

恩波翔高2009考研专业课辅导丛书系列一一

浙江大学材料科学基础

考研

真题详解

恩波翔高 · 浙江大学考研培训中心 编

2009

辅导班内部资料

浙江大学 836 材料科学基础 2003 年试题及解析

一、填空题 (每空 1 分, 共 30 分)

1. 在晶体学中, 所有的晶体均可归纳在 7 个晶系中, 各种晶体结构按其原子或分子排列的周期性和对称性可归属与 14 个空间点阵之一, 所有空间点阵又可归于 3 种晶族。通过宏观对称要素分析, 晶体可能存在的对称类型 (点群) 只能有 32 种, 通过宏观和微观对称要素在三维空间的组合得出晶体中可能存在的空间群有 230 种。全部对称型总共可以导出 47 个单形。
2. 不同的 $\{hkl\}$ 晶面, 其面间距各不相同, 总的来说, 低指数晶面的晶面间距 大, 而高指数的面间距 小。
3. 离子晶体中, 配置于正离子周围的负离子数 (即正离子配位数) 由正、负离子的半径比 (r_c/r_A) 大小所决定, 当 r_c/r_A 值属于范围 $0-0.155$, $0.155-0.225$, $0.225-0.414$, $0.414-0.732$, $0.732-1.0$ 时, 其正离子配位数分别为 2, 3, 4, 6, 8。
4. 缺陷可归纳为 点 缺陷、线 缺陷、面 缺陷三类, 位错属于 线 缺陷, 其最重要、最级别的形态有 刃型 和 螺型 位错两种, 也有介于它们之间的 混合 位错。
5. 根据溶质原子在晶体点阵中的位错, 可以将固溶体分为三类: 分别是 1. 置换 固溶体 2. 间隙 固溶体 3. 缺位 固溶体。
6. 非晶态结构的基本特征是: 短程有序, 长程无序, 描述非晶态金属和合金较成功的结构模型是 硬球无规密堆模型, 而描述无机玻璃的结构模型主要是: 无规网络学说 和 微晶子学说。
7. 通常, 扩散系数可作为表征扩散的一个参量。它与扩散机构及扩散介质和外部条件有关。可以认为扩散系数是物质的一个物性指标。根据扩散系统的不同, 扩散系数可分 自扩散系数、偏扩散系数、互扩散系数 等。

二、选择题 (每题 3 分, 共 30 分)

1. 固溶体特点是掺入外来杂质原子后原来的晶体结构不发生转变, 单点阵畸变, 性能变化。固溶体有限和无限之分, 其中:
A. 结构相同是完全固溶体的充要条件

B 结构相同是完全固溶体的必要条件，不是充分条件

C 结构相同是有限固溶体的充分条件

答：B。结构相同只是完全固溶的必要条件，还需考虑尺寸因素、电价因素、电负性因素等的影响。

2. a-Si-H 薄膜是十分有用的半导体材料之一，其结构特征为：

A 在非晶 Si 膜结构中嵌入了大量的氢原子，H 的空间分布具有局部不均匀性，具有两种相组分的特征

B 在单晶 Si 膜结构中嵌入了大量的氢原子，H 的空间分布具有局部不均匀性，具有两种相组分的特征

C 在多晶 Si 膜结构中嵌入了大量的氢原子，H 的空间分布具有局部不均匀性，具有两种相组分的特征

答：A。a-Si-H 薄膜是非晶态 a-Si 与氢的合金薄膜。

3. 一般认为，晶界小角度和大角度晶界的两相邻晶粒位向差约为：

A 2°

B 10°

C 20°

答：B。小角度晶界两相邻晶粒的位向差约小于 10° ，大角度晶界两晶粒间的位向差较大，一般大于 10° 以上。

4. 位错滑移与攀移所需驱动力的性质可分别描述为：

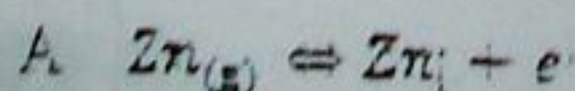
A 弹性力；化学力与切应力

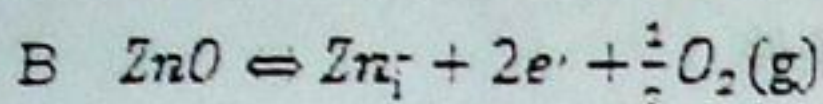
B 化学力与切应力；弹性力

C 切应力；化学力与弹性力

答：C。位错滑移的驱动力位于位错滑移面上，平行与它的伯格斯矢量方向的切应力。与滑移不同，位错攀移时伴随着物质的迁移，需要扩散才能实现，其驱动力是空位运动相关的化学攀移力和晶体畸变产生的弹性攀移驱动力。

5. 实验测得氧化锌中出现间隙锌离子的浓度与锌蒸汽压的二分之一次方成正比，因而可推断其缺陷反应满足式：





答: A。平衡常数 $K = \frac{[Zn_i] \cdot [e']}{[P_{Zn}]}$, 间隙锌离子的浓度与锌蒸气压的关系为

$[Zn_i] \propto [P_{Zn}]^{1/2}$, 锌离子化程度不足。

6. 受泡林规则的制约, 在硅酸盐矿物中不同的硅氧四面体结合类型, 硅氧四面体中过剩的负电荷不同, 也即需要有相应的正电荷来平衡。根据硅酸盐结构判据表示式可以确定矿物 $[Ca_2Mg_5(Si_8O_{22})(OH)_2]$

A 判据值为 2, 属单链结构

B 判据值为 1, 属骨架结构

C 判据值为 1.5, 属双链结构

答: C。 $\frac{2N_{Ca} + 2N_{Mg} - 2N_{OH}}{N_{Si}} = \frac{12}{8} = 1.5$ 属于双链结构。

7. 离子键的成键作用是:

A 电子气和离子实间库仑作用力

B 相反电荷间静电力

C 对电子作用力

答: B。金属键的成键作用是依靠电子气和正离子实之间的库仑作用力。离子键的成键作用是靠相反的电荷在原子间产生的静电力。共价键的成键则在于电子间作用力。

8. 物质的流动可以用菲克第一和菲克第二定律描述, 其对应的扩散方程表达式分别为:

A $J = D \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)$ 和 $\left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$

B $J = -D \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)$ 和 $\left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$

C $J = -D \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)$ 和 $\left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$

答: C。

9. 高分子晶体由同一分子的不同链段间平行排列形成, 高分子晶体通常属于如下晶体结类型:

A 共价晶体

B 分子晶体

C 离子晶体

答: B。高分子中, 大分子和大分子之间或同一大分子不同链段之间仅有二次分子力相互作用。同一分子的不同链段或不同分子的某些链段间平行排列时, 弱二次分子力能将这此链段 (不是整个分子) 排列成局部的结晶区。

10. 在固体材料中, 有许多重要的性质, 如比热、热膨胀、热导等都可以用声子的概念来描述, 声子的概念是指:

A 晶格的振动

B 原子

C 电子

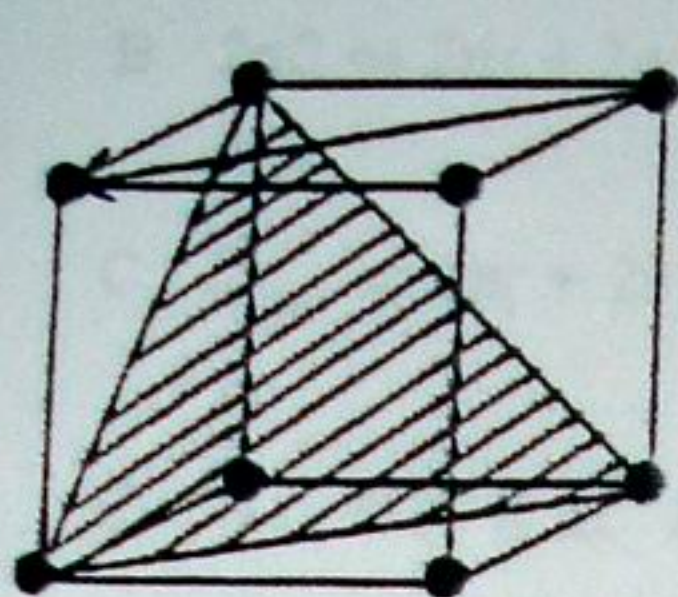
答: A。声子是晶格振动中的简谐振子能量量子。就如光子是描述光的能量量子。

三、分析计算题 (每题 15 分, 共 90 分)

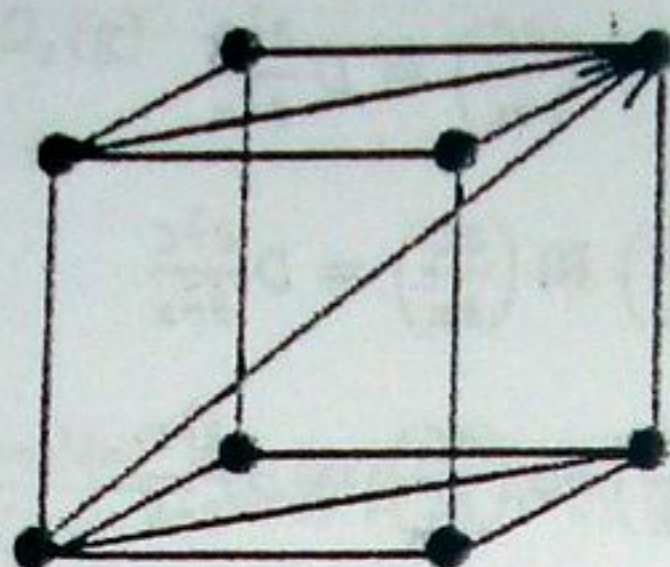
1. 在立方晶系中 (1) 画出下列晶面和晶向: (110) 、 $[1\bar{1}0]$; (110) 、 $[1\bar{1}1]$; $(1\bar{1}2)$ 、 $[110]$ 。(2) 在给出的三个晶向 $[1\bar{1}0]$ 、 $[\bar{1}11]$ 和 $[110]$ 中属于同一晶向族的是那些晶向? 这些晶相又同属于哪一晶向族?

【参考答案】:

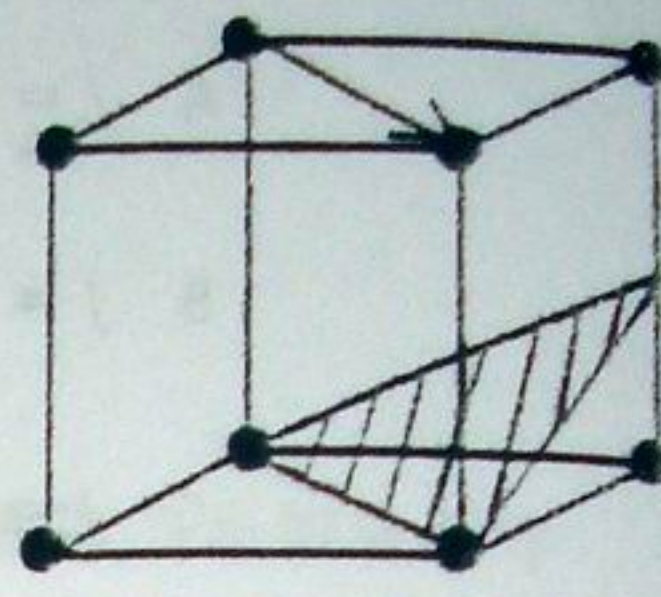
(1)



$(111), [1\bar{1}0]$



$(110), [\bar{1}11]$



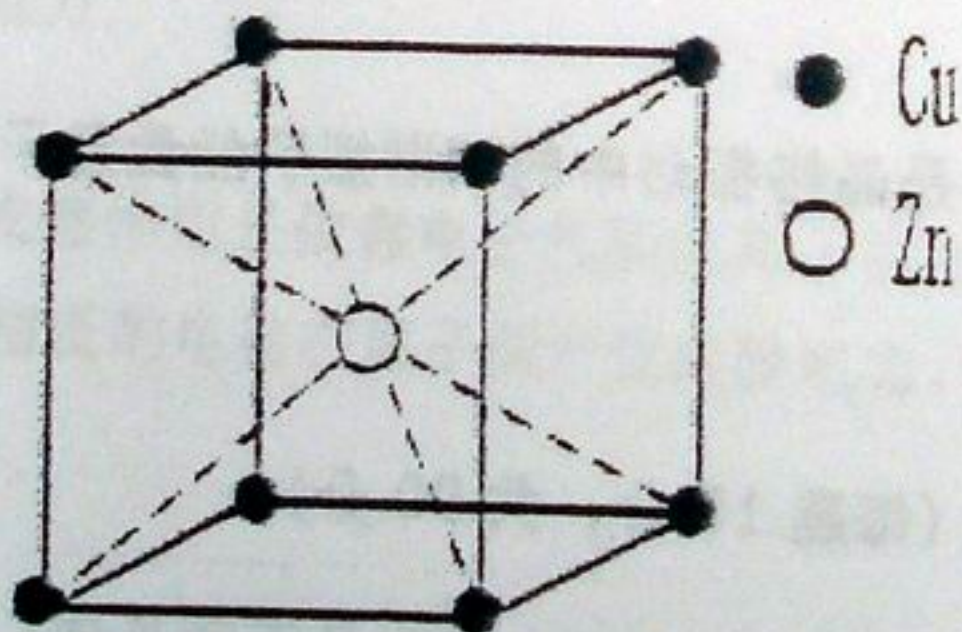
$(1\bar{1}2), [110]$

(2) $[1\bar{1}0]$ 和 $[110]$ 属于 $\langle 110 \rangle$ 晶向族。

2. β ·黄铜 (一种铜锌合金), 属于简单立方点阵, 其中 Cu 原子和 Zn 原子由两套简单立方点阵分别错位 $1/2 \ 1/2 \ 1/2$ 构成。如果 Cu 和 Zn 原子半径分别为 0.13nm 和 0.14nm , (1) 画出 β ·黄铜的晶体结构简图, 确定每个单位晶胞中所含 Cu 原子和 Zn 原子的数目, (2) 试计算 β ·黄铜的密度 (已知 Cu 和 Zn 的原子量分别为 63.54 及 65.37 , 阿佛加德罗常数为 6.022×10^{23})。

【参考答案】 :

(1)



每个单位晶胞中含一个 Cu 原子和一个 Zn 原子。

(2) 设黄铜的晶格常数为 a , 根据几何关系 $\sqrt{3}a = 2r_{\text{Cu}} + 2r_{\text{Zn}}$ 黄铜的晶格常数为: $a = 0.31\text{nm}$

黄铜的密度: $\rho = \frac{M_{Cu} + M_{Zn}}{N_A \cdot a^3} = 7.18 \times 10^6 \text{ g/m}^3$

3. 对含 0.1% 碳的钢进行渗碳实验 (渗碳系指将碳原子扩散渗入钢的内部), 若控制渗碳时钢件表面的浓度保持为 1.2%, 要求在其表面以下 2mm 处有 0.45% 碳, 现若碳在钢中的扩散系数 $D = 2 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ 为常量, 且考虑为半无限长一维扩散

- (1) 试求渗碳所需时间;
- (2) 若想将渗碳厚度增加 1 倍, 需多少时间?

