

南京大学 2007 年攻读硕士学位研究生入学考试试题(三小时)

考试科目名称及代码 材料物理基础 839

适 用 专 业: 材料物理与化学 材料学

- 说明:
1. 请将所有答案写在答卷纸上, 写在试卷纸上一律无效。
 2. 本试题 150 分。
 3. 考试时间为 180 分钟
 4. 仅允许使用普通计算器。

有关的基本常数:

摩尔气体常数: $R=8.314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$;

原子质量常数: $m_0 = 1/12m(^{12}\text{C}) = 1\text{u} = 10^{-3}\text{kgmol}^{-1}/L = 1.660\ 538\ 73 \times 10^{-27} \text{ kg}$

光速: $c \approx 3 \times 10^8 \text{ m/s}$

电子质量: $m_e = 9.11 \times 10^{-28} \text{ g} = 0.511 \text{ MeV}/c^2$

普朗克常数: $h = 6.626176 \times 10^{-34} \text{ Js}$, $\hbar = 1.0545887 \times 10^{-34} \text{ Js} = 6.582173 \times 10^{-16} \text{ eVs}$

真空介电常数: $\epsilon_0 = 10^{-7}/4\pi \text{ c}^2$

一、(30 分) 概念

- 1) (5 分) 激子 (Exciton)
- 2) (5 分) 声子
- 3) (5 分) 居里温度
- 4) (5 分) 铁电体
- 5) (5 分) 德拜温度
- 6) (5 分) 超导体

二、(40 分) 简答题

- 1、(10 分) 比较金属键、共价键、离子键和范德瓦尔斯键的特征。
- 2、(10 分) 比较电子、光子和声子的本质。
- 3、(10 分) 简述布洛赫 (Boch) 定理及其意义。
- 4、(10 分) 下述几种方法是研究材料结构的常用方法, 请描述它们所能得到的物理信息及其理由: (1) X-射线衍射; (2) 电子衍射; (3) Raman 散射; (4) 扫描隧道显微镜

三、(80 分) 计算题

1. 对于面心立方, 倒格子基矢为

$$(20分) \quad a^* = \frac{1}{a}(-\bar{i} + \bar{j} + \bar{k}), b^* = \frac{1}{a}(\bar{i} - \bar{j} + \bar{k}), c^* = \frac{1}{a}(\bar{i} + \bar{j} - \bar{k})$$

- 试求面心立方晶格中原子密度最大的晶面
- 试计算面心立方晶格 (hkl) 面 x 射线衍射的几何结构因子 F_{hkl} , 并指出其消光条件。
- 画出面心立方晶格的二维表示图。
- 写出面心立方点阵的直到第三近邻的径向分布函数。并比较理想晶体、非晶体和气体的径向分布函数的主要特点。

2. 经典电导理论认为在外加电场的作用下, 所有电子都对电流有贡献; 而量子电导理论认为只有费米能附近的电子才对电流有贡献。假设温度为绝对零度, 此时费米面附近电子速度为 v_F , 而 $N(E_F)$ 为费米面处单位能量间隔的电子数 (费米面处的电子态密度), 而弛豫时间 (电子两次被散射的平均时间间隔) 为 τ , 因外加静电场 E 的作用下, 电子散射阻力等于外加电场力, 即 $\hbar \frac{\Delta k}{\tau} = |E|q$, 考虑自由电子模型, 求证量子电导理论的电导表示式为

$$\sigma = \frac{q^2 v_F^2 N(E_F) \tau}{3} \quad (20分)$$

3. (20 分) 由 Na 离子和 Cl 离子交替间隔构成的一维原子链, 晶格常数为 2.81 埃, Na 离子和 Cl 离子的质量分别为 3.82×10^{-26} kg, 5.89×10^{-26} kg。假定离子间仅有静电相互作用 (且仅有近邻相互作用), Cl 离子和 Na 离子各带一个电性不同的单位电荷, 求这个一维 NaCl 原子链的声子色散关系, 并画出简约布里渊区的色散曲线。估算纵声学支的上限和下线角频率。

