

目录

| | |
|-----------------------|----|
| 导 论..... | 5 |
| 0.1 复习笔记..... | 5 |
| 0.2 名校考研真题..... | 6 |
| 第 1 章 材料结构的基本知识..... | 8 |
| 1.1 复习笔记..... | 8 |
| 1.2 名校考研真题详解..... | 13 |
| 第 2 章 材料中的晶体结构..... | 16 |
| 2.1 复习笔记..... | 16 |
| 2.2 名校考研真题详解..... | 22 |
| 第 3 章 高分子材料的结构..... | 28 |
| 3.1 复习笔记..... | 28 |
| 3.2 名校考研真题详解..... | 32 |
| 第 4 章 晶体缺陷..... | 34 |
| 4.1 复习笔记..... | 34 |
| 4.2 名校考研真题详解..... | 42 |
| 第 5 章 材料的相结构及相图..... | 50 |
| 5.1 复习笔记..... | 50 |
| 5.2 名校考研真题详解..... | 64 |
| 第 6 章 材料的凝固与气相沉积..... | 77 |
| 6.1 复习笔记..... | 77 |
| 6.2 名校考研真题详解..... | 85 |
| 第 7 章 扩散与固态相变..... | 92 |
| 7.1 复习笔记..... | 92 |

导论

0.1 复习笔记

一、材料的分类

工程材料按属性可分为四类：金属材料、陶瓷材料、高分子材料及由前三类相互组合而成复合材料；按使用性能可分为两大类：主要利用其力学性能的结构材料和主要利用其物理性能的功能材料。

1. 金属材料

(1) 金属材料中包括两大类型：钢铁材料和有色金属。有色金属主要包括铝合金、钛合金、铜合金、镍合金等；

(2) 在有色金属中，铝及其合金用得最多，这主要是因为铝及其合金的以下特性：

- ① 重量轻，只有钢的 1/3；
- ② 有好的导热性和导电性，在远距离输送的电缆中多用铝；
- ③ 耐大气腐蚀，可用来制作容器和包装品、建筑结构材料及导电材料。

2. 陶瓷材料

(1) 传统的陶瓷材料是由粘土、石英、长石等成分组成，主要作为建筑材料使用；

(2) 新型的结构陶瓷材料，其化学组成和制造工艺都大不相同，其成分主要是 Al_2O_3 、 SiC 、 Si_3N_4 等；

(3) 新型结构陶瓷在性能上的优点：

- ① 重量轻；
- ② 压缩强度高，可以和金属相比，甚至超过金属；
- ③ 熔点高，耐高温；
- ④ 耐磨性能好，硬度高；
- ⑤ 化学稳定性高，有很好的耐蚀性；
- ⑥ 电与热的绝缘材料。

(4) 新型结构陶瓷在性能上的缺点：

- ① 容易脆断；
- ② 不易加工成形。

3. 高分子材料

(1) 高分子材料又称聚合物；

(2) 按用途可分为：塑料、合成纤维和橡胶三大类型；

(3) 塑料又分为：通用塑料和工程塑料。

4. 复合材料

(1) 金属、聚合物、陶瓷自身都各有其优点和缺点，如把两种材料结合在一起，就产生了复合材料；

(2) 复合材料可分为三大类型：塑料基的复合材料、金属基和陶瓷基的复合材料；

5. 电子材料、光电子材料和超导材料

(1) 电子材料是指在电子学和微电子学中使用的材料，主要包括半导体材料、介电功能材料和磁性材料等；

(2) 光电子材料；

(3) 超导材料。

二、材料性能与内部结构的关系

1. 材料的性能

上述三种基本类型材料中，金属有好的导电性，有高的塑性与韧性；陶瓷材料则有高的硬度但很脆，且大多是电的绝缘材料；高分子材料的弹性模量、强度、塑性都很低，多数也是不导电的。

2. 内部结构关系

这些材料的不同性能都是由其内部结构决定的，从材料的内部结构来看，可分为四个层次：原子结构、结合键、原子的排列方式（晶体和非晶体）以及显微组织。

三、材料的制备与加工工艺对性能的影响

材料的性能取决于其内部结构，只有改变了材料的内部结构才能达到改变或控制材料性能的目的，而材料的制备和加工工艺常常对材料的性能起着决定性的作用。

四、什么是材料科学

材料科学是研究各种材料的结构、制备加工工艺与性能之间关系的科学。这一关系可用一四面体表示，如图 0-1 所示。

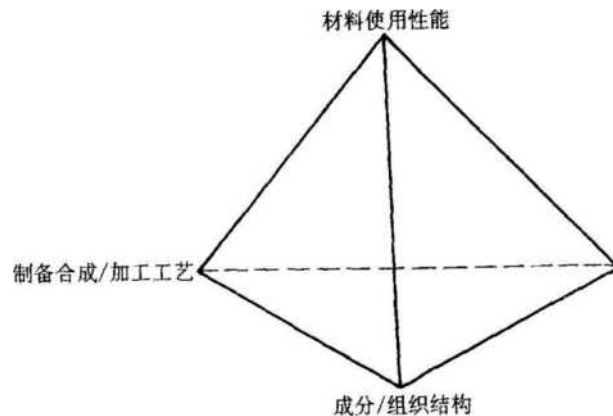


图 0-1 材料科学与工程四要素

0.2 名校考研真题

1. 试举例分析材料加工过程对材料使用性能的影响。 [中南大学 2007 研]

答：材料加工过程对材料使用性能有重要而复杂的影响，材料也必须通过合理的工艺流程才能制备出具有实用价值的材料来。通过合理和经济的合成和加工方法，可以不断创制出许多新材料或改变和精确控制许多传统材料的成分和结构，可以进一步发掘和提高材料的性能。

材料的制备/合成和加工不仅赋予材料一定的尺寸和形状，而且是控制材料成分和结构的必要手段。如钢材可以通过退火、淬火、回火等热处理来改变它们内部的结构而达到预期的性能，冷轧硅钢片经过复杂的加工工序能使晶粒按一定取向排列而大大减少铁损。

2. 任意选择一种材料，说明其可能的用途和加工过程。 [中南大学 2007 研]

答：如 Al-Mg 合金。作为一种可加工、不可热处理强化的结构材料，由于具有良好的焊接性能、优良的耐腐蚀性能和塑性，在飞机、轻质船用结构材料、运输工业的承力零件和化工用焊接容器等方面得到了广泛的应用。

根据材料使用目的，设计合金成分，考虑烧损等情况进行配料，如 Al5Mg 合金板材，实验室条件下可在电阻炉中 750°C 左右进行合金熔炼，精炼除气、除渣后 720°C 金属型铸造，430~470°C 均匀化退火 10-20h 后，在 380-450°C 热轧，再冷轧至要求厚度，在电阻炉中进行稳定化处理，剪切成需要的尺寸或机加工成标准试样，进行各种组织、性能测试。

3. 说说你对材料的成分、组织、工艺与性能之间关系的理解。 [中南大学 2007 研]

答：材料的成分、组织、工艺与性能之间的关系非常紧密，互相影响。材料的性能与它们的化学成分和组织结构密切相关，材料的力学性能往往对结构十分敏感，结构的任何微小变化，都会使性能发生明显变化。

如钢中存在的碳原子对钢的性能起着关键作用，许多金属材料中一些极微量的合金元素也足以严重影响其性能。然而由同一元素碳构成的不同材料如石墨和金刚石，也有着不同的性能，有些高分子的化学成分完全相同而性能却大不一样，其原因是它们有着不同的内部结构。

材料的内部结构可分为不同层次，包括原子结构、原子的排列方式，以及显微组织和结构缺陷。如果同样的晶体材料，它的晶粒或是“相”的形态和分布改变，就可以大大地改善它的性能。无论是金属、陶瓷、半导体、高分子还是复合材料，它们的发展都与成分和结构密切相关。只有理解和控制材料的结构，才能得到人们所要求的材料性能。

而材料的制备/合成和加工不仅赋予材料一定的尺寸和形状，而且是控制材料成分和结构的必要手段。如钢材可以通过退火、淬火、回火等热处理来改变它们内部的结构而达到预期的性能，冷轧硅钢片经过复杂的加工工序能使晶粒按一定取向排列而大大减少铁损。有时候可以说没有一种合成加工上的新的突破，就没有某一种新材料。如有了快速冷却的加工方法，才有了非晶态的金属合金。

1. 谈谈你所了解的新材料、新工艺。 [中南大学 2007 研]

答:材料的种类繁多,把那些已经成熟且在工业中已批量生产并大量应用的材料称之为传统材料或基础材料。而把那些正在发展,且具有优异性能和应用前景的一类材料称之为先进材料或新材料。

传统材料通过采用新技术、提高性能可以成为新材料,新材料经过长期生产和应用之后也就成为传统材料。目前新材料往往与新的加工技术联系在一起,如通过一种快速冷却或机械合金化等加工方法,可以制备非晶态的金属合金,而在这之前人们不知道金属还可以做成非晶态;其他如喷射沉积技术、半固态加工技术、净形薄带连续铸造技术等都是新的加工技术。

其中铝合金制备新技术有:热顶铸造、气隙铸造及电磁铸造技术,铝合金电磁铸轧技术,大型铝合金型材挤压技术,特宽铝合金中厚板轧制技术,半固态金属成形技术,铝合金显微组织结构预测及性能控制技术。

2. 欧盟于 2006 年 7 月 1 日开始正式执行的 RoHS 指令(现已成为法令)要求禁止哪些有害物质?其最高允许含量分别是多少?替代有铅钎料的主要钎料系统有哪些? [清华大学 2008 研]

答:禁用铅(Pb, 0.1%)、汞(Hg, 0.1%)、镉(Cd, 0.01%)、六价铬(Cr⁶⁺, 0.1%)、多溴联苯(PBB, Polybrominated, 0.1%)、多溴二苯醚(PBDE, Polybrominated Diphenyl Ether, 0.1%)。替代有铅钎料的主要有: Sn-Ag-Cu、Sn-Zn、Sn-Bi、Sn-In 系统。

1.1 复习笔记

一、原子结构

1. 原子的电子排列

(1) 原子可以看成由原子核及分布在核周围的电子所组成，原子核内有中子和质子。

(2) 确定电子运动轨道的四个量子数分别为：

① 主量子数 n ：它是确定电子离核远近和能级高低的主要参数；

② 次量子数 l ：次量子数反映了轨道的形状，s、p、d、f 各轨道在原子核周围的角度分布不同，故又称角量子数或轨道量子数；

③ 磁量子数 m ：它基本上确定了轨道的空间取向，s、p、d、f 各轨道依次有 1、3、5、7 种空间取向；

④ 自旋量子数 m_s ：表示在每个状态下可以存在自旋方向相反的两个电子，这两个电子也只是在磁场下才具有略有不同的能量。

表 1-1 各电子壳层及亚壳层的电子状态

| 主量子数壳层序号 | 次量子数亚壳层状态 | 磁量子数规定的状态数目 | 考虑自旋量子数后的状态数目 | 各壳层总电子数 |
|----------|----------------------|------------------|--------------------|------------------------|
| 1 | 1S | 1 | 2 | 2 ($=2 \times 1^2$) |
| 2 | 2s 2p | 1 3 | 2 6 | 8 ($=2 \times 2^2$) |
| 3 | 3s 3p 3d | 1 3 5 | 2 6 10 | 18 ($=2 \times 3^2$) |
| 4 | 4s 4p 4d 4f | 1 3 5 7 | 2 6 10 14 | 32 ($=2 \times 4^2$) |

(3) 原子核外电子的分布与四个量子数有关，且服从下述两个基本原理：

① 泡利不相容原理——一个原子中不可能存在有四个量子数完全相同的两个电子；

② 最低能量原理——电子总是优先占据能量低的轨道，使系统处于最低的能量状态。

(4) 决定电子能量水平的主要因素是主量子数和次量子数，各个主壳层及亚壳层的能量水平在图 1-1 中所

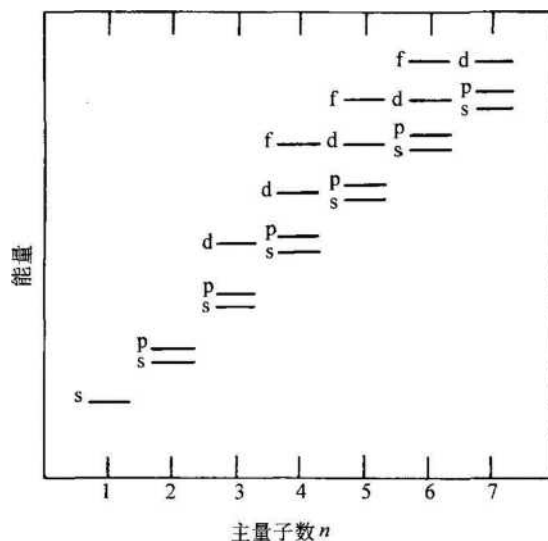


图 1-1 电子能量水平随主量子数和次量子数的变化情况

1. 元素周期表及性能的周期性变化

(1) 第一周期：主量子数 $n=1$ ，只有 1 个亚壳层 S 态，能容纳 2 个自旋方向相反的一对电子，故该周期只有两个元素，原子序数分别为 1、2，即氢和氦，它们的电子状态可分别记作 $1s$ 、 $1s^2$ ；

(2) 第二周期：主量子数 $n=2$ ，有 2 个亚壳层 s、p，其中 S 态能容纳一对电子，p 态能容纳三对自旋方向相反的电子，全部充满后共有八个电子，分别对应于第二周期的八个元素，它们的原子序数 Z 为 3 至 10；

(3) 第三周期：主量子数 $n=3$ ，有三个亚壳层，其中 $3s$ 、 $3p$ 共容纳 8 个电子，按计算 $3d$ 态可再容纳 $5 \times 2 = 10$ 个电子，然而由于 $4s$ 的轨道能量低于 $3d$ ，因此当 $3s$ 、 $3p$ 态充满后，接着的电子不是进入 $3d$ ，而是填入新的主壳层 ($n=4$)，因而建立了第四周期，这样第三周期仍是八个元素；

(4) 第四周期：电子先进入 $4s$ 态，接着填入内壳层 $3d$ ，当 $3d$ 的 10 个位置被占据后，再填入外壳层的 $4p$ 态的六个位置；

(5) 第五周期：电子排列方式同第四周期，按 $5s \rightarrow 4d \rightarrow 5p$ 的顺序排列，所以第四、五周期均为 18 个元素，成为长周期；

(6) 第六周期：电子要填充二个内壳层 $4f$ 和 $5d$ ，在填满 $6s$ 态后，电子先依次填入远离外壳层的 $4f$ 态 14 个位置，原子序数 $Z=57 \sim 71$ ，通常称为偶系稀土族元素。其后的元素再填充 $5d$ 、 $6p$ 直至 $7s$ ，故第六周期包括了原子序数为 $55 \sim 86$ 的 32 个元素；

(7) 第七周期：存在着类似于镧系元素的锕系，它们对应于电子填充 $5f$ 态的各个元素。

二、原子结合键

根据结合力的强弱可把结合键分成两大类：一次键——结合力较强，包括离子键、共价键和金属键；二次键——结合力较弱，包括范德瓦耳斯键和氢键。

1. 一次键

(1) 离子键

当金属原子和非金属原子相结合时，二者分别形成正离子与负离子，正、负离子间相互吸引，使原子结合在一起，这就是离子键。

(2) 共价键

价电子数为 4 或 5 个的 IVA、VA 族元素，离子化比较困难，相邻原子间可以共同组成一个新的电子轨道，利用共享电子对来达到稳定的电子结构。

(3) 金属键

金属原子很容易失去其外壳层价电子而具有稳定的电子壳层，形成带正电荷的阳离子，金属正是依靠正离子与自由电子之间的相互吸引而结合起来的。

2. 二次键

(1) 范德瓦耳斯键

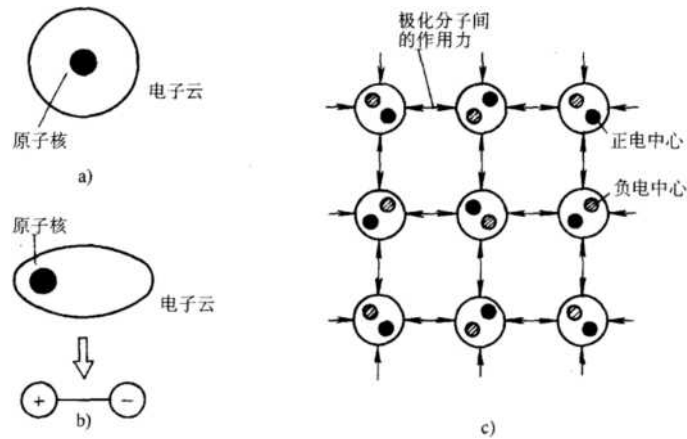
① 原子中的电子分布于原子核周围，并处于不断地运动状态，电子的分布具有球形对称性，并不具有偶极矩 (图 1-2a)；