误差函数表 β 与 $\text{erf}(\beta)$ 的对应值 (β 由 0 至 2.7)

β	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0.1	0.000 0	0.011 3	0.022 6	0.033 8	0.045 1	0.056 4	0.067 6	0.078 9	0.090 1	0.101 3
0.2	0.112 5	0.123 6	0.134 8	0.145 9	0.156 9	0.168 0	0.179 0	0.190 0	0.200 9	0.211 8
0.3	0.222 7	0.233 5	0.244 3	0.255 0	0.265 7	0.276 3	0.286 9	0.297 4	0.307 9	0.318 3
0.4	0.328 6	0.338 9	0.349 1	0.359 3	0.369 4	0.379 4	0.389 3	0.399 2	0.409 0	0.418 7
0.5	0.428 4	0.438 0	0.447 5	0.456 9	0.466 2	0.475 5	0.484 7	0.492 7	0.502 7	0.511 7
0.6	0.520 5	0.529 2	0.539 7	0.546 5	0.554 9	0.563 3	0.571 8	0.579 8	0.587 9	0.595 9
0.7	0.603 9	0.611 7	0.619 4	0.627 0	0.634 6	0.642 0	0.649 4	0.656 6	0.663 8	0.670 8
0.8	0.677 8	0.684 7	0.691 4	0.698 1	0.704 7	0.711 2	0.717 5	0.723 8	0.730 0	0.736 1
0.9	0.742 1	0.748 0	0.753 8	0.759 5	0.765 1	0.770 7	0.776 1	0.781 4	0.786 7	0.791 8
1.0	0.796 9	0.801 9	0.806 8	0.811 5	0.816 3	0.820 9	0.825 4	0.829 9	0.834 2	0.838 5
1.1	0.842 7	0.846 8	0.850 8	0.854 8	0.858 6	0.862 4	0.866 1	0.869 8	0.873 3	0.876 8
1.2	0.880 2	0.883 5	0.886 8	0.890 0	0.893 1	0.896 1	0.899 1	0.902 0	0.904 3	0.907 6
1.3	0.910 3	0.913 0	0.915 5	0.918 1	0.920 5	0.922 9	0.925 2	0.927 5	0.939 7	0.931 9
1.4	0.934 0	0.936 1	0.938 1	0.940 0	0.941 9	0.943 8	0.945 6	0.947 3	0.949 0	0.950 7
1.5	0.952 3	0.953 9	0.955 4	0.956 9	0.958 3	0.959 7	0.961 1	0.962 4	0.963 7	0.964 9
1.6	0.966 1	0.967 3	0.968 7	0.969 5	0.970 6	0.971 6	0.972 6	0.973 6	0.974 5	0.975 3
β	1.55	1.6	1.65	1.7	1.75	1.8	1.9	2.0	2.2	2.7
$\text{erf}(\beta)$	0.971 5	0.975 3	0.980 4	0.983 8	0.986 7	0.989 1	0.992 8	0.995 3	0.998 1	0.999

【参考答案】:

(1) 初始条件: $C_s = 1.2\%$ ($t=0, x < 0$)

$C_0 = 0.1\%$ ($t=0, x > 0$)

若 $C = 0.45\%$, $x = 2\text{mm}$ 求所需扩散时间 t

应用半无限一维扩散公式: $C(x, t) = C_0 + (C_s - C_0)[1 - \text{erf}(\frac{x}{2\sqrt{Dt}})]$

$$\operatorname{erf}(\beta)=0.75/1.1=0.68 \quad \text{查表: } \beta=0.71$$

$$\text{所需扩散时间 } t = \frac{x^2}{4D\beta^2} = \frac{0.002^2}{4 \times 2 \times 10^{-11} \times 0.71^2} = 99186s = 27.5 \text{ 小时}$$

$$(2) \quad t \propto x^2 \quad x \text{ 增加 1 倍, } t \text{ 增加 4 倍, } t=27.5 \times 4=110.0 \text{ 小时。}$$

注: 计算时注意单位的统一。

4. 在氧化镁晶体中, 若肖特基缺陷生成焓为 6eV, (1) 计算 1600°C 时做为热本征缺陷的镁空位浓度是多少。(2) 若在氧化镁晶体中掺杂三氧化二铝生产镁空位, 试写出缺陷方程。(3) 计算 1600°C 时掺杂有百万分之一(摩尔比)三氧化二铝的氧化镁晶体中热缺陷占优势还是杂质缺陷占优势? ($k=8.62 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$)

【参考答案】:

$$(1) \text{ 肖特基缺陷反应方程: } 0 \rightleftharpoons [V_{Mg}^{''}] + [V_O^{\bullet}]$$

$$\text{平衡常数: } K_s = [V_{Mg}^{''}][V_O^{\bullet}] \quad [V_{Mg}^{''}] = [V_O^{\bullet}]$$

镁空位浓度为:

$$[V_{Mg}^{''}] = K_s^{1/2} = \exp\left(-\frac{\Delta G_f}{2kT}\right) = \exp\left(-\frac{6}{2 \times 8.62 \times 10^{-5} \times 1873}\right) = 8.5 \times 10^{-9}$$

$$(2) \text{ 氧化镁掺杂三氧化二铝缺陷反应方程: } Al_2O_3 \xrightarrow{MgO} 2Al_{Mg} + V_{Mg}^{''} + 3O^{\bullet}$$

$$\text{此时的缺陷为 } V_{Mg}^{''}, \text{ 由上式可知: } [V_{Mg}^{''}]_{\text{杂质}} = [Al_2O_3] = 10^{-6}$$

由(1)计算结果可知, $[V_{Mg}^{''}]_{\text{热}} = 8.5 \times 10^{-9} < [V_{Mg}^{''}]_{\text{杂质}}$, 所以在 1600°C 时杂质缺陷占优势。

5. 有一面心立方结构晶体, 在发生滑移时, 如果考虑滑移面是在原子面密度

较大的晶面撤还能够进行，且滑移方向也是在原子线密度较大的晶向上进行，(1) 写出该滑移面的晶面指数，(2) 写出滑移方向的晶向指数，(3) 试求该面心立方晶体结构的最小滑移矢量长度。(晶体的晶格常数为 a)。

【参考答案】：

(1) 面心立方原子密排面为 (111) ，所以 (111) 面及为滑移面。

(2) 面心立方原子密排方向为 $[110]$ ，所以 $[110]$ 为滑移方向

(3) 最小滑移矢量为滑移方向的原子距离， $b = \frac{1}{2}a[110]$ ，所以最小滑移矢量长度为

$$b = \frac{\sqrt{2}a}{2}$$

6. 两个体系的无玻璃系统，在某一温度下分别测得这两个玻璃系统的成核速率和晶体生长速率，其中系统甲的成核速率是乙系统的 3 倍，而系统乙的晶体生长速率却是甲的 2 倍。现设系统甲在这一温度下保持为玻璃相所允许的保温时间不得大于 t ，试计算系统乙在同一温度条件下保持为玻璃相所允许的保温时间不得大于多少？并简单分析两者不同的原因。

【参考答案】：

根据熔体相转变动力学理论，均匀成核过程，在时间 t 内单位体积的结晶 V_L/V 如下式：

$$\frac{V_L}{V} \approx \frac{\pi}{3} I_r u^3 t^4$$

玻璃中能测出的最小晶体体积与熔体之比 V_L/V ，即容积率为 10^{-6} 可得：

$$t^4 \propto (I_r u^3)^{-1}$$

已知： $\frac{I_{r\text{甲}}}{I_{r\text{乙}}} = 3$ $\frac{u_{\text{甲}}}{u_{\text{乙}}} = \frac{1}{2}$ 根据上式可得： $\frac{t_{\text{甲}}}{t_{\text{乙}}} = (3 \times 0.5^3)^{-1/4} = 1.28$

$$t_{\text{乙}} = 0.78 t_{\text{甲}} \leq 0.78 t$$

系统乙在同一温度条件下保持为玻璃相所允许的保温不得大于 $0.78t$ 。

原因分析:

玻璃系统能否稳定存在, 由玻璃转变的动力学条件所决定。玻璃态的晶化包括成核、生长两个过程。玻璃系统在一定温度下的稳定性要同时考虑系统的成核速率与晶体生长速率。

甲系统的成核速率虽快, 但晶体生长速率慢, 总体结果使甲玻璃系统稳定性较乙差, 即玻璃相所允许的保温时间较乙短

乙系统晶体生长速率快, 但成核速率小, 使乙玻璃系统稳定性较好, 即玻璃相所允许的保温时间较甲长。

浙江大学 836 材料科学基础 2004 年试题及解析

一、填空题 (每空一分, 共 20 分)

1. 晶体的对称要素有宏观对称要素和微观对称要素之分, 宏观对称要素包括: 回转对称轴、对称面、对称中心、回转—反演轴 等, 微观对称要素包括: 滑动面、螺旋轴 等。
2. 硅酸盐的基本单元是 $[\text{SiO}_4]^{4-}$ 四面体。硅酸盐是掺入改性阳离子后, 氧化硅结果的变化构型, 根据四面体的排列方式可以将其总体分为: 岛状、单链状、双链状、层状、三维骨架结构 等。
3. 影响固溶体的因素很多, 根据 Hume-Rothery 规律, 主要的影响因素为: 尺寸因素、电价因素、电负性因素 等。
4. 根据晶体化学基本原理, 晶体中的键型有 金属键、离子键、共价键、分子键、氢键 等几种, 而实际材料的键合可以用一个确定键性的 键型四面体 (表面或内部的一个点来表示)。

二、选择题 (每题 3 分, 共 45 分)

1. 晶面间距通常具有的特性是:

- A 低指数的面间距较大, 高指数的面间距小, 面间距最大的面总是阵点 (或原子) 最密排的晶面
- B 高指数的面间距较大, 低指数的面间距小, 面间距最大的面总是阵点 (或原子) 最密排的晶面
- C 高指数的面间距较大, 低指数的面间距小, 面间距最大的面总是阵点 (或原子) 最稀疏的晶面

答: A。一般情况, 低指数的晶面其晶面间距较大, 高指数的晶面其面间距较小。但还与具体的点阵类型有关, 如面心立方或体心立方的最大晶面间距面分别为 $\{111\}$ 或 $\{110\}$, 而不是 $\{100\}$ 。但原子最密排面晶面间距最大总是成立的。

2. 金属键的特点是:

- A 电负性很小, 吸引力相当弱; 晶体中电子“共有化”、原子排列较紧密
- B 电负性很小; 吸引力相当弱; 晶体中电子“共用化”、由于有方向性要求, 所有原子排列稀疏
- C 电负性很小; 吸引力相当弱; 晶体中电子“共有化”、原子排列较紧密

答: C。金属电负性小, 即原子易失去电子成为正离子, 原子以金属键结合, 原子实靠库仑作用结合在一起, 原子排列较紧密。金属原子结合成晶体时, 价电子几乎是自由的, 即晶体中电子“共有化”。

3、氧化硅可以有很多晶体结构形态, 除了石英外还有方石英和鳞石英等。其中方石英和鳞石英分别属于:

- A 六方 ZnS 结构和立方 ZnS 结构
- B 闪锌矿和纤锌矿结构
- C 金刚石结构和六方 ZnS 结构

答: B。方石英结构和立方 ZnS (闪锌矿) 结构相似, 鳞石英结构和六方 ZnS (纤锌矿) 结构相似。

4、高分子材料的结晶区是指:

- A 同一大分子不同链段组成折叠链晶区
- B 不同分子的某些链段组成缨束状晶区
- C 既包括同一大分子不同链段组成折叠链晶区, 又包括不同分子的某些链段组成缨束状晶区

答: C。

5、设 ΔG 为氧化物 MO 的肖特基缺陷形成自由焓变化, 则对该体系中由肖特基形成

的 $[V_M]$ 和 $[V_O]$ 空位的总浓度 $[V]$ 的计算式为:

- A $[V] = \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT}\right)$
- B $[V] = 2\exp\left(-\frac{\Delta G}{RT}\right)$
- C $[V] = 2\exp\left(-\frac{\Delta G}{2kT}\right)$

答: C。肖特基缺陷反应方程: $0 \rightleftharpoons [V_M'] + [V_O']$ 平衡常数:

$$K_s = [V_M'] [V_O'], \quad [V_M'] = [V_O'], \quad [V] = [V_M'] + [V_O'] = 2K_s^{1/2} = 2\exp\left(-\frac{\Delta G}{2kT}\right)$$

6、左、右旋螺型位错的位错线在一个平行于它们的力的作用下分别将下述方向移到:

- A 相反且垂直于力的方向
- B 相同且平行于力的方向
- C 相反且平行于力的方向

答: A。螺旋位错的位错线滑移方向垂直于应力方向。

7、在中间相中, 把电子浓度和晶体结构键明确对应关系的称为:

- A 电子相
- B 间隙相
- C 拓扑密堆相

答: A。

8、各种物质状态的双体分布函数不同, 对应非晶态物质, 其特点是

- A 原子分布几率密堆出现明锐的峰

恩波学校

B 在近程范围内出现原子分布几率密度较大的峰

C 平均自由程外各处原子的分布几率相等

答：B。非晶态物质结构特点：短程有序，长程无序。因而在近程范围，非晶态原子分布几率和晶态相似。

9、非晶态半导体的主要类型有四面体配位的（如非晶硅及非晶锗等）和硫系非晶半导体等。其中硫系非晶半导体结构的主要特点是：

A 硫系元素仅形成层状结构，层间靠范德瓦尔斯力结合

B 硫系元素仅以链状或环状结构存在

C 硫系元素通常为二配位并留有孤电子

答：C。硫系半导体中，二配位材料如 $a\text{-Si}$ ，常形成链状或环状结构，但 As_2X_3 等二元硫系化合物则可形成层状结构，层间以范得瓦尔斯力结合。所以 A，B，都是错误的说法。

10、当玻璃从高温冷却到室温时，保持着转变温度区间的某一温度相应的平衡结构状态和性能。该温度称“假想温度”，一般情况下：

A 淬火玻璃的假想温度高，退火玻璃的假想温度低

B 淬火玻璃的假想温度低，退火玻璃的假想温度高

C 淬火玻璃和退火玻璃的假想温度相等

答：A。玻璃粘度较大，冷却速度快时，熔体结构来不及变化，比实际温度高时的平衡结构就被冻结下来。冷却速率越大，假想温度越高。淬火冷却速率远高于退火冷却速率，因而淬火玻璃的假想温度也较高。

11、弗兰克—瑞德（Frank—Read）位错增值模型中位错环的不断产生是由于：

A 在材料的四周各点上不同时施加外应力引入

B 最初空位片的存在且不断崩塌所致

C 两端被钉扎的一段位错受到应力的作用引起

答：C。

12、对应原子随机迁移引起的扩散，其扩散系数若以 $D = \frac{1}{6} a^2 \Gamma$ 表示，则该式适用于：

A 所有简单点阵且原子的跃迁距离为 a 的体系

B 所有立方点阵且晶格常数为 a 的体系

C 所有立方点阵且原子的跃迁距离为 a 的体系

答：A。上式由扩散运用统计学方法，结合菲克第一定律推得到三维条件下晶体的扩散系数。 a 为原子迁移距离。

13、长波极限下的声学波和光学波可以看作是：

A 极化波和弹性波

B 弹性波和极化波

C 极化波和连续介质

答：B。长声学波可看作弹性波，长声学波的晶格可以看作是连续介质。

海翔高

14、实际晶体中不同方向布里渊区边界上能量被分隔开的宽度可以不同, 因而晶体的实际禁带宽度是由:

- A 某一方向布里渊区边界上能量的间隙所确定
- B 几个方向上的禁带宽度共同决定
- C 特点方向布里渊区边界上能量的间隙所确定

答: B。禁带指能带结构中态密度为零的区域, 常用来表示价带和导带之间的能态密度为零的能量区间。实际晶体各个方向上的禁带宽度可能不相同, 因而实际的禁带宽度可能是几个方向上的禁带宽度共同决定的, 由最小禁带宽度决定。

15、爱因斯坦模型和德拜模型处理比热问题时, 由于采用的近似条件不同, 因而适用的范围也不同。实际上,

- A 爱因斯坦模型特别描述的是声学声子的贡献, 德拜近似更适用于低温
- B 爱因斯坦模型特别描述的是光学声子的贡献, 德拜近似更适用于高温
- C 爱因斯坦模型特别描述的是光学声子的贡献, 德拜近似更适用于低温

答: C。爱因斯坦模型假设晶体中所有的原子都以相同的频率振动, 常用于描述声子谱的一部分, 特别是对光学声子的贡献。低温下只有频率较低的格波(长声学波)对比热才有重要贡献, 对长声学波可以看作连续介质弹性波, 德拜模型以连续介质的弹性波来代替格波, 因此德拜近似更适用于低温。

三、分析计算题 (第3题 10分, 其余每题 15分, 共 85分)

1、设一种氧化物 MO 形成肖特基缺陷, 其缺陷浓度可以用公式

$[V_M^{\bullet}] = [V_O^{\bullet}] = \exp\left(-\frac{\Delta G}{2kT}\right)$ 表示, 测得该氧化物在 1600°C 时的空位浓度

$[V_M^{\bullet}] = 8.516 \times 10^{-9}$, (1) 试求出氧化物 MO 的肖特基缺陷生成焓。($k = 8.62$

$\times 10^{-6} \text{eV/K}$)。 (2) 若在 MO 中掺入杂质使其中形成浓度为 10^{-10} 的 M 空位,

试确定在什么温度下系统开始受到杂质缺陷浓度控制?

