平面，中间如果空出一个原子位就会形成一系列空位，如果重叠了一个原子位就会形成一系列间隙原子。

4-4. 在简单立方晶体的 (001)

投影面上画出一个和柏氏
矢量成 45° 的混合位错附
近的原子组态。

答：见右图。

4-5. 当刃型位错周围的晶体中



含有 (a) 超平衡的空位、 (b) 超平衡的间隙原子、 (c) 低于平衡浓度的空位、 (d) 低于平衡浓度的间隙原子等四种情形时，该位错将怎样攀移？

答：(a) 正攀移； (b) 负攀移； (c) 负攀移； (d) 正攀移。

4-6. 指出图 4-109 中位错环 ABCD 的各段位错线是什么性质的位错？它们在外应力 σ_{xy} 作用下将如何运动？（及 σ_{yy} ）

答：AB、BC、CD、DA 各段都为刃型位错。在 σ_{xy} 作用下，AB、CD 段不运动，BC 向下滑移，DA 向上滑移；在 σ_{yy} 作用下，整个位错环向外扩大。

4-10. 证明混合位错在其滑移面上、沿滑移方向的剪应力为 $\tau_s = Gb(1 - \cos^2 \alpha) / [2r(1 - \cos^2 \alpha)]$ ，式中 α 是位错线 l 和柏氏矢量 b 之间的夹角， r 是波桑比， r 是所论点到位错线的距离。

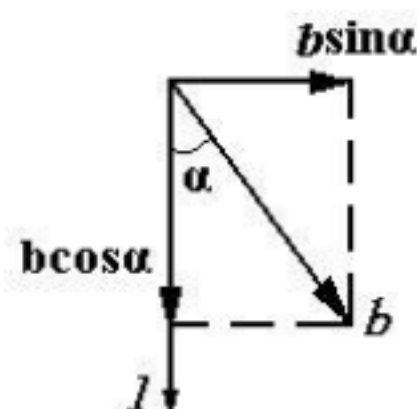
证：将 b 分解为 $b_{\parallel} = b \cos \alpha$ 和 $b_{\perp} = b \sin \alpha$ ，可得

$$\tau_{\text{scrow}} = \sigma_{\parallel} b_{\parallel} / r = Gb \cos^2 \alpha / (2r) \quad \text{方向沿 } l;$$

$$\tau_{\text{edge}} = \sigma_{\perp} b_{\perp} / r = Gb \sin^2 \alpha / [2r(1 - \cos^2 \alpha)] \quad \text{方向垂直于 } l;$$

直于 l ；

$$\begin{aligned} \tau_s &= \tau_{\text{scrow}} \cos \alpha + \tau_{\text{edge}} \sin \alpha \\ &= Gb(1 - \cos^2 \alpha) / [2r(1 - \cos^2 \alpha)]. \end{aligned}$$



4-11. 证明作用在某平面 n 上的总应力 p 和应力张量 σ_{ij} 的关系为 $p_i = \sigma_{ij} n_j$ ，或用分量表示成 $p_i = \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij} n_j$ 。（正交坐标系为 x_1, x_2, x_3 ）

证：由 $P(P_1, P_2, P_3)$ ，及 $F_1 = 0$ ，得 $P_1 A_0$

$$= \sigma_{11} dx_2 dx_3 / 2 + \sigma_{12} dx_3 dx_1 / 2 + \sigma_{13} dx_1 dx_2 / 2,$$

$$\text{又 } dx_2 dx_3 / 2A_0 = n_1, \quad dx_3 dx_1 / 2A_0 = n_2,$$

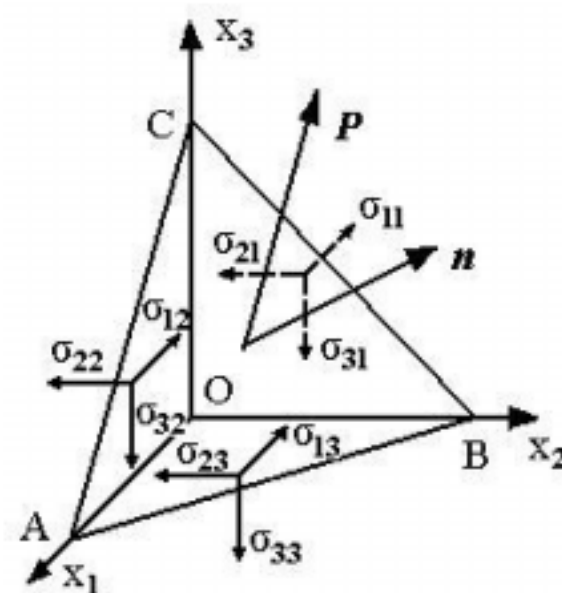
$$dx_1 dx_2 / 2A_0 = n_3,$$

$$P_1 = \sigma_{11} n_1 + \sigma_{12} n_2 + \sigma_{13} n_3,$$

$$\text{同理得 } P_2 = \sigma_{21} n_1 + \sigma_{22} n_2 + \sigma_{23} n_3,$$

$$P_3 = \sigma_{31} n_1 + \sigma_{32} n_2 + \sigma_{33} n_3,$$

上三式即可表示为 $p = \sigma_{ij} n_j$ ，或 $p_i = \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij} n_j$ 。



