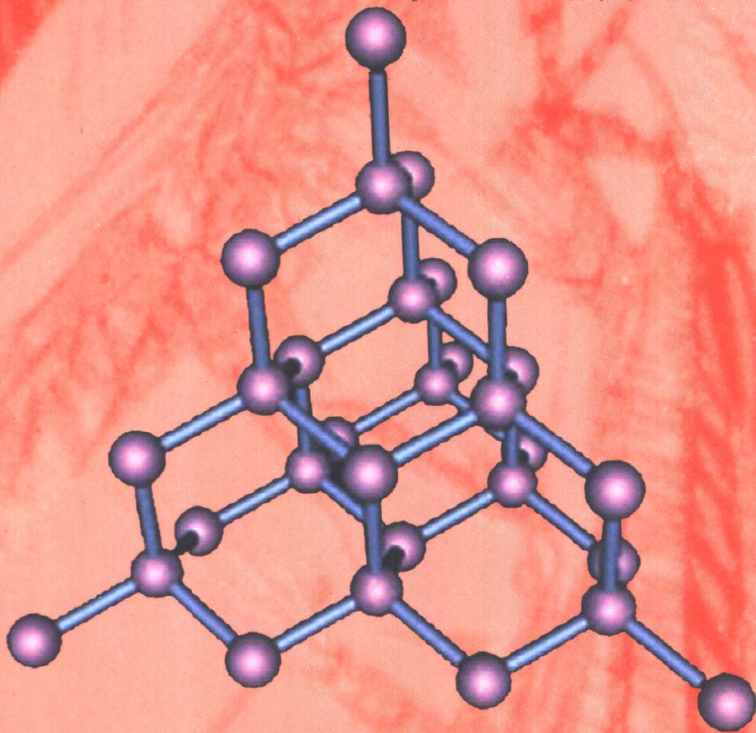


材料科学基础 辅导与习题

CAILIAO KEXUE JICHU FUDAO YUXITI

蔡 珣 戎咏华 编著



上海交通大学出版社

材料科学基础 辅导与习题

蔡 珣 戎咏华 编著

上海交通大学出版社

内 容 简 介

本书是根据《材料科学基础》教材编写的配套教学辅导材料。全书共分9章,内容包括材料的微观结构、晶体缺陷、原子及分子的运动、材料的形变和再结晶、相平衡及相图、材料的亚稳态等。书中既概括总结了各章的主要内容、重点与难点,以及重要概念和公式,又从不同的角度出发,提出问题作为学生的习题作业,以帮助巩固消化和加深理解所学的书本知识。为了便于复习参考,书后附有各章的参考答案,以及近4年的上海交通大学“材料科学基础”专业硕士研究生入学考试试题(附答案)和可供查阅参考的大量资料。因此,本书除可供材料和冶金类师生、科技人员参考外,还可作为远程教学、网上学习效果自我测评和考研的辅导材料。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学基础辅导与习题/蔡珣,戎咏华编著. —上海:上海交通大学出版社,2003

ISBN 7-313-03412-1

I. 材… II. ①蔡… ②戎… III. 材料科学-高等学校-教学参考资料 IV. TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 049044 号

材料科学基础辅导与习题

蔡 珣 戎咏华 编著

上海交通大学出版社出版发行

(上海市番禺路 877 号 邮政编码 200030)

电话: 64071208 出版人: 张天蔚

立信会计出版社常熟市印刷联营厂印刷 全国新华书店经销

开本: 787mm×1092mm 1/16 印张: 16 字数: 393 千字

2003 年 8 月第 1 版 2003 年 8 月第 1 次印刷

印数: 1~3 050

ISBN 7-313-03412-1/TB·064 定价: 20.00 元

版权所有 侵权必究

前 言

本着拓宽专业范围,按专业大类培养人才的基本思路,上海交通大学出版社2000年出版了由胡赓祥、蔡珣主编的上海普通高校“九五”重点教材《材料科学基础》。2002年,蔡珣和陈秋龙又根据国家教育部现代远程教育资源建设委员会关于新世纪网络课程建设的要求,制作了材料科学基础网络课程软件。为了配合该课程的教学,并应广大学生的要求,我们在多年教学实践的基础上,参阅了国内外有关书籍,编著了与《材料科学基础》配套的习题及辅导材料。本书可供材料和冶金类专业师生,以及从事科研、生产方面的科研技术人员参考,也可满足远程教学网上学习效果自我测试的需要。另外,它也可作为报考材料和冶金类学科研究生复习思考的辅导读物。

全书共分9章,并按上海交通大学出版社2000年出版的《材料科学基础》教材的章节顺序编排。第1,2,3,5章和附录由蔡珣教授编写,第4,6,7,8章和硕士研究生入学考试试题参考解答由戎詠华教授编写,第9章则由蔡珣和胡赓祥教授共同编写。为了便于学习参考,书后还附有近几年材料类研究生入学考试试题,常用物理常数,国际制常用单位,若干废弃单位与国际制(SI)单位的关系,应力与压强国际单位与英制单位的转换,摄氏与华氏温度对照表,元素周期表,元素电子结构、晶系、点群、空间群,晶面间距计算公式,晶体结构,常用材料有关性能数据,常用高分子材料链节结构和玻璃化转变温度及开始熔化温度,以及常用无机材料光学性质等有关数据。

郭正洪副教授校核了戎詠华的全部书稿内容,并参加了2002年硕士研究生入学考试试题部分解答和2003年试题全部解答的工作,特致谢意。

作者水平有限,不妥或谬误之处在所难免,敬请批评指正!

