

理工科考研辅导系列 (化学科学类)

材料科学

「知识精要与 真题详解」

主 编 张彩丽
副主编 孙 华

赠送
圣才学习卡
20元

圣才学习网: www.100xuexi.com
圣才考研网: www.100exam.com

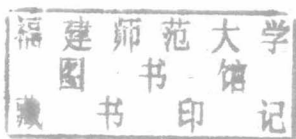


中国水利水电出版社
www.waterpub.com.cn

理工科考研辅导系列（化学科学类）

材料科学知识精要与真题详解

主 编 张彩丽
副主编 孙 华



1040950



T1040950



中国水利水电出版社

www.waterpub.com.cn

内 容 提 要

全书分为 10 章, 每章包括三部分内容。第一部分是重点与难点解析, 第二部分是名校考研真题详解, 第三部分是名校期末考试真题详解。

本书精选了清华大学、上海交通大学、吉林大学、北京科技大学、四川大学、东北大学、中南大学、华中科技大学、北京理工大学、西北工业大学、浙江大学、西安交通大学、东南大学、哈尔滨工业大学、天津大学、湖南大学、西南交通大学、南京大学、南京理工大学、南京航空航天大学、北京工业大学、重庆大学、山东大学、厦门大学、武汉理工大学、合肥工业大学、昆明理工大学、沈阳大学、江苏大学、燕山大学、武汉科技大学、哈尔滨理工大学等院校, 近年的材料科学基础(含金属材料科学基础、无机材料科学基础)、金属学与热处理、材料结构与相变等科目考研和期末考试真题, 并进行了详细解答。

网学天地(www.e-studysky.com)是本书的支持网站, 提供全国各高校考研视频讲解课件, 包括历年真题与答案讲解、考点重点讲解、典型题精讲等。本书和网学天地(www.e-studysky.com)的配套网络课程特别适合备战考研和大学期末考试的读者, 对于参加相关专业同等学力考试、自学考试、资格考试的考生也具有很高的参考价值。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学知识精要与真题详解 / 张彩丽主编. -- 北京: 中国水利水电出版社, 2012. 8
理工科考研辅导系列. 化学科学类
ISBN 978-7-5084-9948-2

I. ①材… II. ①张… III. ①材料科学—高等学校—自学参考资料 IV. ①TB3

中国版本图书馆CIP数据核字(2012)第177901号

书 名	理工科考研辅导系列(化学科学类) 材料科学知识精要与真题详解
作 者	主 编 张彩丽 副主编 孙 华
出版发行	中国水利水电出版社 (北京市海淀区玉渊潭南路1号D座 100038) 网址: www.waterpub.com.cn E-mail: sales@waterpub.com.cn
经 售	电话: (010) 68367658 (发行部) 北京科水图书销售中心(零售) 电话: (010) 88383994、63202643、68545874 全国各地新华书店和相关出版物销售网点
排 版	北京圣才时代教育科技有限公司
印 刷	北京市北中印刷厂
规 格	184mm×260mm 16开本 22.5印张 562千字
版 次	2012年8月第1版 2012年8月第1次印刷
印 数	0001—3000册
定 价	55.00元

凡购买我社图书, 如有缺页、倒页、脱页的, 本社发行部负责调换
版权所有·侵权必究

前 言

高校考研专业课的历年试题一般没有提供答案，虽然各校所用参考教材各异，但万变不离其宗，很多考题也是大同小异。我们参考相关教材和资料，收集和整理了众多高校历年考研真题和期末考试试题，并进行了详细的解答，以减少大家寻找试题及整理答案的痛苦，让读者用最少的的时间获得最多的重点题、难点题（包括参考答案），这是本书的目的所在。

本书精选了清华大学、上海交通大学、吉林大学、北京科技大学、四川大学、东北大学、中南大学、华中科技大学、北京理工大学、西北工业大学、浙江大学、西安交通大学、东南大学、哈尔滨工业大学、天津大学、湖南大学、西南交通大学、南京大学、南京理工大学、南京航空航天大学、北京工业大学、重庆大学、山东大学、厦门大学、武汉理工大学、合肥工业大学、昆明理工大学、沈阳大学、江苏大学、燕山大学、武汉科技大学、哈尔滨理工大学等院校，近年的材料科学基础（含金属材料科学基础、无机材料科学基础）、金属学与热处理、材料结构与相变等科目考研和期末考试真题，并进行了详细解答。

全书共 10 章，每章基本包括三部分内容。第一部分主要是根据各高校的教学大纲、考试大纲等，对本章的重点和难点进行归纳，并进行简要解析；第二部分主要是精选知名院校近年的考研真题，并进行详细解答；第三部分主要是精选知名院校近年的本科期末考试真题，并进行详细解答。本书具有如下主要特点：

(1) 难点归纳，简明扼要。每章前面均对本章的重点难点进行了整理。综合众多参考教材，归纳了本章几乎所有的考点，便于读者复习。

(2) 所选题目均为知名院校近年的考研或期末考试真题，这些题目具有很强的代表性。通过这些真题及其详解，读者可以把握相关院校考研和期末考试的出题特点和解题要求。

(3) 对所有考试真题均进行了详细解答。了解历年真题不是目的，关键是要通过真题解答掌握和理解相关知识点。本书不但精选了真题，同时还对所有的真题均进行了详细解答。

(4) 题量较大，来源广泛。主要选自 30 余所高校的历年考研真题、名校题库以及从众多教材和相关资料编写而成。可以说本书的试题都经过了精心挑选，博选众书，取长补短。