4-12. 证明，对于任何对称张量 σ_{ij} ，下式恒成立： $(\sigma_{ij} a_j) b_i = (\sigma_{ij} b_j) a_i$ 。

证：设 矩阵元为 σ_{ij} ， $i, j = 1, \dots, n$ ， $a = (a_1, \dots, a_n)$ ， $b = (b_1, \dots, b_n)$ ，

$$(\sigma_{ij} a_j) b_i = \sum_{j=1}^n \sigma_{1j} a_j b_1 + \dots + \sum_{j=1}^n \sigma_{nj} a_j b_n = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sigma_{ij} a_j b_i,$$

$$= \sum_{j=1}^n \sigma_{j1} a_1 b_j + \dots + \sum_{j=1}^n \sigma_{jn} a_n b_j = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sigma_{ji} a_i b_j,$$

$$(\sigma_{ij} b_j) a_i = \sum_{j=1}^n \sigma_{1j} b_j a_1 + \dots + \sum_{j=1}^n \sigma_{nj} b_j a_n = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sigma_{ji} a_i b_j,$$

$$= \sum_{j=1}^n \sigma_{j1} b_j a_1 + \dots + \sum_{j=1}^n \sigma_{jn} b_j a_n = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sigma_{ji} a_i b_j,$$

又因为 σ_{ij} 是对称张量，所以对于任意 $i, j = 1, \dots, n$ ，都有 $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ ，原式成立。

4-13. 推导直线混合位错的弹性能公式。

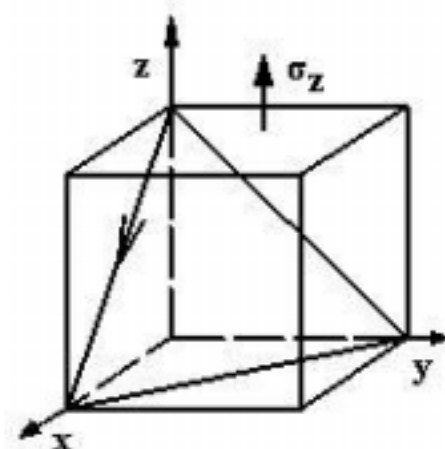
解：见 4-10 题图，分别应用刃型和螺型位错弹性能公式，得

$$\begin{aligned} E &= E_{\text{el}}(\text{刃}) + E_{\text{el}}(\text{螺}) = Gb^2 \sin^2 \alpha \cdot \ln(R/r_0) / [4(1 - \nu)] + Gb^2 \cos^2 \alpha \cdot \ln(R/r_0) / [4(1 - \nu)] \\ &= Gb^2 (1 - \cos^2 \alpha) \cdot \ln(R/r_0) / [4(1 - \nu)]. \end{aligned}$$

4-14. 在铜单晶的 (111) 面上有一个 $b = a/2 [10\bar{1}]$ 的右螺旋位错，式中 $a = 0.36 \text{ nm}$ 。今沿 $[001]$ 方向拉伸，拉应力为 10^6 Pa ，求作用在螺位错上的力。

解：利用 Peach-Koehler 公式，得

$$f = (\sigma_{ij} b_j) \times l_i$$



$$= \left(\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z \end{pmatrix} \cdot \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \right) \times \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = (-\frac{2}{4})a \quad z j ,$$

所以 $f = 1.27 \times 10^{-4}$ 牛/米，方向为 y 轴负方向。

4-15. 如果外加应力是均匀分布的，求作用于任意位错环上的净力。

解：一般情形下位错受力公式为 $dF = (\quad ? \quad b) \times dl$ ，又因为外加应力均匀分布， σ 和 b 都为常量，所以任意位错环上的净力为 $dF = (\quad ? \quad b) \times dl = (\quad ? \quad b) \quad dl = (\quad ? \quad b) \times 0 = 0$ 。

4-16. 设有两条交叉（正交但不共面）的位错线 AB 和 CD，其柏氏矢量分别为 b_1 和 b_2 ，且 $|b_1| = |b_2| = b$ 。试求下述情况下两位错间的交互作用（要求算出单位长度位错线的受力 f ，总力 F ，和总力矩 M ）：(1) 两个位错都是螺型；(2) 两个位错都是刃型；(3) 一个是螺型，一个是刃型。