作者

2003年3月于上海

目 录

第 1 章 原子结构与键合	1
内容提要.....	1
重点与难点.....	2
重要概念.....	2
习题.....	2
第 2 章 固体结构	5
内容提要.....	5
重点与难点.....	6
重要概念和公式.....	6
习题.....	7
第 3 章 晶体缺陷	11
内容提要	11
重点与难点	12
重要概念和公式	12
习题	14
第 4 章 原子及分子的运动	18
内容提要	18
重点与难点	19
重要概念和公式	20
习题	21
第 5 章 材料的形变和再结晶	25
内容提要	25
重点与难点	26
重要概念和公式	26
习题	27
第 6 章 单组元相图及纯晶体的凝固	32
内容提要	32
重点与难点	33

重要概念和公式	34
习题	34
第 7 章 二元合金相图及其凝固	36
内容提要	36
重点与难点	39
重要概念和公式	39
习题	40
第 8 章 三元相图	46
内容提要	46
重点与难点	48
重要概念和公式	48
习题	48
第 9 章 材料的亚稳态	52
内容提要	52
重点与难点	52
重要概念和公式	53
习题	53
习题参考答案	56
思考、讨论题	125
上海交通大学 2000~2003 年硕士研究生入学考试《材料科学基础》	
试题及其参考解答	127
上海交通大学 2001 年(港、澳、台地区)硕士研究生入学考试《材料科学基础》	
试题及其参考解答	149
附录	155
1. 常用物理常数	155
2. 国际单位制(SI)有关内容简介	155
3. 若干废弃单位与国际制(SI)单位的关系	158
4. 应力与压强国际单位与英制单位的转换	159
5. 摄氏与华氏温度对照表	161

6. 元素周期表	166
7. 元素的电子结构	167
8. 7 个晶系和 14 种布拉菲点阵	169
9. 32 种空间点群	170
10. 230 个晶体空间群	171
11. 晶体的晶面间距与晶面夹角的计算公式	174
12. 元素的晶体结构	174
13. 元素的物理性能	177
14. 常用材料的性能	180
15. 国内外常用钢号对照表	185
16. 常用高分子材料的链节结构	188
17. 常用高分子材料的玻璃化转变温度和开始熔化温度	191
18. 常用高分子材料英文缩写	192
19. 无机材料的光学性质	198
20. 无机材料中常见矿物的光学性质一览表	212
参考文献	246

第1章 原子结构与键合

内容提要

物质是由原子组成的,而原子是由位于原子中心的带正电的原子核和核外高速旋转带负电的电子所构成的。在材料科学中,一般人们最关心的是原子结构中的电子结构。

电子在核外空间做高速旋转运动时,就好像带负电荷的云雾笼罩在原子核周围,故形象地称它为电子云。电子既具有粒子性又具有波动性,即具有二象性。电子运动没有固定的轨道,但可根据电子的能量高低,用统计方法判断其在核外空间某一区域内出现的几率的大小。根据量子力学理论,电子的状态是用波函数来描述的,原子中一个电子的空间位置和能量可用4个量子数表示:

(1) 主量子数 n ——决定原子中电子能量,以及与核的平均距离,即表示电子所处的量子壳层;

(2) 轨道角动量子数 l_i ——给出电子在同一量子壳层内所处的能级(电子亚层);

(3) 磁量子数 m_i ——给出每个轨道角动量数的能级数或轨道数;

(4) 自旋角动量子数 s_i ——反映电子不同的自旋方向。

在多电子的原子中,核外电子的排布规律遵循以下三个原则:

(1) 能量最低原理——电子的排布总是先占据能量最低的内层,再由内向外进入能量较高的壳层,尽可能使体系的能量最低。

(2) Pauli 不相容原理——在一个原子中不可能有运动状态完全相同的两个电子,主量子数为 n 的壳层,最多容纳 $2n^2$ 个电子。

(3) Hund 规则——在同一亚层中的各个能级中,电子的排布尽可能分占不同的能级,而且自旋的方向相同。当电子排布为全充满、半充满或全空时,此时是比较稳定的,并且整个原子的能量最低。

