

浙 江 大 学

二〇〇九年攻读硕士学位研究生入学考试试题

考试科目 材料科学基础 编号 836

注意: 答案必须写在答题纸上, 写在试卷或草稿纸上均无效。

一、名词解释 (共 20 题, 每题 2.5 分)

- 1、陶瓷
- 2、半导体
- 3、非晶态材料
- 4、键能
- 5、一次键
- 6、原子半径
- 7、电子衍射
- 8、晶格参数
- 9、八面体
- 10、Burgers 矢量
- 11、位错
- 12、刃型位错
- 13、派-纳 (Peierls-Nabarro) 应力
- 14、置换缺陷
- 15、通量
- 16、自扩散
- 17、体积扩散
- 18、无规线团模型
- 19、禁带
- 20、德拜比热

二、分析计算题 (共 5 题, 1、4 两题各 18 分, 2、3 两题各 20 分, 第 5 题 24 分)

1、一种材料钾, 为 BCC 结构, 每个格点仅一个原子, 钾的密度为 0.855g/cm^3 , 钾的原子量为 39.09g/mole , 试计算其晶格参数及钾的原子半径。(已知 Avogadro 常数为 6.023×10^{23} 原子/mole)

2、设铝的位错密度为 10^{10}cm/cm^3 , 要使材料中位错线的总长度达到 5000km , (1) 试计算这时应该是一块多重的铝? (2) 试给出这种铝内位错线总长度随铝块(重量)增大的关系式并画出相应的关系图(铝的密度为 2.699g/cm^3)

3、在一种含 0.15% 碳的钢中, 从表面对钢进行渗碳, 表面组成中保持碳的含量为 0.90%, 渗碳温度控制在 1100°C , 若要求在表面以下 1 mm 处碳的浓度达到 0.35%, 且考虑扩散属于一维方向扩散和扩散系数与浓度无关。试计算渗碳需要多少时间?(气体常数 $R=1.987\text{cal/moleK}$, 本征扩散系数 $D_0=0.23\text{cm}^2/\text{sec}$, 激活能 $Q=32900\text{cal/mole}$)

The Error Function					
Z	erf(Z)	Z	erf(Z)	Z	erf(Z)
0.00	0.0000	0.55	0.5633	1.3	0.9340
0.025	0.0282	0.60	0.6039	1.4	0.9523
0.05	0.0564	0.65	0.6420	1.5	0.9661
0.10	0.1125	0.70	0.6778	1.6	0.9763
0.15	0.1680	0.75	0.7112	1.7	0.9838
0.20	0.2227	0.80	0.7421	1.8	0.9891
0.25	0.2763	0.85	0.7707	1.9	0.9928
0.30	0.3286	0.90	0.7970	2.0	0.9953
0.35	0.3794	0.95	0.8209	2.2	0.9981
0.40	0.4284	1.0	0.8427	2.4	0.9993
0.45	0.4755	1.1	0.8802	2.6	0.9998
0.50	0.5205	1.2	0.9103	2.8	0.9999

4、一个石英玻璃 SiO_2 体系中加入 Na_2O 后, 其 O:Si 比将增加, 使 O:Si 比为 2.5 时, 以重量比计算体系中分别需要多少 Na_2O 和多少 SiO_2 ? (Na 的原子量为 22.991, O 的原子量为 16, Si 的原子量为 28.086)

5、非化学计量化合物 Fe_{1-x}O 属于正离子空位型, 引起负离子过剩。由于非化学计量缺陷的浓度与周围气氛的性质、压力大小有关, 如果增大周围氧气的分压, Fe_{1-x}O 密度将发生变化, (1) 试写出 Fe_{1-x}O 的缺陷方程式, (2) 给出非化学计量缺陷的浓度与周围氧分压的比例关系 (3) 讨论非化学计量化合物 Fe_{1-x}O 的密度随周围氧气的分压增大将发生怎样的变化? 是增大还是减小? 并说明为什么。

2009 年浙江大学研究生入学考试

材料科学基础试题答案

一、名词解释

1.陶瓷

原来的陶瓷就是指陶器和瓷器的通称。也就是通过成型和高温烧结所得到的成型烧结体。传统的陶瓷材料主要是指硅铝酸盐。对硅铝酸盐的选择要求不高,纯度不大,颗粒的粒度也不均一,成型压强不高。这时得到陶瓷称为传统陶瓷。后来发展到纯度高,粒度小且均一,成型压强高,进行烧结得到的烧结体叫做精细陶瓷。总之,陶瓷是可以借助三维成键的材料,通过成型和高温烧结所得到的烧结体。

