

浙 江 大 学

二〇一〇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。

(第 6、7 二题各 25 分，其它每题 20 分)

注：所有解析题都必需给出详细的计算和推导过程，并对每一步的过程由来作必要的说明

1、Fe 在室温和 1000C 时可以分别形成 BCC 和 FCC 两种结构形式，Fe 原子的半径为 $1.24 \times 10^{-8} \text{cm}$ ，Fe 的原子量 55.8g/mol 。(1) 试给出 BCC Fe 和 FCC Fe 的晶格常数与原子半径的关系式并计算它们的晶格常数。(2) 计算 FCC 结构 Fe 的堆积系数。(3) 计算 BCC 结构 Fe 的密度。(Avogadro 常数 $N_0 = 6.023 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$)

2、FCC 结构的铜，在不同温度下产生的空位数不同，试计算：(1) 在室温 298K 和 1357K (刚低于熔点温度) 时每立方厘米体积产生的空位缺陷数。(2) 在室温 298K 和 1357K 时单位铜原子产生的空位缺陷数。(3) 画出该温度范围内缺陷数随温度升高的变化关系图。(产生一个空位所需活化能 20000cal/mol , FCC 铜的晶格常数为 $3.62 \times 10^{-8} \text{cm}$, 常数 $R = 1.99 \text{cal/mole.K}$ 。)

3、有些气体在一定的材料中容易发生扩散，特别当温度较高和压强较大时更是如此。因而如果用这种材料制备的容器储存相应的气体时，气体较容易渗漏。若现有一种气体盛于某一容器中，(1) 试给出在稳定状态下容器中气体通过容器壁扩散时渗漏的气体物质逸出量表达式，

(2) 根据给出的表达式提出减少气体扩散逸失的措施。(其中设气体在材料中的溶解度满足关系式 $S = k\sqrt{P}$ ，P 为压力，k 为系数。)

4、有一各玻璃组成为 $14\% \text{Na}_2\text{O} - 13\% \text{CaO} - 72\% \text{SiO}_2$ ，其密度为 2.5g/cm^3 ，计算该玻璃的原子堆积系数为多少？(原子量： $M_{\text{Si}} = 28 \text{g/mol}$, $M_{\text{O}} = 16 \text{g/mol}$, $M_{\text{Ca}} = 40 \text{g/mol}$, $M_{\text{Na}} = 23 \text{g/mol}$, 原子半径： $r_{\text{Si}} = 0.039 \text{nm}$, $r_{\text{O}} = 0.132 \text{nm}$, $r_{\text{Na}} = 0.098 \text{nm}$, $r_{\text{Ca}} = 0.106 \text{nm}$, Avogadro 常数 $N_0 = 6.023 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$)

5、尼龙 66 可以是一种很好的结晶高分子材料，利用环己烷二胺 $C_6H_{12}(NH_2)_2$ 与脂肪酸 $C_4H_8(COOH)_2$ 进行聚合反应可形成这种尼龙 66 聚合物，(1) 请给出反应方程式并确定形成的副产物是什么？(2) 假设合成效率为 100%，则用 1000g 环己烷二胺合成这种尼龙 66 聚合物需要脂肪酸多少克？(3) 形成的终产物尼龙 66 聚合物重多少克？(原子量： $M_C=12g/mol$, $M_H=1g/mol$, $M_N=14g/mol$)

6、在氧化镁晶体中，若肖特基缺陷生成焓为 $6eV$ ，(1) 计算 $1600^\circ C$ 时作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成镁空位，试写出缺陷方程。(3) 计算 $1600^\circ C$ 时掺杂有百万分之一（摩尔比）三氧化二铝的氧化镁晶体中是热缺陷占优势还是杂质缺陷占优势？($k = 8.62 \times 10^{-5} eV/K$)

7、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，格波光学支的最高频率为 $3.6 \times 10^{13} (rad/s)$ ，Avogadro 常数 $N_0 = 6.023 \times 10^{23} mol^{-1}$ ，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。(注：格波