元素周期表反映了元素的外层电子结构随着原子序数(核中带正电荷的质子数)的递增,呈周期性变化的规律。可根据元素在周期表中的位置,推断它的原子结构和特定的性质。

原子与原子之间是依靠结合键聚集在一起的。由于原子间结合键的不同,故可将材料分为金属、无机非金属和高分子材料。原子的电子结构决定了原子键合的本身,原子间的结合键可分为化学键和物理键两大类。化学键即主价键,它包括金属键、离子键和共价键3种:

(1) 金属键,绝大多数金属均为金属键方式结合,它的基本特点是电子的共有化;

(2) 离子键,大多数盐类、碱类和金属氧化物,主要以离子键方式结合,这种键的基本特点是以离子而不是以原子为结合单位;

(3) 共价键,在亚金属(C, Si, Sn, Ge 等)、聚合物和无机非金属材料中,共价键占有重要的地位,它的主要特点是共用电子对。

物理键为次价键,也称范德华力,在高分子材料中占着重要作用。它是借助瞬时的、微弱

的电偶极矩的感应作用,将原子或分子结合在一起的键合。它包括静电力、诱导力和色散力。

此外还有一种氢键,它是一种极性分子键,存在于 HF, H₂O, NH₃ 等分子间。其结合键能介于化学键与物理键之间。

由于高分子材料的相对分子质量可高达几十万甚至上百万,所包含的结构单元可能不止一种,每一种结构单元又具有不同的构型,而且结构单元之间可能有不同键接方式与序列,故高分子的结构相当复杂。

高分子结构包括高分子键结构和聚集态结构。键结构又分近程结构和远程结构。近程结构属于化学结构,又称一次结构,它是指大分子链中原子的类型和排列,结构单元的键接顺序、支化、交联,以及取代基在空间的排布规律等。远程结构又称二次结构,它是指高分子的大小与形态、键的柔顺性及分子在各种环境中所采取的构象。

重点与难点

- (1) 描述原子中电子的空间位置和能量的 4 个量子数。
- (2) 核外电子排布遵循的原则。
- (3) 元素性质、原子结构和该元素在周期表中的位置三者之间的关系。
- (4) 原子间结合键分类及其特点。
- (5) 高分子链的近程和远程结构。

重要概念

分子,原子;

主量子数 n , 轨道角动量量子数 l , 磁量子数 m , 自旋角动量量子数 s ;

能量最低原理, Pauli 不相容原理, Hund 规则;

元素, 元素周期表, 周期, 族;

结合键, 金属键, 离子键, 共价键, 范德华力, 氢键;

高分子链, 近程结构, 结构单元, 线性、支化、交联和三维网络分子结构;

无规、交替、嵌段和接枝共聚物;

全同立构, 间同立构, 无规立构, 顺式、反式构型;

远程结构, 数均、重均相对分子质量, 聚合度;

热塑性、热固性塑料。

习题

- 1-1 原子中一个电子的空间位置和能量可用哪 4 个量子数来决定?
- 1-2 在多电子的原子中, 核外电子的排布应遵循哪些原则?
- 1-3 在元素周期表中, 同一周期或同一主族元素原子结构有什么共同特点? 从左到右或从上到下元素结构有什么区别? 性质如何递变?
- 1-4 何谓同位素? 为什么元素的相对原子质量不总为正整数?

- 1-5 铬的原子序数为 24,它共有 4 种同位素:4.31%的 Cr 原子含有 26 个中子,83.76%含有 28 个中子,9.55%含有 29 个中子,且 2.38%含有 30 个中子。试求铬的相对原子质量。
- 1-6 铜的原子序数为 29,相对原子质量为 63.54,它共有两种同位素 Cu^{63} 和 Cu^{65} ,试求两种铜的同位素之含量百分比。
- 1-7 锡的原子序数为 50,除了 4f 亚层之外,其他内部电子亚层均已填满。试从原子结构角度来确定锡的价电子数。
- 1-8 铂的原子序数为 78,它在 5d 亚层中只有 9 个电子,并且在 5f 层中没有电子,请问在 Pt 的 6s 亚层中有几个电子?
- 1-9 已知某元素原子序数为 32,根据原子的电子结构知识,试指出它属于哪个周期? 哪个族? 并判断其金属性的强弱。
- 1-10 原子间的结合键共有几种? 各自的特点如何?
- 1-11 图 1-11 绘出 3 类材料——金属、离子晶体和分子材料之能量与距离的关系曲线,试指出它们各代表何种材料。

