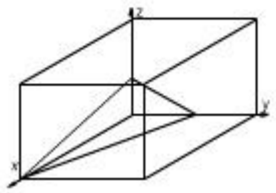
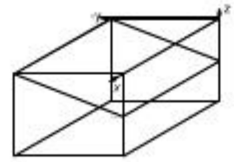
第一章 金属的晶体结构

1-1 作图表示出立方晶系（1 2 3）、（0 -1 -2）、（4 2 1）等晶面和[-1 0 2]、[-2 1 1]、[3 4 6]等晶向。

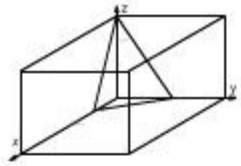
答：



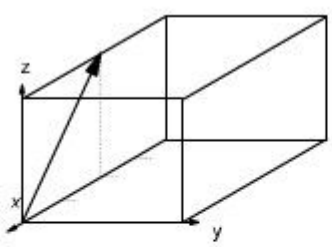
（123）



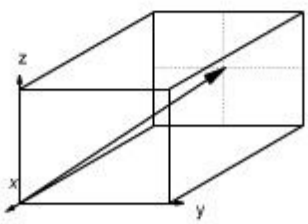
（$0\bar{1}\bar{2}$）



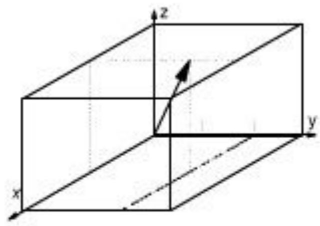
（421）



[$\bar{1}$02]



[$\bar{2}$11]



[346]

1-2 立方晶系的{1 1 1}晶面构成一个八面体，试作图画出该八面体，并注明各晶面的晶面指数。

答：

{1 1 1}晶面共包括（1 1 1）、（-1 1 1）、（1 -1 1）、（1 1 -1）四个晶面，在一个立方晶系中画出上述四个晶面。

1-3 某晶体的原子位于正方晶格的节点上，其晶格常数为 a=b≠c,c=2/3a。今有一晶面在 X、Y、Z 坐标轴上的结局分别为 5 个原子间距、2 个原子间距和 3 个原子间距，求该晶面的晶面指数。