频率表达式为，
$$\omega^2 = \frac{\beta}{mM} \left\{ (m+M) \pm [m^2 + M^2 + 2mM \cos(2qa)]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

浙江大学 2010 年研究生入学考试

材料科学基础答案

1、

(1) 晶格常数与原子半径的关系

Bcc Fe

$$\sqrt{3} a_{\text{BCC}} = 4r$$

$$a = (4/\sqrt{3})r = (4/\sqrt{3}) \cdot 1.24 \times 10^{-8} \text{cm} = 2.86 \times 10^{-8} \text{cm}$$

Fcc Fe

$$\sqrt{2} a_{\text{FCC}} = 4r$$

$$a = (4/\sqrt{2})r = (4/\sqrt{2}) \cdot 1.24 \times 10^{-8} \text{cm} = 3.51 \times 10^{-8} \text{cm}$$

(2) FCC 的堆积系数

$$C = ((4/3) \pi r^3 \times 4) / a^3 = 0.74$$

(3) BCC 的密度

$$\rho = n \cdot M / N_A V = 2 \times 55.8 / 6.023 \times 10^{23} \times a^3 \text{ g/cm}^3 = 7.9 \text{ g/cm}^3$$

2、

(1) 单位晶胞中有 4 个铜原子
则单位晶胞中的空位缺陷数为

$$n = 4 \cdot \exp(-\Delta G/RT)$$

每立方厘米体积产生的空位缺陷数为

$$c = n/V = n/a^3$$

$$\text{由已知 } \Delta G = 20000 \text{ cal/mol} \quad a = 3.62 \times 10^{-8} \text{ cm} \quad R = 1.99 \text{ cal/mole.K} \quad T_1 = 298 \text{ K} \quad T_2 = 1357 \text{ K}$$