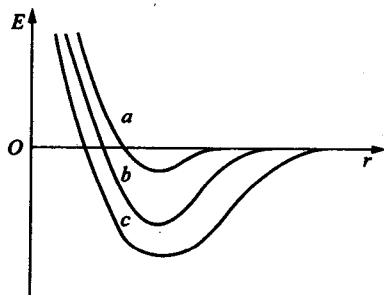


图 1-11

- 1-12 已知 Si 的相对原子质量为 28.09,若 100 g 的 Si 中有 5×10^{10} 个电子能自由运动,试计算:① 能自由运动的电子占价电子总数的比例是多少? ② 必须破坏的共价键之比例是多少?
- 1-13 S 的化学行为有时像 6 价的元素,而有时却像 4 价元素。试解释 S 这种行为的原因。
- 1-14 A 和 B 元素之间键合中离子特性所占的百分比可近似地用下式表示:
- $$IC(\%) = [1 - e^{-0.25(x_A - x_B)^2}] \times 100$$
- 式中 x_A 和 x_B 分别为 A 和 B 元素的电负性值。已知 Ti, O, In 和 Sb 的电负性分别为 1.5, 3.5, 1.7 和 1.9,试计算 TiO_2 和 InSb 的 $IC(\%)$ 。
- 1-15 Al_2O_3 的密度为 3.8 g/cm^3 ,试计算① 1 mm^3 中存在多少个原子? ② 1 g 中含有多少个原子?
- 1-16 尽管 HF 的相对分子质量较低,请解释为什么 HF 的沸腾温度(19.4°C)要比 HCl 的沸腾温度(-85°C)高?
- 1-17 高分子链结构分为近程结构和远程结构。他们各自包含的内容是什么?
- 1-18 高分子材料接受热的表现可分为热塑性和热固性两大类,试从高分子链结构角度加以解释。
- 1-19 分别绘出甲烷(CH_4)和乙烯(C_2H_4)的原子排列与键合。

- 1-20 高密度的聚乙烯可以通过氯化处理,即用氯原子来取代结构单元中氢原子的方法实现。若用氯取代聚乙烯中 8% 的氢原子,试计算须添加氯的质量分数。
- 1-21 高分子材料相对分子质量具有多分散性。聚氯乙烯相对分子质量分布表如下。试计算该材料的数均相对分子质量 \bar{M}_n ,重均相对分子质量 \bar{M}_w ,以及数均聚合度 n_n 。

分子量范围($\times 10^3$)	平均分子量 M_i	分子数分数 x_i	$x_i M_i$	质量分数 w_i	$w_i M_i$
5~10	7500	0.05	375	0.02	150
10~15	12500	0.016	2000	0.10	1250
15~20	17500	0.22	3850	0.18	3150
20~25	22500	0.27	6075	0.29	6525
25~30	27500	0.20	5500	0.26	7150
30~35	32500	0.08	2600	0.13	4225
35~40	37500	0.02	750	0.02	750

- 1-22 有一共聚物 ABS(A——丙烯腈,B——丁二烯,S——苯乙烯),每一种单体的质量分数均相同,求各单体的摩尔分数。
- 1-23 镶嵌金相试样用的是酚醛树脂类的热固性塑料。若酚醛塑料的密度为 1.4 g/cm^3 ,试求在 10 cm^3 的圆柱形试样中所含的分子质量为多少?
- 1-24 一有机化合物,其组成的 $w(\text{C})$ 为 62.1%, $w(\text{H})$ 为 10.3%, $w(\text{O})$ 为 27.6%。试推断其化合物名称。
- 1-25 尼龙-6 是 $\text{HOCO}(\text{CH}_2)_5\text{NH}_2$ 的缩聚反应的产物。① 用分子式表示其缩聚过程。② 已知 C-O,H-N,C-N,H-O 的键能分别为 360,430,305,500(kJ/mol),问形成 1 摩尔的 H_2O 时,所放出的能量为多少?

第 2 章 固体结构

内容提要

固态物质可分为晶体和非晶体两大类。

晶体的性能是与内部结构密切相关的。

为了便于了解晶体结构,首先引入一个“空间点阵”的概念。根据“每个阵点的周围环境相同”和 6 个点阵参数间的相互关系,可将晶体分为 7 个晶系,14 种布拉菲点阵。晶胞是能反映点阵对称性、具有代表性的基本单元(最小平行六面体),其不同方向的晶向和晶面可用密勒指数加以标注,并可采用极射投影方法来分析晶面和晶向的相对位向关系。

在晶体结构中,最常见的是面心立方(fcc)、体心立方(bcc)和密排六方(hcp)3 种典型结构,其中 fcc 和 hcp 系密排结构,具有最高的致密度和配位数。这 3 种典型结构的晶胞分别含有 4,2,6 个原子。利用刚球模型可以算出晶体结构中的间隙,以及点阵常数与原子半径之间的关系。

金属晶体的结合键是金属键,故往往由此构成具有高度对称性的简单晶体结构,如 fcc, bcc 和 hcp 等。但是,工业上广泛使用的金属材料绝大多数是合金。由于合金元素的加入,使形成的合金相结构变得复杂。合金组元之间的相互作用及其所形成的合金相的性质,主要是由它们各自的电化学因素、原子尺寸因素和电子浓度 3 个因素控制的。合金相基本上可分为固溶体和中间相两大类。