【参考答案】:

$$(1) \Delta G = -2kT \ln([V_M^{\bullet}]) = -2 \times 8.62 \times 10^{-5} \times 1873 \times \ln(8.516 \times 10^{-9}) = 6.0 \text{eV}$$

$$(2) [V_M^{\bullet}] = 2 \exp\left(-\frac{\Delta G}{2kT}\right), \text{ 当 } [V_M^{\bullet}] = 10^{-10} \text{ 时:}$$

$$T = -\frac{\Delta G}{2k[V_M^{\bullet}]} = -\frac{6.0}{2 \times 8.62 \times 10^{-5} \times \ln(10^{-10})} = 1511 \text{K} = 1238^{\circ}\text{C}$$

由计算可得: 当温度低于 1238°C 时系统受杂质缺陷浓度控制。

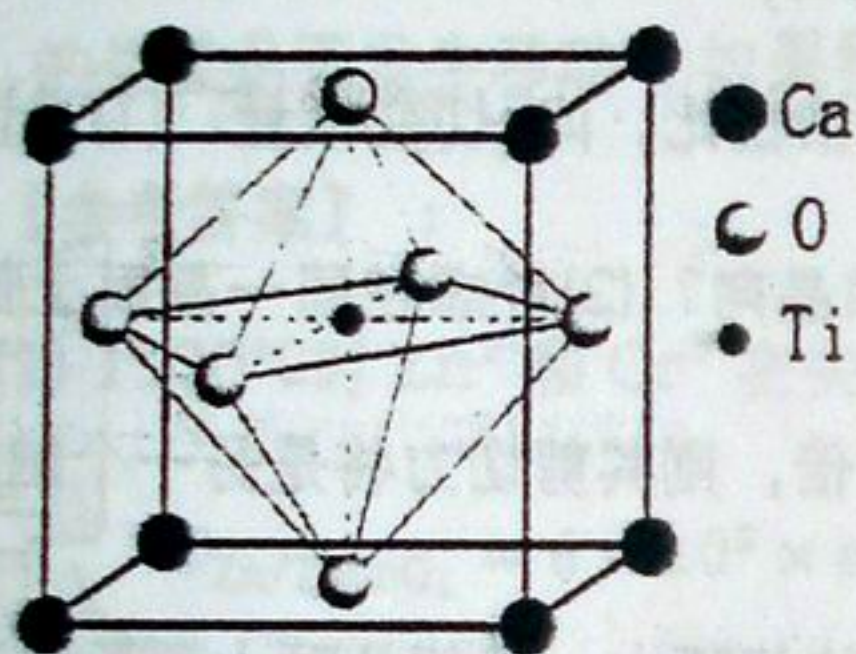
2. 钙钛矿(CaTiO_3)是典型的 ABO_3 结构, 其晶胞是由 Ca 原子和 Ti 原子的正交简单格子各一套, O 原子的正交简单格子三套, 相互穿插构成。若以 Ca 原子的格子作为基体, Ti 原子的格子错位 $1/2(a+b+c)$ 插入, 而三套 O 原子的格子分别配置于

$(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ 、 $(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$ 、 $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ 。

- (1) 画出钙钛矿的理想晶胞结构。(注: 单位晶胞中含一个 CaTiO_3 分子)
- (2) 确定结构中 Ti^{4+} 的最近邻离子是什么? Ti^{4+} 的最近邻离子配位数是多少? 形成是什么配位多面体?
- (3) 根据(1)所得的晶胞图, 最简单画出(111)晶面的原子排列面。

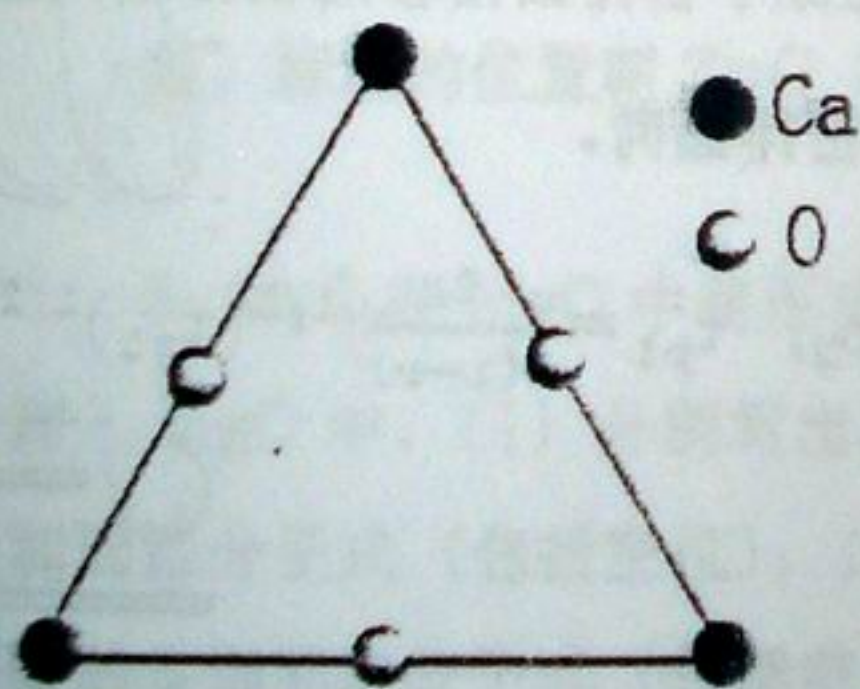
【参考答案】:

(1)



(2) 结构中 Ti^{4+} 的最近邻离子是 O。 Ti^{4+} 的最近邻离子配位数为 6, 形成八面体配位多面体。

(3) (111)面原子排列如下图所示



3. 一种熔体在 1300°C 时的粘度为 $3100\text{Pa}\cdot\text{s}$, 在 800°C 时的粘度为 $10^8\text{Pa}\cdot\text{s}$, 已知粘度 η 和温度 $T(\text{K})$ 的关系满足公式 $\lg \eta = A + \frac{B}{T}$, (1)、试求在 1050°C 时的粘度, (2)、考虑在该粘度下急冷, 是否能形成玻璃。

【参考答案】

上海翔高

全解·深入·内幕

$$(1) \quad \lg 3100 = A + B/1573$$

$$\lg 10^8 = A + B/1073$$

$$A = -6.18 \quad B = 15224$$

$$\text{当 } T = 1323\text{K 时, } \eta = 2.1 \times 10^5 \text{Pa.s}$$

$$(2) \text{ 玻璃化转变温度时其粘度相当于 } \eta_{\text{转变}} = 10^{12.4} \text{Pa.s}$$

1050°C时的粘度 $\eta \ll \eta_{\text{转变}}$, 因此, 在该粘度下急冷, 无法形成玻璃。

4. 应用派-纳模型, 定量地计算克服点阵阻力推动位错运动的切应力的公式

如下表示, $\tau_p = \frac{2\mu}{(1-\nu)} \exp\left(-\frac{2\pi d}{(1-\nu)b}\right) = \frac{2\mu}{(1-\nu)} \exp(-2\pi w/b)$, 其中 w 为位错宽度, b

为位错强度, w 为滑移面的间距, ν 为泊松比, μ 为切变模量。(1)试说明为什么晶

体滑移通常发生在原子最密排的晶面和晶向? (2)考虑在同一晶面上但滑移方向不

同, 若选择一个滑移距离为另一个的两倍, 则其剪切力将是另一个的多少倍?

参考答案:

(1) 对于一个给定的晶体, 由于密排面的间隔大, 相邻晶面上原子对齐的作用力较

弱, 所有密排面上的位错具有较大的宽度, 即密排面的 w 较大, 较小, 所以

晶体滑移易发生在原子密排面。

原子最密排晶向的原子间距小, 晶体延原子密排面滑移的伯格斯矢量强度 b 小,

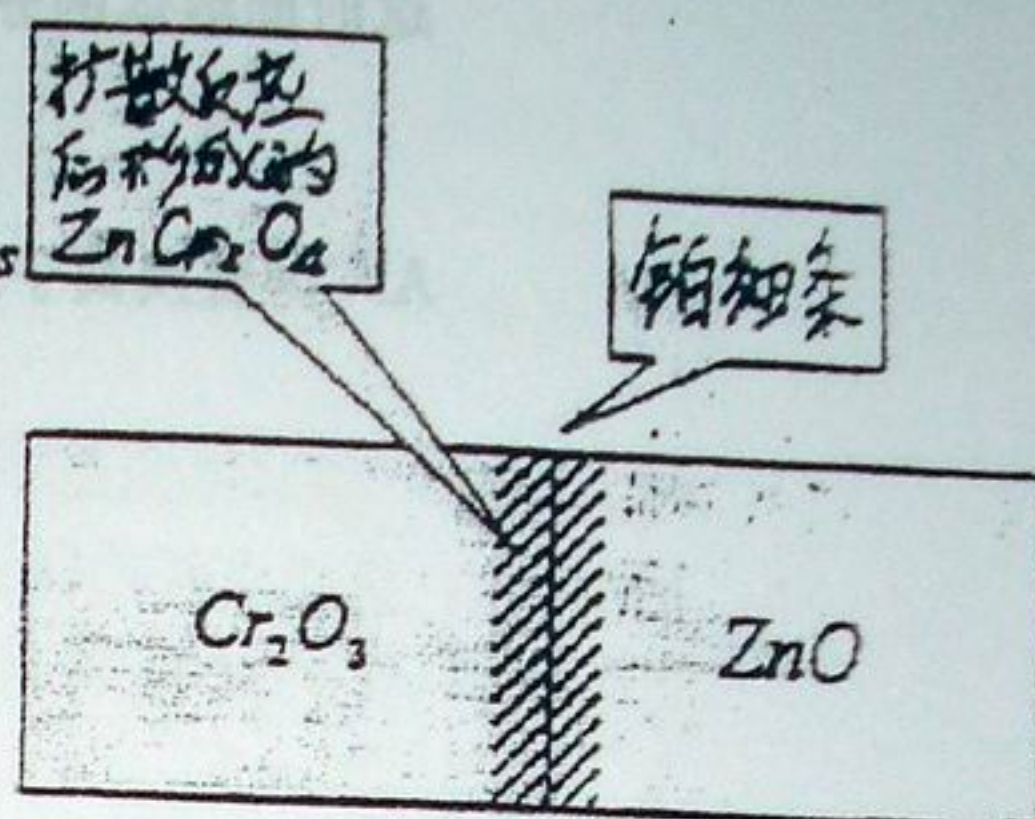
较小, 所以晶体滑移易发生在原子密排晶向。

(2) 同一晶面上 w 、 ν 、均相同, $b_1 = 2b_2$, $\tau_{p1} = \left(\frac{2\mu}{(1-\nu)}\right)^{1/2} (\tau_{p2})^{1/2}$

5. 利用 ZnO 和 Cr_2O_3 两种氧化物, 在一定条件下经相互扩散反应形成尖晶石 $ZnCr_2O_4$ 。(1) 已知 Zn^{2+} 和 Cr^{3+} 在尖晶石 $ZnCr_2O_4$ 中的扩散系数与温度的关系分别为:

$$D_{Zn/ZnCr_2O_4} = 6 \times 10^{-1} \exp\left(-\frac{356732(\text{cal/mol})}{RT}\right) \quad m^2/s$$

$$D_{Cr/ZnCr_2O_4} = 8.5 \times 10^{-3} \exp\left(-\frac{338904(\text{cal/mol})}{RT}\right) \quad m^2/s$$



$R=1.987\text{cal/mol K}$ 。试求 1130°C 时 Zn^{2+} 和 Cr^{3+} 分别在尖晶石 $ZnCr_2O_4$ 中的扩散系数。(2)、设两种氧化物 ZnO 和 Cr_2O_3 扩散反应形成尖晶石 $ZnCr_2O_4$ 的模型如图所示, 制备时若将薄铂细条涂在两种氧化物 ZnO 和 Cr_2O_3 的界面上后压制成型并在 1130°C 进行扩散反应。(标记用铂细条很细不影响离子在不同氧化物间的扩散) 试根据得到的数据判断经一定时间的扩散反应后标的位置是否发生移动? 如果移动则说明向哪个方向移动。

【参考答案】:

(1) 1130°C 时 Zn^{2+} 和 Cr^{3+} 在尖晶石中的扩散系数为:

$$D_{Zn/ZnCr_2O_4} = 6 \times 10^{-1} \times \exp\left(-\frac{356732}{1.987 \times 1403}\right) = 1.600 \times 10^{-52} m^2/s$$

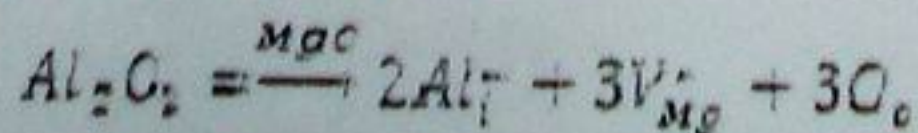
$$D_{Cr/ZnCr_2O_4} = 8.5 \times 10^{-3} \times \exp\left(-\frac{338904}{1.987 \times 1403}\right) = 1.358 \times 10^{-55} m^2/s$$

(2) $D_{Zn/ZnCr_2O_4} > D_{Cr/ZnCr_2O_4}$ 扩散反应后 Cr_2O_3 侧的铂细条受到流体静压力的作用, 标记的位置朝 ZnO 方向移动。

6. Al_2O_3 在 MgO 中将形成有限固溶体, 在低共熔温度时, 约有 $18\text{wt}\%$ 的 Al_2O_3 溶入 MgO 中。(1) 分别写出 Al^{3+} 为填隙离子和 Al^{3+} 为置换离子时的缺陷反应方程和固溶分子式 (包括空位)。(2) 试分别计算 Al^{3+} 为填隙离子时和 Al^{3+} 为置换离子时的实际固溶分子式 (包括空位)。(3) 不考虑体积变化时固溶体固溶前后的相对密度变化。(其中 Al_2O_3 和 MgO 的分子量分别为 102 和 40.3)

【参考答案】:

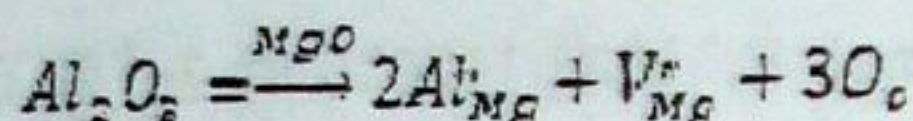
(1) Al^{3+} 为填隙离子时: (a 为 Al_2O_3 溶入摩尔数)



a 2a 3a 3a

这时固溶体的分子式为: $Mg_{1-2a}[V_{Mg}^{IV}]_{2a}Al_{2a}O$

Al^{3+} 为置换离子时: (a 为 Al_2O_3 溶入摩尔数)



a 2a a 3a

这时固溶体的分子式为: $Mg_{1-a}[V_{Mg}^{IV}]_aAl_{2a}O$

(2) 设: Al_2O_3 溶入的摩尔分数为 x, $x = \frac{18/102}{18/102 + 82/40.3} = 0.08$, Al 元素溶入的

摩尔分数为 $3 \times 0.08 = 0.24$

Al^{3+} 为填隙离子时:

这时固溶体的分子式为: $Mg_{1-2a}[V_{Mg}^{IV}]_{2a}Al_{2a}O_{+1}$

$$\frac{Al}{Mg} = \frac{2x}{1-x} = \frac{2a}{1-2a} \quad a = 0.09$$

得到生成填隙型固溶体时的分子式为: $Mg_{0.78}[V_{Mg}^{IV}]_{0.27}Al_{0.18}O_{+1}$

Al^{3+} 为置换离子时:

这时固溶体的分子式为: $Mg_{1-a}[V_{Mg}^{IV}]_aAl_{2a}O$

$$\frac{Al}{Mg} = \frac{2x}{1-x} = \frac{2a}{1-a} \quad a = 0.12$$

得到生成置换型固溶体时的分子式为: $Mg_{0.88}[V_{Mg}^{IV}]_{0.12}Al_{0.24}O$

(3) 生成填隙型固溶体和生成置换型固溶体时的密度分别为 ρ_2 和 ρ_1 , MgO 的

密度为 ρ

生成填隙型固溶体密度变化为: $\frac{\rho_2}{\rho} = \frac{0.78 \times 40.3 + 0.27 \times 102 + 16}{40.3} = 1.58$

生成置换溶体密度变化为: $\frac{\rho_i}{\rho} = \frac{0.88 \times 40.2 + 0.24 \times 102 + 16}{40.2} = 1.88$

浙江大学 836 材料科学基础 2005 年试题及解析

一、基本概念选择题 (每题 2 分)

1、空间点阵的特点是:

A 阵点周围环境都相同, 在空间的位置一定 B 阵点周围环境不同, 在空间的位置一定

C 阵点周围环境都相同, 在空间的位置无序

答: A。空间点阵在空间规则排列, 点子的周围环境必须相同。

2、结晶学中的晶族、晶系、布拉菲点阵、点群、单形、空间群的数目分别为:

A. 3、32、14、47、7、230 B 3、7、14、32、47、230 C 7、3、14、47、32、230

答: B。

3、确定晶面方位的一组数, 称为晶面指数, 它是代表:

A 一组相互垂直的晶面 B 一组相互平行的晶面
晶面

答: B。

4、晶向指数与晶面指数满足条件 $[hkl] \perp (hkl)$ 的晶系为:

A 只有立方晶系 B 立方晶系与正交晶系

答: A。

5、晶态的对称性可用对称要素描述, 对称要素分为宏观对称要素和微观对称要素, 其中微观对称要素有:

A (1)滑动面; (2)回转对称轴 B (1)滑动面; (2)螺旋面 C (1)对称面; (2)螺旋轴

答: B。晶体宏观对称要素有: 回转对称轴、对称面、对称中心、回转反演轴; 微观对称要素有: 滑动面、螺旋面。

6、用电负性区别非金属元素与金属元素时, 用以作为判断及分界的电负性大致为:

A $X=0.5$ B $X=2$ C $X=3$

答: B。

7、原子半径的大小与键的性质直接相关，不同的键型，原子半径也不相同。其中，可用用键长的一半表示的是：

- A 共价半径、范德瓦斯半径 B 金属半径、离子半径 C 共价半径、离子半径

答：A。离子键的键长为阴离子半径与阳离子半径的和，阴、阳离子半径并不为离子键的键长的一半。

8、密排六方和面心立方结构密排面上原子的堆垛方式为：

- A. ABAB....., ABCABC..... B. ABCABC....., ABAB..... C. ABCABC....., ABCABC.....