解：(1) 两个都为螺型，由 P246 知 AB 螺位错的应力场，利用 Peach-Koehler 公式，得

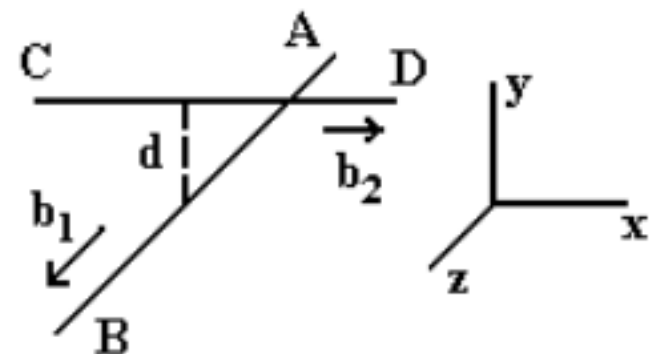
$$f = (\quad ? \quad b) \times \quad =$$

$$\left(\begin{pmatrix} 0 & 0 & \tau_{xz} \\ 0 & 0 & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = b_2 \quad xz j ,$$

$$f_{12} = b_2 \quad xz = -G b_1 b_2 d / [2 (x^2 + d^2)] = -G b^2 d / [2 (x^2 + d^2)],$$

$$F = \int -f_{12} dx = -G b^2 / 2 ,$$

$$M = \int -f_{12} x dx = 0 .$$



(2) 两个都为刃型，由 P247 可知 AB 刃位错的应力场，利用 Peach-Koehler 公式，得

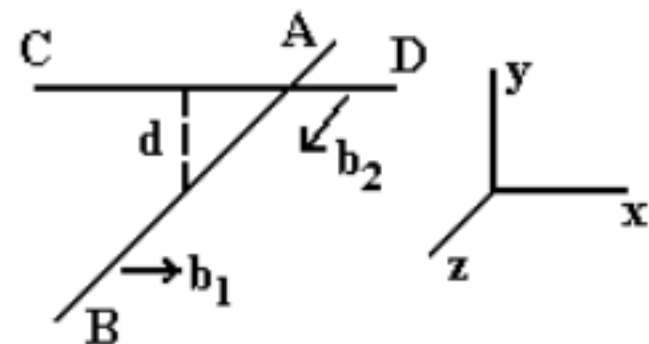
$$f = (\quad ? \quad b) \times$$

$$= \left(\begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & 0 \\ \tau_{xy} & \sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ b_2 \end{pmatrix} \right) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = b_2 \quad z j ,$$

$$f_{12} = b_2 \quad z = -G b^2 d / [(1 - \nu)(x^2 + d^2)],$$

$$F = \int -f_{12} dx = -G b^2 / (1 - \nu) ,$$

$$M = \int -f_{12} x dx = 0 .$$



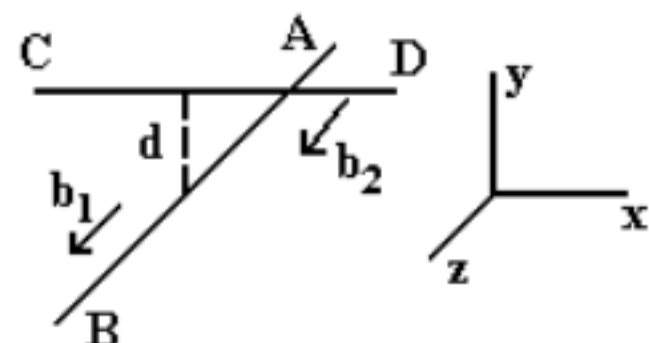
(3) 一个螺型一个刃型， $f = (\quad ? \quad b) \times$

$$= \left(\begin{pmatrix} 0 & 0 & \tau_{xz} \\ 0 & 0 & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ b_2 \end{pmatrix} \right) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -b_2 \quad yz k ,$$