本书由张彩丽任主编，孙华任副主编，此外，孙驰、辛灵轩、宋云娥、陈敬龙、王晓晨、许明波、李荣彪、柯嫣、李兴存、刘凯、杨倩倩、段浩、赵玲玲、吴义东、潘丽繁、段辛云、卫少华、段辛雷、殷超凡、吕珍珍、孔利娜、徐新猛、任丽华、张娟、李宏等也参与了本书编写和部分试题解答工作。由于题量较大，解答详细，错误、遗漏不可避免，诚请读者指正，不妥之处和建议可与编者联系，不甚感激。

网学天地 (www.e-studysky.com) 是本书的支持网站，提供全国各高校考研视频讲解课件，包括历年真题与答案讲解、考点重点讲解、典型题精讲等。本书和网学天地 (www.e-studysky.com) 的配套网络课程特别适合备战考研和大学期末考试的读者，对于参加相关专业同等学力考试、自学考试、资格考试的考生也具有很高的参考价值。

编者

2012 年 5 月

目 录

前言	
第一章 原子结构与键合	1
第一节 重点与难点解析	1
第二节 考研真题详解	2
第三节 期末考试真题详解	5
第二章 固体结构	6
第一节 重点与难点解析	6
第二节 考研真题详解	12
第三节 期末考试真题详解	44
第三章 晶体缺陷	53
第一节 重点与难点解析	53
第二节 考研真题详解	62
第三节 期末考试真题详解	91
第四章 固体中原子及分子的运动	95
第一节 重点与难点解析	95
第二节 考研真题详解	99
第三节 期末考试真题详解	115
第五章 材料的形变和再结晶	117
第一节 重点与难点解析	117
第二节 考研真题详解	127
第三节 期末考试真题详解	165
第六章 单组元相图及纯晶体的凝固	169
第一节 重点与难点解析	169
第二节 考研真题详解	173
第三节 期末考试真题详解	189
第七章 二元系相图及合金的凝固	193
第一节 重点与难点解析	193
第二节 考研真题详解	204
第三节 期末考试真题详解	250
第八章 三元相图	260
第一节 重点与难点解析	260
第二节 考研真题详解	266
第三节 期末考试真题详解	277
第九章 材料的亚稳态	279

第一节	重点与难点解析.....	279
第二节	考研真题详解.....	283
第三节	期末考试真题详解.....	286
第十章	材料的功能特性.....	290
第一节	重点与难点解析.....	290
第二节	考研真题详解.....	293
第三节	期末考试真题详解.....	298
附 录	300
附录 1	清华大学 2009 年《材料科学基础》考研试题与答案.....	300
附录 2	吉林大学 2010 年《材料科学基础》考研试题与答案.....	306
附录 3	中南大学 2009 年《材料科学基础》考研试题与答案.....	314
附录 4	北京科技大学 2010 年《材料科学基础》考研试题与答案.....	318
附录 5	天津大学 2010 年《金属材料科学基础》考研试题与答案.....	324
附录 6	上海交通大学 2007 年《材料科学基础》考研试题与答案.....	332
附录 7	华中科技大学 2007 年《材料科学基础》考研试题与答案.....	336
附录 8	北京理工大学 2008 年《材料科学基础》考研试题与答案.....	339
附录 9	东北大学 2009 年《材料科学基础》考研试题与答案.....	345
附录 10	重庆大学 2011 年《金属学及热处理》考研试题与答案.....	349

第一章 原子结构与键合

第一节 重点与难点解析

一、原子结构

1. 物质的组成

一切物质都是由无数微粒按一定的方式聚集而成的。这些微粒可能是分子、原子或离子。原子结构直接影响原子间的结合方式。

2. 原子的结构

原子是由质子和中子组成的原子核，以及核外的电子所构成的。原子的体积很小，直径约为 10^{-10}m 数量级，而其原子核直径更小，仅为 10^{-15}m 数量级。原子的质量主要集中在原子核内。每个质子和中子的质量大致为 $1.67 \times 10^{-24}\text{g}$ ，而电子的质量约为 $9.11 \times 10^{-28}\text{g}$ ，仅为质子的 $1/1836$ 。

3. 原子的电子结构

描述原子中一个电子的空间位置和能量可用四个量子数表示。多电子的原子中，核外电子的排布规律遵循三原则，即能量最低原理、Pauli 不相容原理和 Hund 规则。

4. 元素周期表

具有相同核电荷数的同一类原子为一种元素。元素周期表是元素周期律的具体表现形式，它反映了元素之间相互联系的规律，元素在周期表中的位置反映了该元素的原子结构和一定的性质。

二、原子间的键合

1. 金属键

金属中的自由电子和金属正离子相互作用所构成的键合称为金属键，其基本特点是电子的共有化。

金属键既无饱和性又无方向性，因而每个原子有可能与更多的原子相结合，并趋于形成低能量的密堆结构。当金属受力变形而改变原子之间的相互位置时，不至于使金属键破坏，这就使金属具有良好的延展性，并且，由于自由电子的存在，金属一般都具有良好的导电性和导热性。

2. 离子键

大多数盐类、碱类和金属氧化物主要以离子键的方式结合。离子键键合的基本特点是以离子而不是以原子为结合单元。一般离子晶体中正负离子静电引力较强，结合牢固，因此其熔点和硬度均较高。另外，在离子晶体中很难产生自由运动的电子，因此，它们都是良好的电绝缘体，但当处在高温熔融状态时，正负离子在外电场作用下可以自由运动，即呈现离子导电性。

3. 共价键

共价键是两个或多个电负性相差不大的原子间通过共用电子对而形成的化学键。共价键键合的基本特点是核外电子云达到最大的重叠，形成“共用电子对”，有确定的方位，且配位数较小。