答：A。

9、正离子配位数通常由正负离子半径比确定，因此：

- A 配位多面体是八面体时，正、负离子半径比应处于 0.414—0.732 范围
B 正离子配位数为 6 时，正、负离子半径比应处于 0.225—0.414
C 正、负离子半径比处于 0.732—1.0 范围时，配位多面体是四面体

答：A。正负离子半径比处于 0.732—1.0 范围，正离子配位数为 8，配位多面体为立方体。正负离子半径比处于 0.414—0.732 范围，正离子配位数为 6，配位多面体为八面体。正负离子半径比处于 0.225—0.414 范围，正离子配位数为 4，配位多面体为四面体。正、负离子半径

10. 根据泡林规则，已知正离子配位数后可以求得相应的负离子配位数。现考虑负离子堆积体是 O^{2-} ，因而有：

- A. 一个一价正离子的配位数是 6 时，有相应的负离子配位数为 8
B. 一个二价正离子的配位数是 6 时，有相应的负离子配位数为 6
C. 一个二价正离子的配位数是 6 时，有相应的负离子配位数为 8

答：B。若一个二价正离子的配位数是 6，二价正离子贡献给周围每个 O^{2-} 的电价为 $2/6$ ，有泡林第二规则可知，为了电价平衡， O^{2-} 周围必须有 6 个二价正离子包围。同样可计算，若一个一价正离子的配位数是 6 时，有相应的负离子配位数为 12。

11、受泡林规则的制约，在硅酸盐矿物中不同的硅氧四面体结合类型，硅氧四面体中过剩的负电荷不同，也即需要有相应的正电荷来平衡。根据硅酸盐结构判据表达式可用确定矿物 $(NaMg_2Al_6(BO_3)_3[Si_6O_{18}]_3(OH)_4)$ 满足：

- A 判据值为 2，属单链结构 B 判据值为 1，属骨架状结构 C 判据值为 2，属环状结构

答：C。判决： $R = \frac{1+6+12-8-4}{6} = 2$ 为 6 元环结构。

12、高分子晶体的特点是:

- A 高分子晶体属于分子晶体类型 B 高分子晶体属于共价晶体类型
C 高分子晶体属于部分共价晶体部分分子晶体结合型

答: A。高分子链节间通常是饱和共价键连接, 而大分子和大分子之间或同一大分子不同链段之间则是通过弱二次分子力使局部排列成有序的结晶区。所以高分子晶体属于分子晶体。

13、晶体缺陷的意义为:

- A 造成晶体点阵周期势场畸变的一切因素 B 晶体中出现原子空位的区域
C 晶体中出现减小原子的区域

答: A。

14、弗伦克尔缺陷是:

- A 原子移到表面处新的位置, 原来位置则形成空位
B 原子离开平衡位置后, 形成间隙离子, 而原来位置上形成空位, 成对产生
C 正、负离子的二元体系, 原子移到表面新的位置, 原来位置空位成对出现

答: B。原子移到表面, 形成空位而不形成等量的间隙原子, 只有形成的缺陷(空位)成为肖脱基缺陷。如果同时形成等量的空位和间隙原子, 则所形成的缺陷(空位和间隙原子对)成为弗伦克缺陷。

15、一中负离子缺位, 金属离子过剩的氧化物 TiO_2 , 满足缺陷反应方程

$\text{O}_\text{o} \rightleftharpoons \text{V}_\text{o} + 2e' + \frac{1}{2}\text{O}_2 \uparrow$, 则氧空位浓度与氧分压满足如下关系:

- A $[\text{V}_\text{o}] \propto \frac{1}{6} [\text{P}_{\text{O}_2}]^{-1/4}$ B $[\text{V}_\text{o}] \propto \frac{1}{2} [\text{P}_{\text{O}_2}]^{-1/6}$ C $[\text{V}_\text{o}] \propto \frac{1}{4} [\text{P}_{\text{O}_2}]^{-1/4}$

答: B。平衡常数: $K = [\text{V}_\text{o}][e']^2[\text{P}_{\text{O}_2}]^{-1/2}$ $[e'] = 2[\text{V}_\text{o}]$ $[\text{V}_\text{o}] \propto \frac{1}{2} [\text{P}_{\text{O}_2}]^{-1/6}$

16、位错最重要的性质之一是它可以在晶体中运动, 其中:

- A 螺型位错只作滑移, 刃型位错既可滑移又可以攀移
B 刃型位错只做滑移, 螺型位错既可滑移又可攀移
C 刃型位错只做攀移, 螺型位错既可滑移又可攀移

答: A。

17、固体表面力原自于:

- A 固体表面质点排列的周期性中断, 力场对称性破坏, 表现出的剩余键力
B 固体表面不均匀性, 外界物质溶液填入台阶处而表现出的吸引力
C 固体表面由于大量位错露头存在, 产生了表面缺陷, 改变了表面势场而出现的作用力

答: A。

18、在中间相稳定的整个温度区间内显示出长程序的中间相称为:

A 电子化合物

B 间隙化合物

C 金属间化合物

答: C。

19、非晶态固体的特点是:

A 具有短程有序而长程无序的结构

B 原子完全混乱无序地无规则排列

C 由许多小晶体取向无序形成的结构

答: A。

20、非晶体固体的短程序常有几何短程有序(GSRO)和化学短程有序(CSRO)之分,化学短程有序的意义为:

A 元素玻璃的局域结构短程有序,与局域应力张量相联系

B 对最近邻的原子,系统元素的原子周围的化学成分与平均值不同

C 与近邻原子的球对称性发生椭圆偏离的度量

答: B。几何短程序(GSRO)表示近邻原子在空间几何位置排列上的规律和特点。

21、在描述非晶半导体、非晶态金属及玻璃的结构时,常用到无规网络模型、微晶子模型、硬球无规密堆模型等,其中在金属一类金属非晶合计用得最成功的模型是:

A 无规网络模型

B 硬球无规密堆模型

C 微晶子模型

答: B。

22、参与形成氧化物玻璃的氧化物常分为三种类型:分别是网络形成剂、网络改变剂和中间剂。其主要为:

A 网络形成剂 SiO_2 、 B_2O_3 、 P_2O_5 、 V_2O_5 、 As_2O_3 、 Sb_2O_3 等;网络改变剂 Na_2O 、 KrO 、 CaO 、 MgO 、 BaO 等;中间剂 Al_2O_3 、 TiO_2 等

B 网络形成剂 SiO_2 、 B_2O_3 、 P_2O_5 、 V_2O_5 、 MgO 、 BaO 等;网络改变剂 Na_2O 、 KrO 、 CaO 、 Al_2O_3 、 TiO_2 等;中间剂 As_2O_3 、 Sb_2O_3 等

C 网络形成剂 Na_2O 、 KrO 、 CaO 、 MgO 、 BaO 等;网络改变剂 SiO_2 、 B_2O_3 、 P_2O_5 、 V_2O_5 、 As_2O_3 、 Sb_2O_3 等;中间剂 Al_2O_3 、 TiO_2 等

答: A。

23、玻璃形成能力可以三 T 图(即温度-时间-转变)来判断。其中定义玻璃中能测出的最小晶体体积与熔体之比约为:

A 10^{-5} B 10^{-6} C 10^{-7}

答: B。

24、局部有序的折叠缨束状胶粒模型, 亦称两性球粒模型, 认为高分子非晶体是由折叠链构象的“粒子相”和无规线团构象的“粒间相”构成。其中:

A 粒子相包括链节规则排列的有序区组成, 但不包括外面的粒间区

B 粒间区由穿越不同粒子相的分子链无规则地缠绕在一起, 加上一些低分子量物和链末端所组成

C 粒子相包括链节规则排列的有序区和穿越不同粒子相并无规地缠绕在一起的分子链组成

答: B。粒子相包括链节规则排列的有序区和外面的粒间区。粒间区是围绕有序区形成的, 主要由折叠弯曲部分、链端和由有序区延伸到粒间区的分子链部分连接所组成的。

25、扩散系数有自扩散系数、偏扩散系数和互扩散系之分。偏扩散系数是指:

A 不依赖于浓度梯度的扩散所定义的扩散系数

B 描述几种离子同时进行扩散时的扩散性流动和整体流动总和的扩散系数

C 几种离子同时金属扩散的多于系统中每个组元的扩散系数, 扩散是处于化学位梯度体积下进行的。

答: C。

26、扩散的激活能可对 $\ln D - 1/T$ 作图, 由斜率求得。在系统中仅有少量杂质时, 通常低温区和高温区的不同斜率分别表示了:

A 非本征扩散即本征扩散激活能 B 本征扩散即非本征扩散激活能

C 不同温度下的本征扩散激活能

答: A。高温区以热缺陷引起的扩散为主, 称为本征扩散; 低温区一般以杂质产生或控制的缺陷所引起的扩散为主, 称为非本征扩散。

27、在光学波中, 位移与波矢相垂直的部分及位移与波矢平行的部分分别构成

A 横波和纵波

B 纵波和横波

C 弹性波和连续波

答: A。

28、在爱因斯坦和德拜的比热模型中, 对利用两子理论求比热的方法进行了简化, 两种模型的简化条件分别是:

A 前者以连续介质的弹性波代替格波; 后者只考虑光学波的作用

B 前者设晶体中所有的原子都以相同的频率振动; 后者以连续介质的弹性波代替格波

C 前者只考虑声学波的作用, 后者设晶体中所有的原子都以相同的频率振动

答: B。

29、热导系数可写出 $k = \frac{1}{3} C \bar{v} l$, 若不考虑温度对声子平均速率的影响, 则对一非常完整的晶体, 在低温下,

A 热导率按 T^3 变化 B 热导将按 T^{-1} 变化 C 热导将按 $e^{B/T}$

答: A。低温下, 热容 $C \propto T^3$, \bar{v} 、 l 不变, 热导 k 按 T^3 变化。

30、有一包含 N 个原胞的三维晶格, 每个原胞由 2 个原子组成, 那么该晶胞包含的独立振动频率数为:

A $3N$ B N C $6N$

答: C。格波波矢的数目等于原胞数, 而独立振动频率数等于系统的自由度数。
系统自由度数 = 原胞所含原子数 \times 晶格维度

二、解析选择题 (每题 15 分);

(注: 解析选择体在给出题目的同时还给出了一种简单解析过程及答案, 解析过程中的每一步都给出了多个选项, 考生只需对每一步所给出的选项按照正确的解析过程进行分析计算, 并按解析顺序和计算结构判断选择出每一步的正确选项即可。

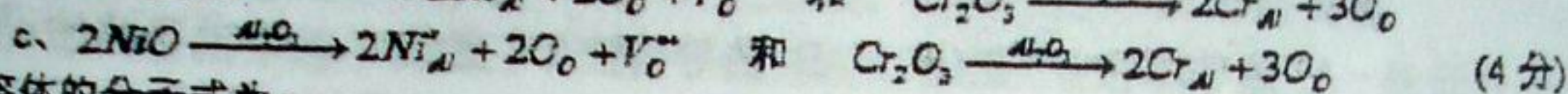
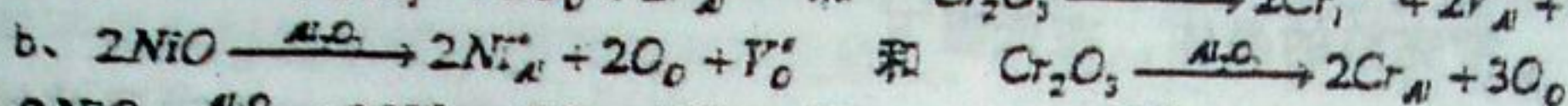
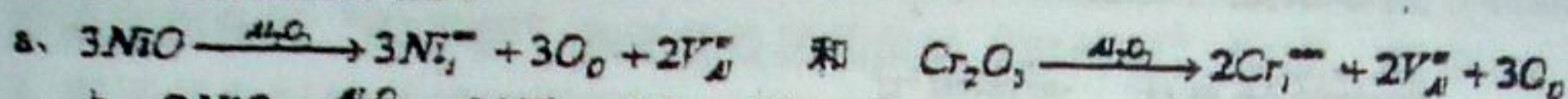
得分原则: 每个题目中将解多个小题, 以每个小题为判断单元, 每个单元只有当所选选项以及以前各项都选择正确是, 该选项才得分, 每一选项的可能得分数都标注在各项后。)



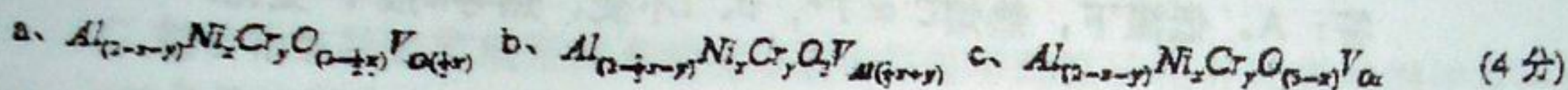
1 一块 Al_2O_3 中以置换固溶的方式固溶 $0.5mol\%$ NiO 和 $0.02mol\%$ Cr_2O_3 , (1) 试确定其缺陷反应方程及固溶体分子式。(2) 给出这种固溶体的化学式, 并考虑固溶前后体积不变, 计算固溶前后的密度变化百分比。(分子量: $M_{Al_2O_3} = 102$, $M_{NiO} = 74.7$, $M_{Cr_2O_3} = 152$)

解析过程:

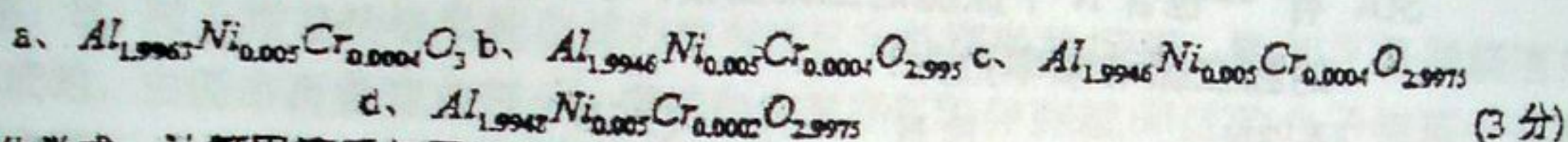
(1) 确定其缺陷反应方程为:



其固溶体的分子式为:



(2) 计算出化学式为:



利用化学式, 计算固溶后与固溶前的体积密度百分比为:

$$a. \frac{\rho'}{\rho} = \frac{0.005M_{NiO} + 0.0002M_{Cr_2O_3} + 0.9948M_{Al_2O_3}}{M_{Al_2O_3}} = 99.87598\%$$

$$b. \frac{\rho'}{\rho} = \frac{0.005M_{NiO} + 0.0004M_{Cr_2O_3} + 0.9948M_{Al_2O_3}}{0.99917M_{Al_2O_3}} = 99.98878\%$$

$$c. \frac{\rho'}{\rho} = \frac{0.005M_{NiO} + 0.0002M_{Cr_2O_3} + 0.9948M_{Al_2O_3}}{0.99833M_{Al_2O_3}} = 100.04305\%$$

$$d. \frac{\rho'}{\rho} = \frac{0.005M_{NiO} + 0.0002M_{Cr_2O_3} + 0.9948M_{Al_2O_3}}{0.99917M_{Al_2O_3}} = 99.95895\% \quad (4分)$$

【参考答案】:

(1) a 选项中生成了间隙固溶体, b 选项中氧空位应该带正电荷, Ni 置换 Al 后应该带一个负电荷。

所以正确的缺陷反应为: c。

根据缺陷反应方程, 固溶分子式为: a。

(2) 溶入的 Ni 原子的摩尔分数为: $x=0.005$, 溶入的 Cr 原子的摩尔分数为: $y=0.0004$

计算得到化学式为: c。

固溶前后体积变化正确选项是: a。

2. 对含 0.2% 碳的钢进行渗碳试验 (渗碳系指将碳原子扩散渗入钢的内部), 若控制渗碳时钢件表面碳的浓度保持为 1.4%, 要求在其表面以下 3mm 处有 0.35% 碳。现若碳在钢中的扩散系数 $D = 2 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ 为常量, 且考虑为半无限长一维扩散

误差函数表 β 与 $\text{erf}(\beta)$ 的对应值 (β 由 0 至 2.7)

β	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0.1	0.0000	0.0113	0.0226	0.0338	0.0451	0.0564	0.0676	0.0789	0.0901	0.1013
0.2	0.1125	0.1236	0.1348	0.1459	0.1569	0.1680	0.1790	0.1900	0.2009	0.2118
0.3	0.2227	0.2335	0.2443	0.2550	0.2657	0.2763	0.2869	0.2974	0.3079	0.3183
0.4	0.3286	0.3389	0.3491	0.3593	0.3694	0.3794	0.3893	0.3992	0.4090	0.4187
0.5	0.4284	0.4380	0.4475	0.4569	0.4662	0.4755	0.4847	0.4937	0.5027	0.5117
0.6	0.5205	0.5292	0.5377	0.5461	0.5544	0.5626	0.5708	0.5788	0.5868	0.5947
0.7	0.6025	0.6103	0.6180	0.6256	0.6331	0.6406	0.6480	0.6554	0.6627	0.6700
0.8	0.6772	0.6844	0.6915	0.6985	0.7054	0.7123	0.7191	0.7259	0.7326	0.7393
0.9	0.7459	0.7525	0.7590	0.7654	0.7718	0.7781	0.7844	0.7906	0.7968	0.8029
1.0	0.8090	0.8150	0.8209	0.8267	0.8324	0.8381	0.8437	0.8493	0.8548	0.8603
1.1	0.8657	0.8711	0.8764	0.8817	0.8869	0.8921	0.8972	0.9023	0.9073	0.9123
1.2	0.9172	0.9221	0.9269	0.9316	0.9363	0.9409	0.9455	0.9499	0.9544	0.9588
1.3	0.9632	0.9675	0.9717	0.9759	0.9800	0.9841	0.9881	0.9921	0.9960	0.9998
1.4	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
1.5	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
1.6	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
1.7	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
1.8	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
1.9	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
2.0	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
2.1	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
2.2	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
2.3	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
2.4	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
2.5	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
2.6	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
2.7	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998

解析过程如下:

(1) 首先根据题意列出扩散方程为:

$$\begin{aligned} \text{a. } C(x,t) &= C_1 + (C_2 - C_1) \left[1 - \text{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] \\ \text{b. } C(x,t) &= \frac{C_1 + C_2}{2} + \frac{C_1 - C_2}{2} \text{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \\ \text{c. } C(x,t) &= \frac{C_2}{2} \left[1 - \text{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] \end{aligned} \quad (3 \text{ 分})$$

以此得到误差关系式为:

$$\text{a. } 0.75 = \text{erf} \left(\frac{335.4}{\sqrt{t}} \right) \quad \text{b. } 0.5 = \text{erf} \left(\frac{335.4}{\sqrt{t}} \right) \quad \text{c. } 0.875 = \text{erf} \left(\frac{335.4}{\sqrt{t}} \right) \quad (3 \text{ 分})$$

查表后计算得到扩散时间为:

$$\text{a. } t = 26.30\text{h} \quad \text{b. } t = 47.63\text{h} \quad \text{c. } t = 135.63\text{h} \quad (3 \text{ 分})$$

(2) 将渗碳厚度增加 1 倍则渗碳时间要延长到原来的:

$$\text{a. } 2 \text{ 倍} \quad \text{b. } 4 \text{ 倍} \quad \text{c. } 6 \text{ 倍} \quad \text{d. } 8 \text{ 倍} \quad (3 \text{ 分})$$

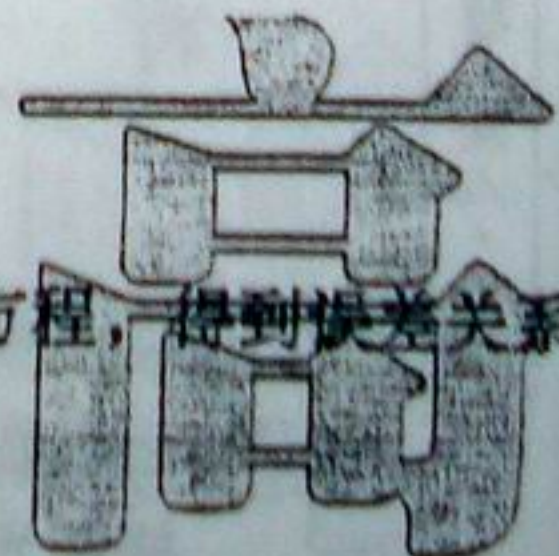
具体渗碳时间为:

$$\text{a. } 52.6 \quad \text{b. } 105.2 \quad \text{c. } 190.52 \quad \text{d. } 208.4 \quad \text{e. } 542.52 \quad (3 \text{ 分})$$

【参考答案】:

(1) 半无限一维扩散方程正确表达式为: a.

