

浙 江 大 学

二〇〇五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、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
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
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 C. 一组两两相交的晶面
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 C. 只有正交晶系
5. 晶体的对称性可用对称要素描述, 对称要素可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)螺旋轴 C. (1)对称面; (2)螺旋轴
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值大致为:
A. $X=0.5$ B. $X=2$ C. $X=3$
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, 可以用键长的一半表示的是:
A. 共价半径、范德瓦耳斯半径 B. 金属半径、离子半径 C. 共价半径、离子半径
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……
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 范围
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
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
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以确定矿物 $(\text{NaMg}_3\text{Al}_6(\text{BO}_3)_3[\text{Si}_6\text{O}_{18}](\text{OH})_4)$ 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
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
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. 晶体中出现间隙原子的区域
14. 弗伦克尔缺陷是:
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
15. 一种负离子缺位, 金属离子过剩的氧化物 TiO_2 , 满足缺陷反应方程 $\text{O}_o \rightleftharpoons +V_o^{\bullet\bullet} + 2e' + \frac{1}{2}\text{O}_2 \uparrow$, 则氧空位浓度与氧分压满足如下关系:
A. $[V_o^{\bullet\bullet}] \propto \frac{1}{6}[P_{\text{O}_2}]^{-\frac{1}{4}}$ B. $[V_o^{\bullet\bullet}] \propto \frac{1}{4}[P_{\text{O}_2}]^{-\frac{1}{6}}$ C. $[V_o^{\bullet\bullet}] \propto \frac{1}{4}[P_{\text{O}_2}]^{-\frac{1}{4}}$
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攀移
B. 刃型位错只作滑移, 螺型位错既可滑移又可攀移
C. 刃型位错只作攀移, 螺型位错既可滑移又可攀移
17. 固体表面力源自于:
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. 固体表面的不均匀性, 外界物质容易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
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
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

非晶态固体的短程有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

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-类金属非晶合金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

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 、 K_2O 、 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 、 K_2O 、 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 、 K_2O 、 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

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}

24. 局部有序的折叠链缨状胶束粒子模型,亦称为两相球粒模型,认为高分子非晶态是由折叠链构象的“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. 粒间相由穿越不同粒子相的分子链无规地缠绕在一起,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

25. 扩散系数有自扩散系数、偏扩散系数和互扩散系数之分。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. 几种离子同时进行扩散的多元系统中每个组元的扩散系数,扩散是处在化学位梯度条件下进行的

26. 扩散的激活能可对 $\ln D \sim 1/T$ 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. 非本征扩散及本征扩散激活能
- B. 本征扩散及非本征扩散激活能
- C. 不同温度下的本征扩散激活能

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

28. 在爱因斯坦和德拜的比热模型中, 对利用量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表格波; 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表格波
 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
29. 热导系数可写成 $\kappa = -\frac{1}{3}C\bar{v}\lambda$, 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. 热导将按 T^3 变化 B. 热导将按 T^{-1} 变化 C. 热导将按 $e^{3/T}$ 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, 那么该晶格包含的独立振动频率数为:
- A. $3N$ B. N C. $6N$

二、解析选择题 (每题 15 分):

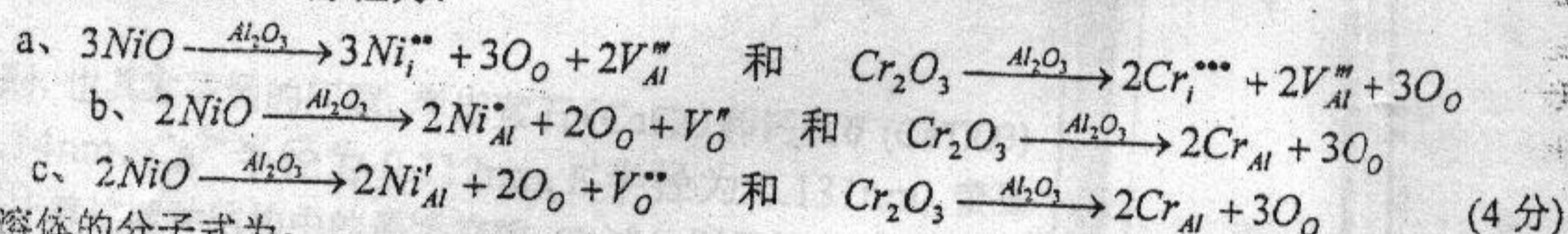
(注: 解析选择题在给出题目的同时还给出了一种简单解析过程及答案, 解析过程中的每一步都给出了多个选项, 考生只需对每一步所给出的选项按照正确的解析过程进行分析计算, 并按解析顺序和计算结果判断选择出每一步的正确选项即可。

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, 每个单元内只有当所选项以及此前各项都选择正确时, 该选项才得分, 每一选项的可能得分数都标注在各项后。)