$$f_{12} = -b_2 \quad yz = -G b^2 x / [2 (x^2 + d^2)],$$

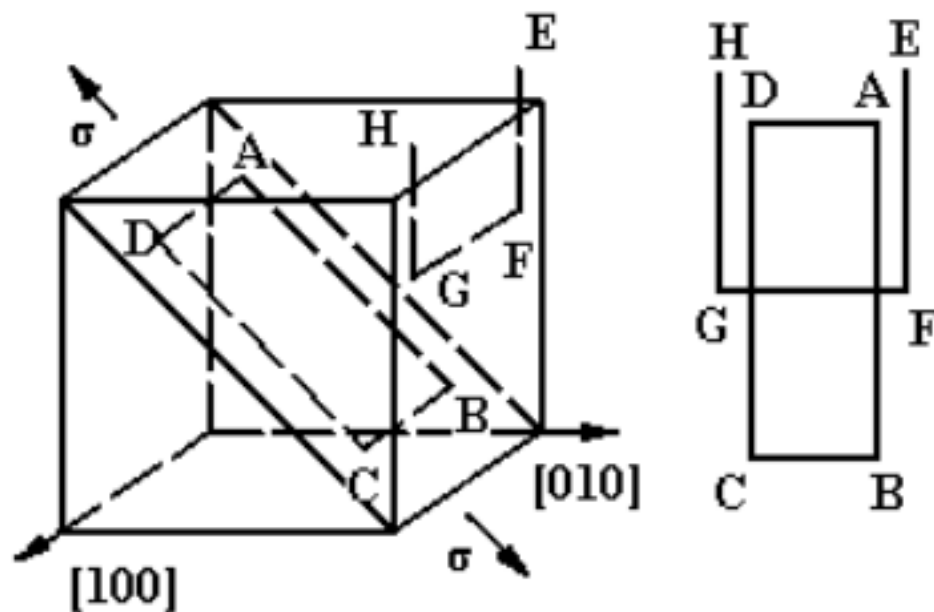
$$F = \int -f_{12} dx = 0 ,$$

$$M = \int -f_{12} x dx = (G b^2 d / (2 (1 - \nu))) \quad ? \text{ 积分应该发散 }) .$$



4-17. 图 4-110 是一个简单立方晶体，滑移系统是 $\{100\} \langle 001 \rangle$ 。今在 (011) 面上有一空位片 ABCDA，又从晶体上部插入半原子片 EFGH，它和 (010) 面平行，请分析：

- (1) 各段位错的柏氏矢量和位错的性质；
- (2) 哪些是定位错？哪些是可滑位错？滑移面是什么？（写出具体的晶面指数。）
- (3) 如果沿 $[0\bar{1}1]$ 方向拉伸，各位错将如何运动？
- (4) 画出在位错运动过程中各位错线形状的变化，指出割阶、弯折和位错偶的位置。
- (5) 画出晶体最后的形状和滑移线的位置。



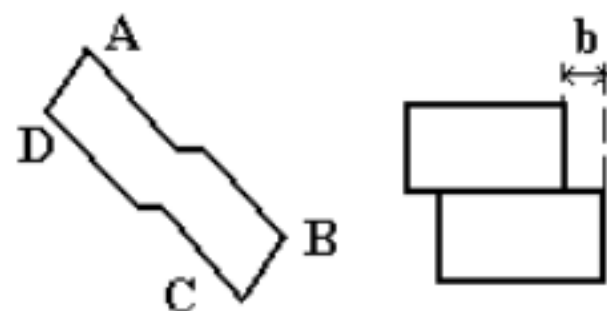
解：(1) 各段位错均为刃型位错， ABCDE位错环柏氏矢量 $b_1 = a[0\bar{1}1]$ ， EFGH柏氏氏量 $b_2 = a[010]$ ；

(2) ABCDE为定位错， 因为 b_1 方向不是简单立方晶体的滑移方向， EFGH滑移面为 (100) 或 (001)；

(3) 沿 $[0\bar{1}1]$ 方向拉伸时， ABCDE不动， EFGH中只有 FG向左移动；

(4) FG 向左移动，与 ABCDE相交后变为，形成割阶；

(5) 最后晶体形状变为右图所示，滑移线方向为 $[100]$ 。



4-18. 在图 4-111 中位错环 ABCDE是通过环内晶体发生滑移而环外晶体不滑移形成的。在滑移时滑移面上部的晶体相对于下部晶体沿 oy 轴方向滑动了距离 b_1 。此外，在距离 AB 位错为 d 处有一根垂直于环面的右螺旋位错 EF，其柏氏矢量为 b_2 。

- (1) 指出 AB BC CD和 DA各段位错的类型。
- (2) 求出 EF 对上述各段位错的作用力。在此力作用下位错环将变成什么形状？
- (3) 求 EF 位错沿 oy 方向运动而穿过位错环，请画出交割以后各位错的形状（要求指出割阶的位置和长度。）

解：(1) AB 为负刃型， BC为右螺型， CD为正刃型， DA为左螺型；
(2) $b = (0 \quad b_1 \quad 0)^T$ ， 利用 Peach-Koehler 公式， EF 螺旋位错应力场为

$$= \begin{Bmatrix} 0 & 0 & \tau_{xz} \\ 0 & 0 & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & 0 \end{Bmatrix}, \text{ 其中 } \tau_{xz} = Gb_2 y/[2$$

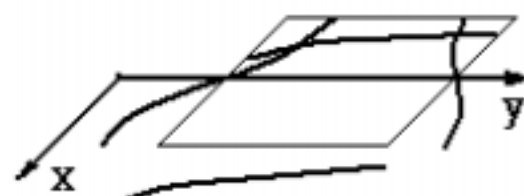
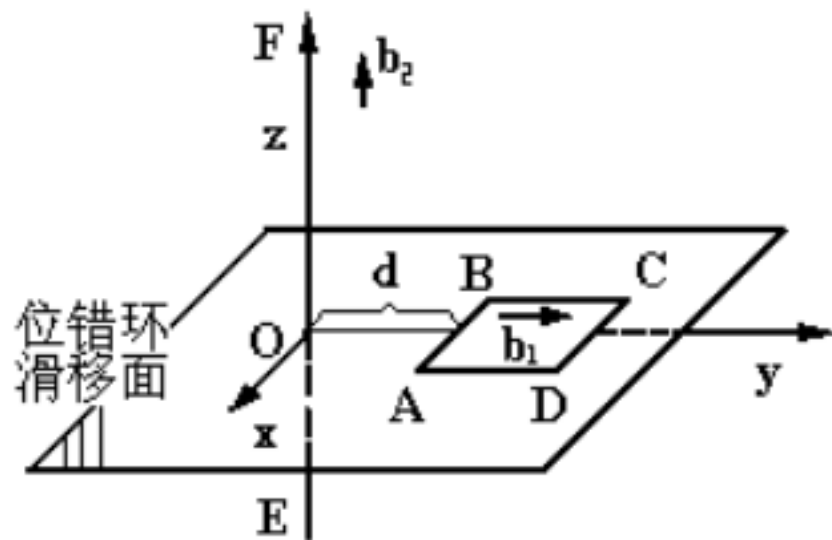
$$(x^2+y^2)], \quad \tau_{yz} = Gb_2 x/[2 (x^2+y^2)],$$

