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＜221＞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]为品带轴的所有晶面。

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。

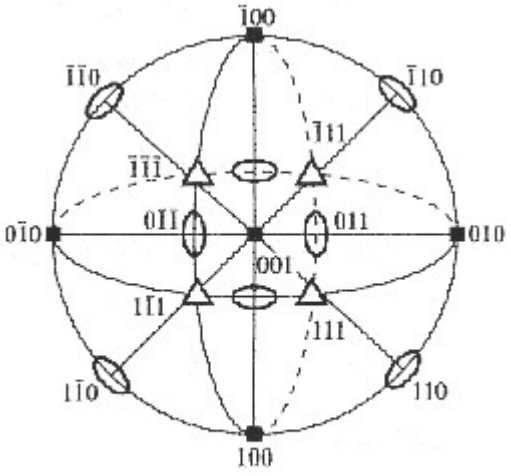
2-8 已知纯钛有两种同素异构体：低温稳定的密排六方结构 α-Ti 和高温稳定的体心立方结构 β-Ti，其同素异构转变温度为 882.5℃。计算纯钛在室温(20℃)和 900℃时晶体中(112)和(001)的晶面间距(已知$a_\alpha^{20℃}=0.2951\ \text{nm}, c_\alpha^{20℃}=0.4679\ \text{nm}, a_\beta^{900℃}$=0.3307nm)。

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° N，20° E 的大圆，平面 B 的极点在 30° N，50° 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在图 2-11 中标出$(\bar{1}10)$，(011)，(112)极点。

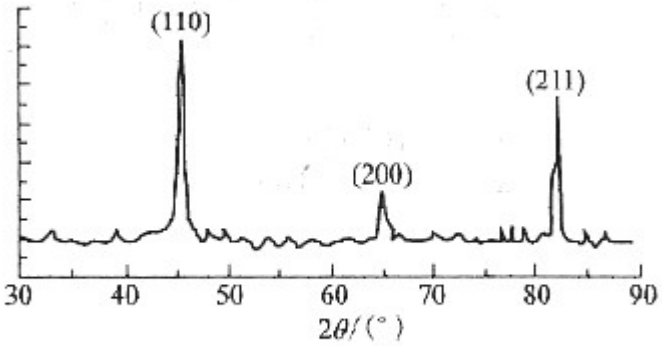
2-12 根据标准的(001)极射赤面投影图指出在立方晶体中属于[110]晶带轴的晶带，除了已在图 2-12 中标出晶面外，在$(1\bar{1}2),(0\bar{1}2),(\bar{1}13),(1\bar{3}2)$，$(\bar{2}21)$晶面中哪些属于[110]晶带?



习题图 2-12

2-13 不用极射投影图，利用解析几何方法，如何确定立方品系中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 λ=0.1542nm，试计算每个峰线所对应的晶面间距，并确定其品格常数。



习题图 2-14

2-15 采用 Cu 的 k_a(λ=0.1542nm)测得 Cr 的 X 射线衍射谱为首的 3 条谱线 2θ=44.4°，64.6° 和 81.8°，若(bcc)Cr 的晶格常数 a=0.2885nm，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=0.1243nm，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=0.3147nm，试求 Mo 的原子半径 r。

2-20 Cr 的晶格常数 a=0.2884nm，密度 ρ=7.19g/cm³，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=0.1625nm，品格常数 a=0.3252nm，c=0.4946nm，密度 ρ=7.286g/cm³，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=0.632nm，ρ=7.26g/cm³，r=0.122nm，问 Mn 晶胞中有几个原子，其致密度为多少?