② 由于各种原因导致原子的负电荷中心与正电荷 (原子核) 中心并不一定重叠，这种分布产生一个偶极矩 (图

1-2b) ;

① 一些极性分子的正负电性位置不一致，也有类似的偶极矩，众多原子（或分子）的结合情况如图 1-2c 所

zjs。



a) 理论电子云分布；b) 原子偶极矩的产生；

c) 原子（或分子）间的范德瓦耳斯键结合

图 1-2 范德瓦耳斯键力示意图

(2) 氢键

① 当氢原子与一个电负性很强的原子（或原子团）X 结合成分子时，氢原子的一个电子转移至该原子壳层上；

② 分子的氢离子侧实质上是一个裸露的质子，对另一个电负性值较大的原子 Y 表现出较强的吸引力，这样，氢原子便在两个电负性很强的原子（或原子团）之间形成一个桥梁，把两者结合起来，成为氢键；

③ 氢键可以表达为： $\delta^+ - Y$

3. 混合键

鲍林以下公式来确定化合物 AB 中离子键结合的相对值：

$$\text{离子键结合 (\%)} = [1 - e^{-\frac{1}{2}(X_A - X_B)^2}] \times 100\%$$

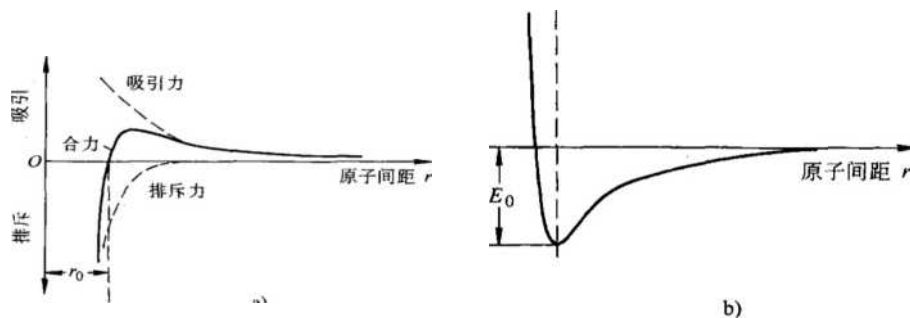
式中， X_A 、 X_B 分别为化合物组成元素 A、B 的电负性数值。

4. 结合键的本质及原子间距

(1) 固体原子间总存在两种力：

- ① 吸引力，来源于异类电荷间的静电吸引；
- ② 同种电荷之间的排斥力。

两原子间的吸引力和排斥力如图 1-3 (a) 所示。



a) 原子间吸引力、排斥力、合力；

b) 原子间作用位能与原子间距的关系

图 1-3 原子间结合力

(2) 根据物理学，力 (F) 和能量 (E) 之间的转换关系：

$$E = - \int F dx$$

所以两原子相互作用的能量随距离的变化如图 1-3 (b) 所示。

5. 结合键与性能

(1) 物理性能

- ① 熔点的高低代表了材料稳定性的程度，熔点与键能值有较好的对应关系；
- ② 材料的密度与结合键类型有关；
- ③ 金属键使金属材料具有良好的导电性和导热性。

(2) 力学性能

弹性模量是材料应力—应变曲线上弹性变形段的斜率，在拉伸变形中通常称它为杨氏模量，以 E 表示，其意义为：

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon}$$

即 E 相当于发生单位弹性变形所需的应力。

三、原子排列方式

1. 晶体与非晶体

(1) 固体材料根据原子（或原子团、分子）的排列可分成两大类，晶体与非晶体（图 1-4）。

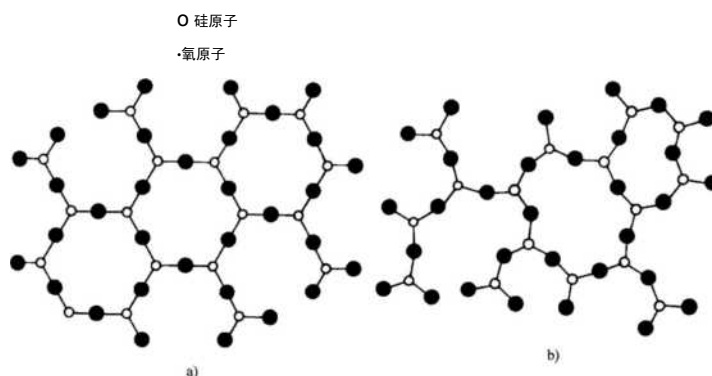


图 1-4 二氧化硅结构示意图

(2) 晶体与非晶体的区别：

- ① 晶体中原子排列是有序的，而非晶体内部原子的排列是无序的，不存在长程的周期排列；
- ② 晶体与非晶体原子排列方式的差异造成两者性能上差别：
 - a. 晶体具有各向异性；
 - b. 非晶体为各向同性。
- ③ 从液态转变为晶体和非晶体时，两者表现的行为是不同的：
 - a. 对于晶体，如图 1-5 所示，从液态冷却凝固（或固态加热熔化）时具有确定的熔点，并发生体积的突变，液体向晶体的转变就不同了，它不是简单的冷却过程，而还具有结构转变，称为结晶；
 - b. 从液态到非晶态固体是一个渐变过程，既无确定的熔点，又无体积的突变。说明非晶态转变只不过是液态的简单冷却过程，非晶态实质上只是一种过冷的液体。

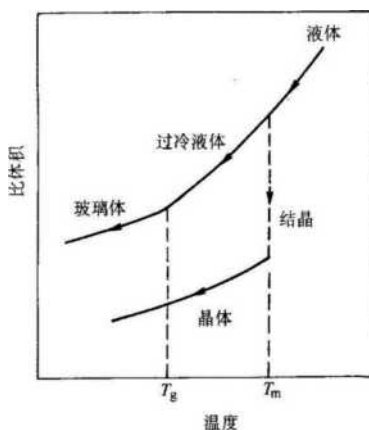


图 1-5 从液态转变为晶体及非晶体的比体积变化

2. 原子排列的研究方法

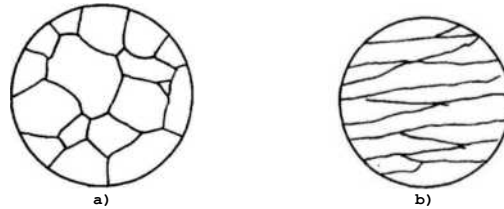
- (1) 研究方法：材料研究中采用 X 射线或电子束来进行研究，其原理就是光学中的干涉和衍射。
- (2) 布拉格定律：

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

四、晶体材料的组织

1. 组织的显示与观察

- (1) 粗大的组织用肉眼即能观察到，称这类组织为宏观组织；
- (2) 要用金相显微镜或电子显微镜才能观察内部的组织，故组织又常称为显微组织或金相组织。



(a)等轴晶；(b)柱状晶

图 1-6 单相组织的两种晶粒形状

2. 单相组织

具有单一相的组织为单相组织，即所有晶粒的化学组成相同，晶体结构也相同，描述单相组织特征的主要有晶粒尺寸及形状。

3. 多相组织

五、材料的稳态结构与亚稳态结构

1. 亚稳态结构

能量最低的结构称为稳态结构或平衡态结构，而能量相对较高的结构则称为亚稳态结构。

2. 热力学条件

热力学条件是指结构形成时必须沿着能量降低的方向进行，或者说结构转变必须存在一个推动力，只有这样，过程才能自发进行。

3. 自由能的表达式

两种自由能的表达式分别为：

(亥姆霍兹)自由能：

$$A = U - TS$$

(吉布斯)自由能：

$$G = H - TS$$

式中，U 为内能；H 为焓 S 为熵；T 为热力学温度。自发转变的倾向取决于自由能的差值， ΔA 及 ΔG 的绝对值越大，则自发转变的倾向越明显。

化学反应动力学的阿累尼乌斯 (Arrhenius) 方程，在反应速度 V 与热力学温度 T 之间满足：

$$V = A e^{-\frac{Q}{RT}}$$

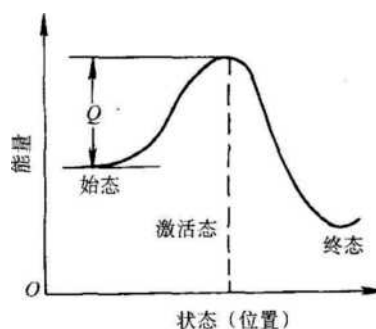


图 1-7 激活能的物理意义

4. 转变的热力学和动力学条件

材料得到的结构是稳态或亚稳态，取决于转变过程的推动力和阻力（即热力学条件和动力学条件），阻力小时得到稳态结构，阻力很大时则得到亚稳态结构。亚稳态结构可能长期保持相对稳定，但在合适条件下有可能逐步向稳态结构过渡。

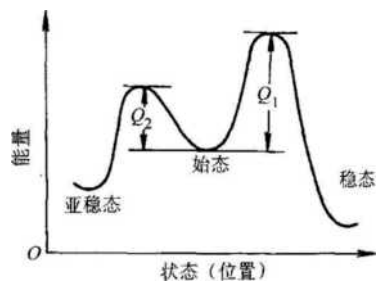


图 1-8 稳态与亚稳态转变的热力学和动力学条件

1.2 名校考研真题详解

一、选择题

1. 化学键中既无方向性又无饱和性的为（ ）。[上海交通大学 2005 研]

- A. 共价键
- B. 金属键
- C. 离子键

【答案】B

2. 大多数实际材料键合的特点是（ ）。[浙江大学 2006 研]

- 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

3. 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（ ）。[浙江大学 2006 研]

- 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

【解析】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。

4. 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（ ）。[浙江大学 2006 研]

- 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

【解析】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 $0.7 \leq \Delta x < 1.7$

5. 容易形成玻璃的物质往往具有（ ）之类的键型。[南京工业大学 2009 研]

- A. 离子键
- B. 金属键
- C. 极性共价键
- D. 共价键

【答案】C

二、名词解释

1. 离子键 [吉林大学 2009 研]

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。

2. 共价键 [北京工业大学 2009 研]

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。

3. 金属键 [西安工业大学 2007 研]

答：金属键是金属正离子与自由电子之间的相互作用所构成的金属原子间的结合力。

三、简答题

1. 判断下列物质的主要结合键 [西安交通大学 2003 研]

CaO SiC GaAs Cu₃Al

*离子键的相对比值可参考公式：

$$\text{离子键相对比值} = 1 - \exp[-j(X_A - X_B)^2]$$

式中， X_A 、 X_B 分别为 A、B 元素的电负性。以下为相关元素的电负性值：

表 1-1

| 元素 | O | Ca | CU | Al | Si | Ga | As | C |
|-----|------|------|------|------|------|------|------|------|
| 电负性 | 3.44 | 1.00 | 1.90 | 1.61 | 1.90 | 1.81 | 2.18 | 2.55 |

答：CaO:离子键；SiC:共价键；GaAs:共价键；Cu₃Al:金属键。

2. 说明材料中的结合键与材料性能的关系。 [中南大学 2007 研]

答：材料结合键的类型及结合能的大小对材料的性能有重要的影响，特别是对物理性能和力学性能。

物理性能：(1)结合键越强，熔点越高，热膨胀系数就越小，密度也越大。

(2) 金属具有光泽、高的导电性和导热性、较好的机械强度和塑性，且具有正的电阻温度系数，这就与金属的金属键有关。

(3) 陶瓷、聚合物一般在固态下不导电，这与其非金属键结合有关。工程材料的腐蚀实质是结合键的形成和破坏。

力学性能：(1)晶体材料的硬度与晶体的结合键有关。一般共价键、离子键、金属键结合的晶体比分子键结合的晶体的硬度高。

(2) 结合键之间的结合键能越大，则弹性模量越大。

(3) 工程材料的强度与结合键能也有一定的联系。一般结合键能高，强度也高一些。

(4) 材料的塑性也与结合键类型有关，金属键结合的材料具有良好的塑性，而离子键、共键结合的材料塑性变形困难，所以陶瓷材料塑性很差。

3. 简述原子间四种结合键各自的特点，并从结合键的角度讨论金属的力学特性。 [西安理工大学 2007 研]

答：各种键的特点如表 1-2 所示。

表 1-2

| 类型 | 作用力来源 | 键强 | 形成晶体的力学性能特点 |
|-----|-----------------------------|----|--------------|
| 离子键 | 正负离子间的库仑引力 | 最强 | 硬度高，强度大，脆性大 |
| 共价键 | 相邻原子价电子各处于相反的自旋状态，原子核间的库仑引力 | 强 | 硬度高，强度大，脆性大 |
| 金属键 | 自由电子气与正离子之间的库仑引力 | 较强 | 塑性变形能力好，强韧性高 |
| 二次键 | 原子与分子间由诱导或永久电偶极子相互作用而产生 | 弱 | 硬度低，塑性、韧性好 |

金属键由于没有方向性和饱和性，对原子也没有选择性，在受外力作用下原子发生相对移动时，金属正离子仍处于电子气的包围中，金属键不会受到破坏，因此金属能够经受变形而不断裂，具有较好的塑性变形性能。

4. 图 1-1 为两种材料中原子结合的键能曲线，回答：

- (1) 哪种材料的弹性模量大？
- (2) 哪种材料的热膨胀系数大？
- (3) 依据图 1-1,示意画出两种材料的键力曲线。 [西安交通大学 2003 研]

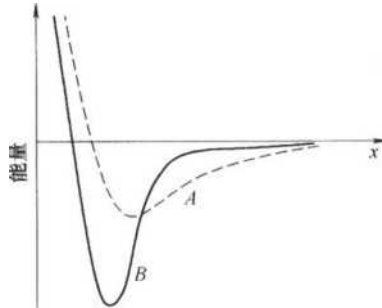


图 1-1

答：(1) B；(2) A；(3)见图 1-2：

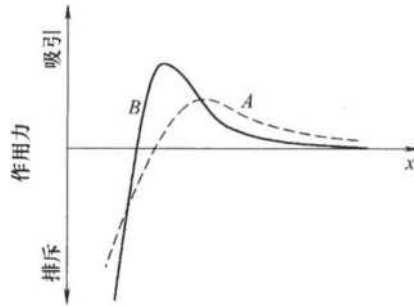


图 1-2

第2章材料中的晶体结构

2.1 复习笔记

一、晶体学基础

1. 空间点阵和晶胞

(1) 空间点阵：是指由几何点在三维空间作周期性的规则排列所形成的三维阵列，构成空间点阵的每一个点称为阵点或结点。

(2) 晶格：人为地将阵点用一系列相互平行的直线连接起来形成空间格架，称之为晶格。

(3) 在选取晶胞时应满足下列条件：

- ① 要能充分反映整个空间点阵的对称性；
- ② 在满足①的基础上，晶胞要具有尽可能多的直角；
- ③ 在满足①、②的基础上，所选取的晶胞体积要最小。

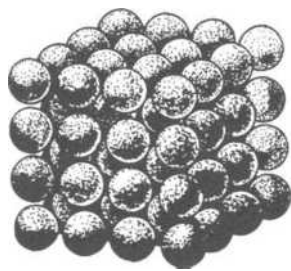
(4) 简单晶胞和复合晶胞的区别

- ① 简单晶胞即只在平行六面体的八个角顶上有阵点，而每个角顶上的阵点又分属于八个简单晶胞，故每个简单晶胞中只含有一个阵点；
- ② 复合晶胞除在平行六面体的八个角顶上有阵点外，在其体心、面心或底心等位置上也有阵点，因此每个复合晶胞中含有一个以上的阵点。

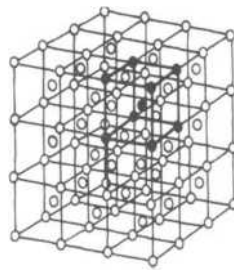
(5) 晶胞的形状和大小即可由坐标系中三个棱边的长度 a, b, c (称为点阵常数) 及其夹角 α, β, γ 这六个参数完全表达出来(图 2-2), 点阵中任一阵点的位置均可用下列矢量表示：

$$\vec{r}_{uvw} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

式中， \vec{r}_{uvw} 为由原点到某阵点的矢量； u, v, w 分别为沿三个点阵矢量方向平移的基矢量数，亦即阵点在 X, y, Z 轴上的坐标值。



(a)



(b)

Si

(c)