2.半导体

材料的电阻率介于金属与绝缘材料之间的材料。这种材料在某个温度范围内随温度升高而增加电荷载流子的浓度,电阻率下降。

3.非晶态材料

非晶态材料也叫无定形或玻璃态材料,这是一大类刚性固体,具有和晶态物质可相比较的高硬度和高粘滞系数

4.键能

$1.01 \times 10^5 \text{ Pa}$ 和 25°C (常温常压下),将 1 mol 理想气体分子 AB 拆开为中性气态原子 A 和 B 所需要的能量 (单位为 $\text{KJ} \cdot \text{mol}^{-1}$) 键能越大,化学键越牢固,含有该键的分子越稳定。

5.一次键

一次键:依靠外层电子转移或形成电子对形成稳定的电子结构,使原子相互结合起来;结合力较强,或称主价键、化学键

6.原子半径

原子半径

定义为两个原子键长的一半,随不同的键型而不同对给定的元素,原子半径的大小与键的性质直接相关

7.电子衍射

当电子波(具有一定能量的电子)落到晶体上时,被晶体中原子散射,各散射电子

波之间产生互相干涉现象。

8.晶格常数

点阵常数 a 、 b 、 c

9.八面体

以一个正离子为中心，周围配置着最近邻的数个负离子，将这些配位的各个负离子的中心连接起来，则成为一个多面体，成负离子配位多面体，配位多面体的形状取决于负离子的数量，正离子周围有八个负离子的成为正八面体。

10.柏氏矢量

反映含与不含位错的两个晶体的差别，体现实际晶体所含位错根本特征的矢量。为闭合在两种晶体上绕走同样步数而无法闭合的回路所附加的矢量。

11.位错

原子行列间相互滑移，不再符合理想晶格的有序的排列，为线缺陷

12.刃位错

滑移面和未滑移面交界处的一条交界线（如动画所示），也即一个多余半原子面与滑移面相交的交线上，由于原子失掉正常的相邻关系，形成的晶格缺陷。它与滑移方向垂直。

13. τ_p 应力

为克服点阵阻力推动位错前进所必须的与滑移力对应的切应力，也就是派纳应力

$$\tau_p = \frac{2\mu}{(1-\nu)} \exp(-2\pi w/b)$$

14.置换缺陷

置换型固溶体中离子间的置换可以是等价置换，也可以是不等价的置换。不等价置换时，为了保持晶体的电中性，必然会在晶体结构中出现空位或间隙原子。

15.通量

某一瞬间通过垂直于 X 轴的单位平面的原子的量

16.扩散

原子迁移的微观过程以及由此引起的宏观现象

17.体积扩散

原子不通过晶界、表面和位错，而是通过晶格进行的扩散

18. 无规线团模型

Flory 从高分子溶液理论出发提出了非晶态聚合物的无规线团模型。该模型认为：非晶态中的高分子链，无论是处于玻璃态、高弹态、还是熔融态，都象无扰状态下高分子溶液中的分子链一样呈无规线团的构象，高分子链之间可以相互贯穿，彼此缠结，而线团内的空间则被相邻的分子所占有，不存在局部有序的结构，整个非晶态固体呈均相结构。

19. 禁带

在能带结构中能态密度为零的能量区间。常用来表示价带和导带之间的能态密度为零的能量区间。禁带宽度的大小决定了材料是具有半导体性质还是具有绝缘体性质。

20. 德拜温度

德拜关于固体比热的模型的主要特点是：把布喇菲格子看作是各向同性的连续介质，即把格波看作是弹性波

$$C_V = \frac{12\pi^4 R}{5} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \quad (3-33)$$

即在极低温下，比热和温度的立方成正比，这叫德拜定律。其中德拜温度是待定

常数。定义德拜温度： $\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} = \frac{\hbar}{k_B} \left(6\pi^2 \cdot \frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot v_p$ ，与声速成正比。

二、分析计算题

1、计算晶格参数

体心立方格子中包含两个原子

由 nM/VN_A 和 $V=a^3$ 得

$$a = \sqrt[3]{nM / \rho N_A} = \sqrt[3]{2 \times 39.09 / 0.855 \times 6.023 \times 10^{23}} \text{ cm} = 5.33 \times 10^{-8} \text{ cm} = 53.3 \text{ nm}$$