$$\text{AB 受力: } = (-1 \ 0 \ 0)^T, \quad f_{AB} = (? \ b) \times = - \tau_{yz} b_1 j = -G b_1 b_2 x/[2 (x^2+d^2)] j,$$

$$\text{BC 受力: } = (0 \ 1 \ 0)^T, \quad f_{BC} = (? \ b) \times = - \tau_{xz} b_1 i = -G b_1 b_2 x/[2 (x^2+y^2)] i,$$

$$\text{CD 受力: } = (1 \ 0 \ 0)^T, \quad f_{CD} = (? \ b) \times = \tau_{yz} b_1 j = G b_1 b_2 x/[2 (x^2+y^2)] j,$$

$$\text{DA 受力: } = (0 \ -1 \ 0)^T, \quad f_{DA} = (? \ b) \times$$



$$= \tau_{yz} b_1 i = G b_1 b_2 x / [2 (x^2 + y^2)] i ,$$

右图曲线指出了各处受力方向及大小，最终形状与曲线形状类似。

(4) 与 AB 交割，EF 产生弯折，宽度 b_1 ，AB 产生割阶，高 b_2 ；
与 CD 交割，EF 变直，CD 与 AB 相同，产生割阶，高 b_2 。



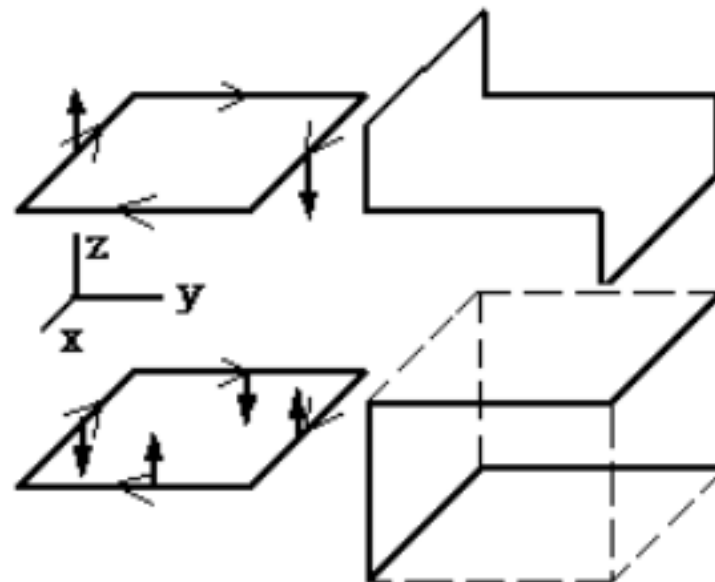
4-20. 有一封闭位错环位于断面为正方形的棱柱滑移面上。正方形的两边分别沿 x 和 y 轴，柏氏矢量沿 z 轴。如果位错环只能滑移，试求在以下两种应力分布情况下位错环的平衡形状和起动的临界应力。(1) $\tau_{xz} = 0$ ， $\tau_{yz} = \text{const}$ ；
(2) $\tau_{xz} = \tau_{yz} = \text{const}$ 。(假定线张力近似不变。)