答：

由题述可得：X 方向的截距为 5a，Y 方向的截距为 2a，Z 方向截距为 3c=3×2a/3=2a。

取截距的倒数，分别为

1/5a，1/2a，1/2a

化为最小简单整数分别为 2，5，5

故该晶面的晶面指数为（2 5 5）

1-4 体心立方晶格的晶格常数为 a，试求出（1 0 0）、（1 1 0）、（1 1 1）晶面的面间距

大小，并指出面间距最大的晶面。

答：

H（100）= $\frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ =a/2

H（110）= $\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ = √ 2a/2

H（111）= $\frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ = √ 3a/6

面间距最大的晶面为（110）

1-5 面心立方晶格的晶格常数为 a，试求出（100）、（110）、（111）晶面的面间距大小，并指出面间距最大的晶面。

答：

H（100）= $\frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ =a/2

H（110）= $\frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ = √ 2a/4

H（111）= $\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ = √ 3a/3

面间距最大的晶面为（111）

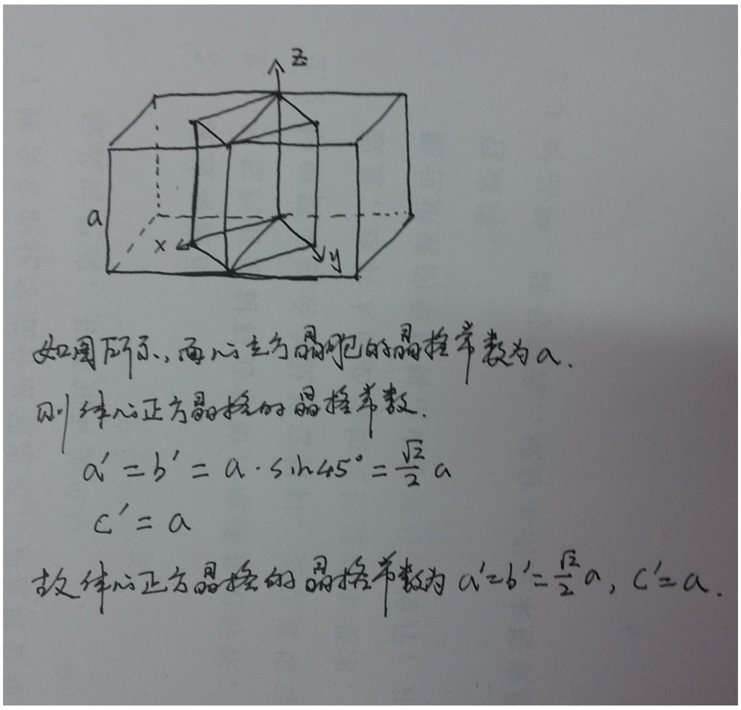
注意：体心立方晶格和面心立方晶格晶面间距的计算方法是：

1、体心立方晶格晶面间距：当指数和为奇数是 H= $\frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$，当指数和为偶数时 H= $\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

2、面心立方晶格晶面间距：当指数不全为奇数是 H= $\frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$，当指数全为奇数是 H= $\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$。

