

## 考试内容

### 1、原子键合方式，晶体学基本概念和基础知识；

原子键合方式：由于原子外层轨道通过释放或接收电子，形成正、负离子，或通过共有电子方式达到电子排布的相对稳定，从而产生了原子间的键合力。

1 正负离子经库仑静电引力相互结合起来形成离子键。

2 由相邻原子共同占有其部分价电子，形成稳定外层电子壳层，将相邻原子结合起来形成共价键。

3 金属原子失去电子成为阳离子，且在空间整齐排列，电子则穿梭于其中，二者相互吸引（静电引力）形成金属键。

4 中性原子或分子靠近时，各自内部出现正负电荷中心不重合产生极化作用，进而出现分子键和氢键。

晶体学基本概念和基础知识：这部分我觉得你看材料科学基础的目录和相应章节就知道了，都是很基础的，但又容易失分的。

七大晶系，14种空间点阵的名字得知道。晶面指数、晶向指数得会标记。主要也就这两大点，其他的自己把握。

2、晶体缺陷：点缺陷，位错（基本类型和特征、柏氏矢量、位错的运动、实际晶体中的位错？），表面及界面（外表面、晶界和亚晶界、相界、孪晶界）；两侧晶体以此面为对称面，构成镜面对称关系。

点缺陷：两种基本类型是空位和间隙原子。对于金属晶体有：肖特基缺陷（只形成空位不形成等量间隙原子），弗伦克尔（同时形成等量空位和间隙原子）

位错：

基本类型和特征：刃位错（位错线  $\perp$  柏氏矢量  $b$ ），螺位错（ $\parallel$  垂直于  $b$ ）

柏氏矢量：是描述位错实质的重要物理量。反映出柏氏回路包含的位错所引起点阵畸变的总积累。又称为位错强度，位错的许多性质如位错的能量，所受的力，应力场，位错反应等均与其有关。它也表示出晶体滑移时原子移动的大小和方向。

柏氏矢量具有守恒性，柏氏回路任意扩大和移动中，只要不与原位错线或其他位错线相遇，回路的畸变总劣迹不变，由此可引申出一个结论：一根不分叉的任何形状有位错只有一个柏氏矢量。

位错的运动：1 刃位错：滑移和攀移。2 螺位错：只能滑移，不能攀移。

实际晶体中的位错：以面心立方晶体为例：1 全位错。其柏氏矢量为沿着滑移方向的原子间距的整数倍的位错。（实际晶体中较少见）2 肖克利 Shockley 分位错。位于孪生面上，柏氏矢量沿孪生方向上

的原子间距为分数倍原子间距。 3 扩展位错。由两条平行的 Shockley 分位错和中间的层错区构成。 4 弗兰克 Frank 分位错。为定位错。相当于在晶体的最密排面插入或抽去一层原子面。实际成因是晶体中由于外来高能粒子辐照产生过剩间隙原子或过饱和空位聚集成空位团。 4 压杆位错。通过 Shockley 分位错合成（或位错反应）得到。有多重缺陷组态，为定位错。

表面及界面（外表面、晶界和亚晶界、相界、孪晶界）：这讲的也就是面缺陷。你的材料基书上应该也有的。

晶界：晶体内部点阵相同而取向不同的两个晶粒之间的相邻边界。 按结构分：小角度晶界和大角度晶界。以  $10^\circ$  为分界线。按位相差分：倾侧晶界，扭转晶界，混合晶界。按匹配程度：共格，半共格，非共格。

亚晶界：一个晶粒内部位向不同的区域称为亚晶粒， 相邻亚晶粒之间的界面称为亚晶界。 有对称倾侧晶界（位错墙），不对称倾侧晶界，扭转晶界。其界面能主要来自位错的应变能。

孪晶界：集体中两个相邻的互为孪晶的界面称为孪晶界。分为共格孪晶界，非共格孪晶界。

相界：晶体中两个不同固相之间的界面。按结构特点分：共格，半共格，非共格。

层错：晶体中原子面的正常堆垛顺序发生错误的界面称为堆垛层错。 层错能越高，出现层错几率越小。

表面：材料与外界物质相接触的界面。可从三个层次上界定：理想表面，清洁表面，实际表面。晶体表面层原子间的结合键少于内部，使几层原子产生晶格畸变而能量升高，称这几层原子为表面。