解：(1) $f = (\tau_{yz} b) \times = -\tau_{yz} b k$ ；

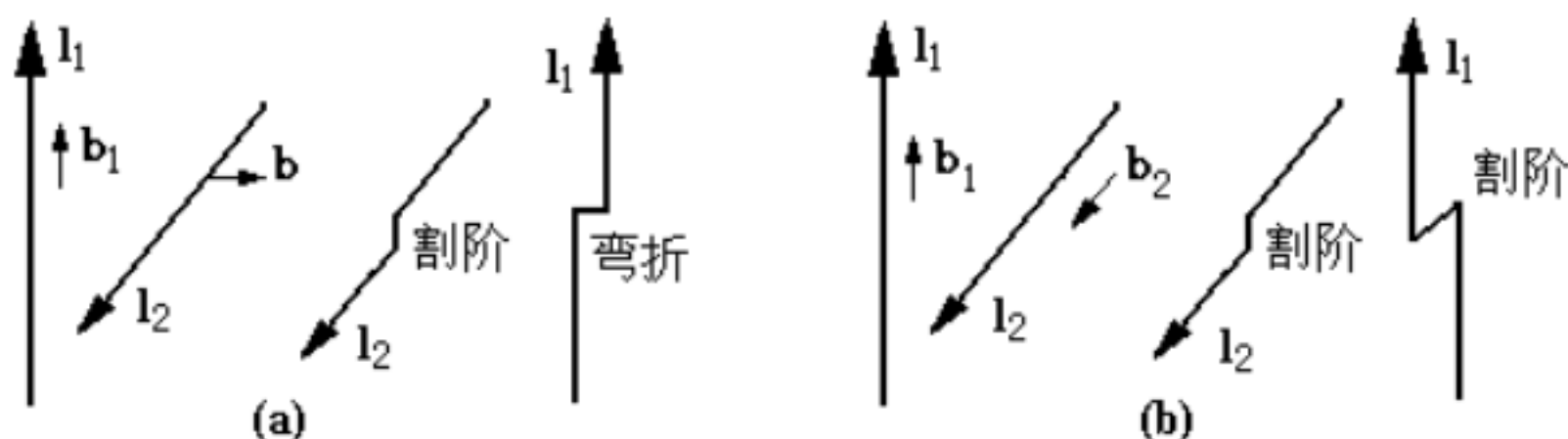
(2) $f = (\tau_{xz} b) \times = (\tau_{xz} - \tau_{yz}) b k$ ；

起动应力 $\tau_p = 2G \exp(-2\pi w/b) / (1 - \nu)$ 。

(P262)



4-21. 在简单立方晶体的 (100) 面上有一个 $b = a[001]$ 的螺位错。如果它 (a) 被 (001) 面上 $b = a[010]$ 的刃位错交割，(b) 被 (001) 面上 $b = a[001]$ 的螺位错交割，试问在这两种情形下每个位错上会形成割阶还是弯折？



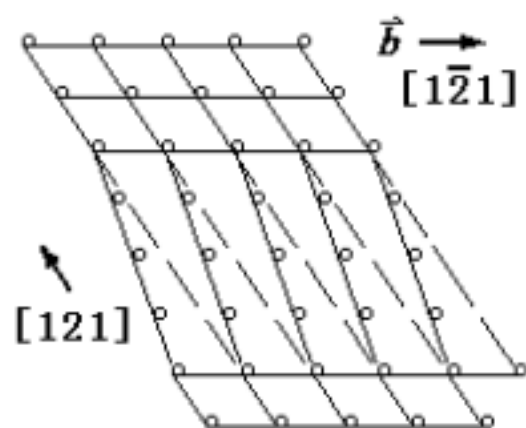
4-22. 一个 $b = a/2 [\bar{1}10]$ 的螺位错在 (111) 面上运动。若在运动过程中遇到障碍物而发生交滑移，请指出交滑移系统。

