10220PME 300600 材料科學導論 Introduction to Material Science

期中考一 Midterm Exam I　　AM 10:10-12:00, March 31, 2014

1. 簡答下列各題 Answer following questions briefly: (60%)
   (a) 計算 FCC 銅金屬的密度。Calculate the density of FCC copper metal. (atomic radius = 0.128 nm, atomic mass = 63.55 g/mol)
   (b) 在單位晶包中畫出$[\bar{2}11]$、$[01\bar{1}]$、$[\bar{1}11]$與$(01\bar{1})$、(111)。Draw the $[\bar{2}11]$, $[01\bar{1}]$, $[\bar{1}11]$ directions and the $(01\bar{1})$, (111) planes in the unit cells.
   (c) 列出<101>方向組在正方晶的所有方向。List all directions of <101> in a tetragonal crystal.
   (d) 計算金屬 BCC 晶體的原子堆積因子。Calculate the atomic packing factor of a metal BCC crystal structure.
   (e) 計算 FCC 晶體中[100]與[110]方向之原子線密度的比值。Calculate the ratio of atomic linear density between [100] and [110] directions.
   (f) 畫出鑽石立方晶包並標出各原子點位置。Depict the atomic position indices in a diamond cubic unit cell.
   (g) 銅金屬(原子半徑為0.128nm)某一低角度晶界之刃差排間隔為1微米，則兩晶粒之角度差為幾度？Calculate the angle between two grains in a low-angle tilt boundary with 1 μm edge-dislocation spacing of copper metal (atomic radius = 0.128 nm).
   (h) 設鉛金屬形成空缺所需的活化能為0.55eV，求300°C時空缺的比例為多少？The activation energy to form a vacancy is 0.55 eV for lead metal. Calculate the ratio of vacancy at 300 °C. ($k = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K = 8.63×10^{-5} eV/K)
   (i) 將 0.1wt%C 碳鋼在表面碳濃度 1.2wt%C 下施以滲碳處理，若欲在 0.1cm 深處得到 0.65wt%C 濃度，需費時多久？Calculate the diffusion time to get a 0.65wt%C concentration underneath 0.1 cm for a carbonization of 0.1wt%C steel with a surface 1.2wt%C concentration. ($D = 1.87 \times 10^{-7}$ cm^2/s)
   (j) 繪圖說明在工程應力應變曲線中如何訂出彈性模數、降伏強度、拉伸強度、伸長率、韌性。Sketch to explain how to define the elastic modulus, yield strength, tensile strength, elongation, and toughness in the engineering stress-engineering strain curve.

(k) 硬度測試時應該注意哪些事項？List attention items for measuring hardness.

(l) 繪圖並解釋試驗溫度對鋼鐵沙丕衝擊值的影響。Sketch and explain the effect of test temperature on the fracture impact energy for the Charpy impact test of steel.

2. 繪圖並說明七大晶系的特徵。Sketch and explain the characteristics of the seven crystal systems. (10%)

3. (a)證明 FCC 晶體的(100)、(110)繞射峰不存在；(b)列出 FCC 晶體的前 5 個繞射峰。(a) Prove that the diffraction peaks of (100) and (110) planes are not found for a FCC crystal. (b) List the earlier five diffraction peaks of FCC crystals. (10%)

4. 計算鐵元素的 FCC 與 BCC 晶體空隙能容納的最大填隙原子半徑。Calculate the maximum interstitial atomic radius of the octahedral interstitial in FCC and BCC of Fe. (atomic radius of Fe = 0.126 nm). (10%)

5. 推導費克第一與第二定律。Derive the Fick's first and second laws:

$$\mathrm{J} = -\frac{1}{6}a^2 r\frac{dc}{dx} = -D\frac{dc}{dx};\ \frac{dc}{dt} = \frac{d}{dx}\left(D\frac{dc}{dx}\right) \quad (10\%)$$

6. 定義工程應力σ、工程應變ε、真應力σ_T、真應變ε_T，並證明在均勻變形階段有 $\sigma_T = \sigma(1+\varepsilon);\ \varepsilon_T = \ln(1+\varepsilon)$ 。

Define the engineering stress σ, engineering strain ε, true stress σ_T, true strain ε_T, and prove $\sigma_T = \sigma(1+\varepsilon);\ \varepsilon_T = \ln(1+\varepsilon)$ for the uniform deformation stage. (10%)

10220PME 300600 材料科學導論 Introduction to Material Science 期中考一 Midterm Exam I 參考答案

1.

