

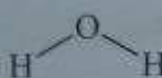
西北工业大学

2008 年博士研究生第二次招生入学考试试题

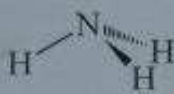
试题名称: 材料物理与化学专业综合四

说明: 所有试题一律答在答题纸上。要求从 180 分的题目中仅选答 100 分的题目并按答卷中题目出现的先后次序计算(题号可打乱, 但要标明), 多答无效。 共 2 页 第 1 页

一、确定各分子的特征对称元素和对称点群(熊氏符号): (每小题 4 分, 共 20 分)



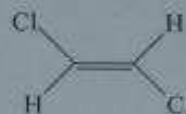
(1)



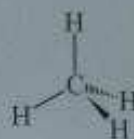
(2)



(3)



(4)



(5)

二、用量热法测得 CO 气体的熵值与统计热力学计算的结果不一致, 这是由于在 0 K 时, CO 分子有两种可能的取向: CO 和 OC。(1) 计算 0 K 时 1 mol 的 CO 完美晶体的微观状态数和摩尔熵值; (2) 当每个分子都有 2 种可能取向时, 求 1 mol 的 CO 固体在 0 K 时的微观状态数和摩尔熵值(Boltzmann 常数 $k=1.38066 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$, Avogadro 常数 $N_0=6.02214 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$)。(20 分)

三、1 mol 某气体的状态方程为: $\left(p + \frac{a}{V^2}\right)V = RT$, 其中 a 为常数。试推导出 1 mol 该气体从 (p_1, V_1) 经恒温可逆过程变为 (p_2, V_2) 后的 W 、 Q 、 ΔU 、 ΔH 、 ΔS 和 ΔG , 要求最终表达式中不出现压力 p (提示: 可利用 $dU = TdS - pdV$, $dH = TdS + Vdp$, Maxwell 关系式 $\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$, $\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$)。(30 分)

四、根据 Hückel 分子轨道理论, 1,3-顺丁二烯 4 个 p 原子轨道可形成 4 个 π 分子轨道。试确定其久期方程、久期行列式和行列式的展开式, 确定各本征值及其所对应的本征向量。根据所得的 π 分子轨道波函数, 计算第一激发态(1 个电子 HOMO $\rightarrow$ LUMO 激发后)分子中各原子上分布的电荷和各相邻原子间的键级。(30 分)

共 2 页 第 2 页

五、分别简述下列分析方法的基本原理(可画给简图): (1)双光束分光型红外光谱分析; (2)气相色谱分析; (3)质谱分析; (4)原子吸收光谱分析; (5)核磁共振分析; (6)原子力显微分析。(每小题 5 分, 共 30 分)

六、试根据自己的理解, 回答(任意一种)常见分子力学/分子动力学中的力场(Potential Field, 又称势函数)所包含的内容、物理意义, 用自变量符号表示的函数关系, 指出关系式中自变量的涵义。(20 分)

七、分别简述分子力学(MM)方法、分子动力学(MD)方法的基本原理。(20 分)

八、结合自己所熟悉的专业, 试叙述你对“材料设计”概念的理解。(10 分)