固溶体保持溶剂的晶体结构类型。根据溶质在固溶体点阵中的位置可分为置换固溶体和间隙固溶体;按固溶度则分为有限固溶体和无限固溶体;而按溶质在固溶体中的排布,则分为无序固溶体和有序固溶体;若按溶剂分类则有第一类固溶体和第二类固溶体。

中间相的晶体结构不同于其组元的结构,它通常可用化合物的化学分子式表示。中间相根据其主导影响因素可分为正常价化合物、电子化合物、间隙相与间隙化合物、拓扑密堆相等。

离子晶体是以正负离子为结合单元的,其结合键为离子键。Pauling 在实验基础上,用离子键理论归纳总结出离子晶体的如下结构规则:负离子配位多面体规则,电价规则,负离子多面体共用顶、棱和面的规则,不同种类正离子配位多面体间连接规则和节约规则等。它们在分析、理解晶体结构时简单明了,突出了结构的特点。

典型的离子晶体结构是 NaCl 型,自然界有几百种化合物都属于此种结构。它属于立方晶系, $Fm\bar{3}m$ 空间群,可以看做分别由 Na^+ 和 Cl^- 构成两个 fcc 结构相互在棱边上穿插而成。

在无机非金属材料中,硅酸盐晶体结构尤其复杂,有孤岛状、组群状、链状、层状和骨架状结构等。但它们有一个共同特点,即均具有 $[SiO_4]^{4-}$ 四面体,并遵循由此导出的硅酸盐结构定律。

共价晶体是以共价键结合的。共价晶体的共同特点是配位数服从 $8-N$ 法则(N 为原子的价电子数)。

最典型的共价晶体结构是金刚石结构。它属于复杂的 fcc 结构,可视为两个 fcc 晶胞沿体对角线相对位移 $1/4$ 距离穿插而成。

聚合物晶态结构是其聚集态结构(三次结构)中的一大类。由于大分子结构的缘故,聚合物的结晶是分子结晶,一个大分子可以贯穿若干个晶胞,结晶速度慢且存在结晶不完整性。

聚合物的晶态多种多样,主要有单晶、片晶、球晶、树枝状晶、孪晶和串晶等。由于聚合物的晶态结构相当复杂,可用缨状微束模型、折叠链模型、伸直链模型、串晶或球晶结构模型,以及 Hosemann 模型来加以描述。

固态物质中除各种晶体外,另有一大类称为非晶体。由于非晶态物质内的原子排列在三维空间中不具有长程有序和周期性,故决定了它在性质上是各向同性的,且没有固定的熔点(对玻璃而言,存在一个玻璃化转变温度)。但应注意固态物质虽有晶体和非晶体之分,然而在一定条件下,二者是可以相互转换的。

重点与难点

- (1) 选取晶胞的原则。
- (2) 7 个晶系,14 种布拉菲空间点阵的特征。
- (3) 晶向指数与晶面指数的标注。
- (4) 晶面间距的确定与计算。
- (5) 晶体的对称元素与 32 种点群。
- (6) 极射投影与 Wulff 网。
- (7) 3 种典型金属晶体结构的晶体学特点。
- (8) 晶体中的原子堆垛方式和间隙。
- (9) 固溶体的分类及其结构特点。
- (10) 影响固溶体固溶度的因素。
- (11) 超结构的类型和影响有序化的因素。
- (12) 中间相的分类及其结构特点。
- (13) 离子晶体的结构规则。
- (14) NaCl 型、 A_2B_2 型和硅酸盐晶体结构特点。
- (15) 金刚石型共价晶体结构特点。
- (16) 聚合物晶态结构模型、晶体形态及其结构特点。
- (17) 非晶态结构及其性能与晶体结构的区别。

重要概念和公式

晶体,非晶体;

晶体结构,空间点阵,阵点,晶胞,7 个晶系,14 种布拉菲点阵;

宏观对称元素,微观对称元素,点群,空间群;

极射投影,极点,吴氏网,标准投影;

晶向指数,晶面指数,晶向族,晶面族,晶带轴,共带面,晶面间距;

面心立方,体心立方,密排六方,多晶型性,同素异构体;
 点阵常数,晶胞原子数,配位数,致密度,四面体间隙,八面体间隙;
 合金,相,固溶体,中间相,短程有序参数 α ,长程有序参数 S ;
 置换固溶体,间隙固溶体,有限固溶体,无限固溶体,无序固溶体,有序固溶体;
 正常价化合物,电子化合物,电子浓度,间隙相,间隙化合物,拓扑密堆相;
 离子晶体,NaCl型结构,闪锌矿型结构,纤锌矿型结构,硅酸盐, $[\text{SiO}_4]^{4-}$ 四面体;
 共价晶体,金刚石结构;
 聚集态结构,球晶,缨状微束模型,折叠链模型,伸直链模型;
 玻璃,玻璃化转变温度