$$\text{则 } c_{298\text{K}} = 1.89 \times 10^{-8}$$

$$c_{1357\text{K}} = 5.1 \times 10^{-19}$$

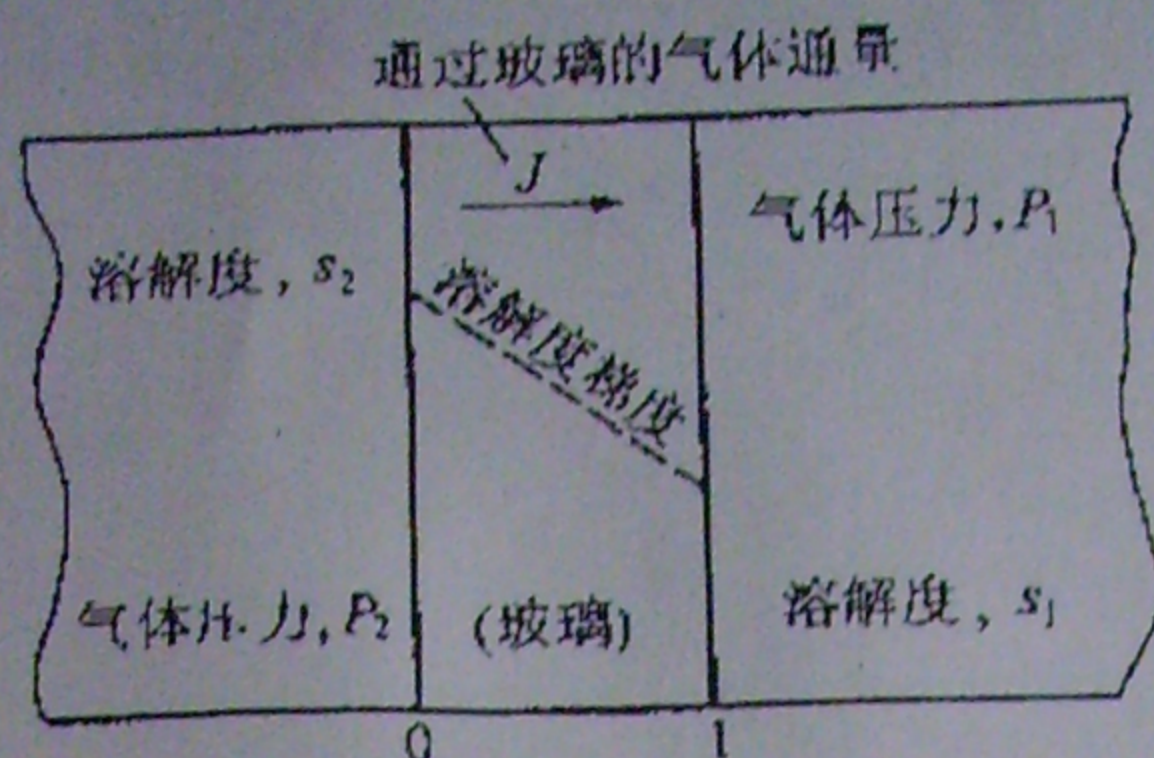
(2) 单位铜原子空位数为

$$n = N \cdot \exp(-\Delta G/RT) / N = \exp(-\Delta G/RT)$$

$$n_{298\text{K}} = 2.25 \times 10^{-15}$$

$$n_{1357\text{K}} = 6 \times 10^{-4}$$

3、



气体通过玻璃片的扩散示意图

(1) 已知稳定状态下的气体扩散

$$\int_{x=0}^{x=l} J dx = - \int_{c=s_2}^{c=s_1} D dc \quad \text{得} \quad J = D \frac{s_2 - s_1}{l}$$

又因为气体在材料中的溶解度满足 $S = k\sqrt{P}$

设 A

上述扩散方程可方便地用通过玻璃的气体流量 F 来表示

$$F = D \frac{k(\sqrt{P_2} - \sqrt{P_1})}{l}$$

(2) 由表达式可以通过以下措施来减少气体扩散:

- 1、增加壁厚
- 2、减小内外压强差
- 3、减小表面积

4、

设该玻璃的质量为 100g

则 $V_{玻璃} = m/\rho = 40 \text{ cm}^3$

计算 Na 的摩尔数为

$$n_{Na} = 2 \times 14 / (23 \times 2 + 16) = 0.45$$

$$N_{Na} = n_{Na} \cdot N_0$$

$$V_{Na} = N_{Na} \cdot (4/3) \pi r_{Na}^3 = 0.011 \text{ cm}^3$$

同上

$$n_O = 14 / (23 \times 2 + 16) + 13 / (40 + 16) + 72 \times 2 / (16 \times 2 + 28) = 2.86$$

$$n_{Ca} = 13 / (40 + 16) = 0.232$$

$$n_{Si} = 72 / (16 \times 2 + 28) = 1.2$$

$$\text{则 } V_O = 16.6 \text{ cm}^3$$

$$V_{Ca} = 0.697 \text{ cm}^3$$

$$V_{Si} = 0.179 \text{ cm}^3$$

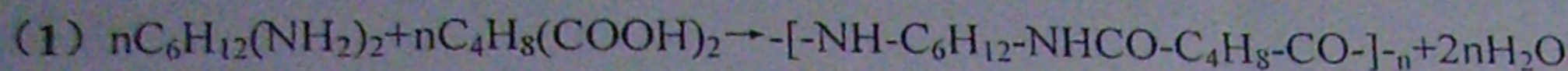
$$\text{则 } \alpha_{Na} = V_{Na} / V_{玻璃} = 0.011 / 40 = 2.75 \times 10^{-4}$$

同上 $\alpha_{\text{O}}=0.415$

$\alpha_{\text{Ca}}=0.0174$

$\alpha_{\text{Si}}=0.03$

5、



副产物是水

(2)

$M_{\text{己二胺}}=116$

$M_{\text{脂肪酸}}=146$

$1000/116 = m_{\text{脂肪酸}}/146$

$m_{\text{脂肪酸}}=1258.6\text{g}$

(3)