(a)晶体；(b)晶格；(c)晶胞

图 2-1 晶体结构

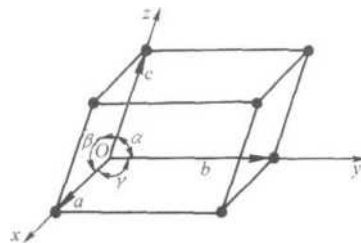


图 2-2 晶胞、晶轴和点阵矢量

2. 晶系和布拉菲点阵

晶体中的空间点阵只有 14 种，称之为布拉菲点阵。其晶胞如图 2-3 所示，表 2-1 则把它们归属于七个晶系。

表 2-1 14 种布拉菲点阵与七个晶系

| 布拉菲点阵 | 晶系 | 棱边长度与夹角关系 | 图 2-3 标号 |
|-------|----|---|----------|
| 简单立方 | 立方 | $a=b=c, (\alpha=\beta=\gamma=90^\circ)$ | 1 |
| 体心立方 | | | 2 |
| 面心立方 | | | 3 |

| | | | |
|------|----|--|----|
| 简单四方 | 四方 | $a=b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ | 4 |
| 体心四方 | | | 5 |
| 简单菱方 | 菱方 | $a=b=c, \alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$ | 6 |
| 简单六方 | 六方 | $a=b, a \neq c, \alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$ | 7 |
| 简单正交 | 正交 | $a \neq b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ | 8 |
| 底心正交 | | | 9 |
| 体心正交 | | | 10 |
| 面心正交 | | | 11 |
| 简单单斜 | 单斜 | $a \neq b \neq c, \alpha=\beta=90^\circ \neq \gamma$ | 12 |
| 底心单斜 | | | 13 |
| 简单三斜 | 三斜 | $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ | 14 |

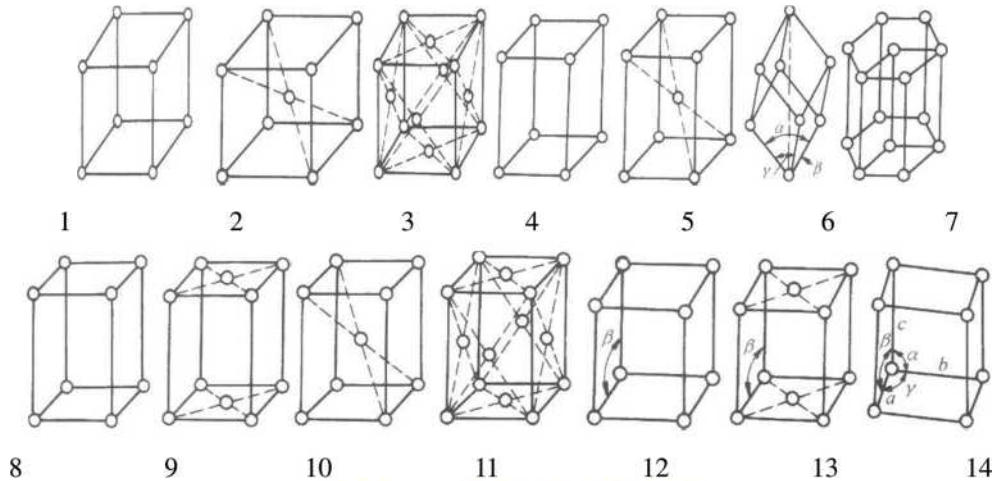


图 2-3 14 种布拉菲点阵的晶胞

1. 晶向指数和晶面指数

(1) 晶向指数

晶向指数是表示晶体中点阵方向的指数，由晶向上阵点的坐标值决定。

① 其确定步骤如下：

- 建立坐标系如图 2-4 所示，以晶胞中待定晶向上的某一阵点 O 为原点，以过原点的晶轴为坐标轴，以晶胞的点阵常数 a 、 b 、 c 分别为 x 、 y 、 z 坐标轴的长度单位，建立坐标系；
- 确定坐标值在待定晶向 OP 上确定距原点最近的一个阵点 P 的三个坐标值；
- 化整并加方括号将三个坐标值化为最小整数 u 、 v 、 w ，并加方括号，即得待定晶向 OP 的晶向指数 $[uvw]$ ，如果 u 、 v 、 w 中某一数为负值，则将负号标注在该数的上方。

② 对于晶向指数需作如下说明：

- 一个晶向指数代表着相互平行、方向一致的所有晶向；
- 若晶体中两晶向相互平行但方向相反，则晶向指数中的数字相同，而符号相反；
- 晶体中原子排列情况相同但空间位向不同的一组晶向称为晶向族，用 $\langle uvw \rangle$ 表示。

(2) 晶面指数

晶面指数是表示晶体中点阵平面的指数，由晶面与三个坐标轴的截距值所决定。

① 其确定步骤如下：

- 建坐标如图 2-5 所示，以晶胞的某一阵点 O 为原点，以过原点的晶轴为坐标轴，以点阵常数 a 、 b 、 c 为三个坐标轴的长度单位，建立坐标系；
- 求截距求出待定晶面在三个坐标轴上的截距，如果该晶面与某坐标轴平行，则其截距为 ∞ ；
- 取倒数取三个截距值的倒数；
- 化整并加圆括号将上述三个截距的倒数化为最小整数 h 、 k 、 l ，并加圆括号，即得待定晶面的晶面指数 (hkl) 。如果晶面在坐标轴上的截距为负值，则将负号标注在相应指数的上方。

② 对于晶面指数需作如下说明：

- 晶面指数 (hkl) 不是指一个晶面，而是代表着一组相互平行的晶面；
- 平行晶面的晶面指数相同，或数字相同而正负号相反；

C.晶体中具有等同条件只是空间位向不同的各组晶面称为晶面族，用 {hkl}表示。

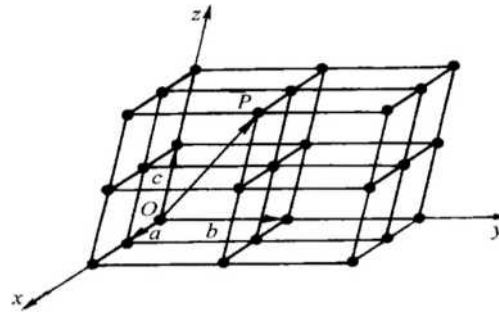


图 2-4 晶向指数的确定

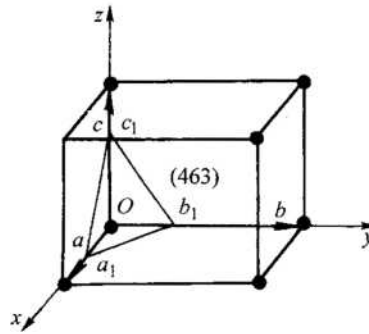
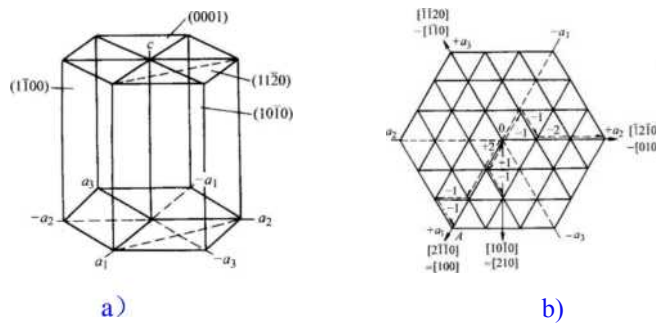


图 2-5 晶面指数的确定

(1) 六方晶系的晶向指数和晶面指数

①对六方晶系的晶向和晶面通常采用密勒—布拉菲 (Miller-BraVaiS) 指数表示。晶面指数的标定方法与三轴坐标系相同，但需用 (hkil)四个数来表示；



a)晶面指数；

b)晶向指数

图 2-6 六方晶系

②位于同一平面上的 h、k、i 三个坐标数的关系：

$$i = - (h + k)$$

③ 晶向指数三轴坐标系的关系：

$$U = (2U - V) / 3, v = (2V - U) / 3, t = - (U + V) / 3, w = W$$

(2) 晶面间距

晶面间距 d_{hkl} 与晶面指数 (hkl)和点阵常数 (a, b, C)之间有如下关系：

正交晶系： $d_{hkl} = 1 / \sqrt{(h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2}$

四方晶系： $d_{hkl} = 1 / \sqrt{(h^2 + k^2) / a^2 + (l/a)^2}$

立方晶系： $d_{hkl} = a / \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$

六方晶系： $d_{hkl} = a / \sqrt{(4/3)h^2 + hk + k^2 + (l/a)^2}$

(3) 晶带

晶带轴 [uvw] 与该晶带中任一晶面 (hkl) 之间均满足下列关系：

二、纯金属的晶体结构

1. 典型金属的晶体结构

(1) 最常见的典型金属晶体结构

最常见的典型金属有面心立方 (A1 或 fee)、体心立方 (A2 或 bee) 和密排六方 (A3 或 hep) 三种晶体结构。

(2) 原子的堆垛方式

三种晶体结构中均有一组原子密排面和原子密排方向, 如表 2-2 所示。

表 2-2 三种典型金属晶体结构的特征

| 晶体类型 | 原子密排面 | 原子密排方向 | 晶胞中的原子数 | 配位数 CN | 致密度 K |
|----------|--------|-----------------------|---------|----------|-------|
| A1 (fee) | {111} | $\langle 110 \rangle$ | 4 | 12 | 0.74 |
| A2 (bee) | {100} | 111 | 2 | 8, (8+6) | 0.68 |
| A3 (hep) | (0001) | 1120 | 6 | 12 | 0.74 |

(3) 点阵常数

晶胞的棱边长度 (单位: nm) a、b、c 称为点阵常数, a、b、c 与 r 之间的关系:

体心立方结构 (a=b=c) : $a = 4r/\sqrt{3}$

面心立方结构 (a=b=c) : $a = 2\sqrt{2}r$

密排六方结构 (a=b≠c) : $a = 2r$

对于密排六方结构, 其轴比 c/a=1.633, 但实际金属常常偏离此值。

(4) 晶胞中的原子数

每个晶胞所含有的原子数 (N) 可用下式计算:

$$N = N_v + N_f \cdot \frac{1}{2} + N_c \cdot \frac{1}{8} + N_e \cdot \frac{1}{4}$$

式中, N_v 、 N_f 、 N_c 、 N_e 分别表示位于晶胞内部、面心和角顶上的原子数; m 为晶胞类型参数, 立方晶系的 m=8, 六方晶系的 m=6。

(5) 配位数和致密度

① 配位数晶体结构中任一原子周围最近邻且等距离的原子数 (CN)。

② 致密度晶体结构中原子体积占总体积的百分数 (K) :

$$K = \frac{Nv}{V}$$

式中, n 是一个晶胞中的原子数; V 是一个原子的体积, $V = \frac{4}{3}\pi r^3$, V 是晶胞的体积。

(6) 晶体结构中的间隙

① 位于 6 个原子所组成的八面体中间的间隙称为八面体间隙;

② 位于 4 个原子所组成的四面体中间的间隙称为四面体间隙;

③ 面心立方结构中的八面体间隙及四面体间隙与密排六方结构中的同类型间隙的形状相似, 都是正八面体和正四面体, 在原子半径相同的条件下两种结构的同类型间隙的大小也相等, 且八面体间隙大于四面体间隙;

④ 体心立方结构中的八面体间隙却比四面体间隙小, 且二者的形状都是不对称的, 其棱边长度不完全相等。

2. 多晶型性

当外界条件 (主要指温度和压力) 改变时, 元素的晶体结构可以发生转变, 把金属的这种性质称为多晶型性, 这种转变称为多晶型转变或同素异构转变。

3. 晶体结构中的原子半径

原子半径的影响因素

(1) 温度与压力的影响;

(2) 结合键的影响;

(3) 配位数的影响;

(4) 原子核外层电子结构的影响。

表 2-3 三种典型晶体结构中的间隙

晶体类型 I 间隙类型 单晶胞间隙数 I 原子半径队 I 间隙半径 III III/以

| | | | | | |
|----------|------|----|-----------------------|----------------------------------|-------|
| A1 (fcc) | 正四面体 | 8 | $\frac{\sqrt{2}}{4}a$ | $(\sqrt{3}-\sqrt{2})\frac{a}{4}$ | 0.225 |
| | 正八面体 | 4 | | $(2-\sqrt{2})\frac{a}{4}$ | 0.414 |
| A2 (bcc) | 四面体 | 12 | $\frac{\sqrt{3}}{4}a$ | $(\sqrt{5}-\sqrt{3})\frac{a}{4}$ | 0.291 |
| | 扁八面体 | 6 | | $(2-\sqrt{3})\frac{a}{4}$ | 0.155 |
| A3 (hcp) | 四面体 | 12 | $\frac{a}{2}$ | $(\sqrt{6}-2)\frac{a}{4}$ | 0.225 |
| | 正八面体 | 6 | | $(\sqrt{2}-1)\frac{a}{2}$ | 0.414 |

三、离子晶体的结构

1. 离子晶体的主要特点

- (1) 硬度高、强度大、熔点和沸点较高、热膨胀系数较小，脆性大；
- (2) 都是良好的绝缘体；
- (3) 不吸收可见光，典型的离子晶体是无色透明的。

2. 离子半径、配位数和离子的堆积

(1) 离子半径

① 离子半径是指从原子核中心到其最外层电子的平衡距离。其大小为球状正离子的半径 R^+ 与球状负离子的半径 R^- 之和。即

$$R_0 = R^+ + R^-$$

② 离子半径的大小并非绝对的，同一离子随着价态和配位数的变化而变化。

(2) 配位数

在离子晶体中，与某一考察离子邻近的异号离子的数目称为该考察离子的配位数。见表 2-4。

表 2-4 离子半径比 (R^+/R^-)、配位数与负离子配位多面体的形状

| R^+/R^- | 正离子配位数 | 负离子配位多面体的形状 | | |
|-------------|--------|-------------|---|---|
| 0→155 | 2 | 哑铃状 |  | $\zeta > 0$ |
| 0.155-0.225 | 3 | 三角形 |  | |
| 0.255-0.414 | 4 | 四面体 | | |
| 0.414-0.732 | 6 | 八面体 |  | |
| 0.732-1.00 | 8 | 立方体 | | |
| 1.00 | 12 | 最密堆积 |  |  |

(3) 离子的堆积

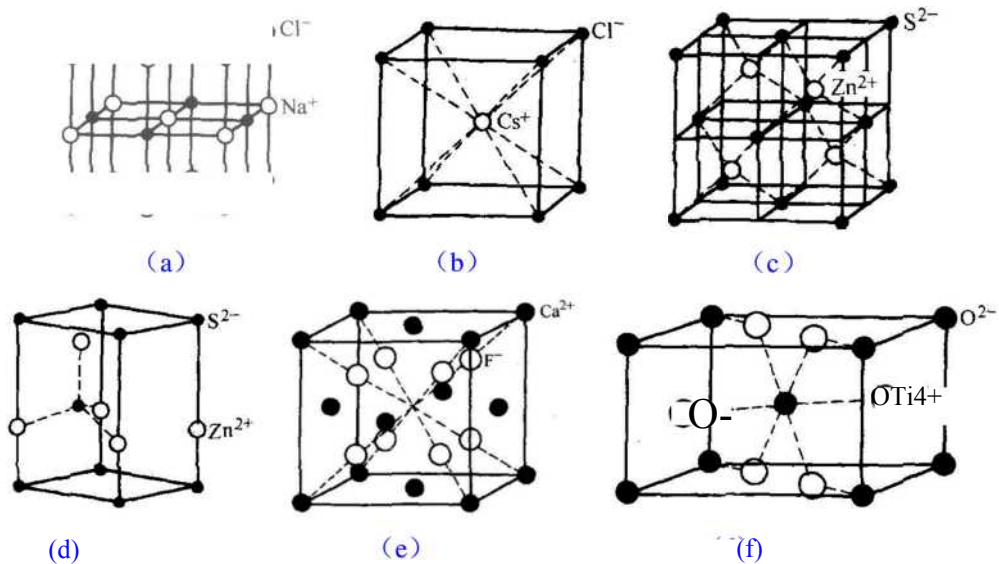
堆积方式主要有立方最密堆积(立方面心堆积)、六方最密堆积、立方体心密堆积和四面体堆积等。

3. 离子晶体的结构规则

- (1) 负离子配位多面体规则——鲍林第一规则
- (2) 电价规则——鲍林第二规则
- (3) 关于负离子多面体共用点、棱与面的规则——鲍林第三规则

4. 典型离子晶体的结构

- (1) NaCl 晶型
属于立方晶系，面心立方点阵。正负离子的配位数均为 6。
- (2) CsCl 晶型
属于立方晶系，简单立方点阵。正负离子的配位数均为 8。
- (3) 闪锌矿(立方 ZnS)晶型
属于立方晶系，面心立方点阵。正负离子的配位数均为 4。
- (4) 纤锌矿(六方 ZnS)晶型
属于六方晶系，简单六方点阵。正负离子的配位数均为 4。
- (5) 萤石(CaF₂)晶型
属于立方晶系、面心立方点阵。正负离子的配位数为 8、4。
- (6) 金红石(TiO₂)晶型
正负离子的配位数为 6、3。



a) NaCl 型; b) CsCl 型; c) 立方 ZnS 型
d) 六方 ZnS 型; e) CaF₂ 型; f) 金红石 TiO₂ 型

图 2.7 典型二元离子晶体的结构

四、共价晶体的结构

1. 共价晶体的主要特点

- (1) 共价晶体是由同种非金属元素的原子或异种元素的原子以共价键结合而成的无限大分子，也叫做原子晶体；
- (2) 共价键的结合力通常要比离子键强，所以共价晶体具有强度高、硬度高、脆性大、熔点高、沸点高和挥发性低等特性，结构也比较稳定；
- (3) 相邻原子所共用的电子不能自由运动，共价晶体的导电能力较差。

