

浙 江 大 学

二〇〇四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 443

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、填空题(每空 1 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: A、B、C、D 等,微观对称要素包括: E、F 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,氧化硅结构的变化构型,根据四面体的排列方式可以将其总体分为: A、B、C、D、E 等几类。
- 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: A、B 和 C 等。
- 4、根据晶体化学基本原理,晶体中的键型有 A、B、C、D 和 E 等几种,而实际材料的键合可以用一个确定键性的 F 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
2. 金属键的特点是:
 - A 电负性很小;吸引力相当强;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“共有化”、由于有方向性要求,所以原子排列稀疏
 - 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
3. 氧化硅可以有多种晶体结构形态,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

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

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缺陷形成的 $[V_M]$ 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 $[V] = 2 \exp\left(-\frac{\Delta G}{2kT}\right)$

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向下述方向移动:

- 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

7. 在中间相中, 把电子浓度和晶体结构间有明确对应关系的称为:

- A 电子相
- B 间隙相
- C 拓扑密堆相

8. 各种物质状态的双体分布函数不同, 对于非晶态物质, 其特点是:

- A 原子分布几率密度出现明锐的峰
- 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

9. 非晶态半导体的主要类型有四面体配置的(如非晶硅及非晶锗等)和硫系非晶态半导体等, 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, 层间靠范德瓦耳斯力结合
- 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对电子

10. 当玻璃从高温冷却到室温时, 保持着与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

11. 弗兰克—瑞德(Frank-Read)位错增殖模型中位错环的不断产生是由于:

- A 在材料的四周各点上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

12. 对于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

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

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 特定方向布里渊区边界上能量的间隙所确定

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

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 $[V_M^{''}] = [V_O^{''}] = \exp(-\frac{\Delta G_s}{2kT})$ 表示, 测得该氧化物在 1600°C 时的空位浓度 $[V_M^{''}] = 8.516 \times 10^{-9}$, (1) 试求出氧化物 MO 的肖特基缺陷生成焓。($k = 8.62 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$)。 (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, 相互穿插配置构成。若以 Ca 原子的格子作为基体, Ti 原子的格子错位 $\frac{1}{2}(a+b+c)$ 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? 形成的是什么配位多面体?
 (3) 根据 (1) 所得的晶胞图, 最简单画出 (111) 晶面的原子排列图。

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 (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。

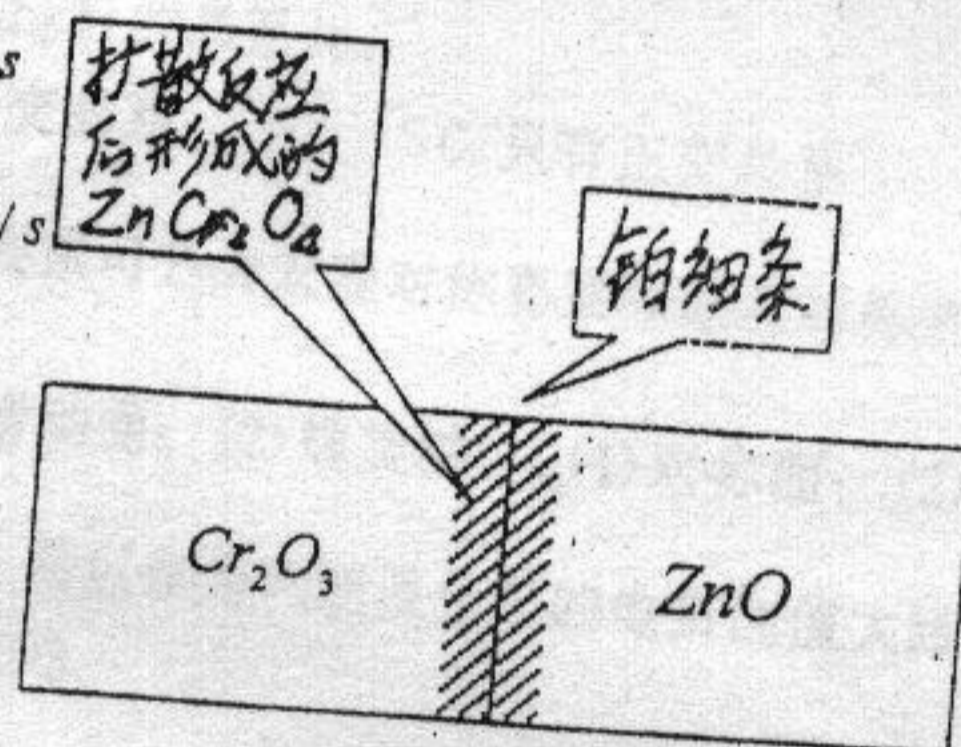
4、应用派-纳模型, 定量地计算克服点阵阻力推动位错运动的切应力的公式如下表示,

$$\tau_p = \frac{2\mu}{(1-\nu)} \exp(-2\pi d/(1-\nu)b) = \frac{2\mu}{(1-\nu)} \exp(-2\pi w/b)$$
, 其中 w 为位错宽度, b 为位错强度,
 d 为滑移面的晶面间距, 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, 则其剪切应力将是另一个的多少倍?

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:

$$D_{\text{Zn}/\text{ZnCr}_2\text{O}_4} = 6 \times 10^{-3} \exp\left(-\frac{356732(\text{cal/mol})}{RT}\right) \text{ m}^2/\text{s}$$

$$D_{\text{Cr}/\text{ZnCr}_2\text{O}_4} = 8.5 \times 10^{-3} \exp\left(-\frac{338904(\text{cal/mol})}{RT}\right) \text{ m}^2/\text{s}$$



$R=1.987\text{cal/mol K}$ 。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记的位置是否发生移动? 如果移动则说明向哪个方向移动。

6、 Al_2O_3 在 MgO 中将形成有限固溶体, 在低共熔温度时, 约有 18wt% 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体分子式 (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体分子表达式 (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)