共价键在亚金属（碳、硅、锡、锗等）、聚合物和无机非金属材料中均占有重要地位。共

价键晶体中各个键之间都有确定的方位，配位数比较小。共价键的结合极为牢固，故共价晶体具有结构稳定、熔点高、质硬脆等特点。共价形成的材料一般是绝缘体，其导电性能差。

4. 范德华力

范德华力属于物理键，系一种次价键，没有方向性和饱和性，比化学键的键能少 1~2 个数量级。不同的高分子聚合物有不同的性能，分子间的范德华力不同是一个重要因素。

5. 氢键

氢键是一种特殊的分子间作用力。它是由氢原子同时与两个电负性很大而原子半径较小的原子（O、F、N 等）相结合而产生的具有比一般次价键大的键力，具有饱和性和方向性。氢键在分子材料中特别重要。

三、高分子链

高分子结构包括高分子链结构和聚集态结构两方面。链结构又分近程结构和远程结构。近程结构属于化学结构，又称一级结构。远程结构又称二级结构，是指单个高分子的大小和形态、链的柔顺性及分子在各种环境中所采取的构象，图 1-1 是单个高分子的几种构象图。

1. 高分子链的近程结构

(1) 链结构单元的化学组成。单体通过聚合反应连接而成的链状分子，称为高分子链，高分子中的重复结构单元的数目称为聚合度。

(2) 分子结构。一般高分子都是线性的，分子链长可以蜷曲成团，也可以伸展成直线。

(3) 共聚物的结构。由两种或两种以上单体单元所组成的高分子称为共聚物。不同的共聚物结构，对材料性能的影响也各不相同。

(4) 高分子链的构型。链的构型是指分子中由化学键所固定的几何排列，这种排列是稳定的，要改变构型必须经过化学键的断裂和重组。

构型不同的异构体有旋光异构和几何异构两种。

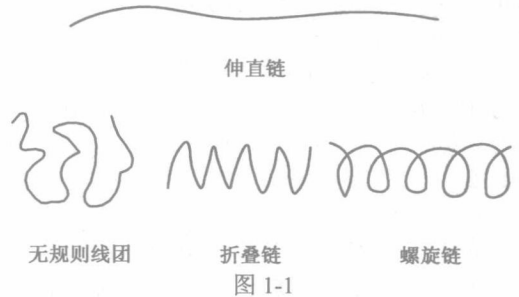
2. 高分子链的远程结构

(1) 高分子的大小。高分子的相对分子质量不是均一的，它实际上是由结构相同、组成相同但相对分子质量大小不同的同系高分子的混合物聚集而成。低聚物转向高分子时，强度有规律地增大。但增长到一定的相对分子质量后，这种依赖性又变得不明显了，强度逐渐趋于一极限值。

(2) 高分子的内旋转构象。单键是由 σ 电子组成，线型高分子链中含有成千上万个 σ 电子。由于分子上非键合原子之间的相互作用，内旋转一般是受阻的，即旋转时需要消耗一定的能量。高分子链的内旋转也像低分子一样，因受链上的原子或基团的影响不是完全自由的。它既表现出一定的柔性，又表现出一定的刚性。

(3) 影响高分子链柔性的主要因素。高分子链能够改变其构象的性质称为柔性。

影响高分子链柔性的主要因素有：①主链结构，对高分子链的刚柔性的影响起决定性的作用；②取代基，取代基团的极性、取代基沿分子链排布的距离、取代基在主链上的对称性和取代基的体积等对高分子链的柔性均有影响；③交联的影响。



第二节 考研真题详解

【1-1】（上海交通大学 2006 年考研试题）从高分子的重复结构单元的对称性可知，最易结晶的是（ ）。

- A. 聚丙烯 B. 聚乙烯 C. 聚苯乙烯

答案: B

【1-2】(上海交通大学 2006 年考研试题) 高分子的主链结构对单键内旋转有重要影响。下列最易单键内旋转的主链结构是 ()。

- A. Si-O 键 B. C-C 键 C. C-O 键

答案: A

【1-3】(上海交通大学 2005 年考研试题) 化学键中既无方向性又无饱和性的为 ()。

- A. 共价键 B. 金属键 C. 离子键

答案: B

【1-4】(上海交通大学 2005 年考研试题) 高分子材料存在不同构象的主要原因是主链上的碳原子可以 ()。

- A. π 键的自旋转 B. σ 键的自旋转 C. 氢键的自旋转

答案: B

【1-5】(浙江大学 2007 年考研试题) 高分子结构单元连接时 ()。

- A. 链节间通常一二次分子力(范氏力)结合
B. 链节间的键合有时为饱和共价键(一次键)结合,有时为二次分子力(范氏力等)结合
C. 大分子间或同一大分子不同链段间仅靠二次分子力(范氏力等)结合

答案: C

【1-6】(浙江大学 2006 年考研试题) 空间电子的意义为 ()。

- A. 晶体中杂质原子的分布规律 B. 晶体中原子或分子的空间规则排列
C. 晶体中与原子或分子的电荷空间分布规律

答案: B

【1-7】(浙江大学 2006 年考研试题) 大多数实际材料键合的特点是 ()。

- A. 几种键合形式同时存在 B. 以离子键的形式存在 C. 以金属键的形式存在

答案: A

【1-8】(浙江大学 2006 年考研试题) 原子间的吸引与排斥作用随原子间的间距不同而不同,原子间距不同时,起主要作用的作用力是不一样的,有 ()。

- A. 吸引力在原子十分接近时起主要作用
B. 吸引力在远距离时起主要作用 C. 排斥力在远距离时起主要作用

答案: B。吸引力是远程力,在远距离是起主要作用;排斥力是近程力,在近距离是起主要作用。

【1-9】(浙江大学 2006 年考研试题) 极性共价键的形成条件若以成键两原子间电负性差来表示时,其电负性差值为 ()。

- A. $0.7 \leq \Delta x < 1.7$ B. $\Delta x < 0.5$ C. $\Delta x = |x_a - x_b| < 0.7$