2-23 ①按晶体的刚球模型，若球的直径不变，当 Fe 从 fcc 转变为 bcc 时，计算其体积膨胀为多少?②经 X 射线衍射测定，在 912℃时，α-Fe 的 a=0.2892nm，γ-Fe 的 a=0.3633nm，计算从 γ-Fe 转变为 α-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 γ-Fe 中 C 原子所处的位置，若此位置全部被 C 原子占据，那么，在此情况下，γ-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根据下列所给之值，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=0.295nm

Be hcp a=0.228nm

Al fcc a=0.404nm

V bcc a=0.304nm

Cr bcc a=0.288nm

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人多少原子数分数的Zn或Sn?若Cu晶体中固溶入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ω(Mn)为12.3%，ω(C)为1.34%的奥氏体钢，点阵常数为0.3624nm，密度为7.83g/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=0.4514nm，b=0.508nm，c=0.6734nm，其密度ρ=7.66g/cm^3，试求Fe_3C每单位晶胞中所含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0.078nm，O^{2-}的离子半径为0.132nm。试求MgO的密度(ρ)、致密度(K)。

2-32 某固溶体中含有x(MgO)为30%，x(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3.6g/cm^3，LiF的密度为2.6g/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0.167nm，0.181nm，试问：①在氯化铯内离子在＜100＞或＜111＞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?④ρ和K各为多少?

2-34 K^+和Cl^-的离子半径分别为0.133nm，0.181nm，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0.051nm，0.132nm，试求Al_2O_3的配位数。

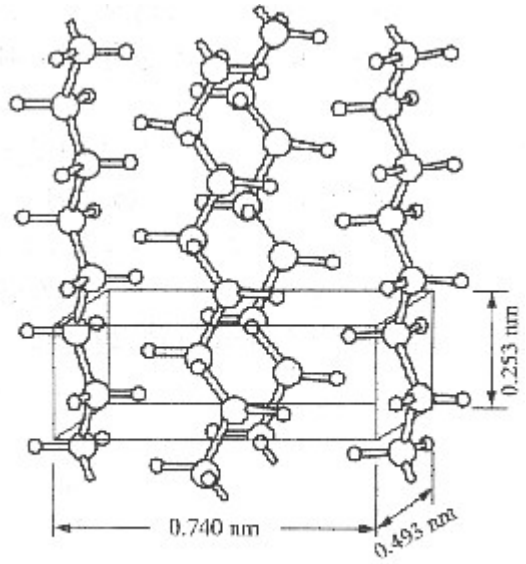
2-36 ZrO_2固溶体中，每6个Zr^{4+}离子同时有1个Ca^{2+}离子加入就可能形成一立方体晶格ZrO_2。若Zr^{4+}离子形成fcc结构，而O^{2-}离子则位于四面体间隙位置。计算：①100个阳离子需要有多少O^{2-}离子存在?②四面体间隙位置被占据的百分比为多少?

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=0.357nm，当它转换成石墨(ρ=2.25g/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，品格常数a=0.74nm，b=0.493nm，c=0.253nm，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0.9g/cm^3，而通常商用的低密度聚乙烯的密度为0.92g/cm^3，高密度聚乙烯的密度为0.96g/cm^3，试估算上述两种情况下聚乙烯的结晶体积分数。



习题图 2-40　聚乙烯分子晶体的结构

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=0.665nm，b=2.096nm，c=0.65nm，α=γ=90°，β=99.3°，其密度 ρ=0.91g/cm^3。试计算结品态聚丙烯的单位晶胞中 C 原子和 H 原子的数目。

2-42 何谓玻璃?从内部原子排列和性能上看，非晶态和晶态物质的主要区别何在?

2-43 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。

第 2 章

2-1 可作图加以证明。四方晶系表面上也可含简单四方、底心四方、面心四方和体心四方结构，然而根据选取晶胞的原则，晶胞应具有最小的体积，尽管可以从 4 个体心四方晶胞中勾出面心四方晶胞(图 2(a))，从 4 个简单四方晶胞中勾出 1 个底心四方晶胞(图 2(b))，但它们均不具有最小的体积。因此，四方晶系实际上只有简单四方和体心四方两种独立的点阵。