1-6 试从面心立方晶格中绘出体心正方晶胞，并求出它的晶格常数。

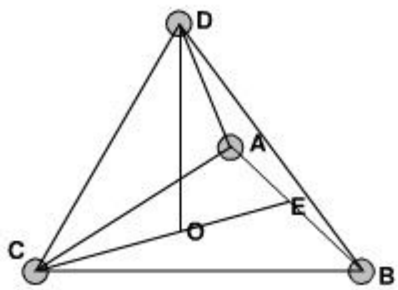
答：



1-7 证明理想密排六方晶胞中的轴比 c/a=1.633。

证明：

理想密排六方晶格配位数为 12，即晶胞上底面中心原子与其下面的 3 个位于晶胞内的原子相切，将各原子中心相连接形成一个正四面体，如图所示：



此时 c/a=2OD/BC

在正四面体中：

AC=AB=BC=CD ,OC=2/3CE

所以：

OD2=CD2-OC2=BC2- OC2

OC=2/3CE，OC2=4/9CE2，CE2=BC2-BE2=3/4BC2

可得到 OC2=1/3 BC2，OD2= BC2- OC2=2/3 BC2

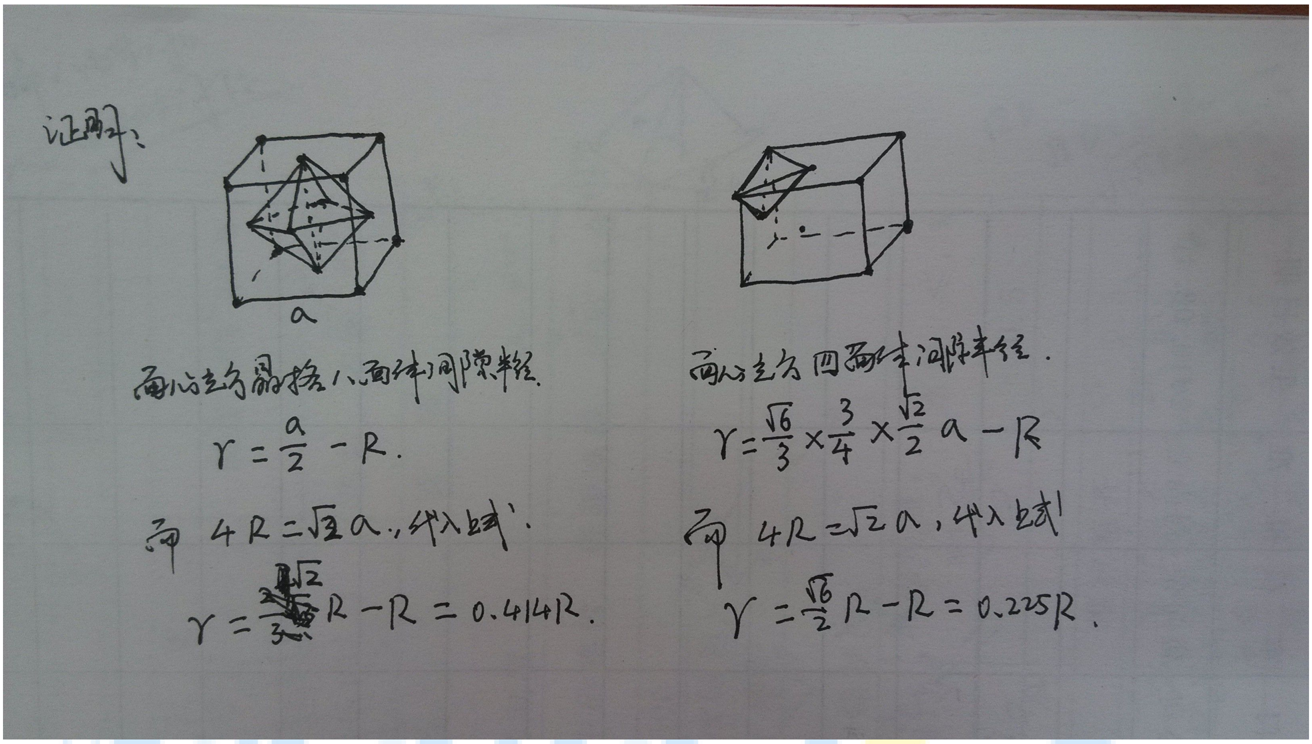
OD/BC=√6/3

所以 c/a=2OD/BC=2√6/3≈1.633

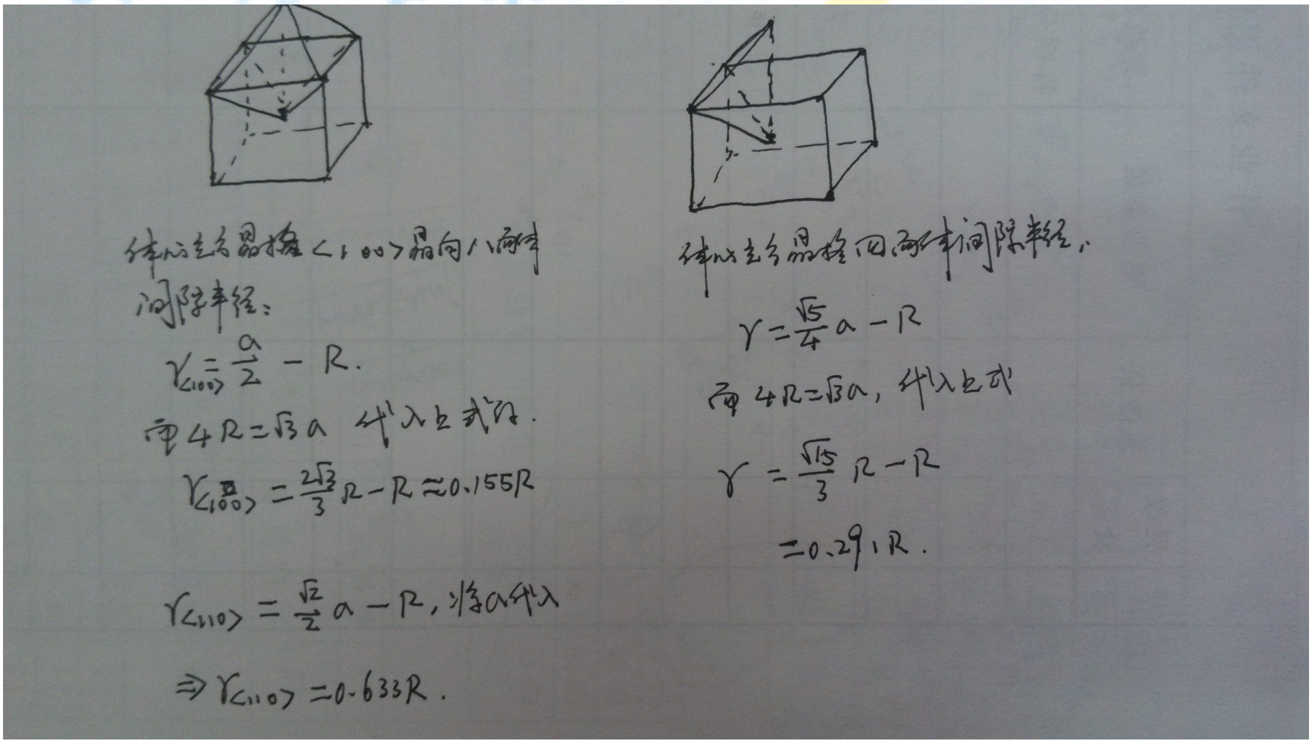
1-8 试证明面心立方晶格的八面体间隙半径 r=0.414R，四面体间隙半径 r=0.225R；体心立方晶格的八面体间隙半径：<1 0 0>晶向的 r=0.154R，<1 1 0>晶向的 r=0.633R，四面体间隙半径 r=0.291R。（R 为原子半径）