答案: A。金属键形成的条件是 $\Delta x < 0.5$, 离子键形成的条件是 $\Delta x \geq 1.7$, 共价键形成的条件是 $0.7 \leq \Delta x < 1.7$

【1-10】(浙江大学 2006 年考研试题) 高分子非晶态的无规线团模型中,分子链总和在溶液中一样,呈无规线团状,线团之间是无规则缠结,在分子链间存在额外空隙,即所谓的自由体积。高分子非晶态中 ()。

- A. 自由体积越大,分子排列得越疏松,密度越小
B. 自由体积越大,分子排列得越疏松,密度越大
C. 自由体积变化与密度无关

答案: A

【1-11】(西安交通大学 2009 年考研试题) 名词解释: 高分子材料与陶瓷材料。

答: 将那些由众多原子或原子团主要以共价键结合而成的相对分子量在 1 万以上的化合物称为高分子化合物, 以有机高分子化合物为基础的材料称为高分子材料。

陶瓷材料是用天然或合成化合物经过成形和高温烧结制成的一类无机非金属材料。它具有高熔点、高硬度、高耐磨性、耐氧化性等优点。

【1-12】(南京航空航天大学 2008 年考研试题) 什么是高分子合金? 高分子合金的制备方法有哪些?

答: 高分子合金又称多组元聚合物, 是指含有两种或多种高分子链的复合体系, 包括接枝共聚物、嵌段共聚物, 以及各种共混物等。正如由不同金属混合制得合金一样, 其目的是通过高分子间的物理、化学组合获得更多样化的高分子材料, 使它们具有更高的综合性能, 因此把这种高分子复合体系形象地称为高分子合金。

高分子合金的制备方法可分为以下几类: ①加聚反应, 包括均加聚反应和共加聚反应; ②缩聚反应, 一种或多种单体互相混合链接成聚合物, 同时析出某种低分子物质的反应称为缩聚反应; ③物理共混法。又称机械共混法, 是将不同种类的高分子在混合设备中实现共混的方法, 共混过程一般包括混合作用和分散作用; ④化学共混法, 主要有共聚-共混法和互穿网络聚合法。

【1-13】(南京航空航天大学 2007 年考研试题) 简述高分子链在溶液中的构象。

答: 单个高分子链的模型是无规统计线团。在溶液中, 高分子链也卷曲成无规统计线团。但线团所占的体积要比纯高分子线团占有的体积大得多。这是因为这些线团是被溶剂化的, 即它们被溶剂所饱和。被线团所吸收的溶剂称为内含溶剂或束缚溶剂。在稀溶液中, 除了内含溶剂之外, 还有自由溶剂, 当然, 这两种溶剂可通过扩散而达到稳定的平衡。由此可见, 在溶液中高分子以被溶剂饱和的线团形式存在。由于线团中空隙的毛细管力控制着线团内的溶剂, 使其成为一个整体而跟随线团一起运动, 也就是说, 线团和存在于线团内的溶剂, 可以成为一个运动单元。在稀溶液中除了线团的移动和转动外, 还有线团链段的连续运动。其结果是线团的构象不断变化着。其最可能的构象是黄豆状的椭圆体。

【1-14】(吉林大学 2009 年考研试题) 名词解释: 离子键。

答: 离子键是通过两个或多个原子或化学基团失去或获得电子而成为离子后形成的。带相反电荷的离子之间存在静电作用, 当两个带相反电荷的离子靠近时, 表现为相互吸引, 而电子和电子、原子核与原子核之间又存在着静电排斥作用, 当静电吸引与静电排斥作用达到平衡时, 便形成离子键。因此, 离子键是阳离子和阴离子之间由于静电作用所形成的化学键。

【1-15】(北京工业大学 2009 年考研试题) 名词解释: 共价键。

答: 共价键是指由两个或多个电负性相差不大的原子间通过共用电子对而形成的化学键, 具有饱和性和方向性。

【1-16】(北京工业大学 2008、重庆大学 2010 年考研试题) 名词解释: 金属键。

答: 金属中的自由电子与金属正离子相互作用构成的键合称为金属键。绝大多数的金属均以金属键方式结合, 基本特点是电子共有化, 既无饱和性又无方向性。

【1-17】(昆明理工大学 2010 年考研试题) 试从结合键的角度, 分析工程材料的分类及其特点。

答: 从结合键的角度划分, 工程材料主要包括: ①金属材料, 主要以金属键为主, 大多数金属强度和硬度较高, 塑性较好; ②陶瓷材料, 以共价键和离子键为主, 硬、脆, 不易变形, 熔点高; ③高分子材料, 分子内部以共价键为主, 分子间为分子键和氢键为主; ④复合材料, 是以上三种基本材料的人工复合物, 结合键种类繁多, 性能差异很大。

第三节 期末考试真题详解

【1-18】（北京科技大学 2005—2006 学年第 1 学期期末试题）给出一个 d 电子（角量子数 $l=2$ ）的轨道角动量、自旋角动量的大小，该电子的轨道角动量在 z 轴上的分量可能有哪些数值？

