# 21年秋季高等材料热力学试题回忆

- 作者：小小角色

---

## 一、简答题

1. 写出A-B二元置换固溶体的自由能表达式。并用示意图表示理想溶体、规则溶体之间的差别。

   解答：见《微观组织热力学》 西泽泰二 著，郝士明 译；P62，3.2.4节--固溶体自由能的B-W-G近似。

---

2. 写出三种统计热力学分布，并说明三者之间的关系。

量子力学的两种分布：玻色—；费米—。

经典分布：玻尔兹曼分布

量子力学分布 $\xrightarrow{\text{退化}}$ 玻尔兹曼经典分布 $\Omega_{M-B}=\frac{N!}{\prod n_i!}\prod g_i^{n_i}$

$$B\text{-}E:\ \Omega_{B-E}=\prod\frac{(g_i+n_i-1)}{n_i!(g_i-1)!}$$

$$F\text{-}D:\ \Omega_{F-D}=\prod\frac{g_i!}{n_i!(g_i-1)!}$$

$$M\text{-}B:\ \Omega_{M-B}=N!\prod\frac{g_i^{n_i}}{n_i!}$$

$$\frac{n_i}{g_i}\ll 1,\ n_i\ll g_i \Rightarrow \Omega_{B-E}\approx\Omega_{F-D}\approx\frac{\Omega_{M-B}}{N!}$$

$$\Omega_{B-E}\approx\frac{\Omega_{M-B}}{N!}\approx\Omega_{F-D}$$

---

3. 用示意图表示脱溶分解的驱动力。

起点O：固溶体α在**一定温度**下脱溶析出β固溶体

$$\Delta G = n_1(G_1 - G) + n_2(G_2 - G)$$

质量平衡 $n_1(x - x_1) = n_2(x_2 - x)$

$$\Delta G = n_2\left\{(G_2 - G) + [\frac{(G_1 - G)(x_2 - x)}{x - x_1}]\right\}$$

$n_1 >> n_2$

$$\Delta G = n_2\left\{(G_2 - G) - (x_2 - x)(\frac{dG}{dx})_x\right\}$$

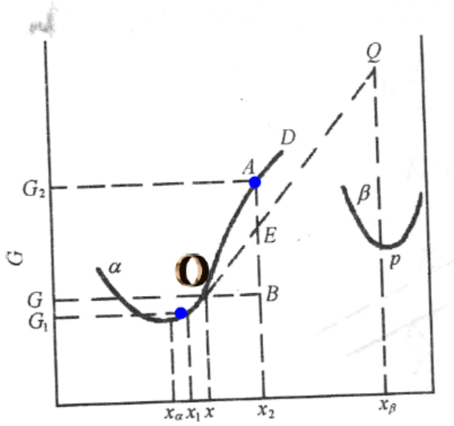



图 12-12 α固溶体脱溶分解为β相时的自由能变化

$$\Delta G = n_2\left\{(G_2 - G) - (x_2 - x)(\frac{dG}{dx})_x\right\}$$

$G_2 = Ax_2$ $G = Bx_2$

$$(x_2 - x)(\frac{dG}{dx})_x = BE$$

$$\boxed{\Delta G = n_2[(Ax_2 - Bx_2) - BE] = n_2[AB - BE] = n_2 AE}$$

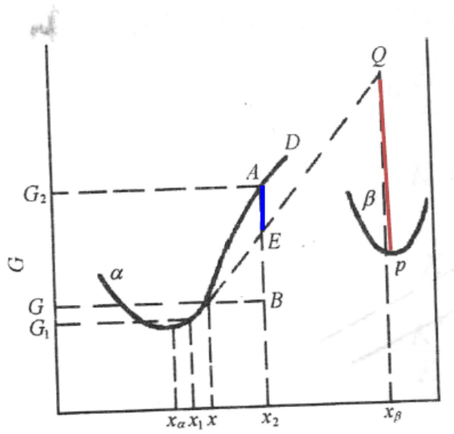



图 12-12 α固溶体脱溶分解为β相时的自由能变化

偏离x的起伏大、新相的自由能较低，表面能量不很大时，**PQ为驱动力**发展成为β相的临界核心，脱溶（沉淀）

脱溶驱动力

$$\alpha \rightarrow \beta + \alpha_1$$

**切线与公切线**之间的距离

相变前

$$G^\alpha = (1 - x_\alpha)\overline{G}_{A_\alpha} + x_\alpha \overline{G}_{B_\alpha}$$

混合相

$$G^{\beta+\alpha_1} = (1 - x_\alpha)\overline{G}_{A_\alpha}^{\alpha/\beta} + x_\alpha \overline{G}_{B_\alpha}^{\alpha/\beta}$$

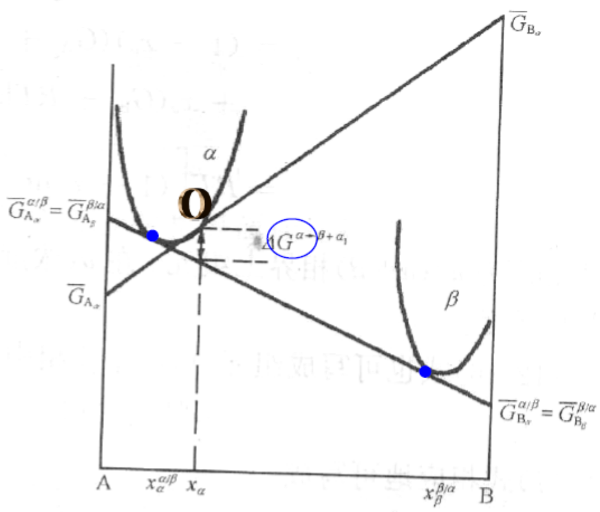



图 12-13 由浓度为 $x_\alpha$ 的α相沉淀β

相时的相变驱动力示意图

## 二、问答/证明题

1. 晶粒细化可以提高金属材料的低温韧性，其中一个重要的原因是减少元素（如P等）的偏析，分析其热力学原理。

   解答：见《微观组织热力学》 西泽泰二 著，郝士明 译；P135，5.3.4节--晶粒超细化与晶界偏析的关系。

2. 写出热力学第二定律关于热传导的描述，并证明自发热传导过程熵增加。

局域熵产生率

Case1：热传导

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla \cdot J_q \quad (u：内能密度；J_q：热流密度)$$