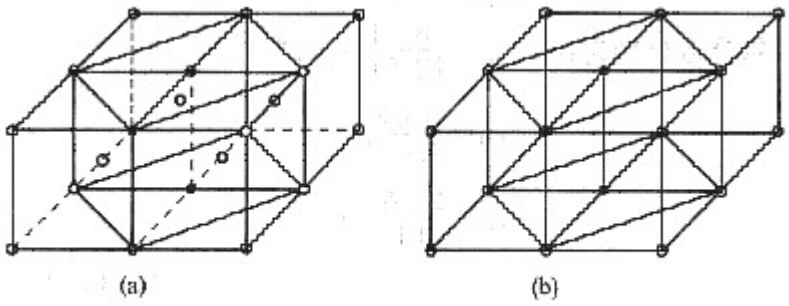


图 2

2-2 空间点阵中每个阵点应具有完全相同的周围环境，而密排六方晶胞内的原子与晶胞角上的原子具有不同的周围环境。在 A 和 B 原子连线的延长线上取 BC=AB，然而 C 点却无原子。若将密排六方晶胞角上的一个原子与相应的晶胞内的一个原子共同组成一个阵点(0，0，0 阵点可视作由 0，0，0 和

$\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{2}$ 这一对原子所组成)，如图 3 所示，这样得出的密排六方结构应属简单六方点阵。

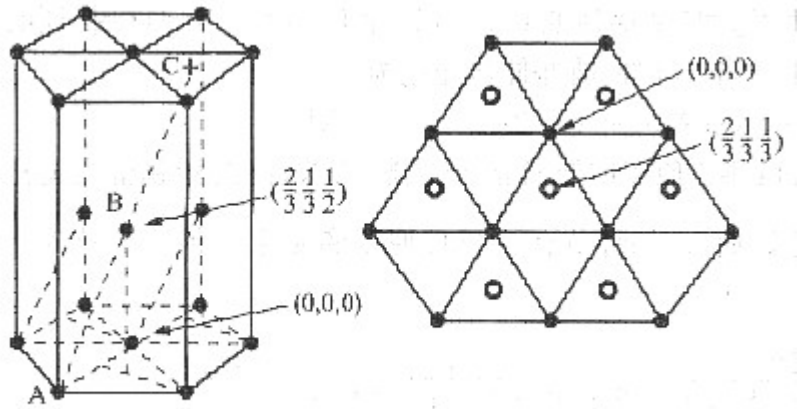


图 3

2-3 为了确定$[\bar{1}10]$是否位于(111)面上，可运用品带定律：hu+kv+lw=0 加以判断，这里

1×(-1)+1×1+1×0=0

因此$[\bar{1}10]$位于(111)面上。

$$K_{[\bar{1}10]}=\frac{4\cdot r}{l}=\frac{4\times\frac{\sqrt{2}a}{4}}{\sqrt{2}a}=1$$

同样的$[10\bar{1}]$和$[01\bar{1}]$晶向上的线密度也为 1，这说明晶向族＜110＞是 fcc 的最密排方向，该方向上原子互相紧密排列(相切)，无间隙存在(见图 4)。