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

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

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

【1-19】（北京科技大学 2005—2006 学年第 1 学期期末试题）固体材料中，内层电子状态通常用哪些量子数描述？外层电子状态通常使用的量子数有哪些？

答：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。

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。

【1-20】（四川大学 2005—2006 学年第 1 学期期末试题、厦门大学 2007 级期末试题）原子的结合键有哪几种？各有什么特点？

答：原子的结合键有：

（1）离子键。其特点是：正负离子相互吸引；键合很强，无饱和性，无方向性；熔点、硬度高，固态不导电，导热性差。

（2）共价键。其特点是：相邻原子通过共用电子对结合；键合强，有饱和性，有方向性；熔点、硬度高，不导电，导热性有好有差。

（3）金属键。其特点是：金属正离子与自由电子相互吸引；键合较强，无饱和性，无方向性；熔点、硬度有高有低，导热导电性好。

（4）分子键。其特点是：分子或分子团显弱电性，相互吸引；键合很弱，无方向性；熔点、硬度低，不导电，导热性差。

（5）氢键。其特点是：类似分子键，但氢原子起关键作用；键合弱，有方向性；熔点、硬度低，不导电，导热性好。

第二章 固体结构

第一节 重点与难点解析

一、晶体学基础

1. 空间点阵和晶胞

(1) 晶胞。具有代表性的基本单元(最小平行六面体)作为点阵的组成单元,称为晶胞。将晶胞作三维的重复堆砌就构成了空间点阵。

(2) 空间点阵。为了便于分析研究晶体中质点的排列规律性,可先将实际晶体结构看成完整无缺的理想晶体并简化,将其中每个质点抽象为规则排列于空间的几何质点,称之为阵点。这些阵点在空间呈周期性规则排列并具有完全相同的周围环境,这种由它们在三维空间规则排列的阵列称为空间点阵,简称点阵。

同一空间点阵可因选取方式不同而得到不相同的晶胞。

(3) 布拉菲点阵。根据 6 个点阵参数间的相互关系,可将全部空间点阵归属于 7 种类型,即 7 个晶系。按照“每个阵点的周围环境相同”的要求,布拉菲(Bravais A.)用数学方法推导出能够反映空间点阵全部特征的单位平面六面体只有 14 种,这 14 种空间点阵也称为布拉菲点阵,如表 2-1 所列。

表 2-1 布拉菲点阵

布拉非点阵	晶系	布拉非点阵	晶系
简单三斜	三斜	简单六方	六方
简单单斜 底心单斜	单斜	简单菱方	菱方
简单正交 底心正交 体心正交 面心正交	正交	简单四方 体心四方	四方

2. 晶向指数和晶面指数

晶向是指空间点阵中各阵点列的方向,晶面是指通过空间点阵中任意一组阵点的平面。为了便于确定和区别晶体中不同方位的晶向和晶面,国际上通用密勒(Miller)指数来统一标定晶向指数与晶面指数。

(1) 晶向指数。晶向指数的确定步骤如下:①以晶胞的某一阵点 O 为原点,过原点 O 的晶轴为坐标轴 x 、 y 、 z ,以晶胞点阵矢量的长度作为坐标轴的长度单位;②过原点 O 作一直线 OP ,使其平行于待定晶向;③在直线 OP 上选取距原点 O 最近的一个阵点 P ,确定 P 点的 3 个坐标值;④将这 3 个坐标值化为最小整数 u 、 v 、 w ,加以方括号, $[uvw]$ 即为待定晶向的晶向指数。

(2) 晶面指数。晶面指数标定步骤如下:①在点阵中设定参考坐标系,设置方法与确定晶向指数时相同;②求得待定晶面在三个晶轴上的截距,若该晶面与某轴平行,则在此轴上的截距为无穷大;若该晶面与某轴负方向相截,则在此轴上截距为一负值;③取各截距的倒数;④将三倒数化为互质的整数比,并加上圆括号,即表示该晶面的指数,记为 (hkl) 。

晶面指数所代表的不仅是某一晶面,而是代表着一组相互平行的晶面。另外,在晶体内

凡晶面间距和晶面上原子的分布完全相同，只是空间位向不同的晶面可以归并为同一晶面族，以 $\{hkl\}$ 表示，它代表由对称性相联系的若干组等效晶面的总和。

(3) 六方晶系指数。六方晶系的晶向指数和晶面指数同样可以应用上述方法标定，但是为了更好地表达其对称性，根据六方晶系的对称特点，对六方晶系采用 a_1 、 a_2 、 a_3 及 c 四个晶轴， a_1 、 a_2 、 a_3 之间的夹角均为 120° ，如图 2-1 所示。这样，其晶面指数就以 $(hkil)$ 四个指数来表示。

根据几何学可知，三维空间独立的坐标轴最多不超过三个。前三个指数中只有两个是独立的，它们之间存在以下关系： $i = -(h+k)$ 。

采用 4 轴坐标时，晶向指数的确定原则仍同前述，晶向指数可用 $\{uvw\}$ 来表示，这里 $u+v=-t$ 。

(4) 晶带。所有平行或相交于同一直线的这些晶面构成一个晶带，此直线称为晶带轴。属此晶带的晶面称为晶带面。

晶带轴 $[uvw]$ 与该晶带的晶面 (hkl) 之间存在以下关系： $hu+kv+lw=0$ 。

凡满足此关系的晶面都属于以 $[uvw]$ 为晶带轴的晶带，故此关系式也称作晶带定律。

(5) 晶面间距。由晶面指数还可求出晶面间距 d_{hkl} 。通常，低指数的晶面间距较大，而高指数的晶面间距则较小。

3. 晶体的对称性

(1) 对称元素。晶体的对称元素可分为宏观和微观两类。宏观对称元素反映出晶体外形和其宏观性质的对称性。而微观对称元素与宏观对称元素配合运用就能反映出晶体中原子排列的对称性。