(a)

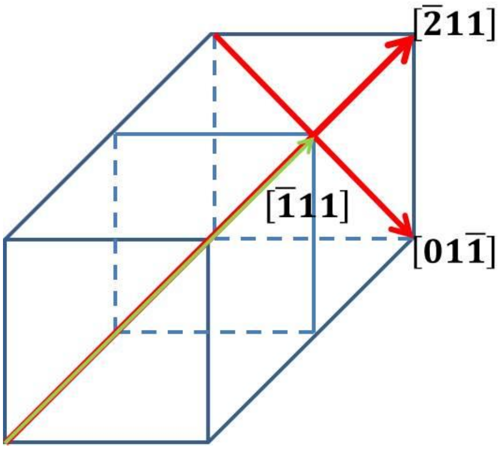
FCC: $\sqrt{2}a = 4r \qquad a = 2\sqrt{2}r$ ❶

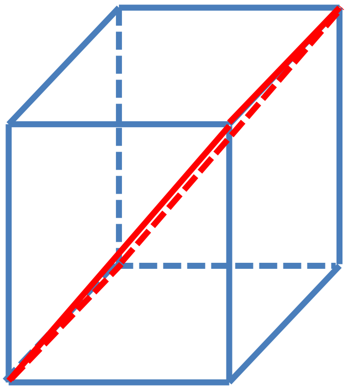
Volume of a unit cell: $V = a^3 = 16\sqrt{2}r^3$ ❶

4 atoms per unit cell ❶

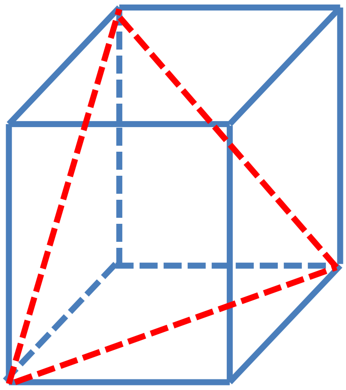
Density: $\rho = \frac{mass}{volume} = \frac{\frac{63.55}{6.02\times10^{23}}\times4}{16\sqrt{2}(0.128\times10^{-7})^3} = 8.898\ {}^{g}/_{cm^3}$ ❷

(b) 各 1 分





$(01\bar{1})$



(111)

(c)

正方晶的方向組<101>:

$[101]\ [\bar{1}01]\ [10\bar{1}]\ [\bar{1}0\bar{1}]$

$[011]\ [0\bar{1}1]\ [01\bar{1}]\ [0\bar{1}\bar{1}]$ 共 8 個 多或少一個扣 1 分

因正方晶(tetragonal crystal)之三軸長度 $a = b \neq c$

(d)

$V_{unit\ cell}$ ❶

2atoms/unit cell ❶

$$\text{APF of BCC} = \frac{N_{atoms}V_{atoms}}{V_{unit\ cell}} = \frac{2\times\frac{4}{3}\pi r^3}{(\frac{4r}{\sqrt{3}})^3} = 0.68$$ ❸

(e)