$[UVW]$ 与 $[uvw]$ 之间的互换关系:

$$\begin{cases} U = u - t, & V = v - t, & W = w \\ u = \frac{1}{3}(2U - V), & v = \frac{1}{3}(2V - U), & t = -(u + v), & w = W \end{cases}$$

晶带定律:

$$hu + kv + lw = 0$$

立方晶系晶面间距计算公式:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

六方晶系晶面间距计算公式:

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \left(\frac{l}{c} \right)^2}}$$

电子浓度计算公式:

$$\frac{e}{a} = \frac{A(100 - x) + Bx}{100}$$

习题

- 2-1 试证明四方晶系中只有简单四方点阵和体心四方点阵两种类型。
- 2-2 为什么密排六方结构不能称为一种空间点阵?
- 2-3 标出面心立方晶胞中(111)面上各点的坐标,并判断 $[\bar{1}10]$ 是否位于(111)面上,然后计算 $[\bar{1}10]$ 方向上的线密度。
- 2-4 标出具有下列密勒指数的晶面和晶向:① 立方晶系(421), $(\bar{1}23)$, (130) , $[2\bar{1}\bar{1}]$, $[311]$;
② 六方晶系 $(2\bar{1}\bar{1}1)$, $(1\bar{1}01)$, $(3\bar{2}\bar{1}2)$, $[2\bar{1}\bar{1}1]$, $[1\bar{2}13]$ 。
- 2-5 在立方晶系中画出 $\{111\}$ 晶面族的所有晶面,并写出 $\{123\}$ 晶面族和 $\langle 221 \rangle$ 晶向族中的全部等价晶面和晶向的密勒指数。
- 2-6 在立方晶系中画出以 $[001]$ 为晶带轴的所有晶面。
- 2-7 试证明在立方晶系中,具有相同指数的晶向和晶面必定相互垂直。
- 2-8 已知纯钛有两种同素异构体:低温稳定的密排六方结构 α -Ti 和高温稳定的体心立方结

构 β -Ti, 其同素异构转变温度为 882.5°C 。计算纯钛在室温 (20°C) 和 900°C 时晶体中 (112) 和 (001) 的晶面间距 (已知 $a_{\alpha}^{20^\circ\text{C}} = 0.2951\text{ nm}$, $c_{\alpha}^{20^\circ\text{C}} = 0.4679\text{ nm}$, $a_{\beta}^{900^\circ\text{C}} = 0.3307\text{ nm}$)。

- 2-9 试计算面心立方晶体的 (100), (110), (111) 等晶面的面间距和面致密度, 并指出面间距最大的面。
- 2-10 平面 A 在极射赤面投影图中为通过 NS 极和点 $0^\circ\text{N}, 20^\circ\text{E}$ 的大圆, 平面 B 的极点在 $30^\circ\text{N}, 50^\circ\text{W}$ 处, ① 求极射投影图上两极点 A, B 间的夹角。② 求出 A 绕 B 顺时针转过 40° 的位置。
- 2-11 ① 说明在 fcc 的 (001) 标准极射赤面投影图的外圆上, 赤道线上和 0° 经线上的极点的指数各有何特点? ② 在上述极图中标出 $(\bar{1}10)$, (011), (112) 极点。
- 2-12 根据标准的 (001) 极射赤面投影图指出在立方晶体中属于 $[110]$ 晶带轴的晶带, 除了已在图 2-12 中标出晶面外, 在 $(\bar{1}\bar{1}2)$, $(0\bar{1}2)$, $(\bar{1}13)$, $(1\bar{3}2)$, $(\bar{2}21)$ 晶面中哪些属于 $[110]$ 晶带?
- 2-13 不用极射投影图, 利用解析几何方法, 如何确定立方晶系中 ① 两晶向间的夹角 θ ; ② 两晶面的夹角 θ ; ③ 两晶面交线的晶向指数; ④ 两晶向所决定的晶面指数。
- 2-14 图 2-14 为 α -Fe 的 X 射线衍射谱, 所用 X 光波长 $\lambda = 0.1542\text{ nm}$, 试计算每个峰线所对应的晶面间距, 并确定其晶格常数。