解：所有包含螺位错方向的面都是滑移面，

对于 FCC 晶体滑移面 (111) 来说，只有 (111) 与 $(11\bar{1})$ 包含 $l = b = a/2 [\bar{1}10]$

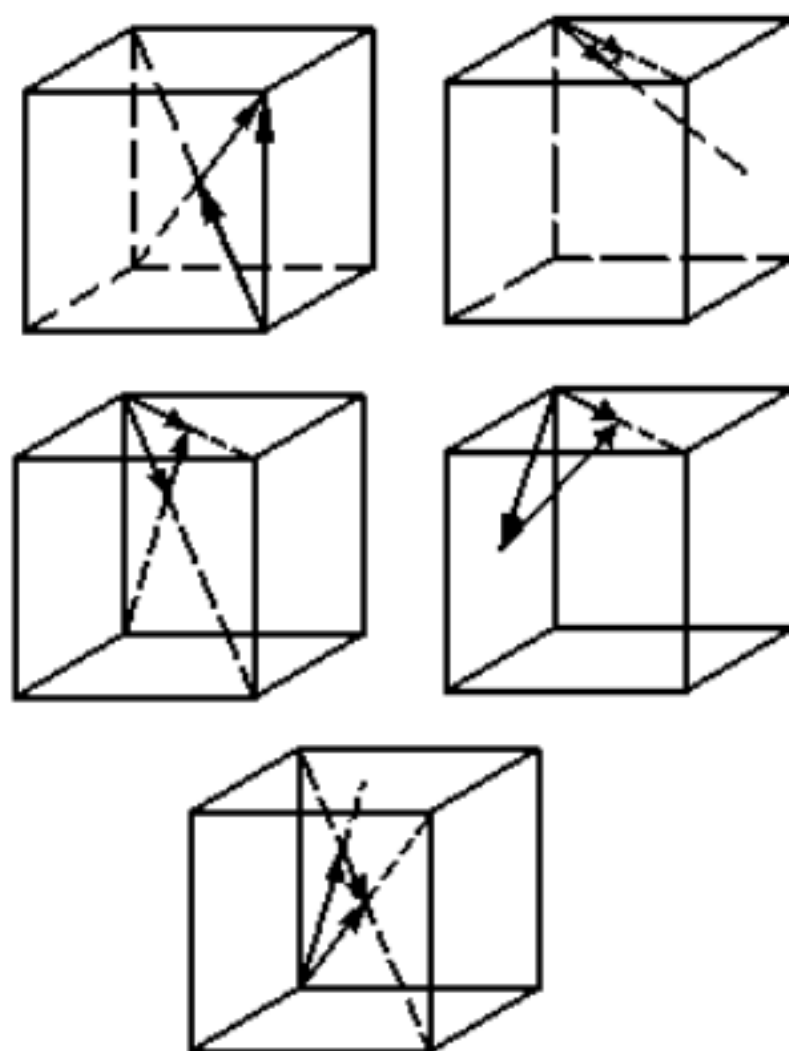
若发生交滑移，一定是从 (111) 面到 $(11\bar{1})$ 面。

4-23. 在 FCC 晶体的滑移面上画出螺型 Shockley 分位错附近的原子组态。



答：

4-24. 判断下列位错反应能否进行？若能进行，



试在晶胞图上作出矢量关系图。

- (a) $a/2 [\bar{1}\bar{1}1] + a/2 [111] = a[001]$
 (b) $a/2 [110] + a/6 [12\bar{1}] + a/6 [211]$
 (c) $a/2 [110] + a/6 [112] + a/3 [11\bar{1}]$
 (d) $a/2 [10\bar{1}] + a/2 [011] = a/2 [110]$
 (e) $a/3 [112] + a/6 [11\bar{1}] = a/2 [111]$

解：几何条件都满足，只判断是否满足能量条件 $b_i^2 = b_j^2$ ，

- (a) $3/2a^2 > a^2$ ；
 (b) $1/2a^2 > 1/3a^2$ ；
 (c) $1/2a^2 = 1/2a^2$ ；
 (d) $a^2 > 1/2a^2$ ；
 (e) $3/4a^2 = 3/4a^2$ ；

全部满足。

4-26. 估算 Al、Cu 和不锈钢中扩展位错的平衡宽度。已知三种材料的点阵常数 a 和剪切模量 G 分别为： $a_{Al} = 0.404\text{nm}$ ， $a_{Cu} = 0.361\text{nm}$ ， $a_{\text{不锈钢}} = 0.356\text{nm}$ ， $G_{Al} = 3 \times 10^{10}\text{N/cm}^2$ ， $G_{Cu} = 5 \times 10^{10}\text{N/cm}^2$ ， $G_{\text{不锈钢}} = 10 \times 10^{10}\text{N/cm}^2$ 。三种材料的层错能 γ 见表 4-2。

解：Al、Cu 和不锈钢都为面心立方结构，因此 $d_0 = Ga^2/(24\gamma)$ ，查表得三种材料的层错能 γ 分别为 166×10^{-6} 、 45×10^{-6} 、 $15 \times 10^{-6}\text{J/m}^2$ ，代入得三种材料的 d_0 分别为 3.91×10^{-7} 、 1.92×10^{-6} 、 $1.12 \times 10^{-5}\text{m}$ 。

4-14 $f = 1.27 \times 10^{-4}\text{牛/米}$ ，方向为 y 轴负方向

4-16 (1) 两个都为螺型，由 P246 知 AB 螺位错的应力场，利用 Peach-Koehler 公式，得

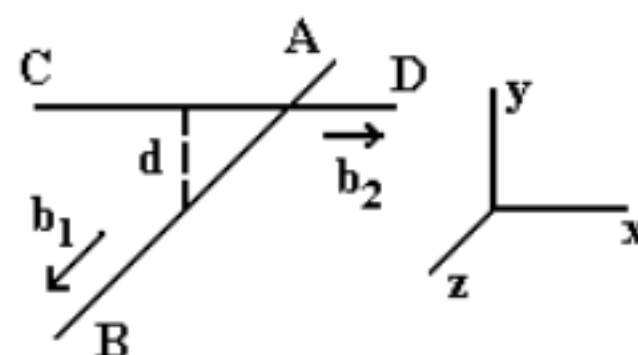
$$f = (\tau_{yz} b_1) \times =$$

$$\left(\begin{pmatrix} 0 & 0 & \tau_{xz} \\ 0 & 0 & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = b_2 \tau_{yz} j,$$

$$f_{12} = b_2 \tau_{yz} = -G b_1 b_2 d / [2(x^2 + d^2)] = -G b^2 d / [2(x^2 + d^2)],$$

$$F = - \int f_{12} dx = -G b^2 / 2,$$

$$M = - \int f_{12} x dx = 0.$$

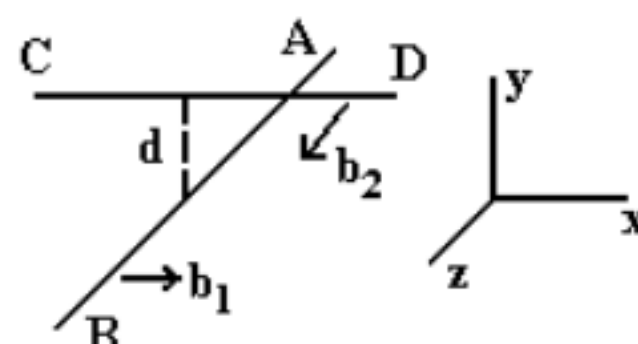


(4) 两个都为刃型，由 P247 可知 AB 刃位错的应力场，利用 Peach-Koehler 公式，得

$$f = (\sigma_{yz} b_1) \times$$

$$= \left(\begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & 0 \\ \tau_{xy} & \sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ b_2 \end{pmatrix} \right) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = b_2 \sigma_z j,$$