2. 典型共价晶体的结构

典型的共价晶体有金刚石(单质型)、ZnS(AB 型)和 SiO₂(AB₂ 型)三种。

(1) 金刚石晶型

金刚石是由碳原子组成的，每个碳原子贡献出四个价电子与周围的四个碳原子共有，形成四个共价键，其配位数为 4，属立方晶系，面心立方点阵，其点阵参数 $a: 0.3599\text{nm}$ ，致密度为 0.34。

(2) ZnS 晶型

AB型共价晶体的结构主要是立方 ZnS 型和六方 ZnS 型两种，正负离子配位数都是 4,立方 ZnS 和六方 ZnS 晶体本身都属于共价晶体。

(3) SiO₂ 晶型

AB型共价键晶体，硅的配位数为 4,氧的配位数为 2。

2-2 名校考研真题详解

一、选择题

1. 立方晶系的 (112) 与 (113) 晶面同属于 () 晶带轴。 [上海交通大学 2005 研]

- A. [110]
- B. [111]
- C. [211]

【答案】A

2. 一组数 $[uvw]$, 称为晶向指数, 它是用来表示 ()。 [浙江大学 2007 研]

- A. 所有相互垂直的晶面的方向
- B. 所有相互垂直的晶向
- C. 所有相互平行、方向一致的晶向

【答案】C

3. 在立方晶系 (OOI) 标准投影图上, A 、 B 、 C 三晶面同在东经 30° 的经线大圆弧上, 则 ()。 [东南大学 2006 研]

- A. 三晶面同属一晶面族
- B. 三晶面和 (OOI) 晶面的夹角相等
- C. 三晶面同属一晶带
- D. 三晶面以坐标原点为对称中心, 具有旋转对称性

【答案】C

4. 若面心立方晶体的晶格常数为 S 则其八面体间隙 ()。 [哈尔滨工业大学 2007 研]

- A. 是不对称的
- B. 是对称的
- C. 位于面心和棱边中点
- D. 位于体心和棱边中点

【答案】BD

5. 面心立方结构的单位晶胞原子数为 ()。 [合肥工业大学 2005 研]

- A. 2
- B. 4
- C. 9
- D. 14

【答案】B

二、填空题

1. 三斜晶体平行六面体晶格常数特征是、, 布氏格子类型为。 [天津大学 2010 研] 【答案】 $a \neq b \neq c$; $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$; 简单三斜

2. 对于单种原子构成的金属, _____ 立方晶体的每个结晶学原胞中包含 4 个原子。 [南京大学 2003 研]

【答案】面心

三、名词解释

1. 空间点阵 [东北大学 2007、合肥工业大学 2005 研]

答: 为了便于分析研究晶体中质点的排列规律性, 可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。

1. 配位数 [西南交通大学 2009 研]

答：配位数是指晶体结构中任一原子周围最近邻且等距离的原子数，表明晶体中原子排列的紧密程度。

四、简答题

1. 空间点阵和晶体结构有何区别？常见金属晶体结构中有哪一种不属于空间点阵？为什么？ [西安理工大学 2007 研]

答：晶体结构是指自然界中由原子、分子、离子与空间点阵结合而成，实际存在的固体结构。而空间点阵是指阵点在空间呈规律分布，并且每个阵点都具有完全相同的物质环境和几何环境。这样，自然界中的晶体可以抽象为七大晶系 14 种布拉菲点阵。晶体结构相同的物质，其空间点阵可能不同；同样的空间点阵不同的物质，其晶体结构也可能相同。

密排六方不是空间点阵，原因是不满足几何环境相同的条件。

2. 简述聚合物晶体形态和金属晶体形态的异同。 [吉林大学 2009 研]

答：聚合物的晶体以各种形式存在，如单晶、球晶、串晶、柱晶和伸直链晶等。

(1) 单晶。凡是能够结晶的聚合物，在适当的条件下都可以形成单晶。单晶只能从极稀的聚合物溶液(浓度一般低于 0.01%)，加热到聚合物熔点以上，然后十分缓慢地降温制备。得到的单晶只是几个微米到几百微米大小的薄片状晶体，但是具有规则外形。单晶的晶片厚度约为 100Å，且与聚合物的相对分子质量无关，只取决于结晶时的温度和热处理条件。晶片中分子链是垂直于晶面方向的，而聚合物分子链一般有几千条以上，因此认为晶片中分子链是折叠排列的。

(2) 球晶。聚合物从浓溶液或熔体冷却时，往往形成球晶——一种多晶聚集体。依外界条件不同，可以形成树枝晶、多角晶等。球晶可以生长得很大，最大可达到厘米级，用光学显微镜很容易在正交偏振光下观察到球晶呈现的黑十字消光图形。球晶中分子链总是垂直于球晶半径方向。

(3) 串晶。在应力作用下的聚合物结晶，一般不一定形成球晶，而是形成纤维状晶体。这种晶体中心为由伸直链构成的微束原纤结构，周围附着许多折叠链晶片。随着应力的增大和伸直链结构增多。其力学强度提高。具有这种结构的制品，由于没有球晶那种散射作用而呈透明状。

(4) 柱晶。聚合物熔体在应力作用下冷却结晶时，若是沿应力方向成行地行成晶核，由于晶体生长在应力方向上受到阻碍，不能形成完善的球晶，只能沿垂直于应力方向生长成柱状晶体。

(5) 伸直链晶体。聚合物在极高的压力下结晶，可以得到完全由伸直链构成的晶片，称为伸直链晶体。实验发现，在 0.5GPa 压力下，200°C 时，让聚乙烯结晶 200h，则得到晶片厚度与分子链长度相当的晶体，晶体密度为 0.994g/cm³。由于伸直链可能大幅度提高材料的力学强度，因此提高制品中伸直链的含量，是使聚合物力学强度接近理论值的一个途径。

3. 在体心立方晶胞中画出一个最密排方向并标明晶向指数；再画出过该方向的两个不同的低指数(简单)晶面，写出对应的晶面指数。这两个面和与其平行的密排方向构成什么关系？ [北京科技大学 2006 研]

答：所求的两个面如图 2-1 所示，这两个面和与其平行的密排方向构成晶带关系。

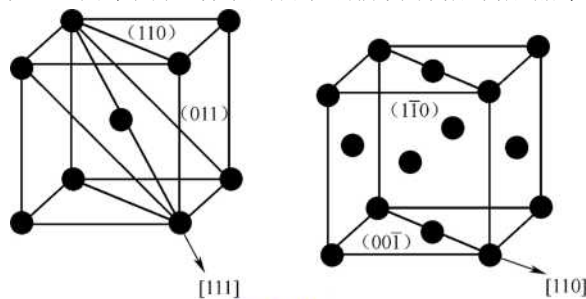


图 2-1

4. 什么是空间点阵与晶体结构？对于同一种空间点阵，晶体结构是否唯一，为什么？请指出图 2-2 中 Cr 和 CSCI 的晶体结构个属于那种空间点阵，并说明理由。 [北京理工大学 2007 研]

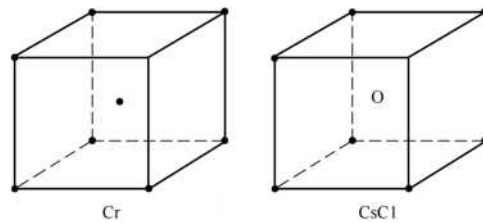


图 2-2

答: (1)空间点阵是指周围环境相同的阵点在空间规则排列的三维阵列; 晶体结构是指晶体中实际质点的具 体排列情况。

(2) 对于同一种空间点阵, 晶体结构不唯一, 因为晶体结构指的是实际质点的具体排列情况, 它们能组成 各种类型的排列, 实际存在的晶体结构是无限的。

(3) Cr 属于体心立方点阵, CsCl 属于简单立方点阵。Cr 的晶胞中, Cr 占据体心和八个顶角位置, 每个原 子的周围环境都相同, 即构成了体心立方点阵。CsCl 中, Cr 占据八个顶角, 它们的周围环境都相同; 对于 Cs⁺ 来说, Cs⁺也具有相同情况, 若将 Cs⁺看成顶点, 也是简单立方点阵。

5. 写出 fcc、bcc 和 hcp 晶胞中的四面体、八面体间隙数, 致密度和原子配位数。 [湖南大学 2007 研]

答: (1)间隙数。fcc 晶胞有 4 个八面体间隙, 8 个四面体间隙; bcc 晶胞有 6 个八面体间隙, 12 个四面体 间隙; hcp 晶胞有 6 个八面体间隙, 12 个四面体间隙;

(2) 配位数。Bcc: 最近邻 8 个, 考虑次近邻为(8+6)个; fcc: 最近邻 12 个; hcp: 理想状态 12 个, 非 理想状态(6+6)个。

(3) 致密度。fcc: 0.74; bcc: 0.68; hcp: 0.74。

6. 萤石(CaF₂)属立方晶系, 其结构如图 2-3 所示, 钙正离子位于立方晶胞的角顶和面的中心, 形成面心 立方结构, 而氟负离子填充在全部的(8 个)四面体间隙中。请画出萤石晶体的结构基元和空间点阵。 [南京航空 航天大学 2008 研]

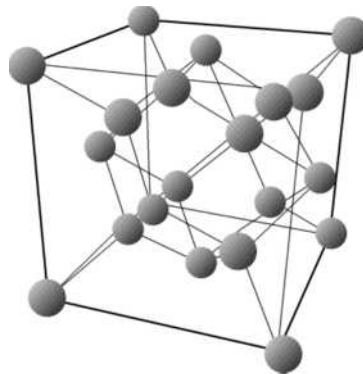


图 2-3

答: 由题意知, 钙正离子位于立方晶胞的角顶和面的中心, 而氟负离子填充在全部的(8 个)四面体间隙中, 则结 构基元和空间点阵如图 2-4 所示。

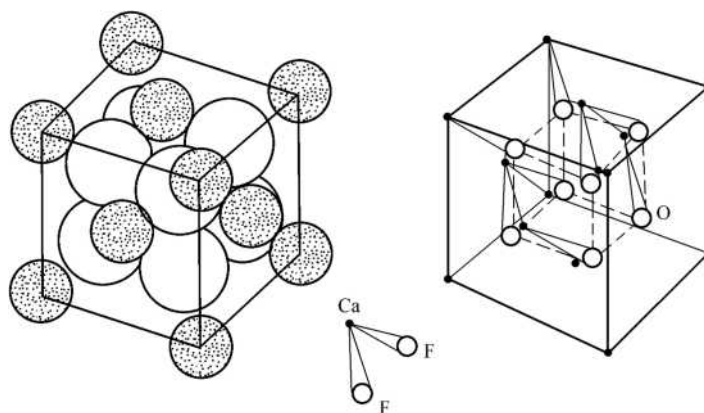


图 2-4

7. 请在立方晶胞中画出(012)^(111)以及 [111] 和 [201] 的图示, 并说明其意义。 [北京工业大学 2009 研]

答: (0i2)和(III)表示晶面, [111] 和 [201] 表示晶向, 如图 2-5 所示。

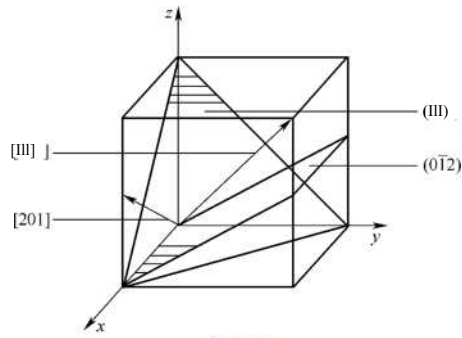


图 2-5

8. 图 2-6 中的晶体结构属于哪种空间点阵? 对于图 2-6 (a)、(C)求 B 原子数与 A 原子数之比。[燕山大学 2005 研]

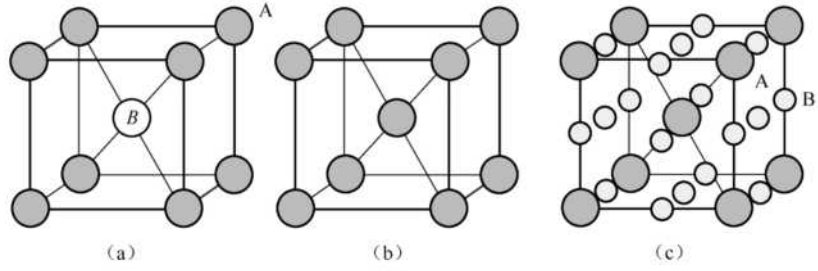


图 2-6

答: 图 2-6 (a)的晶体结构为简单立方, 其中, B 原子数与 A 原子数之比为 1:1; 图 2-6 (b)的晶体结构为 体心立方; 图 2-6 (C)的晶体结构为体心立方, 其中 B 原子数与 A 原子数之比为 6:2=3:1。

五、计算题

1. 某著作中给出六方点阵 MOSi₂ 的错误晶胞如图 2-7 所示, 指出其错误所在, 画出一个正确的六方晶胞, 并给出 C 点阵常数的数值。[清华大学 2008 研]

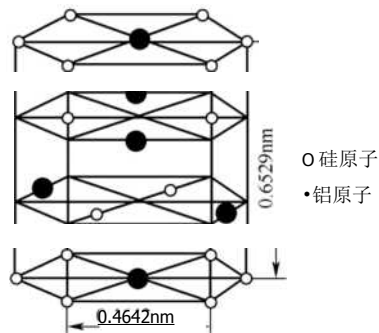


图 2-7

答: 图 2-7 中铝原子与硅原子所示位置为非等同点, 不符合节点选取的规则。正确六方晶胞的(OOI)面如图 2-8 所示(虚线), 其中, $a = b = 2 \times 0.46242 \times \sin 60 = 0.8040 \text{nm}$, $C = 0.6529 \text{nm}$ 。

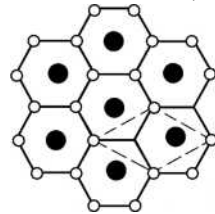


图 2-8

2. 在立方晶系中画出下列晶向指数和晶面指数的晶向和晶面(标明工、y、Z 轴的方向), 并计算面心立方晶体中(110)的面密度。(1) (111)与 [112] ; (2) (132)与 [123] 。[华中科技大学 2006 研]

答: (1) (111)与 [111]的晶向和晶面如图 2-9 (a)所示。

(2) (132)与 [123] 的晶向与晶面如图 2-9 (b)所示。

(3) 对面心立方晶体, 其(110)面如图 2-9 (C)所示, 可得其面密度为:

$$\frac{1}{2} \pi \times 2 + \frac{1}{4} \pi \times 4 = 2\pi$$

对于面心立方:

$$4r = \sqrt{2}a$$

所以:

$$P = \frac{2\pi \times a^3}{\sqrt{1/8}} \quad Z \frac{1}{8} = \frac{1}{8} \times 8 = 1$$

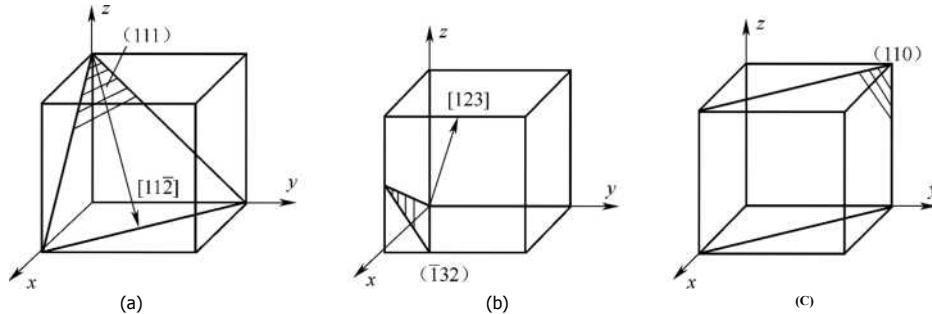


图 2-9

3. 证明金刚石晶体的致密度为 74%。 [南京理工大学 2009 研]