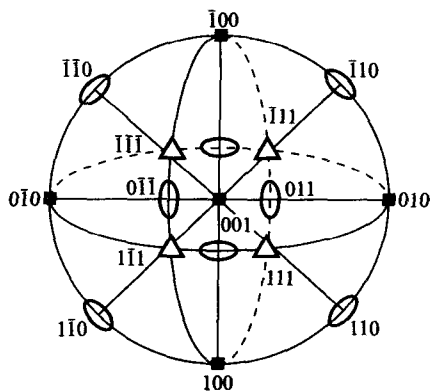


图 2-12

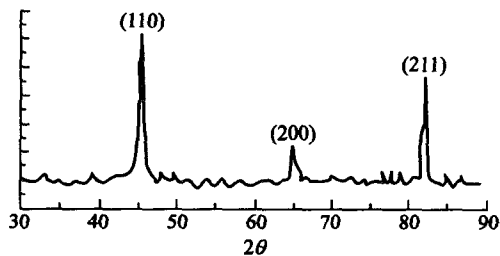


图 2-14

- 2-15 采用 Cu 的 k_{α} ($\lambda = 0.1542\text{ nm}$) 测得 Cr 的 X 射线衍射谱为首的 3 条谱线 $2\theta = 44.4^\circ$, 64.6° 和 81.8° , 若 (bcc) Cr 的晶格常数 $a = 0.2885\text{ nm}$, 试求对应这些谱线的密勒指数。
- 2-16 归纳总结 3 种典型的晶体结构的晶体学特征。
- 2-17 试证明理想密排六方结构的轴比 $\frac{c}{a} = 1.633$ 。
- 2-18 Ni 的晶体结构为面心立方结构, 其原子半径为 $r = 0.1243\text{ nm}$, 试求 Ni 的晶格常数和密度。
- 2-19 Mo 的晶体结构为体心立方结构, 其晶格常数 $a = 0.3147\text{ nm}$, 试求 Mo 的原子半径 r 。
- 2-20 Cr 的晶格常数 $a = 0.2884\text{ nm}$, 密度为 $\rho = 7.19\text{ g/cm}^3$, 试确定此时 Cr 的晶体结构。
- 2-21 In 具有四方结构, 其相对原子质量 $A_r = 114.82$, 原子半径 $r = 0.1625\text{ nm}$, 晶格常数

- $a=0.3252\text{ nm}$, $c=0.4946\text{ nm}$, 密度 $\rho=7.286\text{ g/cm}^3$, 试问 In 的单位晶胞内有多少个原子? In 的致密度为多少?
- 2-22 Mn 的同素异构体有一为立方结构, 其晶格常数 a 为 0.632 nm , ρ 为 7.26 g/cm^3 , r 为 0.122 nm , 问 Mn 晶胞中有几个原子, 其致密度为多少?
- 2-23 ① 按晶体的钢球模型, 若球的直径不变, 当 Fe 从 fcc 转变为 bcc 时, 计算其体积膨胀多少? ② 经 X 射线衍射测定, 在 $912\text{ }^\circ\text{C}$ 时, $\alpha\text{-Fe}$ 的 $a=0.2892\text{ nm}$, $\gamma\text{-Fe}$ 的 $a=0.3633\text{ nm}$, 计算从 $\gamma\text{-Fe}$ 转变为 $\alpha\text{-Fe}$ 时, 其体积膨胀为多少? 与①相比, 说明其产生差别的原因。
- 2-24 ① 计算 fcc 和 bcc 晶体中四面体间隙及八面体间隙的大小(用原子半径 R 表示), 并注明间隙中心坐标。② 指出溶解在 $\gamma\text{-Fe}$ 中 C 原子所处的位置, 若此位置全部被 C 原子占据, 那么, 问在此情况下, $\gamma\text{-Fe}$ 能溶解 C 的质量分数为多少? 实际上碳在铁中的最大溶解质量分数是多少? 二者在数值上有差异的原因是什么?
- 2-25 ① 根据下表所给之值, 确定哪一种金属可作为溶质与钛形成溶解度较大的固溶体:
- | | | |
|----|-----|---------------------|
| Ti | hcp | $a=0.295\text{ nm}$ |
| Be | hcp | $a=0.228\text{ nm}$ |
| Al | fcc | $a=0.404\text{ nm}$ |
| V | bcc | $a=0.304\text{ nm}$ |
| Cr | bcc | $a=0.288\text{ nm}$ |
- ② 计算固溶体中此溶质原子数分数为 10% 时, 相应的质量分数为多少?
- 2-26 Cu-Zn 和 Cu-Sn 组成固溶体最多可溶入多少原子数分数的 Zn 或 Sn? 若 Cu 晶体中溶入 Zn 的原子数分数为 10%, 最多还能溶入多少原子数分数的 Sn?
- 2-27 含 $w(\text{Mo})$ 为 12.3%, $w(\text{C})$ 为 1.34% 的奥氏体钢, 点阵常数为 0.3624 nm , 密度为 7.83 g/cm^3 , C, Fe, Mn 的相对原子质量分别为 12.01, 55.85, 54.94, 试判断此固溶体的类型。
- 2-28 渗碳体(Fe_3C)是一种间隙化合物, 它具有正交点阵结构, 其点阵常数 $a=0.4514\text{ nm}$, $b=0.508\text{ nm}$, $c=0.6734\text{ nm}$, 其密度 $\rho=7.66\text{ g/cm}^3$, 试求 Fe_3C 每单位晶胞中含 Fe 原子与 C 原子的数目。
- 2-29 试从晶体结构的角度, 说明间隙固溶体、间隙相及间隙化合物之间的区别。
- 2-30 试证明配位数为 6 的离子晶体中, 最小的正负离子半径比为 0.414。
- 2-31 MgO 具有 NaCl 型结构。 Mg^{2+} 的离子半径为 0.078 nm , O^{2-} 的离子半径为 0.132 nm 。试求 MgO 的密度(ρ)、致密度(K)。
- 2-32 某固溶体中含有 $x(\text{MgO})$ 为 30%, $x(\text{LiF})$ 为 70%。① 试计算 Li^{1+} , Mg^{2+} , F^{1-} 和 O^{2-} 的质量分数。② 若 MgO 的密度为 3.6 g/cm^3 , LiF 的密度为 2.6 g/cm^3 , 那么该固溶体的密度为多少?
- 2-33 铯与氯的离子半径分别为 0.167 nm , 0.181 nm , 试问: ① 在氯化铯内离子在 $\langle 100 \rangle$ 或 $\langle 111 \rangle$ 方向是否相接触? ② 每个单位晶胞内有几个离子? ③ 各离子的配位数是多少? ④ ρ 和 K 各为多少?
- 2-34 K^+ 和 Cl^- 的离子半径分别为 0.133 nm , 0.181 nm , KCl 具有 CsCl 型结构, 试求其 ρ 和 K 。