界面（以上所有都可以说是界面）的特点及研究意义： 1 阻碍位错运动，引起界面强化，提高材料的强度。 2 阻碍变形，使变形分布均匀，提高材料的塑性。 3 具有高能量。在化学介质中不稳定，产生晶界腐蚀。 4 影响形变过程及形变金属加热时发生再结晶过程。 5 结晶凝固和固态相变都是新相生核和核心长大过程。

3、固体中原子及分子的运动的菲克定律；扩散的热力学分析与扩散激活能分析；影响扩散的因素和 离子晶体中的扩散？？；

菲克第一定律：在单位时间内通过垂直于扩散方向的单位截面积的扩散物质流量（称为扩散通量 Diffusion flux，用  $J$  表示）与该截面处的浓度梯度（Concentration gradient）成正比，也就是说，浓

度梯度越大，扩散通量越大。

$$J = -D \frac{dC}{dx}$$

菲克第二定律：在第一定律的基础上推导出，在距离  $x$  处，浓度随时间的变化率等于该处的扩散通

量随距离变化率的负值。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right)$$

扩散热力学分析：从热力学角度看，扩散是由于化学位（就是化学势）的不同而引起的，各组元的

原子总是由高化学位区向低化学位区扩散。扩散的真正动力不是浓度梯度，而是化学位梯度。

扩散激活能分析：克服能垒所必须的额外能量才能实现原子从一个平衡位置到另一个平衡位置的基本跃迁，这部分能量称为扩散激活能，只有满足该能量要求的原子才能实现扩散。

影响扩散的因素：1 温度。越高则扩散系数  $D$  越大，扩散越快。2 成分。具体说，与组元特性（尺寸相差越大， $D$  越大）、浓度、第三组元都有关。3 晶体结构。与结构的类型（致密度越小，扩散越容易）、固溶体类型（置换式原子的扩散激活能  $Q$  比间隙原子的大得多）、各向异性有关。

离子晶体中的扩散：（离子晶体中的缺陷：1 符合化学计量比且无掺杂的离子晶体中存在本征热缺陷：弗伦克尔缺陷和肖特基缺陷 2 对非化学计量比和有掺杂的离子晶体，缺陷情况较复杂）离子晶体中的扩散机制有：1 空位扩散；2 间隙扩散；3 亚晶格间隙扩散。其中间隙扩散比空位扩散需要更大的扩散激活能。不同的离子晶体中，不同类型载流子的扩散激活能是不同的。

4、二元系相图及合金的凝固：相图的表示和测定方法；相图热力学的基本要点（自由能 - 成分曲线、公切线原理、杠杆法则、二元相图的几何规律）；二元相图分析（匀晶相图、共晶相图、包晶相图）；

#### 5、无机非金属材料种类及性能特点

答：分类：水泥、玻璃、陶瓷、耐火材料。特点：

陶瓷：耐高温、耐腐蚀、硬度高、绝缘。玻璃：各向异性、无固定熔点、介稳性、性质变化的连续性和可逆性。水泥：很好的可塑性、适应性强、耐侵蚀、硬化后强度较高、不生锈、耐久性好。耐火材料：耐高温高热，为满足其他特殊要求，还可分别加入少量适当外加剂进行力学性能等的改善。

结构：元素的结合力主要为离子键、共价键或离子共价混合键，所以具有高的键能和键强。

优点：由于结构特点，赋予这一大类材料以高熔点、高硬度、耐腐蚀、耐磨蚀、高强度和良好的抗氧化性等基本属性，以及宽广的导电性、导热性、透光性及良好的铁电性、铁磁性和压电性。