证明: 根据致密度公式 $K = nV/V_0$ 可知, 金刚石符合 8-N 原则, 故一个晶胞中有 8 个金刚石原子。易知金刚石的晶胞中最近邻的原子间距为 $c = 0.1544 \text{ nm}$, 则 $a = \sqrt{3}c$, 因此有:

$$K = \frac{8 \times \frac{4}{3} \pi \times \left(\frac{c}{2}\right)^3}{\left(\sqrt{3}c\right)^3} = 0.74$$

故金刚石晶体的致密度为 74%

4. 如图 2-10 所示, 已知 $\alpha\text{-Fe}$ 的晶格常数 $a_0 = 0.286 \text{ nm}$, 求解下列问题:

- (1) 求 $\alpha\text{-Fe}$ 中的原子数 n ;
- (2) 求 $\alpha\text{-Fe}$ 的滑移面的面间距。 [沈阳大学 2009 研]

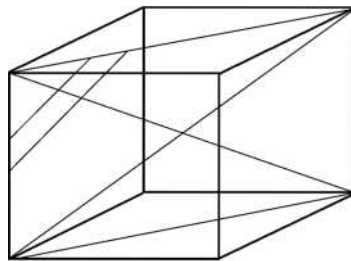


图 2-10

答: (1) 一个晶胞的体积为 $V_0 = 0.286^3 \text{ nm}^3$, 一个 bcc 立方晶胞中有 2 个原子, 所以:

$$\frac{2 \times 10^{-23}}{0.286^3} = 8.55 \times 10^{22} \text{ 个}$$

5

(2) bcc 结构的滑移面为 $\{110\}$, 而 110 面的面间距 $d = \frac{a_0}{\sqrt{2}} = 0.20 \text{ nm}$

5. 证明: 对于立方晶系, 有 $[hkl] \perp (hkl)$ 。 [清华大学 2007 研]

答: 本题要求证明的结论是, 在立方晶系中相同指数的晶向与晶面相互垂直。根据晶面指数的确定规则, (hkl) 晶面 ABC 在 a、b、c 坐标轴上的截距分别是 a/h 、 b/k 、 c/l ; 根据晶面指数的确定规则, $[hkl]$ 晶向 $L = ha + kb + lc$, 如图 2-11 所示。

$$L = ha + kb + lc$$

$$AC = \frac{1}{h} + \frac{1}{k} + \frac{1}{l}$$

利用立方晶系中 $a=b=c$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 的特点, 因此有

$$L \cdot AB = (ha + kb + lc) \frac{h}{a} = h^2 + kb^2 + lc^2 = 0$$

$$L \cdot AC = (ha + kb + lc) \frac{c}{l} = ha^2 + kb^2 + l^2 = 0$$

由于L与ABC面上相交的两条直线垂直，所以L垂直于ABC面。从而在立方晶系中有「晶面(晶

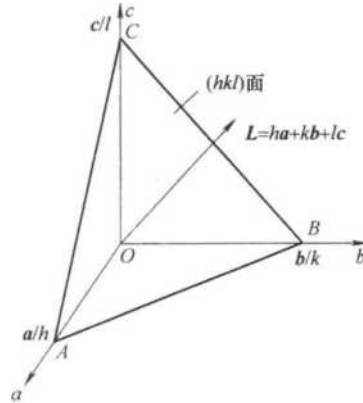


图 2-11

1. (1)试标出面心立方和体心立方各一组最密排面和密排方向；

(2)试证明：立方晶系的 [111] 晶向垂直于(111)晶面。 [武汉科技大学 2008 研]

答：(1)面心立方晶体的最密排面为 {111} 面，面心立方晶体的最密排方向为<110>。

体心立方晶体的最密排面为 {110}，体心立方晶体的最密排方向为<111>。

(2)要证 [111] 晶向与(111)晶面垂直，只需证明晶向矢量 [111] 与晶面(111)的任一矢量的点乘为零；

[111] 晶向的矢量记法为 [111] = 1a + 1b + 1c, 取(111)晶面上的任一矢量，如 [101]，求其与 [111] 矢量的点乘积

$$[111] \cdot [101] = (1 \times 1)a^2 + (1 \times 0)b^2 + (1 \times 1)c^2 = 0$$

在立方晶系中，a=b=c，所以 [111] 晶向垂直于(111)晶面。从而在立方晶系中有「晶面(晶

第3章 高分子材料的结构

3.1 复习笔记

一、高分子材料概述

1. 高分子材料的基本概念

(1) 高分子化合物

① 高分子化合物是指由一种或多种简单低分子化合物聚合而成的相对分子质量很大的化合物, 所以又称聚合物或高聚物;

② 高分子化合物的相对分子质量一般在 10^4 以上, 甚至达到几十万或几百万以上, 它是由成千上万个原子以共价键相连接的大分子化合物;

③ 通常把相对分子质量小于 5,000 的称为低分子化合物, 大于 5,000 的则称为高分子化合物。

(2) 单体

高分子化合物的每个分子都是由一种或几种较简单的低分子一个个连接起来组成的, 单体也就是合成聚合物的起始原料, 它是化合物独立存在的基本单元, 是单个分子存在的稳定状态。

(3) 链节

组成大分子链的特定的结构单元叫做链节。

(4) 聚合度

① 大分子链中链节的重复次数叫做聚合度;

② 一个大分子链的相对分子质量 M , 等于它的链节的相对分子质量 m 与聚合度 n 的乘积, 即 $M=nM_m$ 。

(5) 官能度

官能度是指在一个单体上能与别的单体发生键合的位置数目。

(6) 多分散性

① 高分子化合物中各个分子的相对分子质量不相等的现象叫做相对分子质量的多分散性;

② 多分散性在低分子化合物中是不存在的, 它是高分子化合物的一大特点, 高分子化合物的多分散性决定了它的物理和力学性能的大分散度。

(7) 平均相对分子质量

由于多分散性, 高分子化合物的相对分子质量通常用平均相对分子质量表示。

数均相对分子质量: $M_n = \sum N_i M_i$

重均相对分子质量: $M_w = \sum N_i M_i^2 / \sum N_i M_i$

2. 高分子材料的合成

聚合高分子化合物最基本的化学反应分类, 可分为加聚反应和缩聚反应两类。

(1) 加聚反应

加聚反应是指由一种或多种单体相互加成而连接成聚合物的反应, 其生成物叫做加聚物。

(2) 缩聚反应

缩聚反应是指由一种或多种单体相互混合而连接成聚合物, 同时析出(缩去)某种低分子物质(如水、氨、醇、卤化氢等)的反应, 其生成物叫做缩聚物。

3. 高分子材料的分类

(1) 按聚合反应的类型分类

聚合物的形成有加聚反应和缩聚反应两种方式, 可将高分子材料分为加聚聚合物和缩聚聚合物两类;

(2) 按高分子的几何结构分类

① 线型聚合物

线型聚合物的高分子为线型或支链型结构, 它可以是加聚反应产生的, 也可以是缩聚反应产生的。

② 体型聚合物

体型聚合物的高分子为网状或体型结构, 通常这种结构是由缩聚反应产生的, 有少数材料可由加聚反应形成。

(3) 按聚合物的热行为分类

① 热塑性聚合物具有线型(或支链)分子结构

如热塑性塑料，受热时软化，可塑制成一定的形状，冷却后变硬，再加热时仍可软化或再成型。

② 热固性聚合物具有体型（或网状）分子结构

如热固性塑料，在初受热时也变软，这时可塑制成一定形状，但加热到一定时间或加入固化剂后，就硬化定型，重复加热时不再软化。

二、高分子链的结构及构象

1. 高分子链的化学组成

(1) 碳链高分子

高分子主链是由相同的碳原子以共价键联结而成： $—C—C—C—C—$ 或 $—C=C—C—$ ，前者主链中无 双键，为饱和碳链；后者主链中有双键，为不饱和碳链。

(2) 杂链高分子

高分子主链是由两种或两种以上的原子构成的，即除碳原子外，还含有氧、氮、硫、磷、氯、氟等原子。

(3) 元素有机高分子

高分子主链一般由无机元素硅、钛、铝、硼等原子和有机元素氧原子等组成，它的侧基一般为有机基团。

2. 结构单元的键接方式和构型



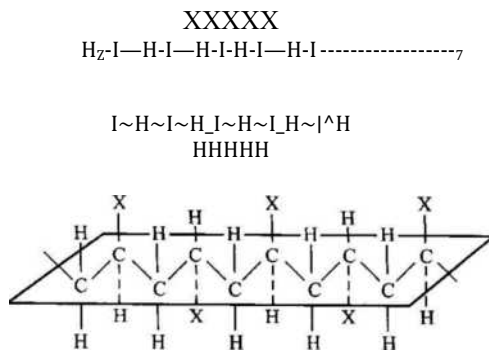
- c) d)
- a) 无规共聚； b) 交替共聚； C) 嵌段共聚；
d) 接枝共聚（黑白球各代表一种重复单元）
- 图 3.1 二元共聚物单体的连接方式

(1) 键接方式

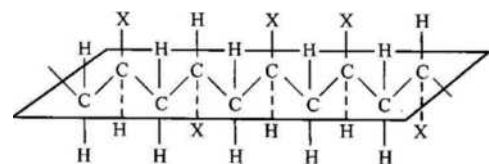
- ① 由两种或两种以上单体共聚时，其连接的方式更为多样，即使以二元共聚物来说就有：无规共聚、交替共聚、嵌段共聚和接枝共聚等方式。
- ② 主要受能量和空间阻碍两个因素所控制，即聚合时力求使能量体系最稳定和所受的空间阻碍最小。

(2) 空间构型

- ① 全同立构：取代基 X 全部处于主链的同侧。



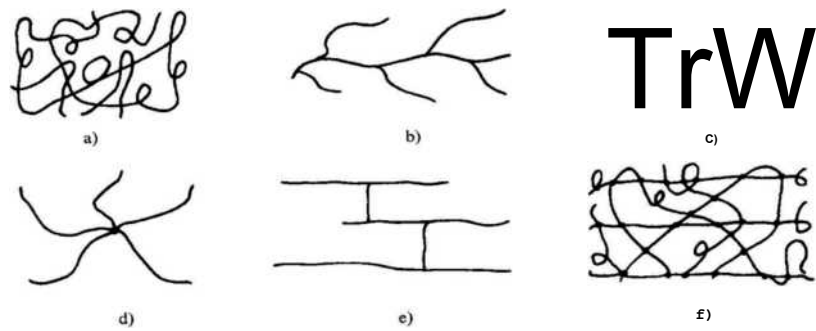
- ③ 无规立构：取代基 X 在主链两侧作无规则地分布。



3. 高分子链的几何形状

由于聚合反应的复杂性，高分子链也会呈现出各种不同的形态，既有线型、支化、交联和体型（三维网状）

等一般形态，也有星形、梳形、梯形等特殊形态。



a) 线型; b) 支化; c) 梳形; d) 星形; e) 交联; f) 体型

图 3-2 高分子链的结构形态

(1) 线型高分子的结构是整个分子链呈细长线条状，可有直线形、螺旋形、折迭形等不同形态；

(2) 体型（网状）高分子的结构是高分子链之间通过化学键相互联结而形成的交联结构，在空间呈三维网状。

4. 高分子链的构象及柔顺性

(1) 高分子链的构象

① 每一个单键围绕其相邻单键按一定角度讲行的旋转运动称为单键的内旋转。

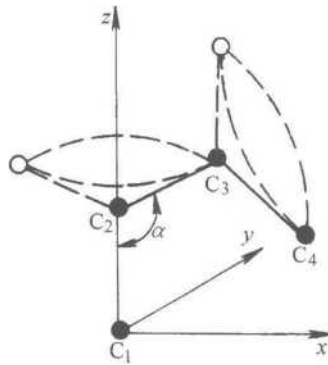


图 3-3 单键内旋示意图

② 由于单键内旋转引起的原子在空间据不同位置所构成的分子链的各种形象，称为高分子链的构象。

(2) 高分子链的柔顺性

① 高分子柔顺性的定义

高分子能由构象变化获得不同卷曲程度的特性，称为高分子链的柔顺性，它是聚合物许多基本性能不同于低分子物质，也不同于其他固体材料的根本原因。

② 高分子卷曲度的计算

a. 高分子链的卷曲程度一般采用其两端点间的直线距离—末端距 h 来衡量（图 3-4） h 末端距越短，则高分子链卷曲越厉害；

b. 末端距应是一种统计平均值，并常用均方末端距 \bar{h}^2 来表示。

③ 影响高分子链柔顺性的因素

a. 主要因素

第一，主链结构

主链全由单键组成时，分子链的柔顺性最好。

第二，侧基性质

i 侧基的极性及其强弱；

ii 侧基体积；

也侧基分布的对称性；

iv 侧基沿分子链分布的距离、分子间的化学键等结构因素。

b. 次要因素

第一，单键内旋的难易程度；

第二，链段的长度。

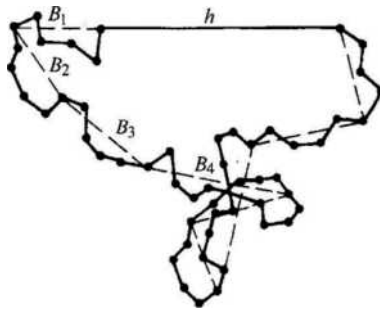


图 3-4 柔性高分子链的末端距和链段示意图

三、高分子的聚集态结构

1. 晶态聚合物的结构

- (1) 缨状胶束结构模型
- (2) 折迭链结构模型

2. 非晶态聚合物的结构

- (1) 无序结构模型
- (2) 局部有序结构模型

该模型表示，非晶态聚合物中存在一定程度的有序，并主要包括两部分：

- ① 由高分子链折迭而成的粒子相；
- ② 粒子与粒子之间的粒间相。

3. 聚合物的结晶度与玻璃化温度

- (1) 结晶度

线结晶度就是结晶的程度，用结晶部分的重量或体积占整体重量或体积的百分数表示。

① 重量结晶度： $\sqrt{T} = [W_c / (W_c + W_a)] \times 100\%$

② 体积结晶度： $\sqrt{t} = [V_c / (K + V_a)] \times 100\%$

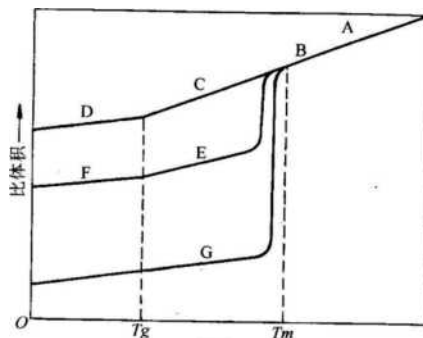
式中，W 表示重量；V 表示体积；下标 C 表示结晶；下标 a 表示非晶。

- (2) 分子结构对结晶能力的影响

- ① 结构简单、规整度高、对称性好的高分子容易结晶；
- ② 等规聚合物结晶能力强；
- ③ 缩聚物都能结晶；
- ④ 高分子链的支化不利于结晶。

- (3) 玻璃化温度 T_g

当一块玻璃冷却到熔点温度以下时，在某一温度范围内它仍是塑性的，但冷却到某个温度时，发生玻璃硬化，该温度称之为玻璃化温度 (T_g)。



〔液态；B-液态（有某些弹性反应）；C—过冷液体（橡胶态）；D—玻璃态；
E—微晶在过冷液体的基体中；F—微晶在玻璃基体中；G—完全晶态

图 3-5 有结晶倾向的聚合物由熔点冷却时比体积与温度的关系

四、高分子材料的性能与结构

1. 高分子材料的主要性能特点

- (1) 高分子材料的弹性模量和强度都较低，即使是工程塑料也不能用于受力较大的结构零件；
- (2) 高分子材料的力学性能对温度与时间的变化十分敏感，在室温下就有明显的蠕变和应力松弛现象；
- (3) 高分子材料从液态凝固后多数呈非晶态，只有少数结构简单、对称性高的分子结构可以得到晶体，但也不能达到 100% 的结晶；
- (4) 高分子材料的主要弱点是容易老化，即在长期使用或存放过程中，由于受各种因素的作用，其性能随时间的延长而不断恶化，逐渐丧失使用价值的过程；
- (5) 高分子材料也有许多金属或陶瓷材料所不具备的优点：
 - ① 原料丰富，成本低廉；
 - ② 密度很小，多数在 $(0.95 \sim 1.4) \text{ g/cm}^3$ ；
 - ③ 化学稳定性好；
 - ④ 有良好的电绝缘性能；
 - ⑤ 有优良的耐磨、减摩和自润滑性能，并能吸振和减小噪声，常用它们来代替金属；
 - ⑥ 有优良的光学性能。