- 2-35 Al^{3+} 和 O^{2-} 的离子半径分别为 0.051 nm, 0.132 nm, 试求 Al_2O_3 的配位数。
- 2-36 ZrO_2 固体中, 每 6 个 Zr^{4+} 离子同时有 1 个 Ca^{2+} 离子加入就可能形成一立方体晶格 ZrO_2 。若此阳离子形成 fcc 结构, 而 O^{2-} 离子则位于四面体间隙位置。计算: ① 100 个阳离子需要有多少 O^{2-} 离子存在? ② 四面体间距位置被占据的百分比为多少?
- 2-37 试计算金刚石结构的致密度。
- 2-38 金刚石为碳的一种晶体结构, 其晶格常数 $a = 0.357 \text{ nm}$, 当它转换成石墨 ($\rho = 2.25 \text{ g/cm}^3$) 结构时, 求其体积的变化。
- 2-39 Si 具有金刚石型结构, 试求 Si 的四面体结构中两共价键间的夹角。
- 2-40 结晶态的聚乙烯分子结构如图 2-40 所示, 其晶格属斜方晶系, 晶格常数 $a = 0.74 \text{ nm}$, $b = 0.493 \text{ nm}$, $c = 0.253 \text{ nm}$, 两条分子链贯穿一个晶胞。① 试计算完全结晶态的聚乙烯的密度。② 若完全非晶态聚乙烯的密度为 0.9 g/cm^3 , 而通常商用的低密度聚乙烯的密度为 0.92 g/cm^3 , 高密度聚乙烯的密度为 0.96 g/cm^3 , 试估算上述两种情况下聚乙烯的结晶体积分数。
- 2-41 聚丙烯是由丙烯聚合而成的, 其化学式是 C_3H_6 , 结晶态聚丙烯属单斜晶系, 其晶格常数 $a = 0.665 \text{ nm}$, $b = 2.096 \text{ nm}$, $c = 0.65 \text{ nm}$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 99.3^\circ$, 其密度 $\rho = 0.91 \text{ g/cm}^3$ 。试计算结晶态聚丙烯的单位晶胞中 C 和 H 原子的数目。
- 2-42 已知线性聚四氟乙烯的数均相对分子质量为 5×10^5 , 其 C—C 键长为 0.154 nm, 键角 θ 为 109° , 试计算其总链长 L 和均方根长度。
- 2-43 何谓玻璃? 从内部原子排列和性能上看, 非晶态和晶态物质主要区别何在?
- 2-44 有一含有苏打的玻璃, SiO_2 的质量分数为 80%, 而 Na_2O 的质量分数为 20%。试计算形成非搭桥的 O 原子数分数。

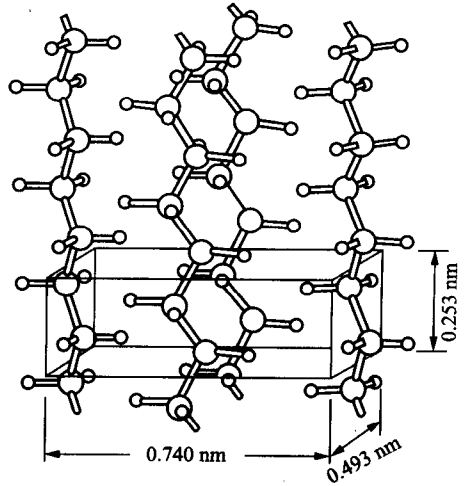


图 2-40 聚乙烯分子晶体的结构