缺点：抗拉强度低、韧性差等，有待于进一步改善。将其与金属材料、有机高分子材料一起合成为复合材料是一个重要的改性途径

#### 6、高分子的基本概念、聚合物的命名与分类

答：概念：一种由许多相同的、简单的结构单元通过共价键重复连接而成的相对分子质量很大（ $10^4$ - $10^6$ ）的化合物。

聚合物的命名与分类：

习惯命名法

最常用的简单命名法系参照单体名称来定名。常以单体名为基础，前面冠以“聚”字，就成为聚合物的名称。

#### 系统命名法

以结构为基础的系统命名法。进行系统命名时，首先确定重复单元结构，再排好重复单元中次级单元的次序，给重复单元命名。最后在重复单元名称前加一“聚”字。

#### 聚合物的分类

可以从不同角度对聚合物进行分类，可按单体来源，聚合物结构、用途、合成方法、加热行为等角度划分。

##### 按主链结构分类

从高分子化学角度来看，一般应以有机化合物分类为基础，根据主链结构可将聚合物分为碳链、杂链、和元素有机三类。

##### 碳链聚合物

大分子主链完全由碳原子组成。大部分烯类和双烯类聚合物为碳链聚合物，详见表 8-1-01。

##### 杂链聚合物

大分子主链中除碳原子外，还有氧、硫、氮等杂原子，如聚醚、聚氨酯、聚硫橡胶等，详见表 8-1-02。

##### 元素有机聚合物

大分子主链中没有碳原子，主要有硅、硼、铝和氧、氮、硫、磷等原子组成，但侧基却由甲基、乙基、乙烯基、芳基等有机基团组成。

##### 按性能用途分类

聚合物主要作为合成材料根据材料的性能与用途，可将聚合物分为塑料、纤维、橡胶。

##### 塑料

塑料是以合成树脂为基本成份，加入填充剂等助剂后，可以作成各种“可塑性”的材料。它具有质轻、绝缘、耐腐蚀、美观，制品形式多样化等特点。

##### 橡胶

橡胶是具有高弹性的材料，在外力作用下能发生较大的形变，当外力消除后能迅速恢复其原状。

##### 纤维

线型结构的高分子量合成树脂，经过牵引、拉伸、定型得到纤维，它弹性较小。

##### 粘结剂

通过表面粘结力和内聚力把各种材料粘合在一起，并且在结合处有足够强度的物质称为粘结剂。通常是高分子合成树脂或具有反应性的低分子量合成树脂。按其外观形态可分为溶液型、乳液型、膏糊型、粉末型、胶带型。

### 涂料

涂料是能涂敷于底材表面并形成坚韧连续膜的液体或固体物料的总称。

一、按聚合物的热行为分类：热塑性聚合物热固性聚合物

二、按聚合物分子的结构分类：碳链聚合物杂链聚合物元素有机聚合物

### 命名：聚合物的命名

一按来源或结构命名均聚物："聚"+单体名称(加聚)共聚物："聚"+单体1名称+单体2名称...

缩聚物："聚"+重复单元名称

二按结构特征：聚醚，聚酯，聚酰胺...

三商品名称：

1合成纤维："...+纶"涤纶，丙纶，锦纶，腈纶，维尼纶，氯纶2合成橡胶："...+橡胶"丁苯橡胶，乙丙橡胶，顺丁橡胶，丁腈橡胶，氯丁橡胶3合成树脂："...+树脂"酚醛树脂，醇酸树脂

四英文缩写名五系统命名法

7、逐步聚合、自由基聚合及离子聚合，掌握各反应类型的反应机理及反应特点

答：逐步聚合反应的重要特点是单体转变成聚合物的化学反应是逐步进行的。

## § 2.2 逐步聚合反应机理

$aAa+bBb\rightleftharpoons aABb+ab$	单体+单体	反应速率 $R_1$	平衡常数 $K_1$
$aABb+aAa\rightleftharpoons aABAa+ab$	单体+二聚体	$R_2$	$K_2$
$aABb+bBb\rightleftharpoons bBABb+ab$	单体+二聚体	$R_3$	$K_3$
$aABb+aABb\rightleftharpoons aABABb+ab$	二聚体+二聚体	$R_4$	$K_4$
.....			
$a(AB)_{n/2}b+a(AB)_{n/2}b\rightleftharpoons a(AB)_nb+ab$		$R_n$	$K_n$

自由基聚合过程中，增长链自由基从其他分子上夺取一个原子而终止成为稳定大分子，并使失去原子的分子又成为一个新自由基，再引发单体继续新的链增长，使聚合反应继续下去。自由基聚合具有诱导期和瞬时高速度特性，它可以明显地区分为四个基元反应：引发（形成反应活性中心-单体自由基）；链



增长（单体自由基与更多的单体继续加成生成含有更多个“结构单元”的“链自由基”）；链终止（2个自由基的结合反应：偶合和歧化）；偶合：两个链自由基形成一个聚合物大分子；这个大分子的相对分子质量（或平均聚合度）等于原来两个链自由基的相对分子质量（或平均聚合度）之和；大分子两端有引发剂残基。

自由基聚合反应 的特点：

1. 整个聚合过程分为链引发、链增长、链终止，各步反应速率和活化能相差很大；
2. 高分子瞬间形成，并产品的相对分子质量不随时间变化；
3. 体系内始终由单体和高聚物组成，产物不能分离；
4. 反应连锁进行，转化率随时间的延长而增加；
5. 反应是不可逆的。