1) 宏观对称元素：①回转对称轴。当晶体绕某一轴回转而能完全复原时，此轴即为回转对称轴。注意该轴线定要通过晶格单元的几何中心，且位于该几何中心与角顶或棱边的中心或面心的连线上。在回转一周的过程中，晶体能复原 n 次，就称为 n 次对称轴；②对称面。晶体通过某一平面作镜像反映而能复原，则该平面称为对称面或镜面；③对称中心。若晶体中所有的点在经过某一点反演后能复原，则该点就称为对称中心，用符号 i 表示；④回转-反演轴。若晶体绕某一轴回转一定角度，再以轴上的一个中心点作反演之后能得到复原时，此轴称为回转-反演轴。

2) 微观对称元素：①滑动面。一个对称面加上沿着此面的平移所组成，晶体结构可借此面的反映并沿此面平移一段距离而复原；②螺旋轴。回转轴和平行于轴的平移所构成。

(2) 32 种点群。点群是指一个晶体中所有点对称元素的集合。点群在宏观上表现为晶体外形的对称。利用组合定理可导出晶体外形中只能有 32 种对称点群。

4. 极射投影

(1) 极射投影原理。先在参考球中选定一条过球心的直线 AB （直线），过 A 点作一平面与参考球相切，该平面即为投影面，也称极射面。若球面上有一极点 P ，连接 BP 并延长之，使其与投影面相交于 P' ， P' 即为极点 P 在投影面上的极射投影。过球心作一平面 $N'E'S'W'$ 与 AB 垂直（与投影面平行），它在球面上形成一个直径与球径相等的圆称大圆。大圆在投影面上的投影为 $N'E'S'W'$ 也是一个圆，称为基圆。

所有位于左半球球面上的极点，投影后的极射投影点均将落在基圆之内。然后将投影面移至 B 点，并以 A 点为投影点，将所有位于右半球球面上的极点投射到位于 B 处的投影面上，并冠以负号。最后将 A 处和 B 处的极射投影图重叠地画在一张图上。这样，球面上所有可能

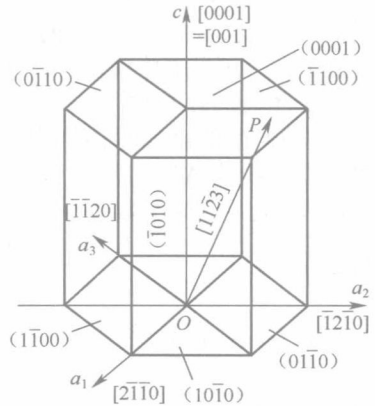


图 2-1 六方晶系一些晶向、晶面指数

出现的极点，都可以包括在同一张极射投影图上。

(2) 乌尔夫网。分析晶体的极射投影时，乌尔夫网是很有用的工具。

(3) 标准投影。以晶体的某个晶面平行于投影面上作出全部主要晶面的极射投影图称为标准投影。一般选择一些重要的低指数的晶面作为投影面，这样得到的图形能反映晶体的对称性。立方晶系常用的投影面是 (001)、(110) 和 (111)；六方晶系则为 (0001)。

二、金属的晶体结构

1. 三种典型的金属晶体结构

面心立方结构 A1 或 fcc、体心立方结构 A2 或 bcc 和密排六方结构 A3 或 hcp 三种。

(1) 晶胞中的原子数。

$$\text{面心立方结构: } n = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4;$$

$$\text{体心立方结构: } n = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2;$$

$$\text{密排六方结构: } n = 12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} + 3 = 6。$$

(2) 点阵常数与原子半径。晶胞的大小一般是由晶胞的棱边长度 (a, b, c) 即点阵常数来衡量的，它是表征晶体结构的一个重要基本参数。

如果把金属原子看作刚性球，并设其半径为 r ，根据几何学关系不难求出三种典型金属晶体结构的点阵常数与 r 之间的关系。

$$\text{面心立方结构: } r = \sqrt{2}a/4;$$

$$\text{体心立方结构: } r = (\sqrt{3}/4)a;$$

$$\text{密排六方结构: } r = \frac{a}{2} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} \right)。$$

(3) 配位数和致密度：①配位数 (CN)，是指晶体结构中任一原子周围最近邻且等距离的原子数；②致密度，是指晶体结构中原子体积占总体积的百分比。如以一个晶胞来计算，则致密度就是晶胞中原子体积与晶胞体积之比值。

综上，总结出三种典型金属结构的晶体学特点，如表 2-2 所示。

表 2-2 三种典型金属结构的晶体学特点

晶体类型	体心立方 bcc	面心立方 fcc	密排六方 hcp
晶胞中的原子数	2	4	6
原子半径	$\sqrt{3}a/4$	$\sqrt{2}a/4$	$r = \frac{a}{2} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} \right)$
配位数	8	12	12
最密排面和最密排方向	{110} <111>	{111} <110>	{0001} <11 $\bar{2}$ 0>
原子堆垛方式	ABABAB...	ABCABC...	ABABAB...
四面体间隙半径/原子半径	0.29	0.225	0.225
八面体间隙半径/原子半径	0.15	0.414	0.414

2. 晶体的原子堆垛方式和间隙

(1) 三种典型晶体的原子堆垛方式。

1) 体心立方晶体：原子面的空隙是有四个原子所构成的，原子排列的紧密程度较差，通常称为次密排面，原子堆垛方式为 ABABAB...