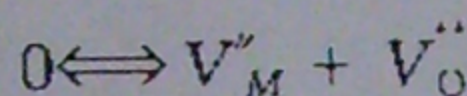
$1000/116 = m_{\text{水}}/36$

$m_{\text{水}}=310.3\text{g}$

$m_{\text{产物}}=1000+m_{\text{脂肪酸}}-m_{\text{水}}=1000+1258.6-310.3=1948.3\text{g}$

6、

(1)



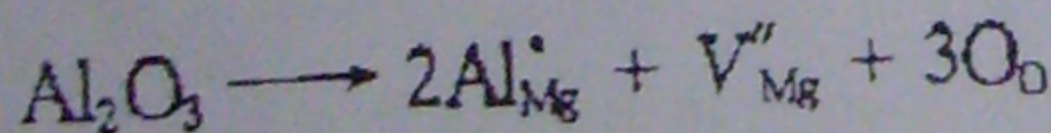
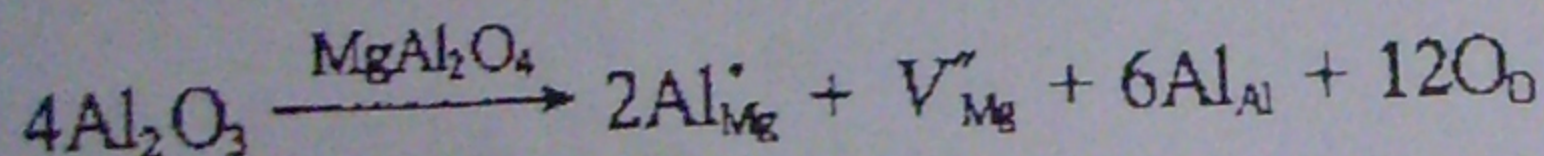
$$K_S = [V_M''] [V_O'']$$

$$K_S^{1/2} = [V_M''] = [V_O''] = \exp\left(-\frac{\Delta G_S}{2kT}\right)$$

代入数据 $\Delta=6\text{ eV}$, $T=1600^\circ\text{C}$, $k=8.62 \times 10^{-5}\text{ eV/K}$

得 $[V_{\text{Mg}}''] = 8.516 \times 10^{-9}$

(2) 缺陷方程为:



(3)

由缺陷方程, 得 $[V_{\text{Mg}}'']_{\text{杂质}} = 10^{-6}$, $[V_{\text{Mg}}'']_{\text{杂质}} > [V_{\text{Mg}}'']_{\text{S}(1600^\circ\text{C})}$, 所以这时杂质缺陷占优;

7、

已知声学支和光学支的格波表达式分别为:

$$\omega_1^2 = \frac{\beta}{mM} \{ (m+M) - [m^2 + M^2 + 2mM\cos(2qa)]^{1/2} \}$$

$$\omega_2^2 = \frac{\beta}{mM} \{ (m+M) + [m^2 + M^2 + 2mM\cos(2qa)]^{1/2} \}$$

(1) ω_2 的最大值是 $(\omega_2)_{\text{最大}} = (2\beta(m+M)/Mm)^{1/2}$
由已知 $(\omega_2)_{\text{最大}} = 3.6 \times 10^{13} \text{ (rad/s)}$ $m=23$ $M=35.5$ $N_0=6.023 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
可以求得 $\beta = 1.5 \times 10^4 \text{ dyn/cm}$

(2)

ω_1 的最大值是

$$(\omega_1)_{\text{最大}} = \left(\frac{\beta}{mM} \right)^{\frac{1}{2}} [(m+M) - (M-m)]^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{2\beta}{M} \right)^{\frac{1}{2}}$$

ω_2 的最小值是

$$(\omega_2)_{\text{最小}} = \left(\frac{\beta}{mM} \right)^{\frac{1}{2}} [(m+M) + (M-m)]^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{2\beta}{m} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$(\omega_1)_{\text{最大}} = (2\beta/M)^{1/2} = 2.26 \times 10^{13} \text{ (rad/s)}$$

$$(\omega_1)_{\text{最小}} = 0$$

$$(\omega_2)_{\text{最小}} = (2\beta/m)^{1/2} = 2.8 \times 10^{13} \text{ (rad/s)}$$