离子聚合机理：

具有相同电荷，不能双基终止，无自加速现象。阳：向单体、反离子、链转移剂终止。  
阴：往往无终止，活性聚合物，添加其它试剂终止。

特征

1. 对单体的选择性高；
2. 链引发活化能低，聚合速率快；
3. 存在增长离子与反离子的平衡；
4. 不同类型的离子型聚合引发剂不同；
5. 不存在偶合终止，只能单基终止。

8、共聚合反应：掌握共聚物的微分组成方程、Q-e 方程

$$\frac{d[M_1]}{d[M_2]} = \frac{[M_1]}{[M_2]} \cdot \frac{r_1[M_1] + [M_2]}{[M_1] + r_2[M_2]}$$

$$r_1 \cdot r_2 = e^{-(e_1 - e_2)^2}$$

9、聚合物的化学反应：掌握反应类型及重要聚合物的制备

答：根据聚合度和基团（侧基和端基）的变化，大致可作如下分类：  
聚合度基本不变而仅限于侧基或端基变化的反应。聚合物的聚合度发生根本改变的反应，包括：聚合度变大的反应，如交联、接枝、嵌段、扩链等。聚合度变小的反应，如解聚、降解等。

10、聚合物的结构和分子运动：掌握高分子链结构、聚集态结构、高聚物的分子热运动、高聚物的玻璃化转变及高聚物的粘性流动

答：聚合物的结构：1, 聚合物链结构，分为一次（近程）结构，二次（远程）结构

2 聚合物凝聚态结构，三次结构

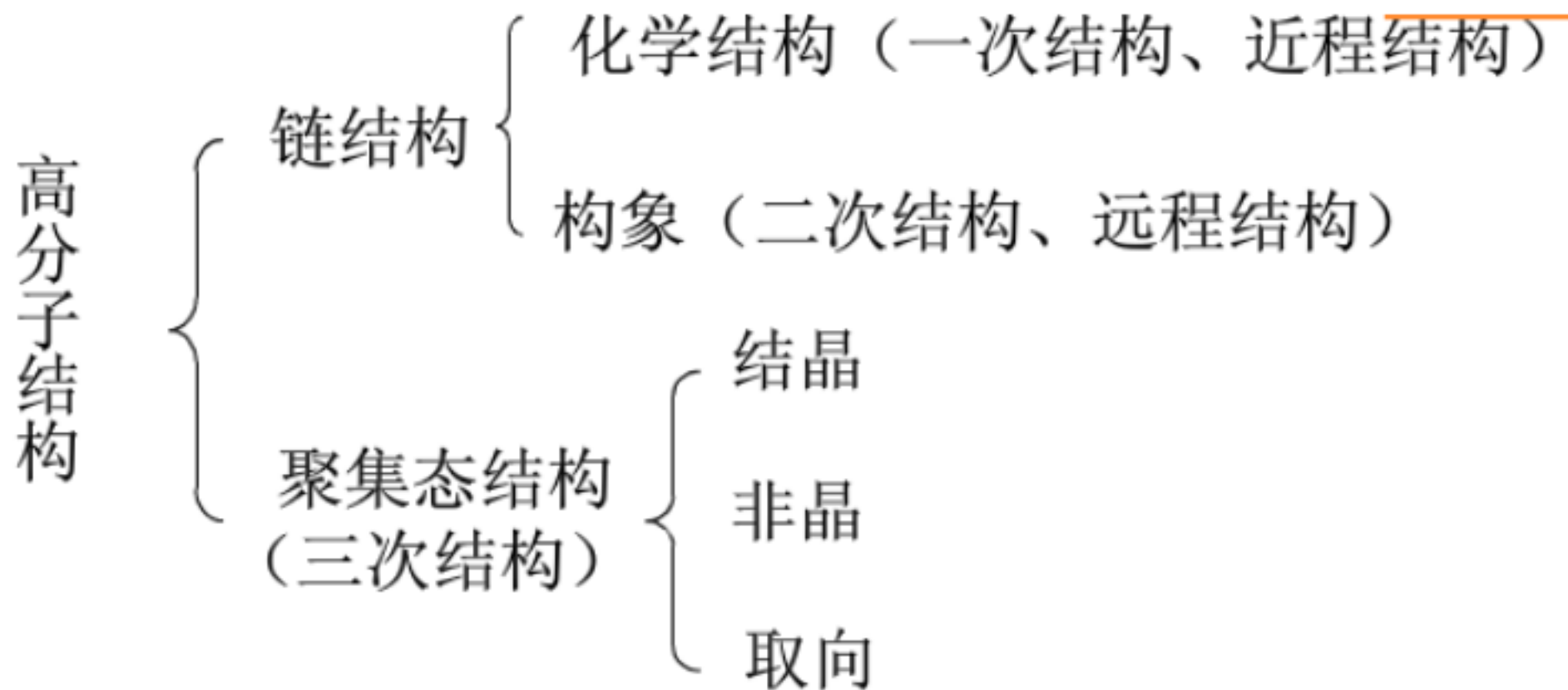
其中近程结构包括 ，分子的组成 ，构型，构造，共聚物的序列结构

远程结构包括 ，分子大小，分子形态

高分子凝聚态包括 ：晶态，非晶态，取向态，液晶态，织态。

（分子的运动： 分子除具有平移运动外，还存在着分子的转动和分子内原子的各种类型的振动。固态分子内部的振动和转动的幅度，比气体和液体中分子的平动和转动幅度小得多，分子的这种内部运动，并不会破坏分子的固有特性。 ）

高分子链结构：



化学结构包括：大分子组成、键接顺序、支化、交联、构型等。

聚集态结构： 是指高分子链间的几何排列，又称三次结构，也称为超高分子结构。聚集态结构包括晶态结构、非晶态结构、取向结构和织态结构等。