计算原子半径：

由体心立方的相关公式，设 K 的原子半径为 r

则 $4r = \sqrt{3}a$

$r = \sqrt{3}a/4 = 23.07\text{nm}$

2、求铝块的质量:

位错密度为在单位体积晶体中所包含的位错线的总长度

由 $\rho = \frac{S}{V}$, $V = S/\rho = 5000 \times 10^3 \times 10^2 / 10^{10} = 0.02\text{cm}^3$

$m = \rho V = 0.02 \times 2.699\text{g} = 0.05398\text{g}$

由 $\rho = \frac{S}{V}$ 与 $m = \rho V$ 得到 m 与 s 的关系式为:

$m = (\rho_{\text{铝}}/\rho_{\text{铝}}) \cdot s$

因此 m 与 s 存在线性关系

3、由 $D = D_1 \exp(-\frac{Q}{RT})$

得 1100°C 下 $D = 0.23 \times \exp(-32900/1.987 \times 1373) \text{cm}^2/\text{sec}$
 $= 1.33 \times 10^{-6} \text{cm}^2/\text{sec}$

由 $C(x,t) = \frac{C_1 + C_2}{2} + \frac{C_1 - C_2}{2} \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$

$0.35\% = 0.15\% + (0.90\% - 0.15\%) [1 - \text{erf}(0.1/2\sqrt{1.33 \times 10^{-6} \times t})]$

$\text{erf}(\beta) = 0.7333$

$\beta = 0.80$

$t = 5195.3\text{sec}$

4、设 SiO_2 和 Na_2O 的摩尔数分别为 x 和 y

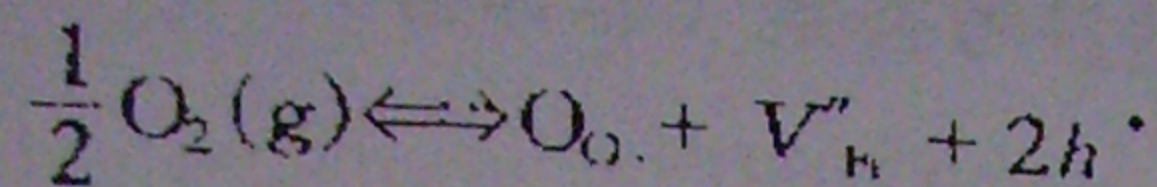
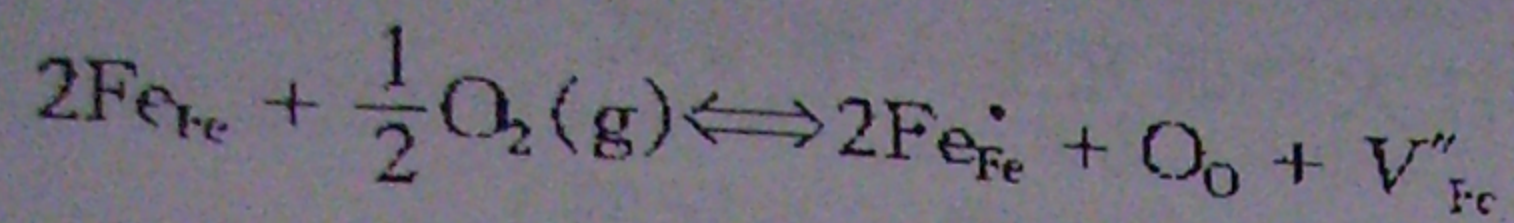
则 $(2x+y)/x = 2.5$

$x/y = 2$

则 $(28.086 + 16 \times 2)x / ((28.086 + 16 \times 2)x + (22.991 \times 2 + 16) \times 0.5x)$
 $= 66\%$

则 Na_2O 的质量分数为 34%

5、缺陷反应式如下



根据质量作用定律

$$K = \frac{[\text{O}_{\text{O}}][V''_{\text{Fe}}][h^{\bullet}]^2}{[P_{\text{O}_2}]^{\frac{1}{2}}}$$

可得 $[V''_{\text{Fe}}] \propto [P_{\text{O}_2}]^{\frac{1}{6}}$ ，所以氧分压增大，空位浓度也增大，化

合物 Fe_{1-x}O 密度减小