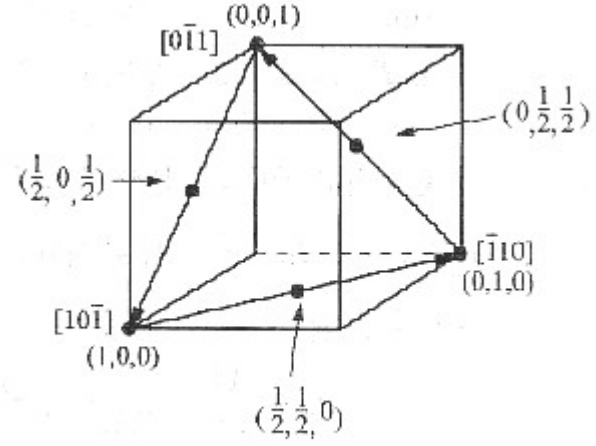


图 4

2-4 见图 5。

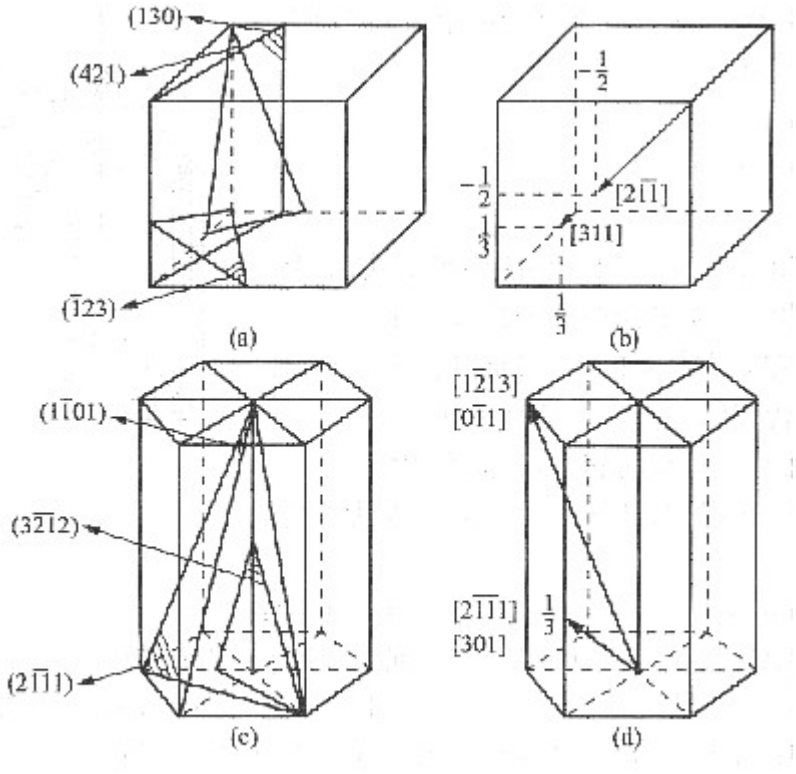


图 5

2-5 见图 6。

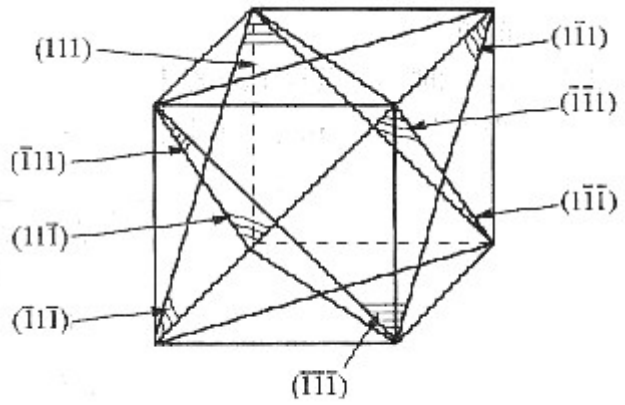


图 6

$$\{111\}=(111)+(\bar{1}11)+(1\bar{1}1)+(11\bar{1})+(\bar{1}\bar{1}\bar{1})+(1\,\bar{1}\,\bar{1})+(\bar{1}1\bar{1})+(\bar{1}\bar{1}1)$$

计算{hkl}晶面族或<uvw>晶向族中所包含的全部等价晶面或晶向数目时，可根据以下四条规则进行判断：

①hkl 或 uvw 中 3 个数字都不等，且≠0，则有 3!×4=24 组，如{123}；

②hkl 或 uvw 中有 2 个数字相等，且≠0，则有 $\frac{3!}{2!}\times 4=12$ 组，如{221}；

③hkl 或 uvw 中 3 个数字相等，则有 $\frac{3!}{3!}\times 4=4$ 组，如{111}；

④hkl 或 uvw 中有 1 个为零，总数应除以 2，则有等 $\frac{3!}{2}\times4=12$ 组，如{120}；有 2 个为零，总数应除以 2^2，则有 $\frac{3!}{2!\cdot2^2}\times4=3$ 组，如{100}；

注意：指数相同而符号相反两个晶面为一组，如(111)和$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$为一组。因此，

$$\begin{aligned}
\text{晶面族}\{123\} =&(123)+(132)+(213)+(231)+(321)+(312)\\
&+(\bar{1}23)+(\bar{1}32)+(\bar{2}13)+(\bar{2}31)+(\bar{3}21)+(\bar{3}12)\\
&+(1\bar{2}3)+(1\bar{3}2)+(2\bar{1}3)+(2\bar{3}1)+(3\bar{2}1)+(3\bar{1}2)\\
&+(12\bar{3})+(13\bar{2})+(21\bar{3})+(23\bar{1})+(32\bar{1})+(31\bar{2})\\
\text{晶向族}\langle221\rangle =&[221]+[212]+[122]+[\bar{2}21]+[\bar{2}12]+[\bar{1}22]\\
&+[2\bar{2}1]+[2\bar{1}2]+[1\bar{2}2]+[22\bar{1}]+[21\bar{2}]+[12\bar{2}]
\end{aligned}$$