2. 高分子材料的性能与结构的关系

(1) 高分子材料的分类

通常将高分子材料分为热塑性塑料、热固性塑料和橡胶三种类型。

(2) 性能与结构上的关系

- ① 热塑性塑料是线型链状结构；
- ② 橡胶是在线型链状结构中形成了少量的交联；
- ③ 热固性塑料则为体型结构；
- ④ 对橡胶，在结构上的要求是：
 - a. 要有很大的相对分子质量，分子链段很长，因而有最大的柔性，其玻璃化温度应比室温低得多；
 - b. 在使用条件下不结晶或结晶度很小；
 - c. 必须进行硫化处理，对纯线型结构的柔性链，受力时分子链间要能相对滑动，变形小时可以弹性恢复；变形大时分子链间如果没有一个较大的弹性恢复力存在，只会造成永久变形。

3. 改变高分子材料性能的途径

改变热塑性塑料性能（主要限于力学性能）的主要途径：

- (1) 改变结晶度；
- (2) 改变侧基的性质；
- (3) 改变主链的结构；
- (4) 共聚；
- (5) 拉拔强化。

3.2 名校考研真题详解

一、选择题

1. 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（ ）。[上海交通大学 2006 研]
 - A. Si-O 键
 - B. C-C 键
 - C. C-O 键

【答案】A

2. 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（ ）。[浙江大学 2006 研]
 - 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

3. 室温下橡胶与塑料的不同柔顺性表明 ()。 [上海交通大学 2005 研]

- A. 塑料的链段可动性比橡胶低
- B. 塑料的链节比橡胶长
- C. 塑料比橡胶的相对分子质量大

【答案】A

4. 作为塑料使用的高分子，在室温使用应处在 ()。 [上海交通大学 2007 研]

- A. 高弹态
- B. 玻璃态
- C. 黏流态

【答案】B

5. 聚乙烯高分子材料中 C-H 化学键属于 ()。 [华中科技大学 2007 研]

- A. 氢键
- B. 离子键
- C. 共价键

【答案】C

6. 最难以形成非晶态结构的是 ()。 [上海交通大学 2005 研]

- A. 陶瓷
- B. 金属
- C. 聚合物

【答案】B

7. 高分子材料是否具有柔顺性主要决定于 () 的运动能力。 [华中科技大学 2007 研]

- A. 主链链节
- B. 侧基
- C. 侧基内的官能团或原子

【答案】A

8. 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 ()。 [上海交通大学 2005 研]

- A. 单键的自旋转
- B. 双键的自旋转
- C. 氢键的自旋转

【答案】B

二、填空题

1. 高分子材料的基本聚合方式可以分为 和 。 [华中科技大学 2007 研]

【答案】加聚反应；缩聚反应

2. 线性高分子可反复使用，称为 _____ 塑料；交联高分子不能反复使用，称为 _____ 塑料。 [北京工业大

学
2009 研]

三、名词解释

热塑性和热固性高分子材料 [吉林大学 2010 研]

答：高分子材料是由相对分子质量较高的化合物构成的材料，包括橡胶、塑料、纤维、涂料、胶黏剂和高分子基复合材料等。高分子材料按其性能可分为热塑性和热固性高分子材料，其中，热塑性高分子材料可溶、可熔；热固性高分子材料不溶、不熔。利用加热和溶解的方法可将热固性和热塑性材料分辨出来，常用的识别高分子材料的简便方法有经验法、燃烧法、溶解法、仪器分析法等。

第4章 晶体缺陷

4.1 复习笔记

根据缺陷的空间的几何图像，将晶体缺陷分为三大类：点缺陷、线缺陷、面缺陷。

一、点缺陷

1. 点缺陷的类型

(1) 肖脱基 (Schottky) 缺陷：晶体中某结点上的原子空缺了，则称为空位，脱位原子一般进入其他空位或者逐渐迁移至晶界或表面，这样的空位通常称为肖脱基 (Schottky) 空位或肖脱基缺陷。

(2) 弗兰克耳 (Frenkel) 缺陷：晶体中的原子有可能挤入结点的间隙，则形成另一种类型的点缺陷——间隙原子，同时原来的结点位置也空缺了，产生一个空位，通常把这一对点缺陷 (空位和间隙原子) 称为弗兰克耳 (Frenkel) 缺陷。

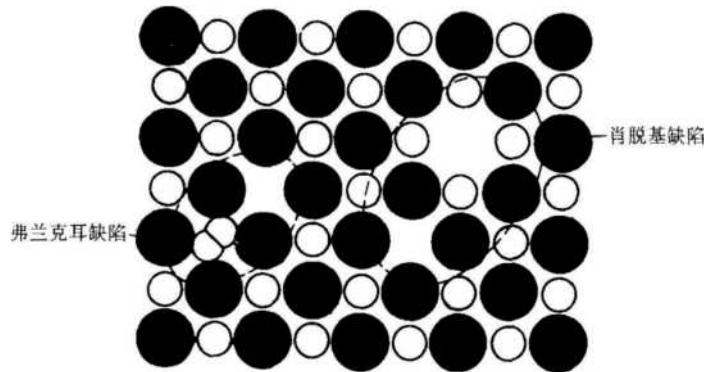


图 4-1 化合物离子晶体中两种常见的点缺陷

2. 点缺陷的产生

(1) 平衡点缺陷及其浓度

- ① 空位和间隙原子是由原子的热运动产生的。
- ② 晶体中平衡点缺陷的浓度可表示为：

$$\frac{n_e}{N} = C_e = A \exp \frac{-u}{kT}$$

式中， C_e 为某一种类型点缺陷的平衡浓度； N 为晶体的原子总数； A 是材料常数，其值常取作 1； T 为体系所处的热力学温度； k 为玻尔兹曼常数，约为 $8.62 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$ 或 $1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ ； U 为该类型缺陷的形成能。

(2) 过饱和点缺陷的产生

有时晶体中点缺陷的数目会明显超过平衡值，这些点缺陷称为过饱和点缺陷。

3. 点缺陷与材料行为

(1) 空位和间隙原子的运动是晶体内部原子扩散的内部原因，原子 (或分子) 的扩散就是依靠点缺陷的运动而实现的；

(2) 点缺陷还可以造成金属物理性能与力学性能的变化

二、位错的基本概念

1. 位错与塑性变形

塑性变形是晶体在外力作用下进行的永久变形，研究塑性变形时内部发生的变化，采用单晶体进行研究。

2. 晶体中的位错模型及位错易动性

(1) 刃型位错

① 定义

位错在空间的一维方向上尺寸很长，故属于线性缺陷，这种类型的位错称为刃型位错；

② 特点

a. 刃型位错中，晶体发生局部滑移的方向是与位错线垂直的；

b. 习惯上把半原子面在滑移面上方的称正刃型位错，以记号“上”表示；相反半原子面在下方的称负刃型位

错，以“下”表示。

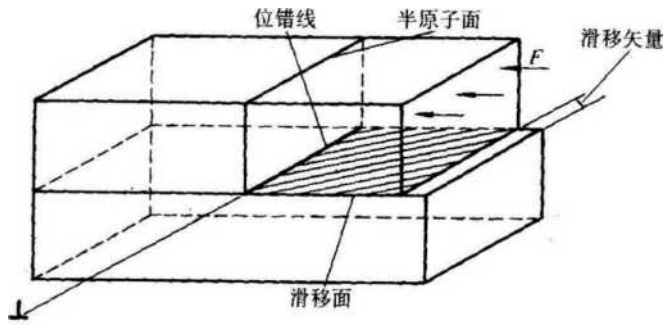


图 4-2 刃型位错的形成

(2) 螺型位错

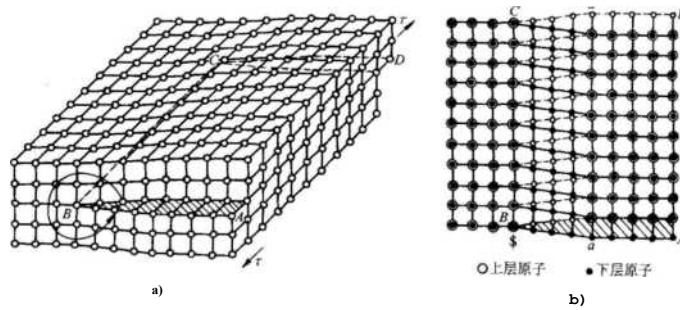
① 定义

在位错线周围原子呈螺旋状分布 (图 4-3 (b)), 故称为螺型位错;

② 特点

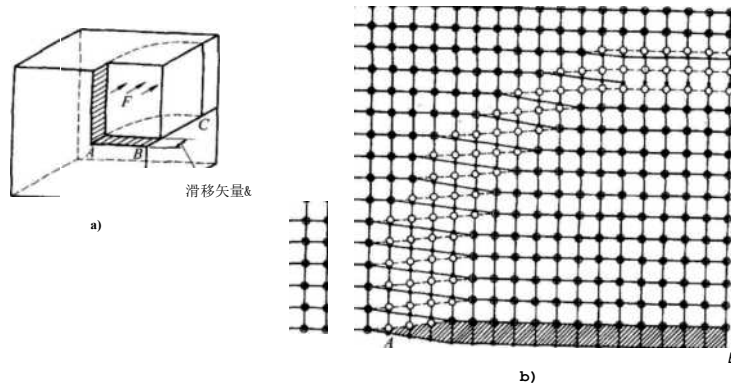
a. 根据螺旋面前进的方向与螺旋面旋转方向的关系可分为左、右螺型位错, 符合右手定则的称右旋螺型位错; 符合左手定则的为左旋螺型位错。

b. 位错线与滑移方向平行, 为螺型位错;



a) 晶体的局部滑移; b) 螺型位错的原子组态

图 4-3 螺型位错



a) 晶体的局部滑移; b) 混合位错的原子组态

图 4-4 混合位错

(3) 混合型位错

在中间部分, 位错线既不平行也不垂直于滑移方向, 每一小段位错线都可分解为刃型和螺型两个分量称为混合位错。

(4) 位错的易动性

① 位错处原子能量高, 它们不太稳定, 因此在切应力作用下原子很容易位移, 把位错推进一个原子距离, 这一特性叫做位错的易动性;

② 螺型位错和刃型位错都具有易动性。

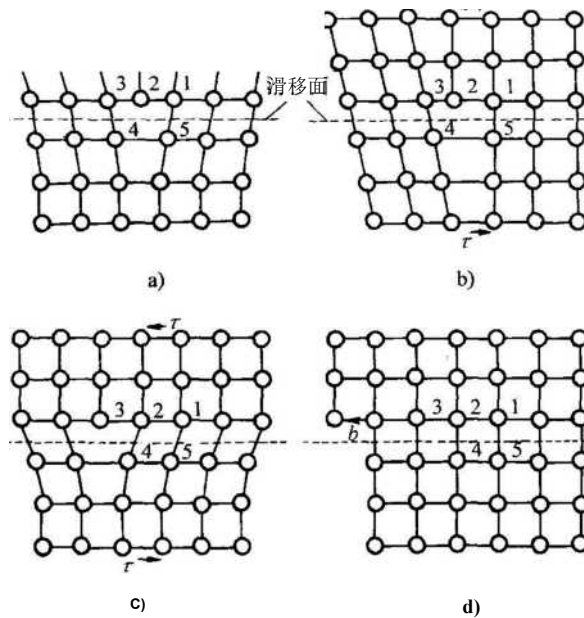
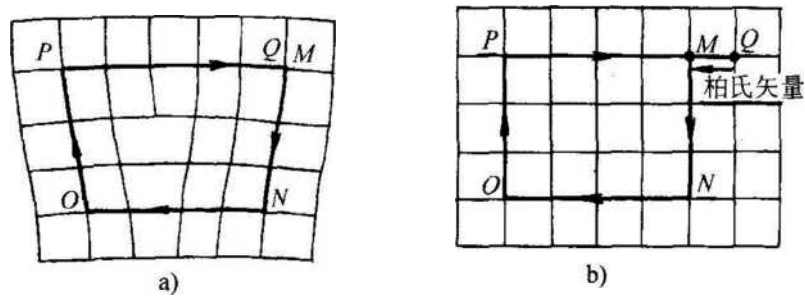


图 4.5 刃型位错的滑移过程

3. 柏氏矢量

(1) 确定方法

- ① 刃型位错的柏氏矢量是与位错线垂直，并与滑移面平行；
- ② 螺型位错的柏氏矢量是与位错线平行的。



a) 含位错晶体的柏氏回路； b) 理想晶体的柏氏回路

图 4-6 刃型位错柏氏矢量的确定

(2) 柏氏矢量的意义

任何一根位错线，不论其形状如何变化，位错线上各点的 b 都相同，或者说一条位错线只有一个 b 。

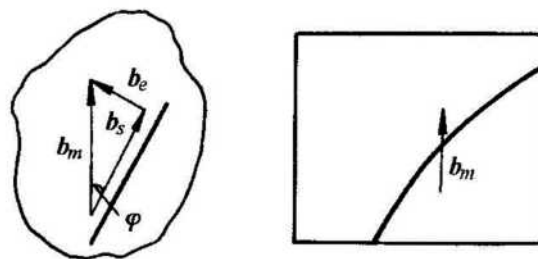


图 4-7 混合位错的柏氏矢量

(3) 柏氏矢量的表示方法 柏氏矢量的一般表达式为：

其模则为：

$$|g| = \sqrt{V^2 + s^2}$$

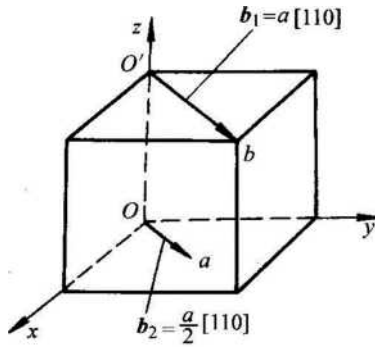


图 4-8 柏氏矢量的表示

4. 位错的运动

位错在晶体中运动有两种方式：滑移和攀移

(1) 位错的滑移

位错的滑移是在切应力作用下进行的，只有当滑移面上的切应力分量达到一定值后位错才能滑移。

(2) 刃、螺型位错滑移特征的不同

① 开动位错运动的切应力方向不同：

使刃型位错运动的切应力方向必须与位错线垂直；而使螺型位错运动的切应力方向却是与螺型位错平行的；

② 位错运动方向与晶体滑移方向两者之间的关系不同：

对于刃型位错，晶体的滑移方向与位错运动方向是一致的；螺型位错所引起的晶体滑移方向却与位错运动方向垂直；

③ 与柏氏矢量的关系：

a. 使位错滑移的切应力方向和柏氏矢量 b 都是一致的；

b. 滑移面两侧晶体的相对位移也是与柏氏矢量 b 一致的。

表 4-1 位错的滑移特征

| 类型 | 柏氏向量 | 位错线运动方向 | 晶体滑移方向 | 切应力方向 | 滑移面个数 |
|----|-----------|---------|----------|----------|-------|
| 刃 | 上于位错线 | 上于位错线本身 | 与 b 一致 | 与 b 一致 | 唯一 |
| 螺 | " 于位错线 | 上于位错线本身 | 与 b 一致 | 与 b 一致 | 多个 |
| 混合 | 与位错线成一定角度 | 上于位错线本身 | 与 b 一致 | 与 b 一致 | |