高聚物的分子热运动： 特点： 1 多重性。包括运动单元的多重性和运动方式的多样性。

2 时间依赖性。从一种平衡状态过渡到另一种平衡的过程为松弛过程。

3 温度依赖性。升高温度对分子运动具有双重作用。

高聚物的玻璃化转变： 是非晶聚合物的玻璃态与高弹态之间的转变。 其分子运动本质是链段运

动发生“冻结”与“自由”的转变。发生玻璃化转变的温度称为玻璃化温度，以  $T_g$  表示，是高聚物的特征温度。它是非晶态热塑性塑料使用温度的上限，是橡胶使用温度的下限。

玻璃化转变对聚合物性能尤其是力学性能变化很大。 玻璃化转变的温度和聚合物链段的柔性有很大的关系，一般链段越柔，玻璃化转变温度越低，链段刚性越大，玻璃化转变温度越高。

高聚物的粘性流动： 1 高聚物粘性流动是链段协同位移运动的结果。 2 其流动活化能与分子量无关。

3 它符合非牛顿流体的流动规律。 4 大多数高聚物熔体属假塑性流体。 5 伴有高弹形变。

#### 11、纳米材料的概念、分类、基本效应

答：纳米材料是指三维空间尺度至少有一维处于纳米量级（1-100nm）的材料，它是由尺寸介于原子、分子和宏观体系之间的纳米粒子所组成的新一代材料。

纳米材料大致可分为纳米粉末、纳米纤维、纳米膜、纳米块体等四类

**基本效应：** 1 体积效应。当纳米粒子的尺寸与传导电子的德布罗意波相当或更小时，周期性的边界条件将被破坏，磁性、内压、光吸收、热阻、化学活性、催化性及熔点等都较普通粒子发生了很大的变化，这就是纳米粒子的体积效应。纳米粒子的以下几个方面效应及其多方面的应用均基于它的体积效应。 2 表面效应。表面效应是指纳米粒子表面原子与总原子数之比随着粒径的变小而急剧增大后所引起的性质上的变化。 3 量子尺寸。粒子尺寸下降到一定值时，费米能级接近的电子能级由准连续能级变为分立能级的现象称为量子尺寸效应。 4 量子隧道。微观粒子具有贯穿势垒的能力称为隧道效应。 5 介电限域。纳米粒子的介电限域效应较少不被注意到。实际样品中，粒子被空气、聚合物、玻璃和溶剂等介质所包围，而这些介质的折射率通常比无机半导体低。光照射时，由于折射率不同产生了界面，邻近纳米半导体表面的区域、纳米半导体表面甚至纳米粒子内部的场强比辐射光的光强增大了。