2-6 见图 7。晶带轴[uvw]与该晶带的晶面(hkl)之间存在以下关系：

hu+kv+lw=0

将晶带轴[001]代入，则

h×0+k×0+l×1=0

当 l=0 时，对任何 h，k 取值均能满足上式，故晶带轴[001]的所有晶带面的晶面指数一般形式为(hk0)，也即在立方晶系的(001)标准投影图外圆上的极点所代表的晶面均为该晶带面。

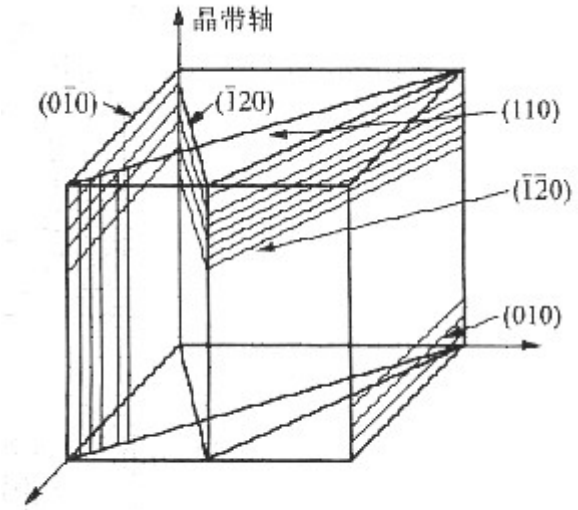


图 7

2-7 以立方晶系的[111]晶向和(111)晶面为例。从矢量数性积得知，若 a·b=0，且 a，b 为非零矢，则 a⊥b。

[111]晶向的矢量表示法为：[111]=1a+1b+1c

从题 2-3 得知$[\bar{1}10]$位于(111)面上，现求[111]·$[\bar{1}10]$值：

[111]·$[\bar{1}10]$=[1×(-1)]a^2+(1×1)b^2+(1×0)c^2=-a^2+b^2

在立方晶系中由于 a=b=c，因此，代入上式即得[111]·$[\bar{1}10]$=0

所以[111]与(111)互相垂直，此关系可推广至立方晶系的任何具有相同指数的晶向和晶面。

2-8 20℃时为 α-Ti：bcp 结构

当 h+2k=3n(n=0，1，2，3，…)，l=奇数时，有附加面。

$$d_{(112)}=\frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3}\left(\frac{h^2+hk+k^2}{a^2}\right)+\left(\frac{l}{c}\right)^2}}=0.1248\ \text{nm}$$

$$d_{(001)}=\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\left(\frac{l}{c}\right)^2}}=0.2339\ \text{nm}$$

900℃时为 β-Ti：bcc 结构

当 h+k+l=奇数时，有附加面。

$$d_{(112)}=\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}=0.135\ \text{nm}$$

$$d_{(001)}=\frac{1}{2}\cdot\frac{a}{\sqrt{1^2}}=0.1653\ \text{nm}$$

2-9 在面心立方晶体中，当(hkl)不为全奇数或全偶数时，有附加面。

$$d_{(100)}=\frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{1^2+0+0}}=0.5a$$

$$K_{(100)}=\frac{\left(\frac{1}{4}\times4+1\right)\pi r^2}{a^2}=\frac{2\pi r^2}{\left(\frac{4}{\sqrt{2}}r\right)^2}=0.785$$

$$d_{(110)}=\frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{1^2+1^2+0}}=0.354a$$

$$K_{(110)}=\frac{\left(\frac{1}{4}\times4+\frac{1}{2}\times2\right)\pi r^2}{\sqrt{2}\cdot a^2}=\frac{2\pi r^2}{\sqrt{2}\left(\frac{4}{\sqrt{2}}r\right)^2}=0.555$$

$$d_{(111)}=\frac{a}{\sqrt{1^2+1^2+1^2}}=0.577a$$

$$K_{(111)}=\frac{\left(\frac{1}{6}\times3+\frac{1}{2}\times3\right)\pi r^2}{\frac{\sqrt{3}}{4}(\sqrt{2}a)^2}=\frac{2\pi r^2}{\frac{\sqrt{3}}{4}\left(\sqrt{2}\,\frac{4}{\sqrt{2}}r\right)^2}=0.907$$

