

809 冶金物理化学 考试大纲

一、考试性质与范围

“080600 冶金工程”、“085603 冶金工程”专业研究生入学考试初试科目《冶金物理化学》包含热力学基本概念、基本定律、冶金熔体溶液、相图、冶金反应动力学基础、多相反应动力学等内容。

《冶金物理化学》重点考查学生对冶金物理化学基本概念、基本原理和理论的掌握程度，以及运用这些知识针对冶金反应体系或工艺过程进行分析并提出解决问题的方法和思路的能力。

二、考试基本要求

要求学生牢固地掌握冶金物理化学的基本概念和基本原理，能够正确熟练地计算冶金体系中化学反应的吉布斯自由能变化，判断化学反应的方向和限度，分析冶金反应反应机理并建立基本动力学模型。

四、考试内容

1. 热力学基本定理及在冶金中的应用

1.1 几个基本公式

- 1) 体系中组元 i 的自由能的描述；理想气体体系中组元 i 的自由能；液相体系中组元 i 的自由能；固相体系中组元 i 的自由能。
- 2) 等温方程式的导出：由单个组元 I 的自由能推导化学反应的自由能变化 ΔG ；讨论 ΔG 的三种形式；重点讨论 $\Delta G = 0$ 的形式，得出 $\Delta G^\ominus = -RT \ln K^\ominus$ ； ΔG 与 $\Delta G^\ominus$ 的关系与联系； ΔG 与 $\Delta G^\ominus$ 在热力学中分别承担的角色。
- 3) 等压方程式与二项式：微分式；由微分式导出积分式；讨论其意义。

1.2 冶金热力学中标准自由能的计算

- 1) 用积分法计算化学反应的标准自由能变化；（注：讲不定积分法，学生阅读定积分法）；
- 2) 由积分法得到的化学反应的标准自由能求化学反应标准自由能与温度的二项式；
- 3) 由标准生成自由能和标准溶解自由能求化学反应的标准自由能（二项式）；
- 4) 由电化学反应的电动势求化学反应的标准自由能变化；
- 5) 由自由能函数求化学反应的标准自由能变化。

2. 热力学参数状态图

2.1 Ellingham 图

氧势图的形成原理；氧势图的热力学特征；（特殊的线；直线斜率；直线位置）氧势图的应用

2.2 相图分析方法及基本规则

- 1) 相图基本定律:相律；连续原理；相应原理。
- 2) 三元系相图的构成；构成原理；浓度三角形。
- 3) 三元系浓度三角形性质:杠杆规则与重心规则；垂线；平行线；等含线；定比例；直线规则。
- 4) 三元系相图分析: 图的构成；平面投影图；结晶过程（冷却组织及量-杠杆原理应用）；等温线与截面；具有一个稳定二元化合物的三元系；具有一个不稳定二元系的三元系相图的特点；分析相图中三个特殊点 M_1 、 M_2 及 M_3 的冷却过程。

2.3 三元系相图的应用

分析 $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$, 及 $\text{CaO-SiO}_2\text{-FeO}_2$ 相图

3. 冶金溶液

3.1 铁溶液

- 1) 两个基本定律：拉乌尔定律；亨利定律；两个定律的联系及区别分析。
- 2) 不同标准态活度及活度系数之间的相互转换：三个不同标准态的活度的定义；三个不同标准态的活度之间的关系；三个不同标准态的活度系数之间的关系。
- 3) 标准溶解自由能：溶解前为纯物质 M ，溶解在溶液中分别为三个不同标准态时标准溶解自由能。
- 4) 多元系铁溶液：瓦格纳模型（一价、二价作用系数）；相互作用系数的关系（ e_j^i 与 e_i^j ， e_j^i 与 ε_i^j ）。

3.2 二元正规溶液

混合自由能与过剩自由能；正规溶液的定义；正规溶液的混合函数与过剩函数；正规溶液的性质。

3.3 冶金炉渣

- 1) 炉渣的性质：碱度（碱度，光学碱度，过剩碱）；氧化还原性。
- 2) 炉渣结构理论：分子理论；捷姆金完全离子理论。
- 3) 炉渣的硫容量：硫化物容量；硫酸盐容量；硫容量与碱度。

4. 冶金反应动力学基础

- 1) 化学反应速率及反应级数：化学反应进度；化学反应速率；化学反应速率方程（ n 级不可逆反应）；1级可逆反应方程。

- 2) 反应速率与温度的关系：阿累尼乌斯公式与活化能；活化能与热力学函数关系式。
- 3) 扩散与传质：费克第一定律；费克第二定律；费克二定律的特解（扩散偶；几何面源）
- 4) 相际传质：边界层的概念；边界层理论；传质系数。
- 5) 多相反应动力学基本模型：双膜理论；溶质渗透理论；表面更新理论。

5. 多相反应动力学

5.1 气-固反应

- 1) 气-固反应特点与反应机理：气固反应特点及处理方法；
- 2) 未反应核模型：外扩散为限制环节时反应模型；内扩散为限制环节时反应模型；界面化学反应为限制环节时反应模型；内扩散和界面化学反应混合控速时反应模型；一般情况
- 3) 未反应核模型应用：未反应核模型特殊条件下：外扩散、内扩散或界面化学反应控速应用及动力学参数获取。

5.2 气-液反应

- 1) 气泡形成机理与动力学过程：均相中气泡的生成机理；均相中气泡的生成机理；例：碳-氧反应；非均相气泡生成机理；活性气隙的最大半径；气泡长大与上升动力学机理；气泡在液相中的行为；气泡在液相中的运动；气泡在上浮过程中长大。
- 2) 钢液中碳-氧反应动力学：碳氧反应机理；碳氧反应动力学模型；气泡冶金过程动力学；吹氩冶炼超低碳不锈钢碳氧反应机

理与反应模型。

3) 吹氩脱氢过程动力学。

5.3 液-液反应

液-液相反应特点与动力学方程：液-液反应特点；液-液反应动力学机理；液-液反应动力学模型及实例分析。

五、参考书

【1】 张家芸主编 冶金物理化学，冶金工业出版社，2004 年 6 月。

【2】 郭汉杰编著，冶金物理化学教程（第二版），冶金工业出版社，2006 年 8 月。