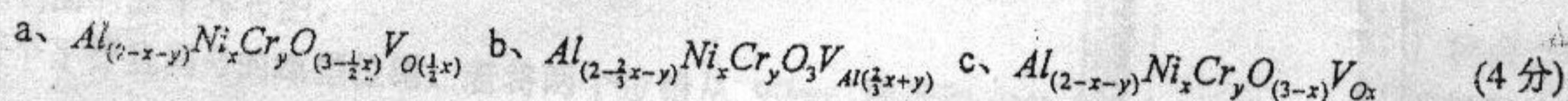
- 1 一块 Al_2O_3 中以置换固溶的方式固溶 0.5mol% NiO 和 0.02mol% Cr_2O_3 , (1) 试确定其缺陷反应方程及固溶体分子式。(2) 给出这种固溶体的化学式, 并考虑固溶前后体积不变, 计算固溶前后的密度变化百分比。(分子量: $M_{Al_2O_3} = 102$, $M_{NiO} = 74.7$, $M_{Cr_2O_3} = 152$)

解析过程:

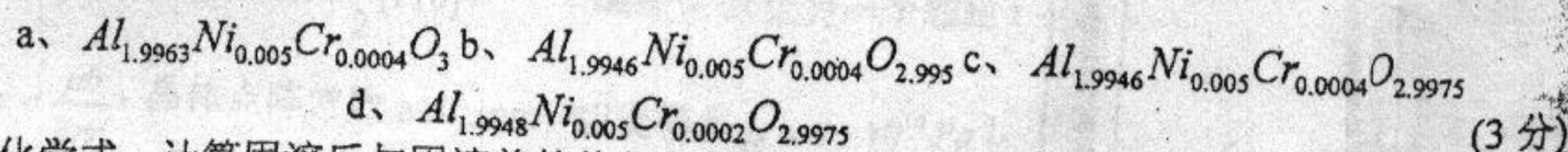
- (1) 确定其缺陷反应方程为:



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

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

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

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 $D = 2 \times 10^{-11} m^2/s$ 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	0.000 0	0.011 3	0.022 6	0.033 8	0.045 1	0.056 4	0.067 8	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 6	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 6	0.816 3	0.820 9	0.825 4	0.829 9	0.832 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	0.929 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 5
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 6	0.976 3	0.980 4	0.983 8	0.986 7	0.989 1	0.992 8	0.995 3	0.998 1	0.999

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

解析过程如下:

- (1) 首先根据题意列出扩散方程为:

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

$$c. C(x, t) = \frac{C_2}{2} \left[1 - \text{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] \quad (3 \text{ 分})$$

以此得到误差关系式为:

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

查表后计算得到扩散时间为:

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

- (2) 将渗碳厚度增加 1 倍则渗碳时间要延长到原来的:

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

具体渗碳时间为:

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

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 $3.6 \times 10^{13} \text{ (rad/s)}$, 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:

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

计算得到晶体的恢复力常数为:

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

(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,

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

计算出相应的声学支和光学支的最大和最小值为:

$$\begin{aligned} \text{a、} (\omega_1)_{\text{最大}} &= 2.8044 \times 10^{13} (\text{rad/s}), \quad (\omega_1)_{\text{最大}} = 2.2573 \times 10^{13} (\text{rad/s}), \\ (\omega_2)_{\text{最小}} &= 2.2573 \times 10^{13} (\text{rad/s}), \quad (\omega_2)_{\text{最小}} = 2.8044 \times 10^{13} (\text{rad/s}), \\ (\omega_1)_{\text{最小}} &= 0, \quad (\omega_1)_{\text{最小}} = 0 \\ \text{c、} (\omega_1)_{\text{最大}} &= 2.2573 \times 10^{13} (\text{rad/s}), \\ (\omega_2)_{\text{最小}} &= 2.8044 \times 10^{13} (\text{rad/s}), \\ (\omega_1)_{\text{最小}} &= 1.9830 \times 10^{13} (\text{rad/s}) \end{aligned} \quad (3 \text{ 分})$$

三、分析计算题 (每题 15 分):

1 不同晶体具有不同的原子排列规则,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)试分别最简单画出 CaF_2 晶胞(110)面和 CaTiO_3 晶胞(111)面的原子排布图。

2 在一个面心立方晶体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 $\frac{a}{2}[110]$, 一个螺型位错受另一个相距 r

处的平行螺型位错作用的应力场为 $\sigma = \frac{\mu b}{2\pi r}$, 晶体点阵常数 $a=0.3\text{nm}$, 切变模量 $\mu = 7 \times 10^{10} \text{Pa}$)。

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。

(两种玻璃的配比如下:

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)

样品	$\text{Na}_2\text{O wt\%}$	$\text{Al}_2\text{O}_3 \text{ wt\%}$	$\text{SiO}_2 \text{ wt\%}$
G1	10	20	70
G2	20	10	70