(3) 位错的攀移

① 攀移的本质

攀移的本质是刃型位错的半原子面向上或向下移动，于是位错线也就跟着向上或向下运动；

② 正攀移和负攀移

半原子面向上移动称为正攀移，半原子面向下运动称为负攀移；

③ 攀移的机制

攀移的机制与滑移也不同，滑移时不涉及原子的扩散，而攀移正是通过原子的扩散而实现的。

④ 攀移时位错线的运动方向正好与柏氏矢量垂直且只有刃型位错才能发生攀移运动，螺型位错不会攀移；

5. 位错密度

晶体中位错的数量用位错密度 P 表示，它的意义是单位体积晶体中所包含的位错线总长度，即

$$Q = \frac{S}{V}$$

式中， V 是晶体的体积； S 为该晶体中位错线的总长度。 P 的单位为 m/m^3 ，也可化简为 $1/\mu m^2$ ，此时位错密度可理解为

$$P = \frac{n}{A}$$

式中， A 为截面积； n 为穿过面积 A 的位错线数目。

6. 位错的观察

目前已有多种实验技术用于观察晶体中的位错，常用的有以下两种：

(1) 浸蚀技术

(2) 透射电镜

三、位错的能量及交互作用

1. 位错的应变能

根据虎克定律，弹性体内应力与应变成正比，即：

$$\sigma = E \epsilon$$

单位长度位错线的应变能可简化写作：

$$U = \alpha G b^2$$

其中 α 的值可取为 0.5~1.0, 对螺型位错 α 取下限 0.5, 刃型位错则取上限 1.0。

由上式可知：位错的能量与切变模量成正比，与柏氏矢量的模的平方成正比，所以柏氏矢量的模是影响位错能量最重要的因素。

2. 位错的线张力

已知表面具有表面能 γ ，在降低表面能的驱动力作用下，表面膜会自动收缩。

$$\gamma = \frac{Gb}{r}$$

由上式可知，保持位错线弯曲所需的切应力与曲率半径成反比，曲率半径越小，所需的切应力越大，这一关系式对于位错运动及增殖有重要的意义。

3. 位错的应力场及与其他缺陷的交互作用

(1) 位错的应力场

切应变与切应力可简单地表达为：

$$\gamma = \frac{b}{r} \quad ; \quad \tau = \frac{Gb}{2\pi r}$$

(2) 位错与点缺陷的交互作用

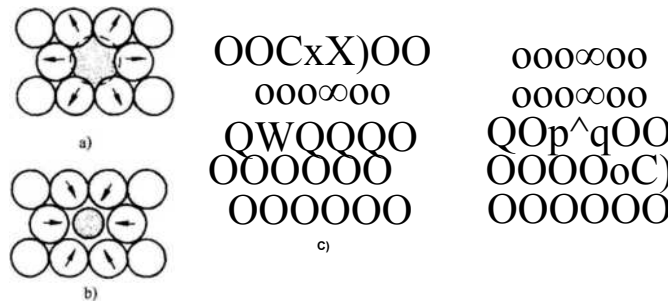


图 4-9 溶质原子与位错的交互作用

(3) 位错与其它位错的交互作用

位错的应力场对其他位错也产生一个作用力，使位错发生运动，以降低体系的自由能。

单位长度位错线的作用力大小为：

$$F_d = Lb_2 = \frac{Gb_1b_2}{2\pi r}$$

其方向垂直于位错线，且使位错间距离 r 逐渐增大。

相反两根异号位错互相接近时，位错的拉应力区与压缩应力区互相重叠而抵消，于是相互吸引而互毁。

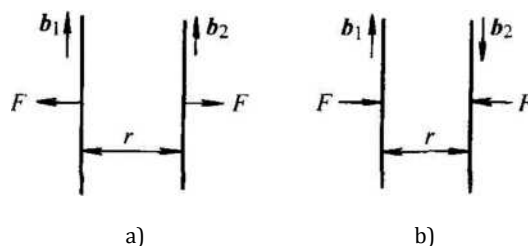


图 4-10 平行螺型位错间的交互作用力

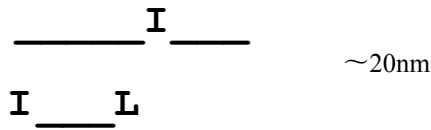


图 4-11 刃型位错的稳定排列方式

4. 位错的分解与合成

(1) 位错反应的条件

所有自发的位错反应必须满足两个条件:

- ① 几何条件 $\sum \mathbf{b}_{\text{前}} = \sum \mathbf{b}_{\text{后}}$, 即反应前后位错在三维方向的分矢量之和必须相等。
- ② 能量条件 $\sum b_{\text{前}}^2 > \sum b_{\text{后}}^2$, 即位错反应后应变能必须降低, 这是反应进行的驱动力。

(2) 实际晶体中位错的柏氏矢量

实际晶体中也是一样, 位错的柏氏矢量都是与连接点阵中最近邻两个原子的点阵矢量相等。

① 对面心立方点阵, 最短的点阵矢量为原点到面心位置, 可用 $\frac{a}{2}\langle 110 \rangle$ 表示, 其长度为 $\frac{a}{\sqrt{2}}$ 。这是面心立方的全位错的柏氏矢量。次短的点阵矢量为 $a\langle 100 \rangle$, 长度为 a , 它的能量较高, 出现的机率很低;

② 体心立方点阵中最短的点阵矢量为 $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$, 是体心立方晶体全位错的柏氏矢量; ③ 密排六方晶体最密

排的晶向是 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, 该矢量上包含了三个原子间距, 故全位错的柏氏矢量值为 $\frac{a}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 。

(3) 面心立方晶体中全位错的分解及扩展位错

① 面心立方晶体中位错的滑移面为 $\{111\}$, 滑移面上 $T = \frac{a}{3}\langle 110 \rangle$ 的全位错会分解成两个 $\frac{a}{6}\langle 11\bar{2} \rangle$ 的分位错。分位错在面心立方晶体的塑变中起了重要作用, 通常称它为肖克莱 (Shockley) 分位错。

② 层错能的作用类似表面张力, 在层错能作用下层错区有收缩的趋势, 而分位错间的排斥力又使两位错尽量分开, 当这两种相反的力达到平衡时得到扩展位错的平衡宽度 d , 即:

$$\frac{\gamma}{2nd} = G(M)$$

$$G(M)$$

式中 b_1, b_2 为两个分位错的柏氏矢量。可见扩展位错的宽度 d 与层错能成反比, γ 越大, d 越小, 金属的层错能的大小及扩展位错宽度对塑性变形过程及材料的强化起了重要作用。

四、晶体中的界面

1. 晶界的结构与晶界能

(I) 小角度晶界的结构

当晶界两侧的晶粒位向差很小时, 晶界基本上由位错组成。最简单的情况是对称倾斜晶界, 即晶界两侧的晶粒相对于晶界对称地倾斜了一个小的角度。位错间距 D 与位向差 θ 之间的关系可简单地求得:

$$D = \frac{a}{\theta}$$

当 θ 很小时, D 为几万到几十万, 则

(2) 大角度晶界

晶界相当于两晶粒之间的过渡层，是仅有 2~3 个原子厚度的薄层，这里虽然也存在一些排列比较规则的位置，但总体来说，原子排列相对无序，也比较稀疏些。

(3) 晶界能

① 不论是小角度晶界或大角度晶界，这里的原子或多或少地偏离了平衡位置，所以相对于晶体内部，晶界处于较高的能量状态，高出的那部能量称为晶界能，或称晶界自由能，记作 γ ，其单位为 $J \cdot m^{-2}$ 有时晶界能以界面张力的形式表示，其单位采用 $N \cdot m^{-1}$ ($=J \cdot m^{-2}$)，记作 σ ；

② 小角度晶界能 γ_G 与 θ 之间的关系式：

$$\gamma_G = \gamma_0 \cdot (B - \ln \theta)$$

式中， γ_0 为材料常数，其中 G 为切变模量， b 为柏氏矢量， ν 为泊松比； B 为积分常数，取决于位错中心的错排能。由式可见，晶界能 γ 随位向差的增大而提高；

③ 大角度晶界近似看成为材料常数。

2. 表面及表面能

(1) 材料表面的原子和内部原子所处的环境不同，内部的任一原子处于其他原子的包围中，周围原子对它的作用力对称分布，因此它处于均匀的力场中，总合力为零，即处于能量最低的状态；

(2) 表面原子处于不均匀的力场之中，能量大大升高，高出的能量称为表面自由能(或表面能)，记作 σ ，有时也可表示为单位表面长度上的作用力，即表面张力记作 σ 。显然，表面能的数值要明显高于晶界能，根据实验，测定其数值大约为晶界能的三倍，即

$$\sigma_s = 3\gamma_G$$

与晶界能一样，材料的表面能与衡量原子结合力或者结合键能的弹性模量 E 有直接的联系，与原子间距 b 也有关，它们之间的关系可表不为：

$$\sigma_s \approx \frac{1}{4} E b$$

3. 表面吸附与晶界内吸附

(1) 表面吸附

① 吸附是指外来原子或气体分子在界面上富集的现象，吸附是自发过程；

② 降低的能量以热的形式释放，故吸附过程是放热反应，放出的热量称为吸附热；

③ 固体表面的吸附按其作用力的性质可分为两大类：物理吸附和化学吸附。

a. 物理吸附是由范德华耳斯力作用而相互吸引的，范德耳斯力存在于任何两个分子之间，所以任何固体对任何气体或其他原子都有这类吸附作用，即吸附无选择性，只是吸附的程度随气体或其他原子的性质不同而有所差异；

b. 化学吸附则来源于剩余的饱和键力，吸附时表面与被吸附分子间发生了电子交换，电子或多或少地被两者所共有，其实质上是形成了化合物，即发生了强键结合。

(2) 晶界内吸附

① 对金属材料的研究中发现少量杂质或合金元素在晶体内部的分布也是不均匀的，它们常偏聚于晶界，为区别于表面吸附，称这种现象为晶界内吸附。

② 内吸附是异类原子与晶界交互作用的结果，由于外来原子的尺寸不可能与基体原子完全一样，在晶粒内部分布总要产生晶格应变，相反，晶界处原子排列相对无序，故不论是大原子或小原子都可在晶界找到比晶内更为合适的位置，使体系总的应变能下降。

4. 润湿行为

(1) 图 4-12 给出了液滴在固体表面润湿与不润湿的情况，接触角。为图中三相接触点 O 上液-固($\sigma_{s/L}$)和液-气($\sigma_{L/V}$)界面张力之间的夹角。

① 当 $\theta < 90^\circ$ 时，液滴对固体的粘着性很好，即润湿性(或浸润性)较好，润湿能力随角的减小而增加；

② 当 θ 趋于零时，液体几乎可以完全铺展在固体表面，称为液体对固体完全润湿；

③ 当 θ 角大于 90° 时，则称为不润湿，液相对固体的粘着性较差；

④ 当 $\theta = 180^\circ$ 时，液滴呈完整的球状，与表面为点接触，称其为完全不润湿。

(2) θ 角的大小则取决于固体表面张力 $\sigma_{S/V}$ 、液体表面张力 $\sigma_{L/V}$ 以及固-液之间的表面张力 $\sigma_{S/L}$ 的相对大小，如图 4-12 所示，接触点 O 受到这三个力的作用，当达到平衡状态时合力为零，良 L

$$\sigma_{S/V} = \sigma_{S/L} + \sigma_{L/V} \cos \theta$$

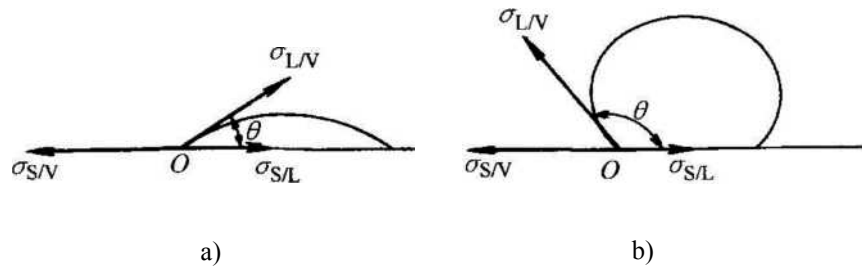


图 4-12 液滴在固体表面润湿(a)与不润湿(b)的情况

由此可见，固体与液体接触后体系的表面能 ($\sigma_{S/L} + \sigma_{L/V}$) 低于接触前的表面能 $\sigma_{S/V}$ ，所以从热力学上讲润湿是体系自由能降低的过程。

(1) 异相间的润湿行为对晶体的显微组织有重要的影响，对两相合金而言，如在(X相中存在有少量第二相 P 时，P 相常倾向于分布在主相(I)的晶界上，特别是三个晶粒的交会点上，以降低体系总的界面能，至于。相在晶界上的形态则取决于晶界能 $\gamma_{\alpha/\alpha}$ 和相界能 $\gamma_{\alpha/\beta}$ 之间的平衡。图中 13 是第二相 IJ 分布于 OI 相交会点的情况，交会点的接触角为 θ ，高温时， θ 角会自动调整来满足晶界能和相界能的平衡，即

$$\gamma_{\alpha/\alpha} = 2\gamma_{\alpha/\beta} \cos \frac{\theta}{2}$$

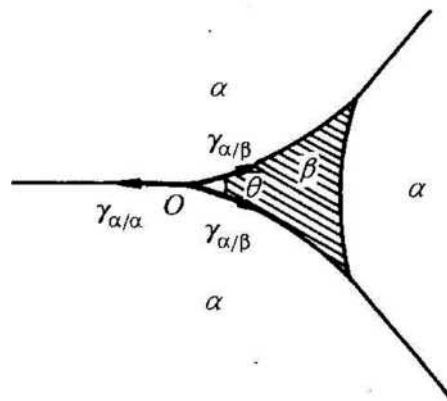


图 4-13 第二相处于三晶粒交会点时晶界能与相界能的平衡 具有不同接触角的第二相在晶界上的形状如图 4-14 所示。

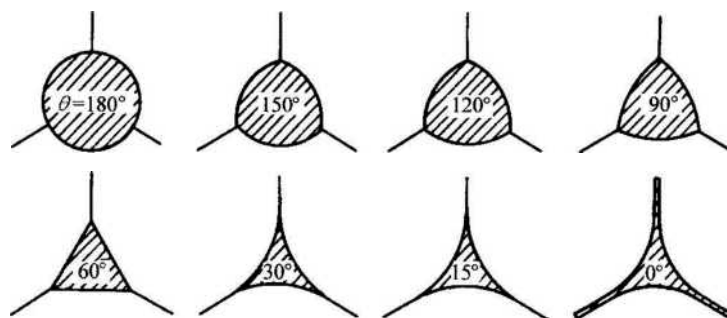


图 4-14 不同接触角下第二相在晶界上的形状

5. 界面能与显微组织的变化

- (1) 晶体材料的界面能会促使显微组织发生变化，变化的结果是降低了界面能。
- (2) 当晶粒处于平衡时，某一交会点处的各晶界的界面能与界面夹角之间应存在下述平衡关系：

$$\frac{\sigma_{S/V}}{\sin \theta} = \frac{\sigma_{S/L}}{\sin \theta_1} = \frac{\sigma_{L/V}}{\sin \theta_2}$$

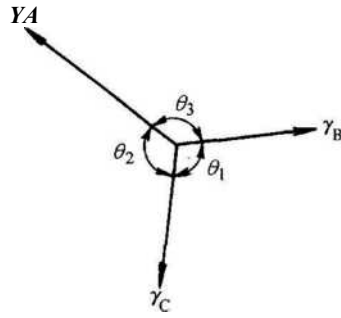


图 4.15 三晶粒交会点上界面能的平衡关系

4.2 名校考研真题详解

一、选择题

1. 下面关于位错应力场的表述中，正确的是（ ）。 [上海交通大学 2005 研]

- A. 螺型位错的应力场中正应力分量全为零
- B. 刃型位错的应力场中正应力分量全为零
- C. 刃型位错的应力场中切应力分量全为零

【答案】A

2. 螺型位错的位错线是（ ）。 [合肥工业大学 2005 研]

- A. 曲线
- B. 直线
- C. 折线
- D. 环形线

【答案】A

二、填空题

1. 通常把晶体的界面分为、和 _____ 三类。 [天津大学 2009 研]

【答案】晶界；相界；表面

2. 位错的柏氏矢量集中地反映了位错区域内畸变总量的 _____ 和。 [沈阳大学 2009 研]

【答案】大小；方向

3. _____ 小角度晶界是相邻两晶粒的位向差 _____ 的晶界，它主要可以分为 _____ 和 _____ 两种，前者是由 _____ 位错构成，后者是由 _____ 位错构成，小角度晶界的晶界能比大角度晶界的晶界能 _____。 [合肥工业大学 2006 研]

4. 点缺陷的平衡浓度随 _____ 的升高而增大。 [北京工业大学 2008 研]

【答案】温度

三、名词解释

1. 扩展位错 [东北大学 2007 研]

答：一个全位错分解为 2 个 Shockley 不全位错，这样的 2 个 Shockley 位错一起被称为扩展位错。

2. 位错 [西安工业大学 2008 研]

答：：位错是晶体中的一维缺陷或线状缺陷。

3. 全位错与不全位错 [西安交通大学 2009 研]

答：全位错是指柏氏矢量等于晶体点阵矢量的位错；不全位错是指柏氏矢量不等于晶体点阵矢量的位错。

四、简答题

1. 晶界从结构上可分为哪几种类型？晶界结构的普遍特点是什么？ [武汉大学 2009 研]

答：(1) 从结构上来看，晶界可分为小角度晶界和大角度晶界，其中小角度晶界又可以分为：倾斜晶界、扭转晶界和重合晶界。

(2) 晶界结构的普遍特点是原子排列比晶内混乱的多，特别是大角晶界上原子排列更加混乱。

2. 论述位错的运动方式、条件及其对材料变形的影响。 [湖南大学 2007 研]

答：(1) 运动方式。刃型位错：滑移，攀移；螺型位错：滑移和交滑移。

(2) 条件。滑移需要临界切应力，启动单个位错滑移的力为 $F \cdot N$ 力。攀移运动需要正应力和高温作用。只有螺型位错才能发生交滑移，层错能的大小对交滑移的影响很明显，层错能越高，则扩展层错越窄，位错越容易束集而发生交滑移。

(3) 位错滑移和交滑移是材料主要的塑性变形方式，只有在高温和高正应力作用时才能发生正刃型位错的攀移。

3. 纯金属中主要的点缺陷有哪些，简述其可能的产生原因。 [东南大学 2005 年、南京航空航天大学 2007 研]