$$f_{12} = b_2 \sigma_z = -G b^2 d / [(1-\nu)(x^2 + d^2)],$$



$$F = \int -f_{12} dx = -Gb^2/(1-) ,$$

$$M = \int -f_{12} xdx = 0 。$$

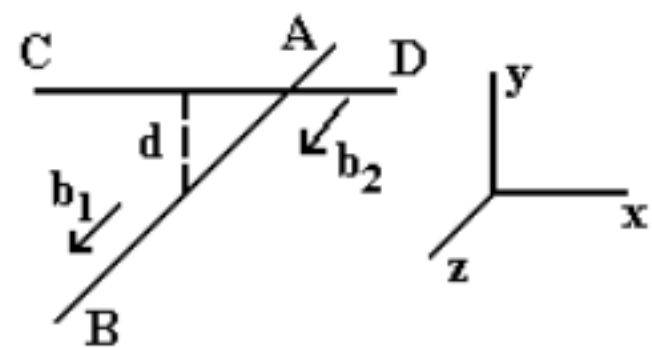
(3) 一个螺型一个刃型， $f = (\quad ? \ b) \times$

$$= \left(\begin{pmatrix} 0 & 0 & \tau_{xz} \\ 0 & 0 & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ b_2 \end{pmatrix} \right) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -b_2 \tau_{yz} k,$$

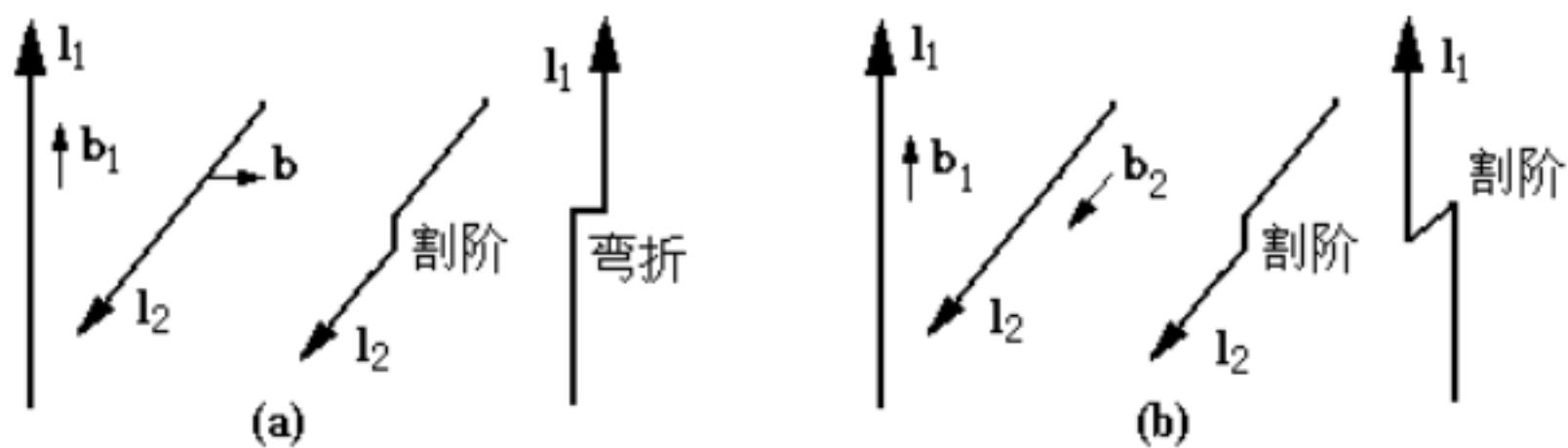
$$f_{12} = -b_2 \tau_{yz} = -Gb^2 x/[2 (x^2+d^2)] ,$$

$$F = \int -f_{12} dx = 0 ,$$

$$M = \int -f_{12} xdx = (积分发散) 。$$



4-21



4-24 全部满足。

4-26. 表里面 MJ不是兆焦，应该是 mJ毫焦，所以大家的数量级都错了。

$$8-2. C=1.3\% \cdot \text{erf}(6.8x \cdot \text{cm}^{-1});$$

$$8-6. (a) t = 1.012 \cdot 10^{-4} \text{ s};$$

$$(b) t = 4.047 \cdot 10^{-4} \text{ s};$$

$$(c) x_1/x_2 = (D_1/D_2) = (16.6/7.94) = 1.446.$$

$$8-7. C=0.85 \text{erf}(25.13 \cdot x)=0.8, \quad \text{得}$$

$$x = 0.053 \text{ cm}。$$