#### 12、纳米材料的制备方法概述

答：1 物理法：放电爆炸法、机械合金化法、严重塑性变形法、惰性气体蒸发法、等离子蒸发法、电子束法、激光束法等。

2 化学法：气相燃烧合成法、气相还原法、等离子化学气相沉积法、溶胶-凝胶法、共沉淀法、碳化法、微乳液法、络合物分解法等。

#### 13、纳米材料热学和光学特性



热学特性：一、热容      二. 晶格参数，结合能，内聚能      三、纳米粒子的熔解热力学      四、反应体系的化学平衡

光学： 1、宽频带强吸收性      2、吸收光谱的蓝移现象      3、吸收光谱的红移现象      4、激子吸收带 - 量子限域效应      5、纳米颗粒发光现象

14、材料的常规测试方法和特点（ X 射线衍射分析，透射电子显微镜，扫描电子显微镜，差热分析，热重分析，红外光谱）；

这样答就够了！ 14 作为一个大题的话，但如果只要你说其中某一个的话，那就得细致些把特点说出来，我本来有《近代材料分析与测试方法》，但给学姐了，现在手上也没有，你可以想投机：把你背的内容分成几小点。

X 射线衍射（ XRD）分析：通过对材料进行 X 射线衍射，分析其衍射图谱，获得材料的成分、材料内部原子或分子的结构或形态等信息的研究手段。特点：

1 是研究晶体物质和某些非晶态物质微观结构的有效方法。      2 可用于精确测定物质的晶体结构，织构及应力，精确的进行物相分析，定性分析，定量分析。 3 根据不同需要，样品可以是粉末或者其他。      4 可以不损坏样品来测定微观应力。

（这个也比较常用：）拉曼光谱（ RamanSpectrum）：是一种散射光谱。拉曼光谱分析法是基于印度科学家 C.V. 拉曼（ Raman）所发现的拉曼散射效应，对与入射光频率不同的散射光谱进行分析以得到分子振动、转动方面信息，并应用于分子结构研究的一种分析方法。特点：

1. 提供快速、简单、可重复、且更重要的是无损伤的定性定量分析      2 水的拉曼散射很微弱，拉曼光谱是研究水溶液中的生物样品和化学化合物的理想工具。      3 拉曼一次可以同时覆盖 50-4000 波数的区间，可对有机物及无机物进行分析。      4 拉曼光谱谱峰清晰尖锐，更适合定量研究、数据库搜索、以及运用差异分析进行定性研究。      5 常规拉曼光谱只需要少量的样品就可以得到。这是拉曼光谱相对常规红外光谱一个很大的优势。      6 拉曼散射谱线的波数随入射光的波数而不同，对同一样品，同一拉曼谱线的位移与入射光的波长无关，只和样品的振动转动能级有关。

差热分析（ Differential Thermal Analysis，DTA），是一种重要的热分析方法，是指在程序控温下，测量物质和参比物的温度差与温度或者时间的关系的一种测试技术。该法广泛应用于测定物质在热反应时的特征温度及吸收或放出的热量，包括物质相变、分解、化合、凝固、脱水、蒸发等物理或化学反应。广泛应用于无机、硅酸盐、陶瓷、矿物金属、航天耐高温材料等领域，是无机、有机、特别是高分子聚合物、玻璃钢等方面热分析的重要仪器。

热重分析（ Thermogravimetric Analysis，TG或 TGA），是指在程序控制温度下测量待测样品的质量与温度变化关系的一种热分析技术，用来研究材料的热稳定性和组份。 TGA在研发和质量控制方

面都是比较常用的检测手段。 热重分析在实际的材料分析中经常与其他分析方法连用，进行综合热分析，全面准确分析材料。

热重法的重要特点 是定量性强，能准确地测量物质的质量变化及变化的速率，可以说，只要物质受热时发生重量的变化，就可以用热重法来研究其变化过程。

红外光谱分析 infrared spectra analysis 利用红外光谱对物质分子进行的分析和鉴定。将一束不同波长的红外射线照射到物质的分子上，某些特定波长的红外射线被吸收， 形成这一分子的红外吸收光谱。 每种分子都有由其组成和结构决定的独有的红外吸收光谱，据此可以对分子进行结构分析和鉴定。

特点：气、液、固都可测定，并具有用量小，分析速度快，不破坏样品

（这些答案都是从我的清华版材料科学基础课本及相应辅导书中一个一个敲出来的，当然，也有从百度

和其他网站上搜集的答案，还有你自己之前找的，不一定全面、准确，但我已尽力。权作参考。

另附我这次 T 大复试的一些经验分享，祝复试顺利 ! by Fultice )