答：纯金属晶体中，点缺陷的主要类型是空位、间隙原子、空位对及空位与间隙原子对。它们产生的途径有以下几个方面：

(1) 依靠热振动使原子脱离正常点阵位置而产生。空位、间隙原子或空位与间隙原子对都可由热激活而形成。这种缺陷受热的控制，它的浓度依赖于温度，随温度升高，其平衡态的浓度亦增高。

(2) 冷加工时由于位错间有交互作用，在适当条件下，位错交互作用的结果能产生点缺陷，如带割阶的位错运动会放出空位。

(3) 辐照。高能粒子（中子、 α 粒子、高速电子等）轰击金属晶体时，点阵中的原子由于粒子轰击而离开原来位置，产生空位或间隙原子。

4. 简述位错、位错线和柏氏矢量 (5) 的概念，并论述柏氏矢量和位错线的相对关系。 [吉林大学 2009 研]

答：(1) 位错是晶体材料的一种内部微观缺陷，指原子的局部不规则排列（晶体学缺陷）。从几何角度看，位错属于一种线缺陷，可视为晶体中已滑移部分与未滑移部分的分界线，其存在对材料的物理性能，尤其是力学性能，具有极大的影响。

位错线是指晶体或晶格内滑移面上已滑动区的边界线称。位错线的形成和发展可用 Frank Read 源的原理解释：当应力超过临界剪应力时，位错线扩张，形成内外两部分，外部位错逐渐扩大，内部位错线恢复原状，在外力作用下，不断产生新位错环，因而得到很大的滑移量。

柏氏矢量是描述位错实质的重要物理量，反映出柏氏回路包含的位错所引起点阵畸变的总积累。通常将柏氏矢量称为位错强度，位错的许多性质如位错的能量、所受的力、应力场、位错反应等均与其有关。它也表示出晶体滑移时原子移动的大小和方向。

(2) 柏氏矢量和位错线的相对关系：

① 一条位错线具有唯一的柏氏矢量。它与柏氏回路的大小和回路在位错线上的位置无关，位错在晶体中运动或改变方向时，其柏氏矢量不变；

② 根据柏氏矢量与位错线的关系可以确定位错的类型。当柏氏矢量垂直于位错线时是刃位错；当柏氏矢量平行于位错线时是螺位错；当柏氏矢量与位错线成任意角度时是混合位错。

5. 点缺陷（如间隙原子或代位原子）和线缺陷（如位错）为何会发生交互作用？这种交互作用如何影响力学性能？ [北京科技大学 2006 研]

答：(1) 发生交互作用的原因：

① 在晶体中，点缺陷会引起晶格畸变，产生内应力，形成应力场；点缺陷的应力场与位错的应力场会发生交互作用，其结果是通过点缺陷运动而使点缺陷相位错形成特定的分布，从而使体系的自由能达到较低状态；

② 柯垂尔提出了溶质原子与位错之间的交互作用，在间隙固体中，由于间隙原子的半径比晶体间隙的半径大，与位错进行弹性交互作用，结果间隙原子将在位错附近聚集，形成小原子集团，称为柯垂尔气团。柯垂尔气团的存在，使位错运动困难，这是因为位错只有从气团中挣脱或者抱着气团一起前进才能继续运动，这需要外力作更多的功，这就是固溶强化效应；

③ 而空位通常被吸引到刃型位错的压缩区，或消失在刃型位错线上，使位错线产生割阶，空位与位错在一定条件下可互相转化。

(2) 由刃型位错的应力场可知，在滑移面以上，位错中心区域为压应力，而滑移面以下的区域为拉应力，若有间隙原子 C, N 或比溶剂原子尺寸大的置换溶质原子存在就会与位错交互作用偏聚于刃型位错的下方，以抵

消部分或全部的张应力，从而使位错的弹性应变能降低，当位错处于能量较低状态时，位错趋于稳定，不易运动，即对位错形成钉扎作用，位错要运动就必须在更大应力作用下才能挣脱柯垂尔气团的钉扎作用而移动，这就形成上下屈服点。

1. 什么是晶体缺陷？按照晶体缺陷的几何组态，晶体缺陷可分为哪几类？ [北京理工大学 2006 研]

答：(1) 在理想完整晶体中，原子按一定的次序严格地处在空间有规则的、周期性的格点上。但在实际的晶体中，由于晶体形成条件、原子的热运动及其他条件的影响，原子的排列不可能那样完整和规则，往往存在偏离了理想晶体结构的区域。这些与完整周期性点阵结构的偏离就是晶体缺陷，它破坏了晶体的对称性。晶体缺陷有的是在晶体生长过程中，由于温度、压力、介质组分浓度等变化而引起的；有的则是在晶体形成后，由于质点的热运动或受应力作用而产生。它们可以在晶格内迁移，以至消失；同时又可有新的缺陷产生。

(2) 按照晶体缺陷的几何组态，晶体缺陷可分为：

① 点缺陷，只涉及到大约一个原子大小范围的晶格缺陷，包括：晶格位置上缺失正常应有的质点而造成的空位；由于额外的质点充填晶格空隙而产生的填隙；由杂质成分的质点替代了晶格中固有成分质点的位置而引起的替位等。在类质同象混晶中替位是一种普遍存在的晶格缺陷。

② 线缺陷，是沿着晶格中某条线的周围，在大约几个原子间距的范围内出现的晶格缺陷。位错是其主要的表现形式。

③ 面缺陷，是沿着晶格内或晶粒间的某个面两侧大约几个原子间距范围内出现的晶格缺陷，主要包括堆垛层错以及晶体内部和晶体间的各种界面，如小角晶界、畴界壁、双晶界面及晶粒间界等。此外，也有人把晶体中的包裹体等归为晶体缺陷而再分出一类体缺陷。

2. 在位错发生滑移时，请分析刃位错、螺位错和混合位错的位错线 Z 与柏氏矢量 b 、外加切应力 T 与柏氏矢量 b 、外加切应力 c 与位错线 Z 之间的夹角关系，及位错线运动方向。 [西北工业大学 2009 研]

答：如表 4-1 所示。

表 4-1

| 类型 | B 与 I | τ 与 B | f 与 I | 位错线运动方向 |
|------|-----------|--------------|-----------|---------|
| 刃位错 | \perp | // | \perp | 法线 |
| 螺位错 | // | // | // | 法线 |
| 混合位错 | 一定角度 | // (分量) | 一定角度 | 法线 |

3. 请简单说明层错能高低对螺型位错交滑移的影响，及其对金属加工硬化速率的影响。 [西南交通大学 2008 研]

答：(1) 层错能高低对螺型位错交滑移的影响：

① 在变形过程中，层错能高的金属，其高层错使得全位错不易发生分解，遇到阻碍时，可以通过交滑移继续运动，不会发生中断，直到与其他位错相遇形成缠结而后停止；

② 层错能低的金属，由于其全位错容易分解为两个不全位错，难以发生交滑移，只能通过两个不全位错的运动来完成，所以位错组态的运动性差。

(2) 在螺型位错交滑移过程中，由于同一滑移面上的两个异号的螺型位错相遇可以相互抵消，从而降低位错的增殖速率。而对于层错能低的金属难以发生交滑移，因此变形过程中位错增殖速率大，从而导致加工硬化速率增大。

4. 比较大角度晶界能与表面能的大小，并分析其原因。 [南京理工大学 2009 研]

答：大角度晶界能：断键以及临近层原子键变化产生的能量；表面能：原子键变化产生的能量。

一般来说，表面能大于大角度晶界能，面缺陷表面能是指金属与真空或气体、液体等外部介质相接触的界面，界面上的原子会同时受到晶体内部自身原子和外部介质原子和分子的作用力，而内部原子对外界面原子的作用力显然大于外部原子或分子的作用力，表面原子就会偏离其正常平衡位置，并牵连到邻近的几层原子，造成表面层产生较大的晶格畸变，即表面原子的结合键断开，产生较高的能量。

而大角度晶界是晶体内部相邻晶粒相差在 1 (TC 以上，部分原子的结合键发生变化而并未断开，引起的晶格畸变较小，故能量较低。

5. 举例或画图说明什么是小角晶界的位错模型？描述大角晶界有何模型？其含义是什么？ [北京科技大学 2006 研]

答：(1) 小角晶界主要是指相邻晶粒位相差小于 10° 的晶界，而根据相邻晶粒之间位相差的形式不同又可分为倾斜晶界、扭转晶界和重合晶界等。

对称倾斜晶界可看做把晶界两侧晶体互相倾斜的结果，其晶界结构可看是由一系列平行的刃型位错所构成，位

$$D = \frac{b}{2 \sin(\theta/2)}$$

不对称倾斜晶界结构可看成由两组柏氏矢量互相垂直的刃型位错交错排列而成

扭转晶界可看成是两部分晶体绕某一轴在一个共同的晶面上相对扭转一个角所构成的，扭转轴垂直于这一共同的晶面，其结构可看成由互相交叉的螺型位错所组成。

(2) 大角度晶界多为多晶体材料中各晶粒之间的晶界。大角度晶界上原子排列比较紊乱，但也存在一些比较整齐的区域，因此其晶界可看成由坏区与好区交替相间组合而成，主要有“重合位置点阵”模型、非晶模型和小岛模型。

6. 以低碳钢的拉伸曲线为例，运用位错理论说明屈服现象及加工硬化现象。[西南交通大学 2008 研]

答：低碳钢的屈服是由于低碳钢中的碳是间隙原子，它与铁素体中的位错交互作用形成溶质原子气团，即所谓的柯氏气团。该气团对位错有钉扎作用，只有在较大的应力作用下，位错才能脱离溶质原子的钉扎，表现为应力-应变曲线上的上屈服点。而一旦位错脱钉，继续滑移，就不需要那么大应力了，表现为应力-应变曲线上的下屈服点和水平台阶。当继续变形时，由于位错数量的大大增加，导致应力又出现升高的现象，称为加工硬化现象。这是由于冷变形金属在塑性变形过程中形成大量位错，这些位错部分成为不可动位错，从而导致其对可动位错的阻力增大，引起材料继续变形困难，形成加工硬化或形变强化。

五、计算题

1. 试分析在 fcc 中下述反应能否进行？并指出其中三个位错的性质类型，反应后生成的新位错能否在滑移面上运动？[四川大学 2009 研]

$$\frac{1}{2}[10\bar{1}] + \frac{1}{6}[121] \rightarrow \frac{1}{3}[\bar{1}11]$$

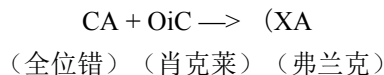
答：(1) 位错反应几何条件：

$$R + \text{方} = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{6}\right) \quad 6 \quad | < 2 \quad 6 \quad 3 \quad 3 \quad 3$$

能量条件：
$$\left|\frac{a}{2}\sqrt{2}\right|^2 + \left|\frac{a}{6}\sqrt{6}\right|^2 = \left(\frac{a^2}{2} + \frac{a^2}{6}\right) > \frac{a^2}{3}$$

因此， $\frac{1}{2}[\bar{1}0\bar{1}] + \frac{1}{6}[121] \rightarrow \frac{1}{3}[\bar{1}11]$ 位错反应能进行。

(2) 对照汤姆森四面体，此位错反应相当于：



新位错 $[\bar{1}11]$ 的位错线为 (了互) 和 (III) 的交线位于 (OOI) 面上，且系纯刃型位错。由于 (OOI) 面系 fcc 非密排面，故不能运动，系固定位错。

2. 有一面心立方单晶体，在 (III) 面滑移的柏氏矢量为 $\frac{1}{2}M[\bar{1}01]$ 的右螺型位错，与在 (II) 面上滑移的柏氏

矢量为 $\frac{1}{2}N[011]$ 的另一右螺型位错相遇于此两滑移面交线，并形成一个新的全位错。

- (1) 说明新生成的全位错属哪类位错，该位错是否滑移，为什么？
- (2) 若沿 $[010]$ 晶向施加大小为 17.2MPa 的拉应力，试计算该新生全位错单位长度的受力大小，并说明方向

(设点阵常数为 $a=0.2\text{nm}$)。[清华大学 2007 研]

答：(1) 由于位错线为两滑移面交线，故位错线为：

$$\xi = n_1 \times n_2 = \begin{vmatrix} \text{III} & & \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix} = [1\ 0\ \bar{1}]$$

式中， ξ 、 n 分别为两滑移面法矢量。

而柏氏矢量 $b = \frac{1}{2}[\bar{1}01] + \frac{1}{2}[011] = \frac{1}{2}[\bar{1}10]$ ，可见，位错线与柏氏矢量既不平行，也不垂直，该新生位错为混合型位错。

已知该新生位错的位错线及柏氏矢量，可由它们叉乘得到新生位错滑移面的法向量，供供

$$n_3 = \xi \times b = \begin{vmatrix} 1 & 0 & \bar{1} \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = [1\ \bar{1}\ 1]$$

该位错的滑移面为 (101)。因该单晶体为面心立方，滑移面为 (II) 为面心立方密排面，故该位错可以滑移。

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/09705512316406150>

$$CF = 17.2 \text{ MPa}$$

根据 Schmid 定律可知， $T = \sigma \cos \phi \cos \lambda$ ，故作用在新生位错滑移面的滑移方向上的分切应力为：

$$T_0 = \sigma \cos \phi \cos \lambda = 17.2 \times \dots = 7.0 \text{ MPa}$$

对于面心立方且设点阵常数为 $a=0.2\text{nm}$ ，则位错线单位长度：

$$|b| = a/2 = 0.1 \times 10^{-9} \text{ m}$$

则作用在单位长度位错线上的力为： $f = \tau b = 2 \times 4 \text{ N/m}$ 方向为垂直于位错线方向 $[101]$ ，指向未滑移区。

3. 在 $\text{MgAl}_2\text{O}_4\text{-Al}_2\text{O}_3$ 系统中，氧化铝的一种变体 $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ 和尖晶石的结构相似，但含有阳离子空位。已知 MgAl_2O_4 尖晶石固溶体的化学式可以写成 $\text{Mg}_{1-x}\text{Al}_{2+ (M)}\text{O}_4$ 这个式子强调了阳离子空位。对于 $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ ，所谓的尖晶石相似的结构，可以看作是 Al^{3+} 进入了 MgAl_2O_4 晶格占据了 Mg^{2+} 位置同时产生了镁空位形成缺陷固溶体，其缺陷固溶体的形成仍然满足上述尖晶石固溶体化学式的关系。

- (1) 试写出缺陷反应关系式；
- (2) 根据质量作用定律，写出该反应平衡常数 K 的表达式。 [浙江大学 2007 研]

答：(1) 缺陷反应： $4\text{Al}_2\text{O}_3 \rightarrow 2\text{Al}_{\text{Mg}} + 6\text{Al}_{\text{Al}} + \frac{1}{4}\text{g} + 12\text{O}$

(2) 缺陷反应等价于： $2\text{Al}^{3+} \rightarrow 2\text{Al}_{\text{Mg}} + \dots$

根据质量守恒定律，则可得该反应平衡常数 K 的表达式为：

$$K = \frac{[\text{Al}_{\text{Mg}}]^2}{[\text{Al}^{2+}]^2}$$

4. 如图 4.1 所示，四方形单晶体中有一矩形位错环 AHC 其各段分别平行于 x 、 y 轴，其柏氏矢量平行于 T 轴。 [西安交通大学 2009 研]

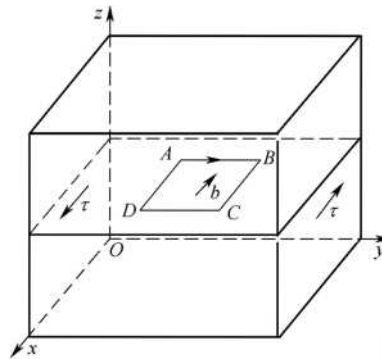


图 4-1

- (1) 写出各位错段的位错类型；
- (2) 写出 AD 段与 BC 段单位长度位错线间的相互作用力的大小及方向；
- (3) 写出 AB 段与 OC 段单位长度位错线间的相互作用力的大小及方向；
- (4) 用应力张量符号表示图中所示的一对切应力 τ ，并写出该切应力作用在各位错段单位长度上的力的大小及方向；
- (5) 分析在切应力，持续作用下该位错环在运动中的形状变化及晶体形状的变化。

答：(1) AB 为正刃型位错， BC 为左螺型位错， CD 为负刃型位错， DA 为右螺型位错。

(2) $F = \frac{G|b|^2}{2\pi|AB|}$ ， AO 与 BC 之间相互吸引。

(3) $F = \frac{G|b|^2}{2\pi(1-\nu)|BC|}$ ， AB 与 OC 之间相互吸引。

(4) 一对切应力 τ ，该切应力作用在各位错段单位长度上的力的大小及方向， AB 上无作用力， BC 上无作用力， CD 上无作用力， DA 上无作用力。