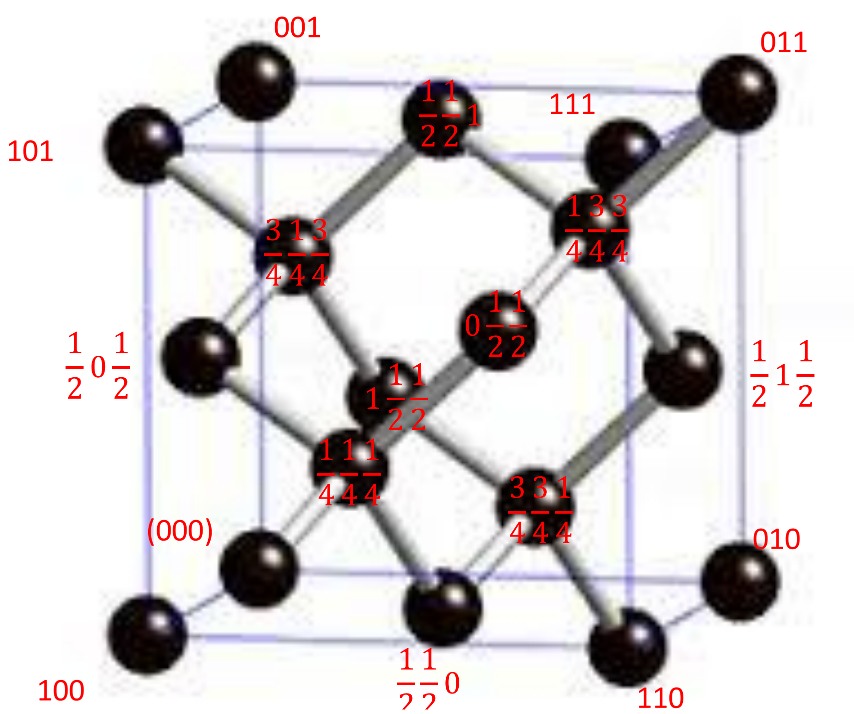
Linear density/direction: each ❶ ❶

$$\text{linear density} = \frac{\text{atoms}}{\text{length}}$$

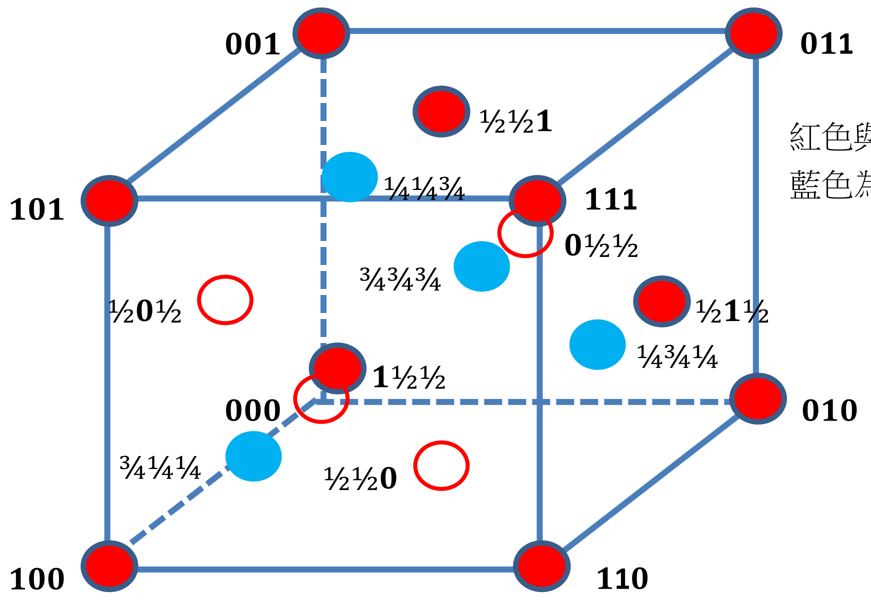
$$\frac{[100]}{[110]} = \frac{\frac{1}{a}}{\frac{2}{\sqrt{2}a}} = \frac{\sqrt{2}}{2}$$ ❸

(f)

$\boxed{\text{Each atom} \quad 0.5\text{ 分}}$



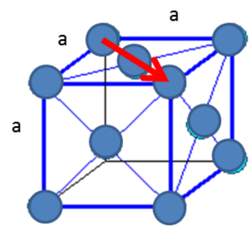
或



紅色與紅圈為 FCC 位置
藍色為 FCC 內部四面體空隙

(g)

銅為 FCC structure



FCC 密排方向為<110>

$\sqrt{2}\mathrm{a} = 4\mathrm{R} \rightarrow \mathrm{a} = \frac{4}{\sqrt{2}}R = \frac{4}{\sqrt{2}}(1.28) = 3.62\text{Å}$❶