2) 面心立方晶体: 原子面的空隙是有三个原子所构成的, 原子排列较为紧密, 原子堆垛方式为 ABCABCABC…。

3) 密排六方晶体: 密排六方晶格的密排面{0001}, 原子堆垛方式为 ABABABAB…。

(2) 三种典型晶体的间隙。体心立方晶体、面心立方晶体、密排六方晶体三者皆含有四面体和八面体两种间隙。利用几何关系可求出三种晶体结构中四面体和八面体间隙的数目和尺寸大小, 计算结果如表 2-3 所示。

3. 多晶型性

有些固态金属在不同的温度和压力下具有不同的晶体结构即具有多晶型性, 转变的产物称为同素异构体。例如, 铁在 912℃以下为体心立方结构, 称为 α -Fe; 在 912~1394℃具有面心立方结构, 称为 γ -Fe; 温度超过 1394℃至熔点间又变成体心立方结构, 称为 δ -Fe。由于不同晶体结构的致密度不同, 当金属由一种晶体结构变为另一种晶体结构时, 将伴随有质量体积的跃变即体积的突变。

表 2-3 三种典型晶体中的间隙

晶体结构	八面体间隙		四面体间隙	
	间隙数/原子数	r_B/r_A	间隙数/原子数	r_B/r_A
bcc	3	0.155	6	0.291
fcc	1	0.414	2	0.225
hcp	1	0.414	2	0.225

三、合金相结构

所谓合金是指由两种或两种以上的金属或金属与非金属经熔炼、烧结或其他方法组合而成并具有金属特性的物质。组成合金的基本的独立的物质称为组元。组元可以是金属和非金属元素, 也可以是化合物。

固态下所形成的合金相基本上可分为固溶体和中间相两大类。

1. 固溶体

固溶体是以某一组元为溶剂, 在其晶体点阵中溶入其他组元原子(溶质原子)所形成的均匀混合的固态溶体, 它保持着溶剂的晶体结构类型。

(1) 置换固溶体。当溶质原子溶入溶剂中形成固溶体时, 溶质原子占据溶剂点阵的阵点, 或者说溶质原子置换了溶剂点阵的部分溶剂原子, 这种固溶体就称为置换固溶体。金属元素彼此之间一般都能形成置换固溶体, 但溶解度视不同元素而异, 有些能无限溶解, 有的只能有限溶解。

影响溶解度的因素主要取决于四个方面: ①晶体结构; ②原子尺寸; ③化学亲和力(电负性); ④原子价。

(2) 间隙固溶体。溶质原子分布于溶剂晶格间隙而形成的固溶体称为间隙固溶体。

影响间隙固溶度的因素包括: 溶质原子大小及溶剂中间隙的形状和大小。一般说来, 间隙溶解度都是较小的。

(3) 固溶体的微观不均匀性。事实上, 完全无序的固溶体是不存在的。可以认为, 在热力学上处于平衡状态的无序固溶体中, 溶质原子的分布在宏观上是均匀的, 但在微观上并不均匀。在一定条件下, 它们甚至会呈有规则分布, 形成有序固溶体。这时溶质原子存在于溶质点阵中的固定位置上, 而且每个晶胞中的溶质和溶剂原子之比也是一定的。有序固溶体的点阵结构有时也称超结构。

(4) 固溶体的性质。和纯金属相比, 由于溶质原子的溶入导致固溶体的点阵常数改变, 产生固溶强化及力学性能、物理和化学性能产生了不同程度的变化。

2. 中间相

中间相可以是化合物, 也可以是以化合物为基的固溶体(第二类固溶体或称二次固溶体)。

中间相通常可用化合物的化学分子式表示。大多数中间相中原子间的结合方式属于金属键与其他典型键（如离子键、共价键和分子键）相混合的一种结合方式。它们都具有金属性。

(1) 正常价化合物。

形成：电负性差起主要作用，符合原子价规则。

键型：随电负性差的减小，分别形成离子键、共价键、金属键。

(2) 电子化合物。

形成：电子浓度起主要作用，不符合原子价规则。

键型：金属键（金属—金属）。

(3) 原子尺寸因素有关的化合物。

形成：尺寸因素起主要作用。

结构：包括简单间隙化合物（间隙相），如面心立方 VC（碳化钒）， $r_X/r_M < 0.59$ ；复杂间隙化合物：主要是铁、钴、铬、锰的化合物，如 Fe_3C ， $r_X/r_M > 0.59$ 。

组成：可用化学式表示，可形成固溶体，复杂间隙化合物的金属元素可被置换。

键型：共价键和金属键。

(4) 超结构（有序固溶体）：对某些成分接近于一定的原子比得无序固溶体中，当它从高温缓冷到某一临界温度以下时，溶质原子会从统计随即分布状态过渡到占有有一定位置的规则排列状态，即发生有序化过程，形成有序固溶体。

(5) 金属间化合物的性质和应用。

力学性能：高硬度、高强度、低塑性。

物化性能：具有电学、磁学、声学性质等，可用于半导体材料、形状记忆材料、储氢材料等。

1) 具有超导性质的金属间化合物，如 Nb_3Ge 、 Nb_3Al 、 Nb_3Sn 、 V_3Si 、 NbN 等。

2) 具有特殊电学性质的金属间化合物，如 InTe-PbSe 、 GaAs-ZnSe 等在半导体材料用。

3) 具有强磁性的金属间化合物，如稀土元素（Ce, La, Sm, Pr, Y 等）和 Co 的化合物，具有特别优异的永磁性能。

4) 具有奇特吸释氢本领的金属间化合物（常称为贮氢材料），如 LaNi_5 、 FeTi 、 R_2Mg_{17} 和 $\text{R}_2\text{Ni}_2\text{Mg}_{15}$ 。（R 代表稀土 La, Ce, Pr, Nd 或混合稀土）是一种很有前途的储能和换能材料。