证明：

一、面心立方晶格



二、体心立方晶格



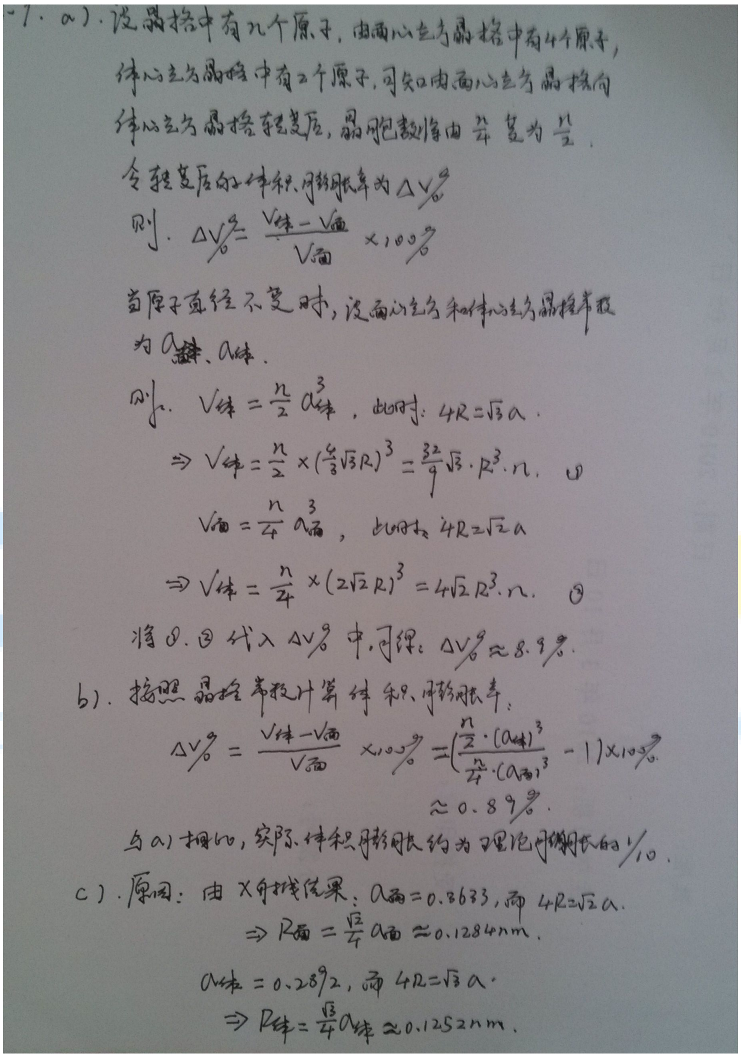
注意：解答此题的关键：

1、要会绘制面心立方晶格和体心立方晶格的八面体间隙和四面体间隙的示意图。

2、间隙半径是指顶点原子至间隙中心的距离再减去原子半径 R。

1-9 a）设有一钢球模型，球的直径不变，当有面心立方晶格转变为体心立方晶格时，试计算器体积膨胀。b）经 X 射线测定，在 912℃时γ-Fe 的晶格常数为 0.3633nm，α-Fe 的晶格常数为 0.2892nm，当由γ-Fe 转变为α-Fe，试求其体积膨胀，并与 a）相比较，说明其差别的原因。

答：



-7. a). 设晶格中有 n 个原子，由面心立方晶格中有 4 个原子，体心立方晶格中有 2 个原子，可知由面心立方晶格向体心立方晶格转变后，晶胞数将由 $\frac{n}{4}$ 变为 $\frac{n}{2}$.

令转变后的体积膨胀率为 $\Delta V\%$

则. $\Delta V\% = \frac{V_体 - V_面}{V_面} \times 100\%$

当原子直径不变时，设面心立方和体心立方晶格常数为 $a_面$、$a_体$.

则. $V_体 = \frac{n}{2} a_体^3$，此时：$4R = \sqrt{3}a$.

$\Rightarrow V_体 = \frac{n}{2} \times (\frac{4}{3}\sqrt{3}R)^3 = \frac{32}{9}\sqrt{3} \cdot R^3 \cdot n$. ①

$V_面 = \frac{n}{4} a_面^3$，此时：$4R = \sqrt{2}a$

$\Rightarrow V_体 = \frac{n}{4} \times (2\sqrt{2}R)^3 = 4\sqrt{2}R^3 \cdot n$. ②

将①.②代入 $\Delta V\%$ 中，可得：$\Delta V\% \approx 8.9\%$.

b). 按照晶格常数计算体积膨胀率：

$\Delta V\% = \frac{V_体 - V_面}{V_面} \times 100\% = \left(\frac{\frac{n}{2} \cdot (a_体)^3}{\frac{n}{4} \cdot (a_面)^3} - 1\right) \times 100\%$

$\approx 0.89\%$.

与 a) 相比，实际体积膨胀约为理论膨胀的 1/10.

c). 原因：由 X 射线结果：$a_面 = 0.3633$，而 $4R = \sqrt{2}a$.

$\Rightarrow R_面 = \frac{\sqrt{2}}{4} a_面 \approx 0.1284nm$.

$a_体 = 0.2892$，而 $4R = \sqrt{3}a$.

$\Rightarrow R_体 = \frac{\sqrt{3}}{4} a_体 \approx 0.1252nm$.

由此可以说明在面心立方晶格向体心立方晶格转变过程中，Fe 原子的原子半径发生了变化，并不遵守刚体模型，从而导致实际体积膨胀率要远小于钢球模型的理论膨胀率。

1-10 已知铁和铜在室温下的晶格常数分别为 0.286nm 和 0.3607nm，求 1cm³ 中铁和铜的原子数。

解：

已知铁在室温下是体心立方晶格，每个体心立方晶胞共占有 2 个 Fe 原子

铜在室温下是面心立方晶格，每个面心立方晶胞共占有 4 个 Cu 原子。

已知铁在室温下的晶格常数为 0.286nm，

所以每个体心立方晶胞的体积=（0.286）^{3}=0.0234nm^3