$C_1 = 0.2\%$ $C_2 = 1.4\%$ $C(3\text{mm}, t) = 0.35\%$ 带入扩散方程, 得到误差关系式为: c.



全程·深入·内幕

查表得 $\frac{225.4}{\gamma} = 1.9$ $\therefore (\frac{225.4}{1.9})^2 = 31161s = 8.48h$ 选项给出的计算结构均不

正确。所需扩散时间为 8.48h。

(2) $\frac{x}{\sqrt{Dt}} = \beta$ $\propto x^2$ 渗碳厚度增加一倍，渗碳时间延长到原来的 4 倍。选 b。

具体的渗碳时间为 $8.48 \times 4 = 33.92h$ 。

3 一种双原子离子晶体，已知两个原子的原子量分别为 23 和 35.5，每摩尔的原子数为 6.024×10^{23} ，格波光学支的最高频率为 $3.1 \times 10^{13}(\text{rad/s})$ ，试以一维双原子晶链模型计算：(1) 晶体的恢复力常数 β ；(2) 格波光学支的最低频率以及格波声学支的最低和最高频率。

解析过程：

(1) 利用光学支公式：

$$\begin{aligned} a. \omega^2 &= \frac{\beta}{mM} \left\{ (m+M) - [m^2 + M^2 + 2mM \cos(2qa)]^{\frac{1}{2}} \right\} & b. \omega^2 &= \frac{\beta}{mM} \left\{ (m+M) + [m^2 + M^2 - 2mM \cos(2qa)]^{\frac{1}{2}} \right\} \\ c. \omega^2 &= \frac{\beta}{mM} \left\{ (m+M) + [m^2 + M^2 + 2mM \cos(2qa)]^{\frac{1}{2}} \right\} & & (4 \text{ 分}) \end{aligned}$$

计算得到晶体的恢复力常数为：

$$\begin{aligned} a. \beta &= 1.5014 \times 10^4 (\text{dyn/cm}) = 15.014 (\text{N/m}) & b. \beta &= 3.8187 \times 10^4 (\text{dyn/cm}) = 38.187 (\text{N/m}) \\ c. \beta &= 2.4741 \times 10^4 (\text{dyn/cm}) = 24.741 (\text{N/m}) & & (4 \text{ 分}) \end{aligned}$$

(2) 利用下列声学支公式 ω_1 和光学支公式 ω_2 的最大和最小值表达式，

$$\begin{aligned} a. (\omega_1)_{\text{最大}} &= \left(\frac{2\beta}{m} \right)^{\frac{1}{2}}, (\omega_2)_{\text{最小}} = \left(\frac{2\beta}{M} \right)^{\frac{1}{2}} \square C (\omega_1)_{\text{最小}} = 0 & b. (\omega_1)_{\text{最大}} &= \left(\frac{2\beta}{M} \right)^{\frac{1}{2}}, (\omega_2)_{\text{最小}} = \left(\frac{2\beta}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \square C (\omega_1)_{\text{最小}} = 0 \\ c. (\omega_1)_{\text{最大}} &= \left(\frac{2\beta}{M} \right)^{\frac{1}{2}}, (\omega_2)_{\text{最小}} = \left(\frac{2\beta}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \square C (\omega_1)_{\text{最小}} = \left(\frac{\beta}{m} \right)^{\frac{1}{2}} & & (4 \text{ 分}) \end{aligned}$$

计算出相应的声学支和光学支的最大和最小值为：

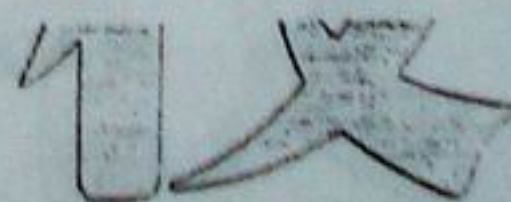
$$\begin{aligned} a. (\omega_1)_{\text{最大}} &= 2.8044 \times 10^{13} (\text{rad/s}), & b. (\omega_1)_{\text{最大}} &= 2.2573 \times 10^{13} (\text{rad/s}), \\ (\omega_2)_{\text{最小}} &= 2.2573 \times 10^{13} (\text{rad/s}), & (\omega_2)_{\text{最小}} &= 2.8044 \times 10^{13} (\text{rad/s}), \\ (\omega_1)_{\text{最小}} &= 0 & (\omega_1)_{\text{最小}} &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c. (\omega_1)_{\text{最大}} &= 2.2573 \times 10^{13} (\text{rad/s}), & & (3 \text{ 分}) \\ (\omega_2)_{\text{最小}} &= 2.8044 \times 10^{13} (\text{rad/s}), \\ (\omega_1)_{\text{最小}} &= 1.9830 \times 10^{13} (\text{rad/s}) \end{aligned}$$

【参考答案】：

(1) 正确选项为：C。

格波光学支的最高频率为：



$$(\omega_2)_{\text{最大}} = \left(\frac{2\beta}{\mu}\right)^{1/2} \quad \mu = \frac{mM}{m+M} = \frac{23 \times 25.5}{(23+25.5) \times 6.024 \times 10^{23}} = 2.31694 \times 10^{-22} \text{ g}$$

$$\beta = \frac{\mu}{2} [(\omega_2)_{\text{最大}}]^2 = \frac{2.31694 \times 10^{-22}}{2} \times (3.6 \times 10^{12})^2 = 1.5014 \times 10^4 \text{ dyn/cm}$$

正确选项为：a。

(2) 声学支最大值和光学支最小值的表达式为：b。

光学支最低频率为：

$$(\omega_2)_{\text{最低}} = \left(\frac{2\beta}{m}\right)^{1/2} = \left(\frac{2 \times 1.5014 \times 10^4}{23} \times 6.024 \times 10^{23}\right)^{1/2} = 2.8044 \times 10^{12} \text{ rad/s}$$

声学支的最高频率为：

$$(\omega_2)_{\text{最大}} = \left(\frac{2\beta}{M}\right)^{1/2} = \left(\frac{2 \times 1.5014 \times 10^4}{35.5} \times 6.024 \times 10^{23}\right)^{1/2} = 2.2573 \times 10^{12} \text{ rad/s}$$

声学支的最大频率为： $(\omega_1)_{\text{最大}} = 0$

正确选择为：b。

三、分析计算题（每题 15 分）

1、不同晶体具有不同的原子频率规则，也具有不同的间隙，考虑萤石(CaF_2)和钙钛矿(CaTiO_3)两种结构晶体，已知 O^{2-} 半径为 0.14nm, Ca^{2+} 半径为 0.112nm, F 半径为 0.131nm, 萤石结构的晶胞常数为 $a=0.5452\text{nm}$ 。(1) 计算这两种结构中的最大空隙，(2) 试分别最简单地画出 CaF_2 晶胞(110)面和 CaTiO_3 晶胞(111)面的原子排布图。

【参考答案】：

(1) $\frac{r_{\text{Ca}^{2+}}}{r_{\text{F}^-}} = \frac{0.112}{0.131} = 0.855$ ，根据泡林第一规则，Ca和F形成八面体配位。

Ca^{2+} 贡献给周围每个 F 的电价为 1/4，根据泡林第二规则， F^- 周围必须有 4

个 Ca^{2+} 离子包围，即 位于 Ca^{2+} 四面体间隙。

从上述分析可得 CaF_2 的晶格结构为： Ca^{2+} 离子形成面心立方结构， F^- 离子位于其四面体间隙。

最大空隙为面心立方的八面体空隙, 立方体边长为, 八面体空隙能填充的最大

球的半径为 r_{x1} 。根据几何关系有: $\frac{a}{2} = r_{Ca} + r_{x1}$, $r_{x1} = 0.1606\text{nm}$

钙钛矿晶格结构:

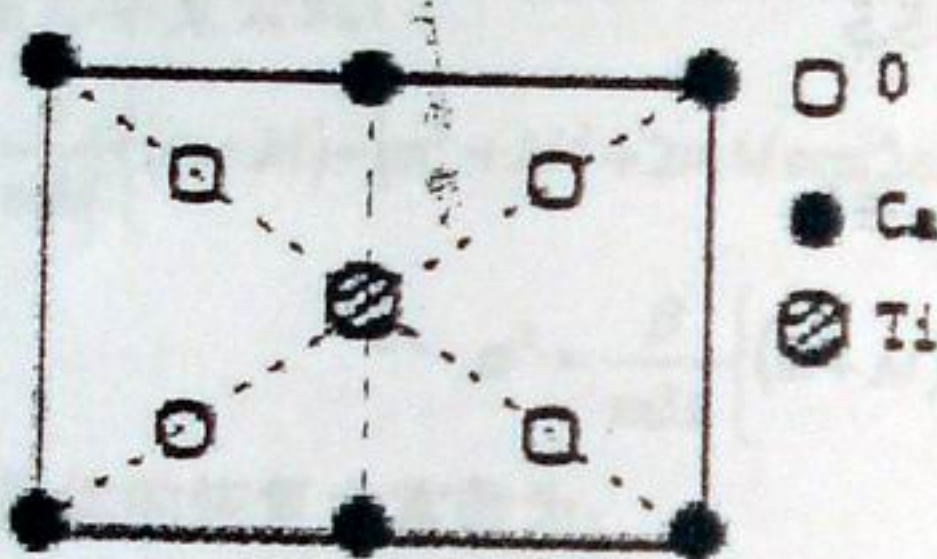
Ca 离子和 O 离子共同形成密排堆积, Ti 离子位于氧八面体间隙中。

钙钛矿中最大的空隙为两个 Ca 离子和四个 O 离子构成的八面体间隙, 间隙能

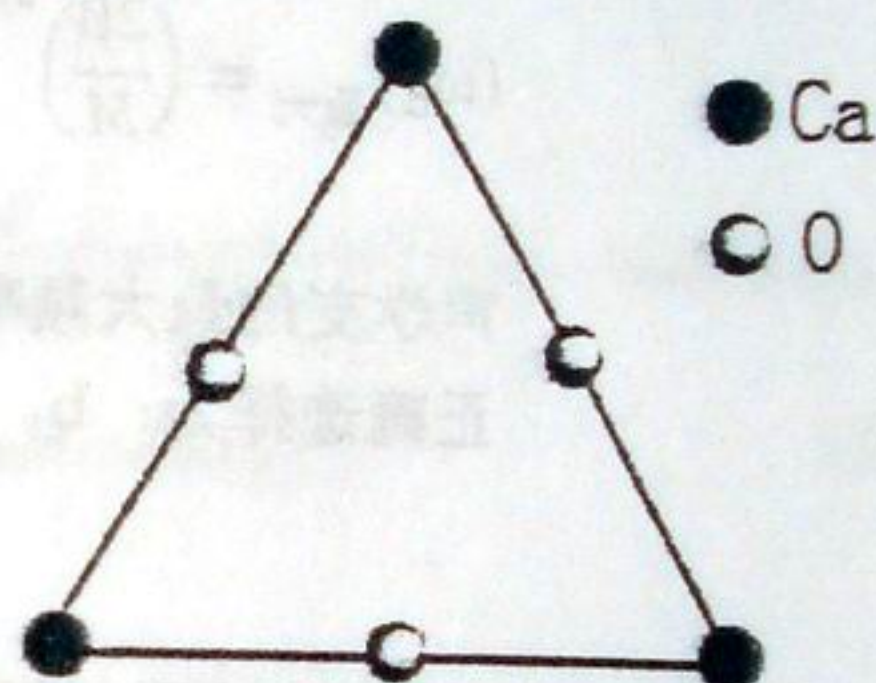
填入最大的球半径为 r_{x2} 。根据几何关系有: $r_O + r_{Ca} = \sqrt{2}(r_O + r_{x2})$,

$$r_{x2} = \frac{0.14 + 0.112}{\sqrt{2}} - 0.14 = 0.038\text{nm}$$

(1) CaF_2 晶胞(110)面:



CaTiO_3 晶胞(111)面:



2、在一个面心立方晶格中有两个平行且同号的螺型位错, 若将两个位错从 90nm 推进到 3nm 试求需要做多少功? (已知螺型位错的 Burgers 矢量为)

$\frac{a}{2}[110]$, 一个螺型位错受到另一个相距 r 处的平行螺型位错作用的应力常为 $\alpha = \frac{\mu b}{2\pi r}$

晶体点阵常数为 $a = 0.3\text{nm}$, 切变模量 $\mu = 7 \times 10^{10}\text{Pa}$ 。

【参考答案】:

伯格斯矢量强度: $b = \frac{a}{2}\sqrt{2} = 0.21\text{nm}$

螺型位错受到的应力为: $F = \alpha b = \frac{\mu b^2}{2\pi r}$

两个位错从 90nm 推进到 3nm 做功为:

$$W = \int_{90}^3 -F dr = \int_{90}^3 -\frac{\mu b^2}{2\pi r} dr = \frac{7 \times 10^{10} \times 0.21^2}{2 \times \pi} (\ln 90 - \ln 3) = 1.67 \times 10^{-9}\text{J}$$

3、玻璃在高温下的粘度与该玻璃的桥氧有关，一般桥氧多，体系的高温粘度就高。现有两种不同组成的玻璃，(1) 试计算两种玻璃的桥氧数，(2) 判断两种玻璃高温粘度的大小。(两种玻璃的配备如下：

样品	Na_2O wt%	Al_2O_3 wt%	SiO_2 wt%
G1	10	20	70
G2	20	10	70

氧化物的分子量为： $M_{\text{Al}_2\text{O}_3}=102$ ， $M_{\text{Na}_2\text{O}}=62$ ， $M_{\text{SiO}_2}=60.1$

注：由于 Al_2O_3 是两性氧化物，当体系中 Al_2O_3 超过 Na_2O 的量时， Al^{3+} 可视为网络改性离子。反之，则 Al^{3+} 视为网络形成离子)

【参考答案】：

(1) 样品 1:

$\text{Al}_2\text{O}_3 > \text{Na}_2\text{O}$ Al^{3+} 为网络改性离子。

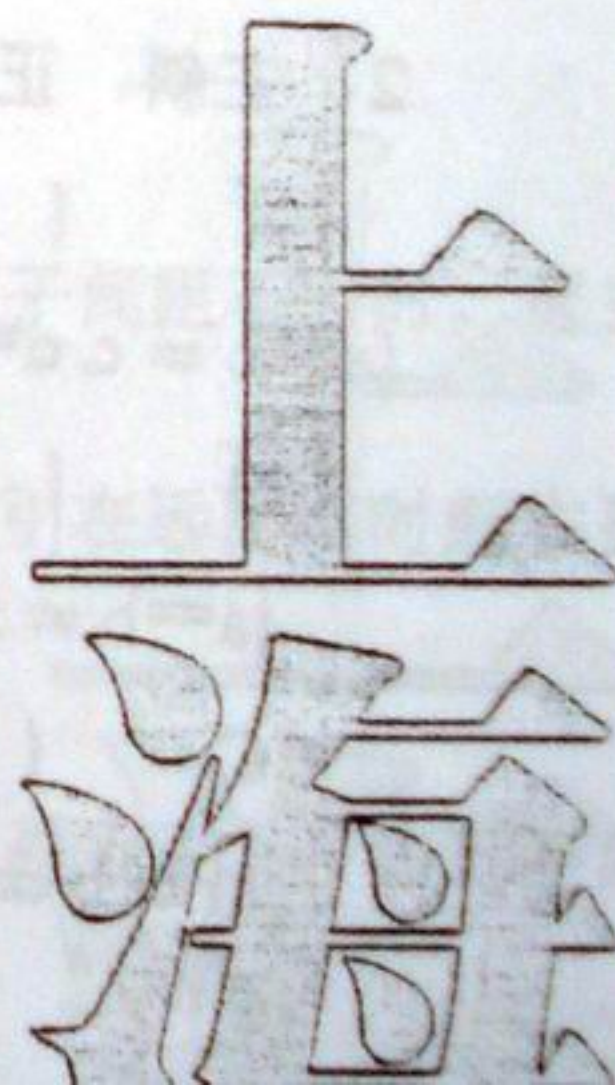
$$R_1 = \frac{10+60+140}{70} = 3 \quad \text{桥氧数为: } Y_1 = 2Z - 2R_1 = 8 - 6 = 2$$