5) 具有耐热特性的金属间化合物，如 Ni_3Al 、 NiAl 、 TiAl 、 Ti_3Al 、 FeAl 、 Fe_3Al 、 MoSi_2 、 NbBe_{12} 、 ZrBe_{12} 等不仅具有很好的高温强度，并且在高温下具有比较好的塑性。

6) 耐蚀的金属间化合物，如某些金属的碳化物、硼化物、氮化物和氧化物等在侵蚀介质中仍很耐蚀，若通过表面涂覆方法，可大大提高被涂覆件的耐蚀性能。

7) 具有形状记忆效应、超弹性和消震性的金属间化合物，如 TiNi 、 CuZn 、 CuSi 、 MnCu 、 Cu_3Al 等已在工业上得到应用。

四、离子晶体结构

陶瓷材料属于无机非金属材料，是由金属与非金属元素通过离子键或兼有离子键和共价键的方式结合起来的。陶瓷的晶体结构大多属离子晶体。

1. 离子晶体的结构规则

(1) 负离子配位多面体规则。在离子晶体中，正离子的周围形成一个负离子配位多面体，正负离子间的平衡距离取决于离子半径之和，而正离子的配位数则取决于正负离子的半径比。这是鲍林第一规则。将离子晶体结构视为由负离子配位多面体按一定方式连接而成，正离子则处于负离子多面体的中央，故配位多面体才是离子晶体的真正结构基元。

离子晶体中，正离子的配位数通常为 4 和 6，但也有少数为 3，8，12。

(2) 电价规则。在一个稳定的离子晶体结构中，每个负离子的电价 Z_- 等于或接近等于与之相邻的各正离子静电强度 S 的总和。这就是鲍林第二规则，也称电价规则。

(3) 负离子多面体共用顶、棱和面的规则。鲍林第三规则指出, 在一配位结构中, 共用棱特别是共用面的存在, 会降低这个结构的稳定性。对于电价高, 配位数低的正离子来说, 这个效应尤为显著。

(4) 不同种类正离子配位多面体间连接规则。鲍林第四规则认为, 在含有一种以上正离子的离子晶体中, 一些电价较高, 配位数较低的正离子配位多面体之间, 有尽量互不结合的趋势。

(5) 节约规则。鲍林第五规则指出, 在同一晶体中, 同种正离子与同种负离子的结合方式应最大限度地趋于一致。因为在一个均匀的结构中, 不同形状的配位多面体很难有效堆积在一起。

2. 典型的离子晶体结构

离子晶体按其化学组成为二元化合物和多元化合物。其中二元化合物中介绍 AB 型, AB_2 型和 A_2B_3 型化合物; 多元化合物中主要有 ABO_3 型和 AB_2O_4 型。

(1) AB 型化合物结构: 主要有 CsCl 型结构; NaCl 型结构; 立方 ZnS 型结构; 六方 ZnS 型结构。

(2) AB_2 型化合物结构: CaF_2 (萤石) 型结构; TiO_2 (金刚石) 型结构; β -方石英 (方晶石) 型结构。

(3) A_2B_3 型化合物结构。以 $\alpha-Al_2O_3$ 为代表的刚玉型结构, 是 A_2B_3 型的典型结构。

(4) ABO_3 型化合物结构: $CaTiO_3$ (钙钛矿) 型结构; 方解石 ($CaCO_3$) 型结构。

(5) AB_2O_4 型化合物结构: AB_2O_4 型化合物中最重要的化合物是尖晶石 ($MgAl_2O_4$)。

3. 硅酸盐的晶体结构

(1) 孤岛状硅酸盐的结构: 含有限 Si-O 团的硅酸盐, 包括含孤立 Si-O 团和含成对或环状 Si-O 团两类。

(2) 链状硅酸盐的结构: Si-O 团共顶连接成一维结构, 又含单链和双链两类。

(3) 层状硅酸盐的结构: Si-O 团底面共顶连接成二维结构。

(4) 架状硅酸盐的结构: Si-O 团共顶连接成三维结构。

五、共价晶体结构

元素周期表中 IV, V, VI 族元素、许多无机非金属材料 and 聚合物都是共价键结合。共价晶体的共同特点是配位数服从 $8-N$ 法则小为原子的价电子数, 这就是说结构中每个原子都有 $8-N$ 个最近邻的原子。

共价晶体最典型代表是金刚石结构。

金刚石是碳的一种结晶形式。这里, 每个碳原子均有 4 个等距离 (0.154nm) 的最近邻原子, 全部按共价键结合, 符合 $8-N$ 规则。其晶体结构属于复杂的面心立方结构, 碳原子除按通常的 fcc 排列外, 立方体内还有 4 个原子, 它们的坐标分别为 $(1/4, 1/4, 1/4)$ 、 $(3/4, 3/4, 1/4)$ 、 $(3/4, 1/4, 3/4)$ 、 $(1/4, 3/4, 3/4)$, 相当于晶内其中 4 个四面体间隙中心的位置。故晶胞内共含 8 个原子。实际上, 该晶体结构可视为两个面心立方晶胞沿体对角线相对位移 $1/4$ 距离穿插而成。

六、聚合物的晶体结构

聚合物聚集态结构分为晶态结构 and 非晶态 (无定形) 结构两种类型, 且有两个不同于低分子物质聚集态的明显特点: ① 聚合物晶态总是包含一定量的非晶相; ② 聚合物聚集态结构不但与大分子链本身的结构有关, 而且还强烈地依赖于外界条件, 如温度对结晶过程有很大影响, 应力也可加速结晶。

(1) 聚合物的晶体形态。主要形态有单晶、片晶、球晶、树枝状晶、孪晶、纤维状晶 and 串晶等。

(2) 聚合物晶态结构的模型。樱状微束模型, 折叠链模型, 伸直链模型, 串晶的结构模