布格向量為$\frac{a}{2} < 110 >$ ❶

布格向量長度為 b=$\frac{3.62}{\sqrt{2}} = 2.56\text{Å}$

或

FCC 密排方向為<110>，布格向量長度為密排之原子間距，❶

即為 2 個原子半徑 = 1.28 Å × 2 = 2.56 Å ❶

$\theta = \frac{b}{D}$❶ $= \frac{2.56\times10^{-10}}{1\times10^{-6}} = 2.56 \times 10^{-4} = 0.015°$❷

(h)

$\frac{\mathrm{n_V}}{\mathrm{N}} = \exp\left(-\frac{\mathrm{E_V}}{\mathrm{kT}}\right)$❷ 帶入數值 $= \exp\left(-\frac{-0.55\times1.6\times10^{-19}}{1.38\times10^{-23}\times573}\right) = 1.47 \times 10^{-5}$❸

(i)

$\mathrm{C_s} = 1.2\mathrm{wt\%}$

$\mathrm{C_0} = 0.1\mathrm{wt\%}$

$\mathrm{C_x} = 0.65\mathrm{wt\%}$

$\frac{\mathrm{C_s - C_x}}{\mathrm{C_s - C_0}} = erf\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$❷ 帶入數值 $= \frac{1.2-0.65}{1.2-0.1} = \frac{1}{2}$ $\therefore \frac{x}{2\sqrt{Dt}} = 0.5$❶

$\mathrm{x} = \sqrt{Dt}$ 帶入數值 $10^{-3} = \sqrt{1.87 \times 10^{-11}t}$

或

$\mathrm{C_x}$為$\mathrm{C_0}$與$\mathrm{C_s}$之平均值❷，則 $\mathrm{x} = \sqrt{Dt}$ 帶入數值 $10^{-3} = \sqrt{1.87 \times 10^{-11}t}$❶

$\therefore \mathrm{t} = 5.35 \times 10^{4}(\mathrm{s})$ ❷

(j)