样品 2:

$\text{Al}_2\text{O}_3 < \text{Na}_2\text{O}$ Al^{3+} 为网络形成离子。

$$R_2 = \frac{20+30+140}{70-20} = 3.1 \quad \text{桥氧数为: } Y_2 = 2Z - 2R_2 = 8 - 6.2 = 1.8$$

(2) $Y_1 > Y_2$ 所以样品 1 的粘度小于样品 2 的粘度。



浙江大学 836 材料科学基础 2006 年试题及解析

一、填空题 (每空 1 分, 共 30 分)

1、空间电子的意义为:

A 晶体中杂质原子的分步规律
则排列

B 晶体中原子或分子的空间规

C 晶体中与原子或分子电荷空间分别规律

答: B。空间点阵的阵点可以是原子或分子的中心, 也可以是彼此等同的原子群或分子群的中心, 但各个点子的周围环境都必须相同。

2、三斜、正交、四方晶系对应的棱边长度关系是:

A $(a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ)$, $(a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ)$,
($a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)

B $(a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ)$, $(a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ)$,
($a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)

C $(a = b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ)$, $(a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ)$,
($a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)

答: A。

3、晶体的晶面指的是:

A 描述晶体是选取的晶系坐标轴所构成的平面

B 与晶系坐标轴成特殊夹角的平面

C 原子所构成的平面

答: C。

4、在晶系坐标轴上分别去 $a/2$ 、 $b/3$ 、 $c/4$ 三个点, 连接这三个点得到的平面, 其晶面指数为:

A (234)
(432)

B (643)

答: A。

5、可与用晶面族 $(100) = (100) + (010) + (001) + (\bar{1}00) + (0\bar{1}0) + (00\bar{1})$ 表示的晶系是:

A 正交晶系

B 立方晶系

C 四

方晶系

答：B。立方晶体的等价晶面具有“类似的指数”，即指数的数字相同，只是符号（正负号）和排列次序不同。

6、电负性的基本意义是：

A 形成负离子倾向大小的两大亮度

B 形成正离子倾向大小的

C 相斥负离子和形成正离子倾向相等时的电子亲和力

答：A。电负性是分子中一个原子向它本身吸引电子的能力，即分子内两种原子吸引电子称为负离子倾向的相对大小。

7、大多数实际材料键合的特点是：

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：A。

8、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，起主要作用的作用理是不一样的，有：

A 吸引力在原子十分接近时起主要作用

B 吸引在远距离时起主要作用

C 排斥在远距离时起主要作用

答：B。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。

9、极性共价键形成的条件，若以成键两原子间电负性差来表示时，其电负性差值为：

A $0.7 \leq \Delta x < 1.7$

B $\Delta x < 0.5$

$\Delta x = |x_e - x_p| < 0.7$

答：A。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： $0.7 \leq \Delta x < 1.7$

10、金属晶体中最典型的结构是：

A 面心立方、体心立方、密排六方排六方

B 面心立方、简单立方、体

C 面心立方、体心四方、密排六方

答: A。

11、描述晶体的间隙时通常可与用 r_A/r_B 表示, 其中:

A r_A 表示堆积原子的半径, r_B 表示形成间隙多面体的两个原子间的距离

B r_A 表示堆积原子的半径, r_B 表示形成间隙多面体的两个原子间的距离的一半

C r_A 表示堆积原子的半径, r_B 表示形成多面体间隙中可放入最大原子的半径

答: C。

12、描述晶体材料(非高分子)的结构时有一套系统的结构参数, 但对高分子晶体结构进行描述时, 可

A 用高分子晶体的链常特性参数进行描述

B 用一般晶体材料(非高分子)中使用的同一结构参数描述

C 用高分子晶体结晶区的形态特点, 如缨束状晶区和折叠链晶区的多少进行描述

答: B。高分子晶体可用一般晶体材料中使用的各种晶体参数进行描述。但高分子晶体的对称性比金属和无机材料差, 内含大量非晶区域。

13、缺陷的特征是:

A 不随外界条件的改变而变动, 也不会合并和消失

B 随着各种条件的改变而不断变动, 有些可与产生、发展、运动、交互作用、合并和消失

C 随着各种条件的改变而不断变动, 但不产生交互作用, 不会合并和消失

答: B。晶体中缺陷存在交互作用, 合并和消失, 如: 正负位错的合并消失, 空位、间隙原子的复合消失等。

14、点缺陷是指:

A 一个方向上的尺寸很小, 另外两个方向上的尺寸很大的一类缺陷

B 在两个方向上的尺寸很小, 另一个方向上的尺寸相对很长的一类缺陷

C 在 X、Y、Z 三个方向上的尺寸都很小的一类缺陷

答: C。对点缺陷、线缺陷、面缺陷可以近似的分别看成是零维、一维、二位缺陷。

15、位错线与滑移方向垂直和平行的位错分别为:

A 螺型位错和刃型位错 B 刃型位错和螺型位错
C 刃型位错和混合型位错

答: B。

16、正、负刃型位错的半原子面在同一垂直于该面的力的作用下，其移动方向：

- A 相反且垂直于力的方向 B 相同且平行于力的方向 C 相反且平行于力的方向

答：C。位错线的滑移方向平行于应力的方向，因而半原子面也平行于应力方向。

17、三条位错线在一节点相交，若有一条 b_1 指向该节点，另有两天 b_2 和 b_3 背离该节点，则有：

- A $b_2+b_3-b_1=0$ B $b_2+b_1-b_3=0$ C $b_1+b_3-b_2=0$

答：A。

18、派-纳模型给出了为克服点阵阻力，推动位错前进相应的切应力表达式：

$\tau_p = \frac{2\gamma}{(1-\mu)} \exp(-2\pi\omega/b)$ ——其中 ω 为位错宽度， b 为位错强度。分析此式可知：

- A 位错容易延原子排列稀疏的面滑移 B 位错容易延原子密排面滑移
C 与位错滑移面平行的晶面面间距越小，该位错越容易滑移

答：B。原子密排面位错宽度大，派-纳力小，位错容易滑移；原子密排方向伯格斯矢量小，派-纳力小，位错容易滑移。与位错滑移面平行的晶面常为原子密排面（易滑移面），原子密排面的晶面面间距大，所以 C 选项也是错的。

19、晶格常数等于 0.361nm 的面心立方晶体。其 2° 的对称倾侧晶界中的位错间距为：

- A $\sim 73 \text{ \AA}$ B $\sim 37 \text{ \AA}$
C $\sim 103 \text{ \AA}$

答：C。对称倾侧晶界中位错的间距为： $D = \frac{b}{2\sin\frac{\theta}{2}} = \frac{0.361}{2 \times \sin 1^\circ} = 10.3\text{nm} = 103\text{\AA}$

20、试从点阵常数与不同固溶形式时原子进入结构的位置关系考虑，当平均点阵常数减小时，通常可以认为是：

- A 形成了置换固溶体 B 形成了减小固溶体

C 完全无法

判断

答: A。对间隙固溶体, 由于固溶原子进入间隙位置, 只可能使点阵常数增大。对于置换固溶体, 若溶质原子尺寸较小, 在溶质原子附近点阵发生收缩, 使固溶体的点阵常数减小, 若溶质原子的尺寸较大, 在溶质原子附近的点阵发生膨胀, 平均点阵常数增大。

21、非晶态固体常以原子径向分布函数 $RDF=4\pi r^2 \rho(r)$ 来描述, 其中 $\rho(r)$ 表示:

- A 不同半径 r 的原子密度的分布 B 不同半径 r 的球面上半径为 r 的原子密度分布
C 不同半径 r 的球面上的平均原子密度随 r 的变化

答: C。 $\rho(r)$ 表示以任何一个原子为球心, 半径为 r 的球面上的平均原子密度 (统计平均值), 即表示不同半径 r 的球面上的平均原子密度随 r 的变化。

22、Voronoi 多面体是用于描述局域短程序特征的一种多面体, Voronoi 多面体是指:

- A 由相邻两个球的球心连线为棱所构成的多面体
B 以某个球为中心与最近邻的球心连线, 这些连线的垂直平分面所围成的多面体
C 一种称为 Gaskell 模型的多面体——三棱柱多面体

答: B。

23、玻璃网络特性的基本结构参数可与用桥氧和非桥氧来描述, 考虑一玻璃组成为 $12\text{mol}\%\text{Na}_2\text{O}$, $10\text{mol}\%\text{CaO}$ 和 $78\text{mol}\%\text{SiO}_2$, 则每个氧多面体的平均桥氧和非桥氧数分布为:

- A 0.56 和 3.44 B 1.44 和 1.56 C 3.44 和 0.56

答: C。 $R = \frac{12-10-156}{78} = 2.28$ 桥氧数: $Y = 2Z - 2R = 8 - 4.56 = 3.44$ 非桥氧

数: $X = 2R - Z = 4.56 - 4 = 0.56$

24、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

- 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 C 自由体积变化与密度无关

答: A。

- 25、考虑扩散系数为常量的半无限一维扩散, 保持扩散源的浓度为 C_2 不变; 保持扩散介质中扩散物质的初始浓度为 C_1 , 且均匀分布。这时扩散介质中扩散物质的浓度随扩散时间和扩散距离的变化可用下式来表示:

A $C(x, t) = \frac{C_2}{2} [1 - \exp(\frac{x}{2\sqrt{Dt}})]$

B $C(x, t) = C_2 + (C_2 - C_1)[1 - \exp(\frac{x}{2\sqrt{Dt}})]$

C $C(x, t) = \frac{C_1 - C_2}{2} + \frac{C_1 + C_2}{2} [1 - \exp(\frac{x}{2\sqrt{Dt}})]$

答: B。

- 26、一过渡金属氧化物, 存在有金属离子空位, 其空位浓度为 $[V_M']$ 。原子跳动脱离

格点所需超过能垒的自由能为 ΔG , 原子的振动频率为 ν , 配位数为 z_0 。据空位机构, 原子跳动频率为:

A $\Gamma = \frac{[V_{Co}']}{\nu z_0} \exp[-\frac{\Delta G}{kT}]$

B $\Gamma = \nu z_0 [V_{Co}'] \exp[-\frac{\Delta G}{kT}]$ C

$\Gamma = \frac{\nu z_0}{[V_{Co}']} \exp[-\frac{\Delta G}{kT}]$

答: B。 $\Gamma = z_0 P_v \omega$, 将 $P_v = [V_M']$, $\omega = \nu \exp[-\frac{\Delta G}{kT}]$ 代入可得

$\Gamma = \nu z_0 [V_M'] \exp[-\frac{\Delta G}{kT}]$

- 27、在柯肯达尔扩散实验中, 一个二元系统, A 组元的原子百分比浓度为 0.4, 两个组元的实际扩散系数分别为 $D_A = 10^{-7} \text{cm}^2/\text{sec}$ 和 $D_B = 9 \times 10^{-8} \text{cm}^2/\text{sec}$, 在标志界面处 A 组元的成份随距离的变化率为 2.0cm^{-1} 。则互扩散系数及标志移动速度分布为:

A $9.6 \times 10^{-8} \text{cm}^2/\text{sec}$ 和 $2 \times 10^{-6} \text{cm}/\text{sec}$
和 $1 \times 10^{-6} \text{cm}/\text{sec}$

B $9.6 \times 10^{-8} \text{cm}^2/\text{sec}$

C $9.4 \times 10^{-8} \text{cm}^2/\text{sec}$ 和 $2 \times 10^{-6} \text{cm}/\text{sec}$

答: A。根据达肯公式,

互扩散系数为:

$$\bar{D} = N_A D_B + N_B D_A = 0.4 \times 9 \times 10^{-8} + 0.6 \times 10^{-7} = 9.6 \times 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{sec}$$

标志移动:

$$V = (D_A - D_B) \frac{\partial N_A}{\partial x} = (10^{-7} - 9 \times 10^{-8}) \times 2.0 = 2.0 \times 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{sec}$$

28、外场作用下原子的势场不再对称, 势场在作用方向上发生由高到低的倾斜, 造成空位向势场方向的运动速度:

A 升高

B 下降

C 不变

答: B。空位跳动几率为: $P = v \exp(-\frac{E}{kT})$ 延势场方向, 空位势垒 E 增大, 因

而势场方向, 空位跳动几率降低, 即空位向势场方向运动速率下降。对填隙原子在势场下的运动与空位相反, 即填隙原子向势场方向的运动速率升高。

29、由于极化所引起的宏观场是个纵向场, 它趋于减小纵向位移, 增加纵向振动恢复了, 因此:

A 长光学纵波的频率 ω_L 恒大于长光学横波的频率 ω_T 。

B 长光学横波的频率 ω_T 恒大于长光学纵波的频率 ω_L 。

C 长光学纵波的声子是电磁声子, 长光学横波声子是极化声子。

答: A。长光学波声子称为极化声子, 但只有长光学纵波伴随有宏观的极化电场, 所以, 极化声子应该主要是指纵光学波。长光学横波则具有电磁性, 因此, 长光学横波声子是电磁声子。

30、一简立方格子, 晶格常数为 a , 那么其倒格子具有:

A 简立方格子, 晶格常数为 $2\pi/a$

B 体心立方格子, 晶格常

数 $4\pi/a$

C 面心立方格子, 晶格常数 $4\pi/a$

答: A。简单立方的倒格子仍为简单立方; 面心立方的倒格子是体心立方, 体心立方的倒格子是面心立方。

二、分析计算题 (第 4 题 18 分, 第 6 题 12 分, 其余各题 15 分, 共 90 分);

1、BCC 结构的金属铁, 其(112)晶面的原子面密度为 $9.94 \times 10^{14} \text{ atoms/cm}^2$ 。

(1) 请计算 (110) 晶面的原子面密度, (2) 分别计算 (112) 和 (110) 晶面的

晶面间距, (3) 确定通常在那个晶面上最可能产生晶面滑移? 为什么? (BCC 结构铁的晶格常数为 $a=0.2866\text{nm}$)

【参考答案】 :

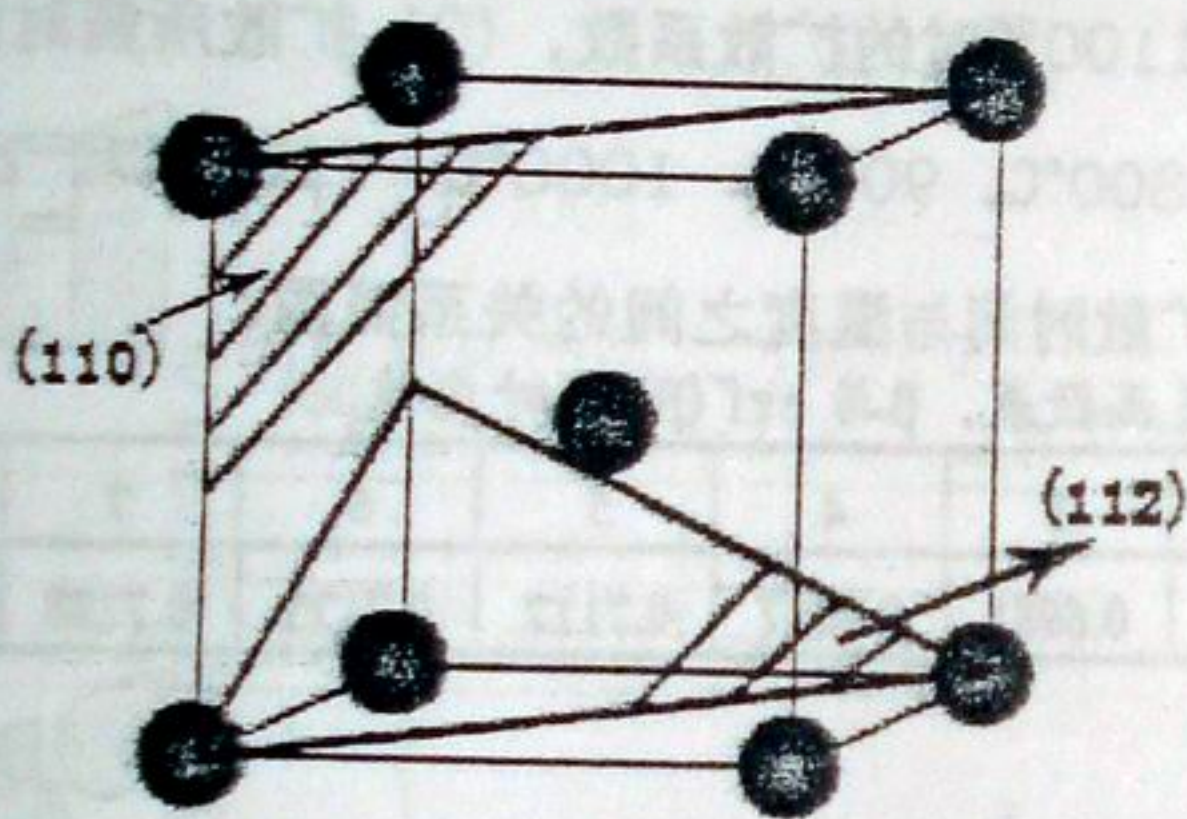
(1) BCC 结构的晶胞如下图所示。设晶胞棱长为 a 。

在一个晶胞中(110)面的面积为 $\sqrt{2}a^2$, 在这个面上有 2 个原子, 所以其面密度

$$\text{为 } \rho_{(110)} = \frac{2}{\sqrt{2}a^2} = \frac{\sqrt{2}}{a^2}$$

在一个晶胞中(112)面的面积为 $\frac{\sqrt{6}}{4}a^2$, 在这个面上有 $2/3$ 个原子, 所以其面密

$$\text{度为 } \rho_{(112)} = \frac{2/3}{\frac{\sqrt{6}}{4}a^2}$$



(110)面的原子密度为:

$$\frac{\rho_{(110)}}{\rho_{(112)}} \times 9.94 \times 10^{14} = \frac{\frac{\sqrt{2}}{a^2}}{\frac{2/3}{\frac{\sqrt{6}}{4}a^2}} \times 9.94 \times 10^{14} = \frac{3\sqrt{2}}{4} \times 9.94 \times 10^{14} = 1.29 \times 10^{15} \text{ atoms}$$

$$(2) \text{、(112)面的面间距为: } d_{(112)} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} = \frac{0.2866}{\sqrt{6}} = 0.1170\text{nm}$$

$$(110)面的面间距为: d_{(110)} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} = \frac{0.2866}{\sqrt{2}} = 0.2027\text{nm}$$