从上面计算结果得知，原子排列最密排的(111)晶面的面间距最大。

2-10 见图 8。

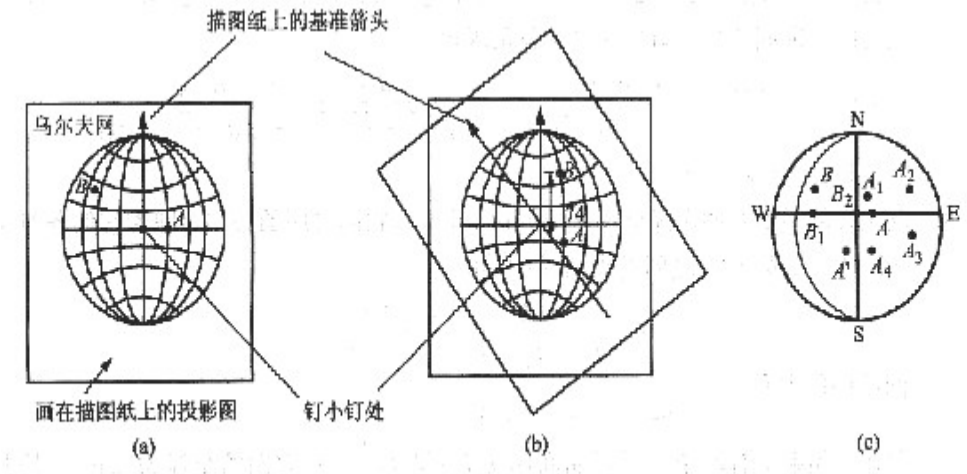


图 8

①将基圆和 A，B 两点画在半透明绘图纸上，并将它盖在和基圆同样大小的乌尔夫网上使这两张图的中心重合。用一小针钉住圆心，使描图纸能相对于乌尔夫网自由转动。转动图纸，使 A，B 两点落在乌尔夫网的同一经线(即参考球的同一大圆)上，如图 8(b)所示，A，B 两点的纬度差就是 A，B 间的夹角，读得此值为 74°。

②按如下操作可求出 A 绕 B 顺时针转过 40° 的位置：

ⓐ将极图绕乌尔夫网中心转动，使 B 点位于赤道线上，即图 8(c)中 $B \rightarrow B_1$，$A \rightarrow A_1$；

ⓑA_1B_1 各沿自己所在的纬线转动，使 B_1 位于乌尔夫网中心，即 $B_1 \rightarrow B_2$，$A_1 \rightarrow A_2$；

ⓒA_2 绕 B_2 顺时针转过 40°，即 B_2 不动，$A_2 \rightarrow A_3$；

ⓓ按逆方向操作，使 B 点复原，即 $B_2 \rightarrow B_1 \rightarrow B$，$A_3 \rightarrow A_4 \rightarrow A'$，则 A'(32° S，6° W)即为 A 绕 B 顺时针转过 40° 的位置。