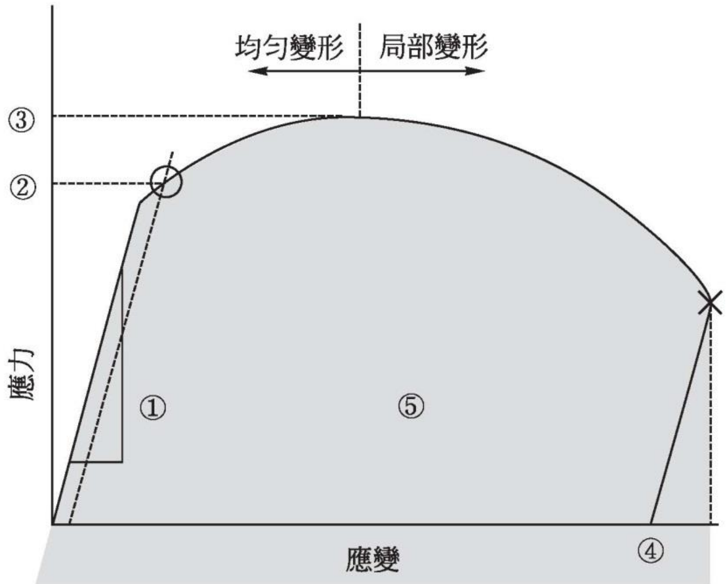


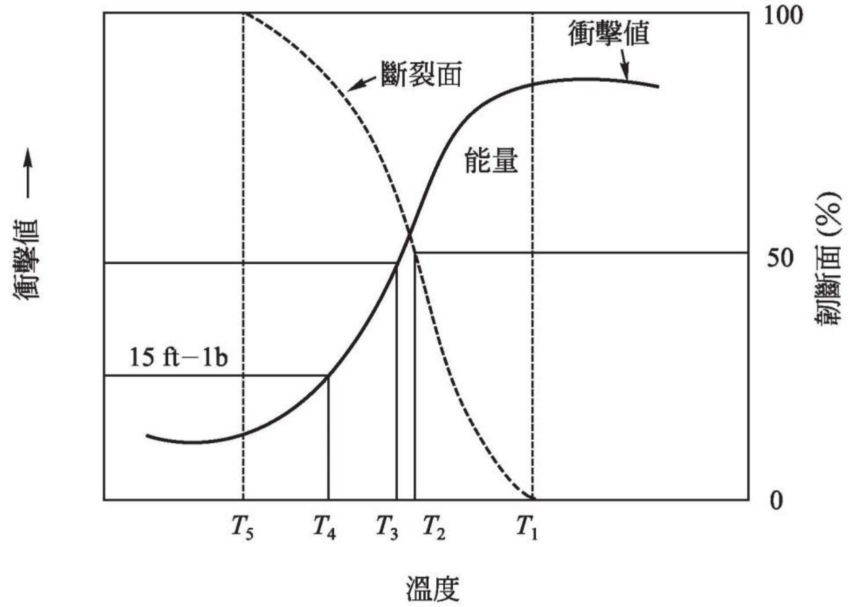
圖 6-8　由拉伸試驗可以得到的重要數據：①彈性模數，②降伏強度(YS)，③拉伸強度(UTS或TS)，④延性＝$100\varepsilon_f$，⑤韌性＝$\int_0^{\varepsilon_f}\sigma d\varepsilon$。圖中也可以看到材料斷裂時，會有彈性回復產生(2)

1. 彈性模數：曲線初期彈性變形直線的斜率值。❶
2. 降伏強度(YS)：開始塑性變形的應力，利用偏位降伏強度法所求得，其法為在應力-應變曲線上定出一偏位應變量(通常為 0.2%)，引伸一直線平行於彈性變形直線，並與拉伸曲線相交，此交點所對應的應力即為降伏強度。❶
3. 拉伸強度：應力應變曲線最高點的應力，此點稱為 UTS 或 TS。❶
4. 伸長率：從斷裂點畫一平行於初期彈性變形之直線交於 X 座標軸之處，即為伸長率。❶
5. 韌性：在應力-應變曲線下的面積。❶

(k)

1. 試片厚度至少必須是壓痕深度的十倍 ❶
2. 壓痕間或壓痕中心與試片邊緣間距離至少 3 倍的壓痕直徑❶
3. 試片不堆疊在另一試片上❶
4. 表面平滑且無灰塵與生鏽❶
5. 選擇適當的壓痕器❶
6. 試片有曲面時，硬度須加以修正❶

(l)

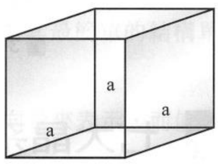
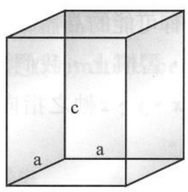
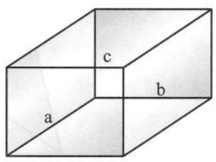


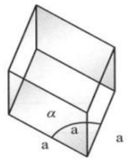
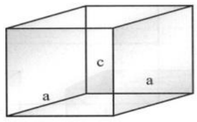
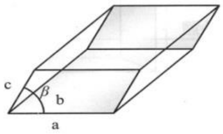
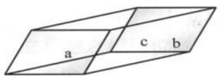
❶❶

高溫時，如 T_1 以上，斷裂面全部是韌性斷裂，衝擊值最高❶；低於 T_1 開始有脆性斷裂出現，衝擊值逐漸下降❶；到 T_5 或更低溫時，斷裂面全部是脆性斷裂，衝擊值很低。❶

2.

七個晶系，每個 1.5 分，名字、關係、圖各 0.5 分

晶系	晶軸邊長和夾角	晶胞幾何
立方體	$a = b = c$；$\alpha=\beta=\gamma= 90°$	
正方體	$a = b \neq c$；$\alpha=\beta=\gamma= 90°$	
斜方體	$a \neq b \neq c$；$\alpha=\beta=\gamma= 90°$	

晶系	晶軸邊長和夾角	晶胞幾何
菱方體	$a=b=c$；$\alpha=\beta=\gamma\neq 90°$	
六方體	$a=b\neq c$；$\alpha=\beta=90°$，$\gamma=120°$	
單斜體	$a\neq b\neq c$；$\alpha=\beta=90°\neq\gamma$	
三斜體	$a\neq b\neq c$；$\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq 90°$	

3.