(3)、BCC 结构铁中, (110)晶面原子面密度最高, 位错滑移阻力最小, 因此(110)面容易滑移。

2. 铜是 FCC 晶体结构, 其晶格常数为 $a=0.36151\text{nm}$ 。(1) 试分析并确定

最可能出现晶面滑移的晶面及滑移方向 (以晶面符号及晶向符号表示)。(2) 计算 Burgers 矢量的长度。

【参考答案】：

(1) FCC 晶体, (111)面为最密排面, [110]晶向为与原子最密排晶向。因此最可能出现滑移的晶面为(111)面, 滑移方向为[110]方向。

(2) 伯格斯矢量为: $b = \frac{a}{2}[110]$, 长度为 $b = \sqrt{2}a = 0.5112$

3、对含有 0.1% C 的钢进行表面渗碳增强处理, 渗碳时将钢置于浓度为 1.2% C 的气氛中, 在高温下通过扩散达到进入钢材体内的目的。为了获得最佳应用性能, 在钢表面以下 0.2cm 处必须达到浓度为 0.45% C, 扩散激活能为 32900cal/mole, 气体常数 $R=1.987\text{cal/mole.K}$ 。若该钢材的扩散常数为 D_0 为 $0.115\text{cm}^2/\text{sec}$ 。试求出 (1) 1100°C 时的扩散系数, (2) 扩散所需时间与扩散温度的函数关系, (3) 分解计算 800°C、900°C、1000°C、1100°C 和 1200°C 温度下所需的扩散时间并以此作出扩散时间与温度之间的关系简图。

误差函数表, β 与 $\text{erf}(\beta)$ 的对应值

β	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0.7	0.6778	0.6847	0.6914	0.6981	0.7047	0.7112	0.7175	0.7238	0.7300	0.7361

【参考答案】：

(1) 1100°C 时的扩散系数为:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{\Delta G}{RT}\right) = 0.115 \times \exp\left(-\frac{32900}{1.987 \times 1373}\right) = 6.776 \times 10^{-7} \text{cm}^2$$

(2) 半无限一维扩散方程: $C(x, t) = C_0 + (C_s - C_0)[1 - \exp\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)]$

已知: $C_0 = 0.1\%C$, $C_s = 1.2\%C$, $C_x = 0.45\%C$, $x = 0.2\text{cm}$

$$\exp\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) = 0.68$$

查误差函数表得:

$$\frac{x}{2\sqrt{Dt}} = 0.71 \Rightarrow t = \frac{1}{D} \left(\frac{x}{2 \times 0.71}\right)^2 = \frac{0.0198}{D} \text{ s} = \frac{0.0198}{0.115 \times \exp(-16557.624/T)} = \frac{0.17}{\exp(-16557/T)}$$

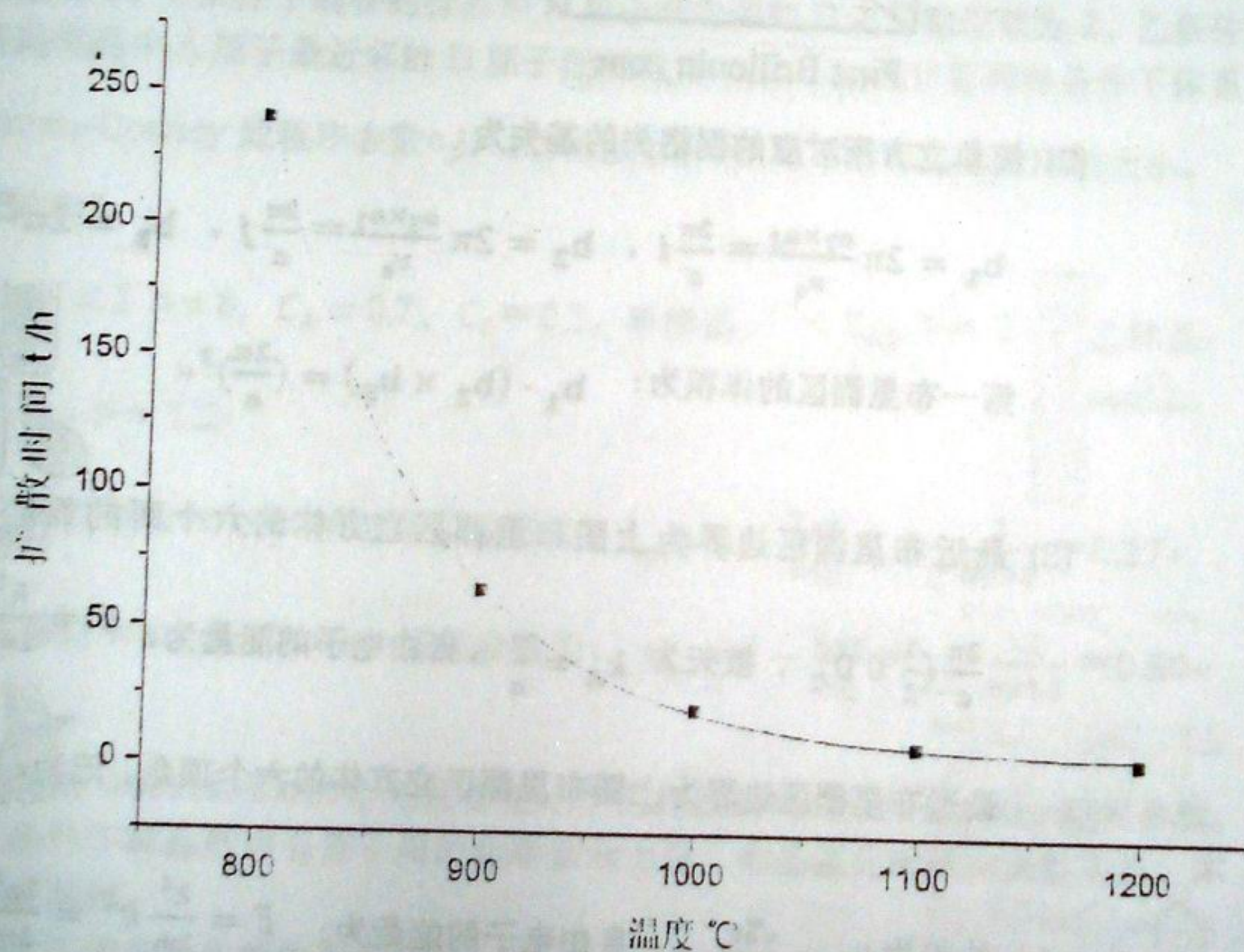
(3) $T=800$ 时, 扩散时间 $t=864846\text{s}=240.2\text{h}$

$T=900$ 时, 扩散时间 $t=232077\text{s}=64.5\text{h}$

$T=1000$ 时, 扩散时间 $t=76575\text{s}=21.3\text{h}$

$T=1100$ 时, 扩散时间 $t=29695\text{s}=8.2\text{h}$

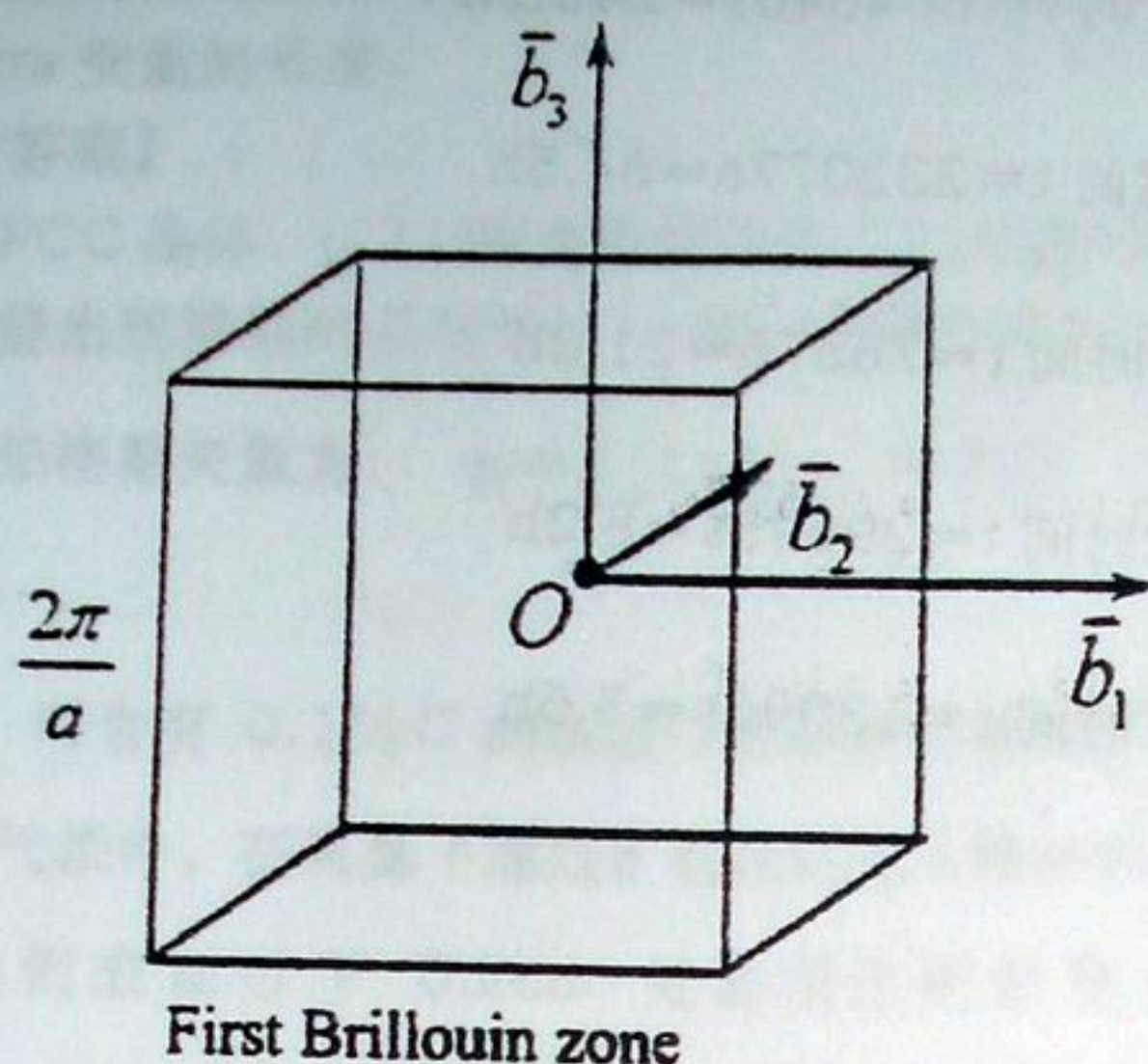
$T=1200$ 时, 扩散时间 $t=13096\text{s}=3.6\text{h}$



4. 对应简单立方结构, 已知原胞的基矢为 $\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}$, $\mathbf{a}_2 = a\mathbf{j}$, $\mathbf{a}_3 = a\mathbf{k}$ (1) 绘出它的第一布里渊区, (2) 计算出该布里渊区的体积, (3) 计算波矢 \mathbf{k} 处在最近和最远布里渊区边界处相应自由点阵的能力 (可直接利用 \hbar, \hbar, m, a)

【参考答案】:

(1) 简单立方的第一布里渊区如下图:



(2) 简单立方所对应的倒格失的基矢为:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{v_0} = \frac{2\pi}{a} \mathbf{i}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{v_0} = \frac{2\pi}{a} \mathbf{j}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{v_0} = \frac{2\pi}{a} \mathbf{k}$$

第一布里渊区的体积为: $\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3) = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$

(3) 最近布里渊区边界为上图布里渊区立方体的六个面的面心, 记为: A,

$$\frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2} 0 0\right), \text{ 波矢为 } k_A = \frac{\pi}{a}, \text{ 自由电子的能量为: } E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

最远布里渊区边界为上图布里渊区立方体的六个顶角, 记为: B, $\frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$

$$\text{波矢为 } k_A = \frac{\sqrt{3}\pi}{a}, \text{ 自由电子的能量为: } E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

5、 TiO_2 是一种性能优越的光催化和氧化气敏材料, 这与 TiO_2 中 Ti 是一种易变价离子有一定的关系。当 TiO_2 材料中失去氧, 通常会引起 Ti 离子从四价变为三价, 即 TiO_2 变为 TiO_{2-x} , 在体系中产生氧空位。这中缺陷形成过程满足缺陷反应关系, 试以此写出 (1) 缺陷反应的反应方程, (2) 根据质量作用定律, 写出反应平衡常数 K 的表达式, (3) 给出体系中氧空位浓度与氧分压之间的函数表达式。

【参考答案】:

(1) 缺陷反应方程为: $2\text{TiO}_2 \rightarrow 2\text{Ti}_{\text{Ti}}' + \text{V}_\text{O}^\bullet + 3\text{O}_\text{O} + \frac{1}{2}\text{O}_2 \uparrow$

(2) 缺陷反应等价于: $O_O \rightarrow 2e' + V_O^{\bullet\bullet} + \frac{1}{2}O_2 \uparrow$, 根据质量守恒定律, 平衡常数为:

$$K = \frac{[e']^2 [V_O^{\bullet\bullet}] [P_{O_2}]^{1/2}}{[O_O]}$$

(1) 晶体中氧离子浓度基本不变, $[e']$ 是 $[V_O^{\bullet\bullet}]$ 的两倍。所以有: $[V_O^{\bullet\bullet}] \propto [P_{O_2}]^{1/6}$

6、一个非晶态二元体系, 其中 A 原子浓度百分数为 70%, B 原子浓度百分数为 30%, 从非晶态物质的化学短程序观点看, 原子分别的均匀性也不同, 其化学短程序也不同。在甲、乙两种不同的指标条件下, 发现这个体系中每个原子的平均总配位数为 8, 甲条件下制备的样品中 A 原子最近邻的 B 原子配位数为 2, 乙条件下制备的样品中 A 原子最近邻的 B 原子配位数为 1.2。(1) 试计算两种条件下体系的 Warren-Cowley 短程序参数 α_p , (2) 比较两个条件下样品晶化趋向的大小。

【参考答案】:

(1) 已知: $\langle Z \rangle = 8$, $C_A = 0.7$, $C_B = 0.3$ 。甲样品: $\langle Z_{AB} \rangle = 2$; 乙样品:

$$\langle Z_{AB} \rangle = 1.2$$

甲样品的 Warren-Cowley 短程参数为: $\alpha_p = 1 - \frac{Z_{AB}}{ZC_B} = 1 - \frac{2}{8 \times 0.3} = 0.17$

乙样品的 Warren-Cowley 短程参数为: $\alpha_p = 1 - \frac{Z_{AB}}{ZC_B} = 1 - \frac{1.2}{8 \times 0.3} = 0.50$

(2) 甲样品的 Warren-Cowley 短程参数小于乙样品的 Warren-Cowley 短程参数, 即乙条件下样品的中各原子间的化学亲和力强, 非晶晶化时结构调整不易, 不易形成晶体。

甲条件下样品晶化趋向大。

翔高

浙江大学 836 材料科学基础 2007 年试题及解析

一、基本概念选择题 (每题 3 分, 共 60 分)

1、晶胞可以描述为:

- A 任意在晶体中选取的平行六面体
- B 点阵中取出的一个具有相同阵点数的代表性基本单元
- C 点阵中取出的一个反映点阵对称性的代表性单元

答: C。为了说明点阵排列的规律和特点, 在点阵中取出一个具有代表性的基本单元作为点阵的组成单元, 称为晶胞。晶胞需能反映晶格的空间对称性。

2、一组数 $[uvw]$, 称为晶向指数, 它是用来表示:

- 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: C。晶向指晶体中某些特点的方向。 $[uvw]$ 晶向指数表示所有和向量 $\overrightarrow{OP} = ua + vb + wc$ 相互平行、方向一致的晶向。

3、有两个晶面 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2j_2k_2)$, 根据晶带轴的定义, 要计算这两个晶面的晶带轴时, 这两个晶面可以是:

- A 任意两个晶面
- B 两个平行的晶面
- C 两个不平行的晶面

答: C。所有相交于某一晶向直线或平行于此直线的晶面构成一个“晶带”, 此直线称为晶带轴。平行晶面不相交于任何一条直线。

4、根据电负性的定义, 一般有:

- A 电负性大, 得电子能力强的为金属元素
- B 电负性小, 得电子能力弱的为非金属元素
- C 电负性大, 得电子能力强的为非金属元素

答: C。电负性是分子中一个原子向它本身吸引电子的能力, 亦表示原子形成负离子倾向大小的量度。元素的电负性值越大越易取得电子, 即越易于称为负离子。金属的电负性较低, 非金属的电负性较高。

5、原子间的吸引与排斥作用随原子间的距离不同而不同，原子间距不同时，起主要作用的作用力是不一样的，有：

- A 吸引在原子十分接近时起主要作用
- B 吸引在远距离时起主要作用
- C 排斥在远距离时起主要作用

答：B。此题可从“原子间的相互作用能和作用力”图上直观的看出，原子距离较近时合作用力为斥力，距离增大时逐渐转为吸引力。从图记住简单的结论“吸引了为长程力，排斥力为短程力”。

6、金属晶体中，随原子的堆垛方式不同，其致密不同，对密排六方和面心立方结构，其致密度为：

- A 0.74 0.68
- B 0.68 0.74
- C 0.74 0.74

答：C。密排六方和面心立方都是晶体最密排结构，致密度均为 0.74，只是两则堆垛顺序不同。

7、硅酸盐是地表含量最丰富的材料，硅酸盐的基本组成单元是：

- A $[\text{SiO}_4]^{4-}$ 四面体共顶连接
- B $[\text{SiO}_6]^{6-}$ 八面体共顶连接
- C $[\text{SiO}_4]^{4-}$ 四面体共面连接

答：A。 $[\text{SiO}_4]^{4-}$ 为硅酸盐的基本组成单元。根据泡林第三规则， $[\text{SiO}_4]^{4-}$ 四面体共顶连接。

8、高分子结构单元连接时：

- A 链节间通常一二次分子力（范氏力结合）
- B 链节间的键合有时为饱和共价键（一次键）结合，有时为二次分子力（范氏力等）结合
- C 大分子间或同一大分子不同链段间仅靠二次分子力（范氏力等）结合

答：C。高分子结构单元，即链节间通常是饱和共价键连接，称为一次键连接。而大分子之间或同一大分子不同链段（包含若干链节）之间仅有二次分子力（范德华力、伦敦力和色散力）的相互作用。

9、弗伦克缺陷是：

- A 原子移到表面外新的位置，原来位置则形成空位
- B 原子离开平衡位置后，形成间隙原子，而原来位置上形成空位，成对产生
- C 正、负离子的二元体系，原子移到表面新的位置，原来位置空位成对出现

答：B。佛伦克尔缺陷和肖脱基缺陷是晶体中原子热运动所致。此类点缺陷有

空位和间隙原子两种基本类型。如果只形成空位而不形成等量的间隙原子, 这样形成的缺陷(空位称为肖脱基缺陷; 如果同时形成等量的空位和间隙原子, 则所形成的缺陷(空位和间隙原子对)称为佛伦克尔缺陷。

10、螺型位错和刃型位错的不同在于:

- A 刃型位错不引起剪切畸变, 也不引起体积的膨胀和收缩, 螺型位错反之
- B 刃型位错引起压缩变形, 螺型位错引起体积的膨胀
- C 螺型位错只引起剪切畸变, 而不引起体积的膨胀和收缩, 刃型位错反

答: C。刃型位错, 位错线垂直于滑移方向, 刃型位错可以看成是通过在完整晶体中插入半个原子面而形成的, 因而在半原子面一侧原子受到压缩变形, 在另一侧则受到膨胀变形。螺型位错, 位错线平行于滑移方向, 相当于上下原子面相对错开了一定距离, 因而螺型位错只引起剪切畸变, 而不引起体积的膨胀和收缩。

11、位错滑移应满足:

- A 有切应力作用在位错滑移面上, 且垂直于它的 B 矢量方向, 位错才会运动或者趋于运动
- B 有压应力作用在位错滑移面上, 且垂直于它的 B 矢量方向, 位错才会运动或者趋于运动
- C 有切应力作用在位错滑移面上, 且平行于它的 B 矢量方向, 位错才会运动或者趋于运动

答: C。使位错滑移的应力平行于作用面(滑移面), 根据应力的定义, 所加应力为切应力。在切应力作用下, 刃型位错的位错线滑移方向与其 B 矢量平行, 切应力方向平行于 B 矢量; 在切应力作用下, 螺型位错的位错线滑移方向与其 B 矢量垂直, 切应力的方向平行于 B 矢量。

12. 下面哪一点可以描述两平行螺型位错间的相互作用(滑移)的特征;

- A 位错同号相斥, 异号相吸, 作用大小与位错间距成反比
- B 具有相同符号的位错按垂直方向排列起来是稳定的; 位错的符号相反, 稳定方位随之改变
- C 由于相互之间不能提供对方滑移所需的应力场, 所以, 两位错间作用较小

答: A。

13、对于金属固溶体, 要想获得大的固溶度, 考虑尺寸及电负性因素的影响, 溶质与溶剂原子应分别满足:

- A 尺寸相当差 $<14\sim15\%$, 电负性差 $<\pm0.4$
- B 尺寸相当差 $>14\sim15\%$, 电负性差 $<\pm0.4$

C 尺寸相当差 $<14\sim 15\%$, 电负性差 $>\pm 0.4$

答: A。

14、氧化物玻璃形成稳定网络结构时满足:

A 1.每个氧离子可与两个以上阳离子相连。2.氧多面体中, 包围中心阳离子的氧离子数目是

3~4。3.氧多面体可相互共顶或共面连接。

B 1.每个氧离子可与两个以上阳离子相连。2.氧多面体中, 包围中心阳离子的氧离子数目小于

3。3.氧多面体相互共顶连接且至少有三个顶角与相邻多面体共用。

C 1.每个氧离子与不超过两个阳离子相连。2.氧多面体中, 包围中心阳离子的氧离子数目是

3~4。3.氧多面体相互共顶连接且至少有三个顶角与相邻多面体共用。

答: C。氧多面体相互共角连接而不共棱不共面。

15、高分子非晶态的局部有序模型中高分子的熔体或非晶态结构存在着相当部分的有序结构主要为两种结构单元, 分别是:

A 链束结构单元和大致平行排列的分子链结构单元

B 链束状结构单元和链球状结构单元

C 链球状结构单元和单条分子链卷曲结构单元

答: B。

16、非晶态高分子玻璃态与高弹态之间的转变对应为:

A 粒子相的吸附与解吸附状态

B 穿越不同粒子相产生无规缠绕与非缠绕状态

C 链段微布朗运动的“冻结”与“解冻”的临界状态

答: C。

17、有一极稀的 fcc 结构的间隙固溶体, 设 a_0 为晶格常数, v 为间隙原子沿扩散方向的振动频率,

ΔG_m 为从平衡位置到势垒

顶点的自由能改变量。则扩散系数可表示为;

A $D = a_0^2 v \exp\left(-\frac{\Delta G_m}{RT}\right)$

B $D = \frac{1}{6} a_0^2 v \exp\left(-\frac{\Delta G_m}{RT}\right)$

C $D = 2 a_0^2 v \exp\left(-\frac{\Delta G_m}{RT}\right)$

上海翔高

全程·深入·内幕

答: A。

18. 光学波和声学波有各自的频率色散关系, 其中:

- A 声学波的频率大于光学波的频率
- B 声学波纵波的频率大于光学横波的频率
- C 光学波的频率大于声学波的频率

答: C。

19. 爱因斯坦模型和德拜模型出来比热问题时, 由于采用的近似条件不同, 因而适用的范围也不同, 实际上,

- A 爱因斯坦模型特别描述的是声学声子的贡献, 德拜近似更适用于低温
- B 爱因斯坦模型特别描述的是光学声子的贡献, 德拜近似更适用于高温
- C 爱因斯坦模型特别描述的是光学声子的贡献, 德拜近似更适用于低温

答: C。爱因斯坦模型假设晶体汇总所有的原子都以相同的频率振动, 常用于描述声子谱的一部分, 特别是对光学声子的贡献。德拜模型假设以连续介质的弹性波来代替格波, 适用于低温, 温度越低, 德拜近似越好。

20. 德拜模型中, 低温时的比热表达为:

$$A \quad C_v = 3Nk\left(\frac{\theta_D}{T}\right)^2 e^{-\theta_D/T}$$

$$B \quad C_v = \frac{12\pi^4 Nk}{5} \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$$

$$C \quad C_v = 3Nk\left(\frac{\theta_D}{T}\right)^2 \frac{e^{\theta_D/T}}{(e^{\theta_D/T} - 1)^2}$$

答: B。选项 A 为爱因斯坦模型中低温时 ($e^{\theta_D/T} \gg 1$) 比热的表达式; 选项 C 为爱因斯坦模型中比热的表达式。

二、分析计算题 (每题 15 分, 共 90 分);

1. 有铀和硼两种材料, 若已知铀的密度为 19.05g/cm^3 , 原子量为 238.03g/mole , 硼的密度为 2.3g/cm^3 , 原子量为 10.81g/mole , Avogadro's 常数为 $6.02 \times 10^{23}\text{atoms/mole}$, 试分别计算这两种材料单位体积内的原子数。

【参考答案】:

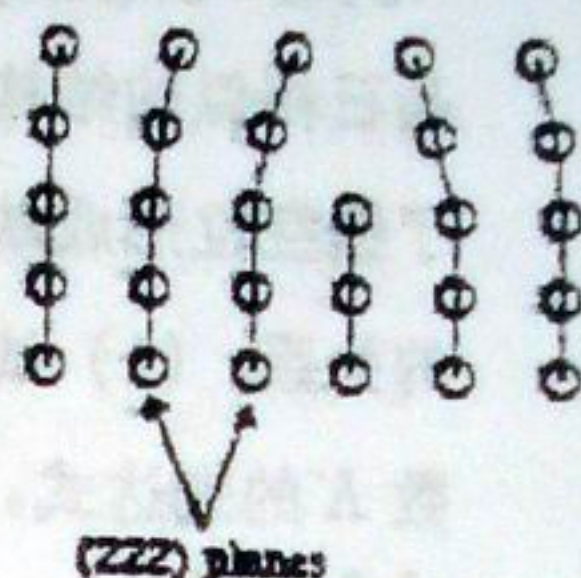
铀单位体积内的原子数:

$$n = \frac{\rho}{M} N_A = \frac{19.05}{238.03} \times 6.02 \times 10^{23} = 4.82 \times 10^{22} \text{ atoms/cm}^3$$

硼单位体积内的原子数:

$$n = \frac{\rho}{M} N_A = \frac{2.3}{10.81} \times 6.02 \times 10^{23} = 1.28 \times 10^{23} \text{ atoms/cm}^3$$

2. 有一 BCC 结构晶体, 其晶格常数为 $4 \times 10^{-10} \text{ m}$, 该晶体中出现的位错如图所示, (1) 试计算给该位错 Burgers 矢量长度, (2) 确定该 Burgers 矢量的方向 (用晶向指数表示)。



【参考答案】:

(1) 如图示, Burgers 矢量垂直于 BCC 结构晶体的 (222) 晶面, Burgers 矢量的长度为该晶面的晶面间距,

$$\text{即 } b = \frac{a}{2\sqrt{3}} = \frac{4 \times 10^{-10}}{2\sqrt{3}} = 1.15 \times 10^{-10} \text{ m}$$

(2) 该 Burgers 矢量的方向为: $[111]$ 方向

3. 对一种材料在 1200°C (1473K) 和 1 小时处理后可以成功进行渗碳, 但为了降低成本, 若需将渗碳处理稳定降低到 950°C (1223K), 并考虑这种渗碳属于半无限扩散模式, 试计算如果要获得同样的渗碳结果, 需要处理多少时间? 已知气体常数 $R=1.987 \text{ cal/mole.K}$, 材料的本征扩散系数 $D_0=0.23 \text{ cm}^2/\text{sec}$, 扩散能 $Q=32900 \text{ cal/mole}$

【参考答案】:

(1) 半无限一维扩散方程: $C(x, t) = C_0 + (C_s - C_0) [1 - \exp(-\frac{x^2}{4Dt})]$

两种温度条件下获得相同的结果, 即 Dt 为定值, $t \propto \frac{1}{D}$, $D = D_0 \exp(-\frac{Q}{RT})$

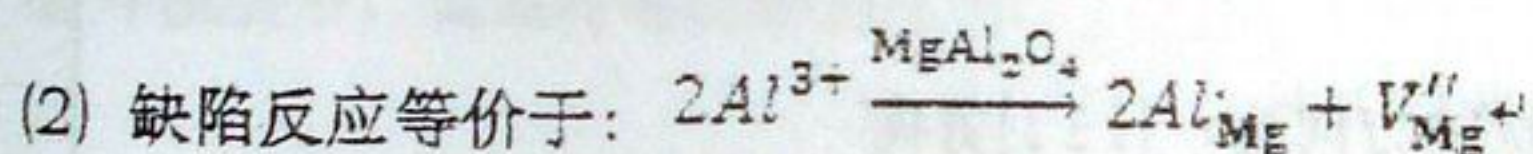
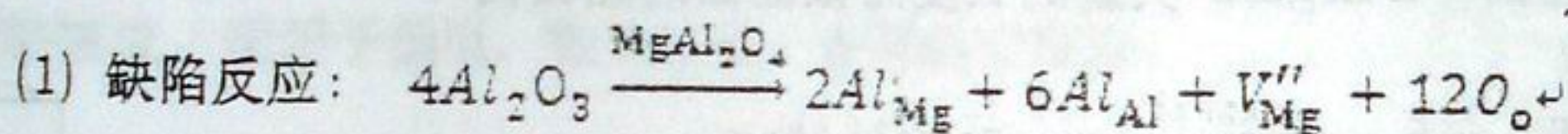
$$t \propto \exp(\frac{Q}{RT}) = \exp(\frac{16557.624}{T})$$

950°C 时所需要的时间为:

$$t_{1223K} = 1 \times \exp[16557.624 \times (\frac{1}{1223} - \frac{1}{1473})] = 9.95 \text{ 小时}$$

4、在 MgAl_2O_4 - Al_2O_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出 $\text{Mg}_{1-x}\text{Al}_{2+(2x/3)}\square_{x/3}\text{O}_4$ 。这个式子强度了阳离子空位。对于 $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, 所谓的与尖晶石相似的结构, 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。

【参考答案】:



根据质量守恒定律, 反应平衡常数为: $K = \frac{[\text{Al}_{\text{Mg}}]^2 [V_{\text{Mg}}'']}{[\text{Al}^{3+}]^2}$

5. 有两种不同配比的玻璃, 其组成如下:

编号	Na_2O mol%	Al_2O_3 mol%	SiO_2 mol%
1	10.6	12.9	76.5
2	20.4	6.2	73.4

考虑到 Al_2O_3 中 Al 离子为两性离子, 一般情况下当玻璃中 Na_2O 的摩尔数比 Al_2O_3 的摩尔数小, 则 Al 离子表现为网络改性离子的特性, 反之则具有网络形成离子的特性, (1) 试计算这两个玻璃系统的桥氧数, (2) 依据桥氧数判断在高温下这两个玻璃系统的粘度大小。

【参考答案】:

(1) 系统 1:

Na_2O 的摩尔数比 Al_2O_3 的摩尔数小, Al 离子为表现为网络改性离子

$$R_1 = \frac{10.6 + 12.9 \times 3 + 76.5 \times 2}{76.5} = 2.6$$

桥氧数: $Y_1 = 2Z - 2R_1 = 8 - 5.2 = 2.8$

系统 2:

Na₂O 的摩尔数比 Al₂O₃ 的摩尔数大, Al 离子表现为网络形成离子

$$R_2 = \frac{20.4 + 6.2 \times 3 + 73.4 \times 2}{73.4 + 6.2 \times 2} = 2.2$$

桥氧数: $Y_{12} = 2Z - 2R_2 = 8 - 4.4 = 3.6$

(2) $Y_1 < Y_2$, 所以系统 1 的粘度小于系统 2 的粘度。

6. 金刚石的爱因斯坦温度 $\theta_E = 1320\text{K}$, 德拜温度 $\theta_D = 1860\text{K}$ 。试分别用爱因斯坦比热公式计算在温度 $T = 2000\text{K}$ 和 $T = 0.2\text{K}$ 时金刚石的摩尔比热数值以及用德拜比热公式计算在温度 $T = 0.2\text{K}$ 时金刚石的摩尔比热数值。已知 $k = 1.38 \times 10^{-23}\text{J/K}$, $N = 6.02 \times 10^{23}/\text{mol}$

【参考答案】:

应用爱因斯坦比热公式计算:

$$C_v = 3Nk \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T} - 1)^2} = 24.923 \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T} - 1)^2}$$

$T = 2000\text{K}$ 时, $\frac{\theta_E}{T} = 0.660$, $e^{\theta_E/T} = 1.935$

$$C_v = 24.923 \times 0.660^2 \times \frac{1.935}{(1.935 - 1)^2} = 24.03 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

$T = 0.2\text{K}$ 时, $\frac{\theta_E}{T} = 6600$

恩波学校, 上海翔高, 专业课培训专家 网址: www.kaoyanmeng.com

$$C_v = 24.923 \times 6600^2 \times e^{-6600} = 4.92 \times 10^{-2858} \approx 0 \text{ J/mol.K}$$

应用德拜比热公式计算:

$$C_v = \frac{12\pi^4 Nk}{5} \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 = 1942.166 \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$$

$$T=0.2\text{K 时}, C_v = 1942.166 \times \left(\frac{0.2}{1860}\right)^3 = 2.41 \times 10^{-9} \text{ J/mol.K}$$