2-11 ①在投影图外圆上(图 9)的极点与(001)极点的夹角都为 90°，即外圆上极点所代表的晶面与 z 轴平行，所以指数应为(hk0)；

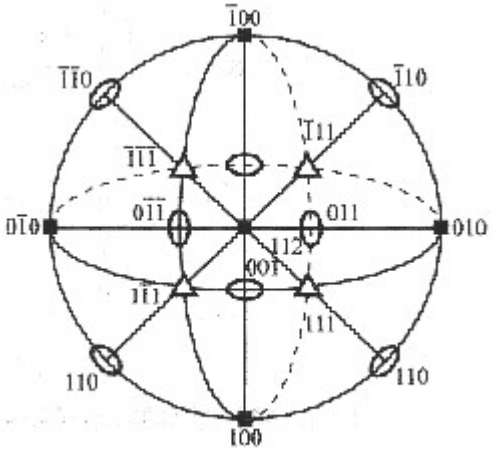


图 9

在赤道线上的极点与(100)极点的夹角都为 90°，即赤道线上各极点所代表的各个晶面都与 z 轴平行，所以指数应为(0kl)；

在 0° 经线上的极点与(010)极点的夹角都是 90°，即 0° 经线上各极点所代表的各个晶面都与 y 轴平行，所以指数应为(h0l)。

② 先由晶面指数的正、负号可判断$(\bar{1}10)$在第一象限，(011)，(112)在第四象限。由①讨论得知$(\bar{1}10)$必定在极图的外圆上，且$(\bar{1}10)$极点与$(\bar{1}00)$及(010)极点都应交成 45°，所以可沿第一象限外圆量得与$(\bar{1}00)$或(010)极点相交成 45° 的点，即为$(\bar{1}10)$极点；

(011)极点应在赤道线上，且其指数可由(001)和(010)相加得到，所以此极点必定在(001)和(010)极点之间，又因(011)极点与(001)和(010)相交成 45°，所以可在(001)与(010)两极点的连线上找到与(001)或(010)相交成 45° 的点，即为(011)极点；

(112)极点指数可南(001)和(111)两极点的指数相加得到，所以此极点必在(001)和(111)极点之间，量得这两极点连线上与(001)极点相交成 35.26° 的位置，便是(112)极点。

2-12 由于在立方晶系中，具有相同指数晶向和晶面必定相互垂直，故与极点(110)成 90° 的晶面$(\bar{1}10),(\bar{1}11),(001),(1\bar{1}1),(1\bar{1}0)$属于[110]晶带。

另外根据晶带轴[uvw]与晶带面(hkl)之间存在以下关系：

hu+kv+lw=0

$(1\bar{1}2),(\bar{1}13)(\bar{2}21)$这 3 个晶面也属于此晶带。

2-13 ① 设立方晶系中的两个晶向为$[u_1v_1w_1]$和$[u_2v_2w_2]$，

由矢量数性积得知：$[u_1v_1w_1]\cdot[u_2v_2w_2]=|[u_1v_1w_1]|\cdot|[u_2v_2w_2]|\cdot\cos\theta$

故此两晶向间夹角 θ 就可从其余弦值求得：

$$\cos\theta=\frac{[u_1v_1w_1]\cdot[u_2v_2w_2]}{|[u_1v_1w_1]|\cdot|[u_2v_2w_2]|}=\frac{u_1u_2+v_1v_2+w_1w_2}{\sqrt{u_1^2+v_1^2+w_1^2}\cdot\sqrt{u_2^2+v_2^2+w_2^2}}$$

$$\theta=\arccos(\cos\theta)$$

② 设立方晶系中有两个晶面$(h_1k_1l_1)$和$(h_2k_2l_2)$，它们之间的夹角 θ 即为它们各自法线$[h_1k_1l_1]$和$[h_2k_2l_2]$之间的夹角，故可得

$$\cos\theta=\frac{h_1h_2+k_1k_2+l_1l_2}{\sqrt{h_1^2+k_1^2+l_1^2}\cdot\sqrt{h_2^2+k_2^2+l_2^2}}$$

两晶面的夹角

θ =arccos(cos θ)

③ 设立方晶系中有两个不平行晶面$(h_1k_1l_1)$和$(h_2k_2l_2)$，它们的交线为[uvw]，按几何关系得知，这个晶向应同时位于这两个晶面上，故可得

$$\begin{cases}h_1u+k_1v+l_1w=0\\h_2u+k_2v+l_2w=0\end{cases}$$

解上述方程组可得

$$u:v:w=\begin{vmatrix}k_1&l_1\\k_2&l_2\end{vmatrix}:\begin{vmatrix}l_1&h_1\\l_2&h_2\end{vmatrix}:\begin{vmatrix}h_1&k_1\\h_2&k_2\end{vmatrix}$$

或

$$\begin{cases}u=k_1l_2-l_1k_2\\v=l_1h_2-h_1l_2\\w=h_1k_2-k_1h_2\end{cases}$$

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/355221321122011213