$$du = Tds \underbrace{- pdV}_{=0} + \underbrace{\sum_i \mu_i dn_i}_{=0}$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{1}{T}\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{T}(-\nabla \cdot J_q) = -\nabla \cdot \frac{J_q}{T} + J_q \cdot \nabla \frac{1}{T}$$

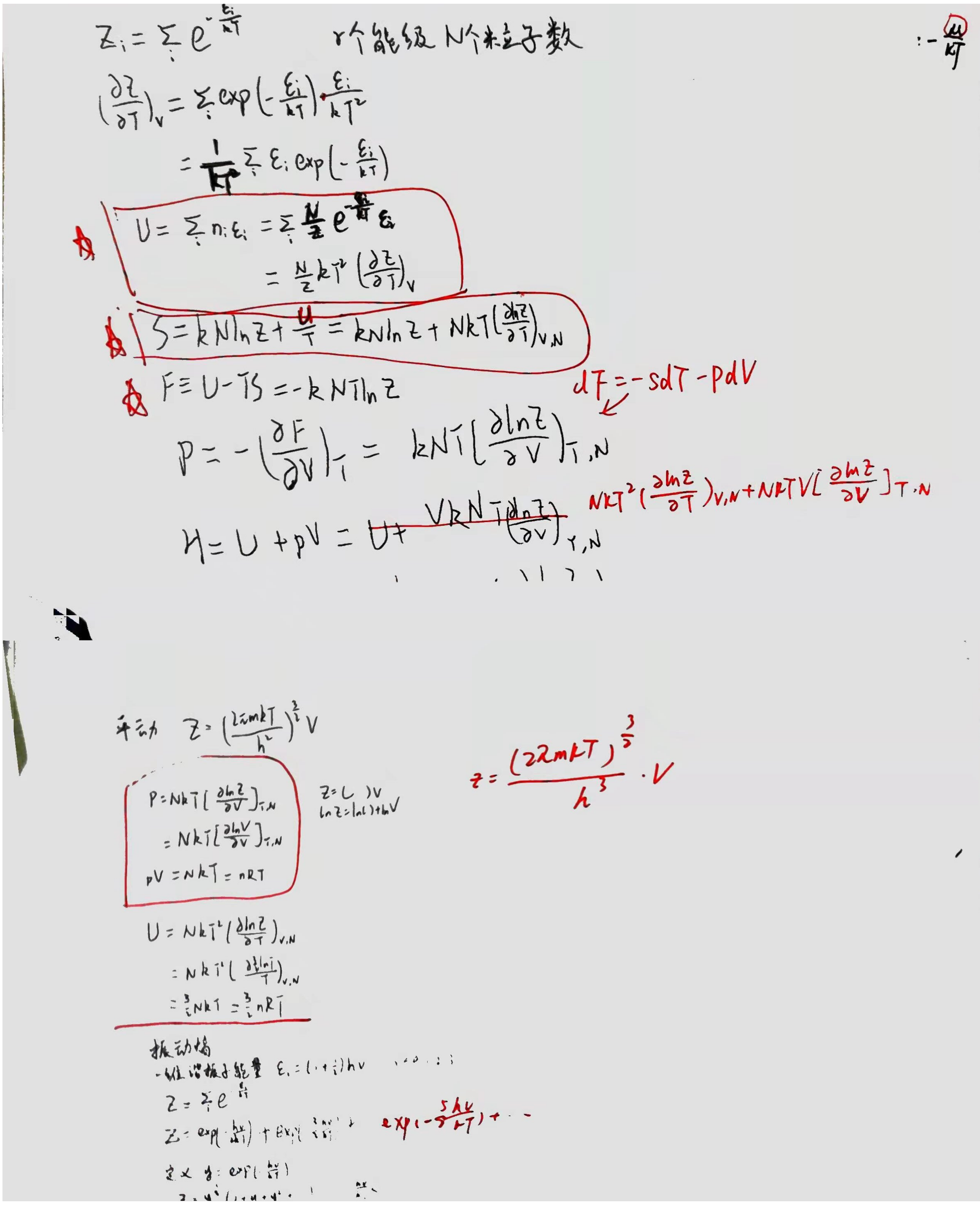
$$\frac{d_i s}{dt} = J_q \cdot \nabla \frac{1}{T} \qquad X_q = \nabla \cdot \frac{1}{T} \ 热流动力$$

（局域熵密度的产生率） $\Rightarrow \frac{d_i s}{dt} = J_q \cdot X_q$

$$J_q = -k\nabla T \Rightarrow \frac{d_i s}{dt} = J_q \cdot \nabla \frac{1}{T} = -J_q \cdot \frac{\nabla T}{T^2} = k \cdot \frac{(\nabla T)^2}{T^2} > 0$$

（k为热传导系数）

3. 写出微正则系综中的内能U和焓H关于配分函数Z的表达式，并推导出单原子理想气体的状态方程。




4. 推导B-W-G模型下A:B=1:3的的BCC结构CuZn型有序化，并求出有序度消失时的临界温度$T_c$。
   解答：见《微观组织热力学》 西泽泰二 著，郝士明 译；P198，例题7.2。