(a)

FCC 的晶體中(100)平面間的(200)平面有面心原子存在❶，而(200)原子平面間距恰為(100)原子平面間距的一半❶，因此若(100)原子平面間光程差為整數波長，則(200)原子平面間光程差則為半波長，即產生破壞性干涉，而無法產生加強性干涉的繞射峰❶。同樣的道理，(110)平面間的(220)平面有面心原子存在❶，而(220)原子平面間距恰為(110)原子平面間距的一半，所以也無法產生繞射峰❶。FCC 能產生繞射峰的原子面指標必須是全奇數或全偶數。

(b)

依照($h^2+k^2+l^2$)低高順序列出符合全奇數或全偶數者：

(100)X；

(110)X；

(111)第一繞射峰；❶

(200)第二繞射峰；❶

(210)X；

(211)X；

(220)第三繞射峰；❶

(221)X，(300)X；

(310)X；

(311)第四繞射峰；❶

(222)第五繞射峰。❶

4.

鐵原子半徑為 0.126 nm

(1)FCC：原子半徑 R，其FCC晶體最大為八面體空隙(體心位置❶)恰可容納的原子半徑 r ❶，其關係為 $2(r + R) = \frac{4R}{\sqrt{2}}$ ❶ $\rightarrow \boldsymbol{r = (\sqrt{2} - 1)R}$❶ $\boldsymbol{= 0.414R = 0.0522}$ nm❶

(2)BCC：原子半徑 R，其 BCC 晶體最大為八面體空隙(面心位置❶)恰可容納的原子半徑 r ❶，其關係為 $2(r + R) = \frac{4R}{\sqrt{3}}$ ❶ $\rightarrow \boldsymbol{r = \left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1\right)R}$❶ $\boldsymbol{= 0.155R = 0.0195}$ nm❶

5.

參考 P.122, 125

費克第一定律:

假設兩原子平面距離 a (在 x 方向上)，其中一原子平面上有 N_1 個溶質原子，另一個則有 N_2 個溶質原子 $N_1 > N_2$❶。考慮在 x 方向的淨流動，令原子跳離原位置的頻率為 r，又因在晶格內有六個可跳動的方向，所以平面間(在 x 方向上)的頻率為(1/6)r❶，其淨流動為:

$J = (1/6)(N_1 - N_2)\, r$………(1)　，❶

J 為單位時間通過單位面積的原子數目

兩平面的溶質濃度可表示成 $c = N/a$❶

所以(1)可改寫成 $J = (a/6)(c_1 - c_2)\, r$，❶其中 $dc/dx = (c_2 - c_1)/a$ 所以

$$\boxed{J = -\frac{1}{6}a^2 r\frac{dc}{dx} = -D\frac{dc}{dx}}$$ ❶

費克第二定律:

假設兩平行平面距離Δx❶，其中通過一平面上的原子流為 J_1，通過另一平面之原子流為 $J_2$❶，又 $J_1 > J_2$。此現象會導致原子堆積，且原子堆積速率和濃度變化速率相等❶，所以❶❶

$$\frac{dc}{dt} = \frac{J_1 - J_2}{\Delta x} = \frac{J_{(x+\Delta x)} - J_{(x)}}{\Delta x} = -\frac{dJ}{dx} = -\frac{d}{dx}\left(D\frac{dc}{dx}\right)$$

6.

A_0：原始橫截面積❶

l_0：原始標距長❶

l_i：瞬間長度❶

A_i：瞬間橫截面積❶

均勻應變下體積不變所以：$A_0 \times l_0 = A_i \times l_i$❶

工程應力 $\sigma = F/A_0$❶

工程應變 $\varepsilon = (l_i - l_0)/l_0 = \Delta l/l_0$ ❶

真應力 $\sigma_T = F/A_i$ ❶$= (F/A_0)\times(A_0/A_i) = (F/A_0)\times(l_i/l_0) = (F/A_0)\times[(l_0 + \Delta l)/l_0) = \sigma\,(1 + \varepsilon)$ ❶

真應變 $\varepsilon_T = \int_{l_0}^{l_i}\frac{dl}{l} = \ln(l_i/l_0)$ ❶$= \ln((l_0 + \Delta l)/l_0) = \ln(1+\varepsilon)$ ❶