4. (20 分) 一个二维晶体, 其倒易点阵为六方点阵: $a^* = b^* = a$, $\varphi = 120^\circ$ 。

- 使用未简约的图, 画出其前三个布里渊区。假定其每个元胞里含有两个传导电子。
- 考虑周期边界条件和弱的库仑势, 画出在前三个布里渊区中的费米面。
- 需要多大的带隙 (和费米能比较), 才能使第三布里渊区没有电子占据, 需要多大的带隙才能使第二布里渊区中没有电子占据。在这两种情况下, 哪种是导体。
- 考虑实空间中的三角晶格, 波函数的零级特征矢量为 $\varphi_0(x, y)$, 一级特征矢量为 $\varphi_1(x, y)$, 给出在最近邻耦合的紧束缚近似下, 薛定谔方程的解的形式。并证

明其能量满足关系 $\varepsilon^2 = \gamma^2 \left(1 + 4 \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y \sqrt{3} a}{2}\right) + 4 \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \right)$, 其

中 γ 表示最近邻的耦合能。

南京大学 2007 年攻读硕士学位研究生入学考试试题(三小时)

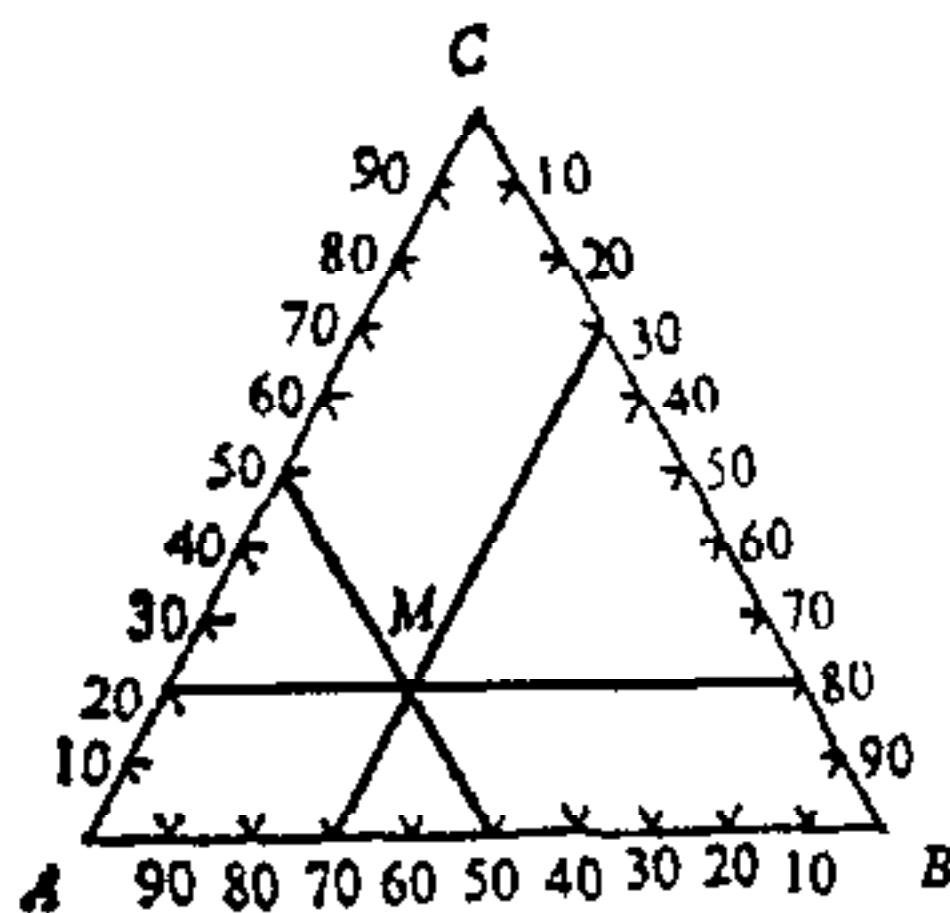
考试科目名称及代码 材料化学基础 848
 适用专业：材料物理与化学、材料学

注意：

1. 所有答案必须写在研究生入学考试答题纸上，写在试卷和其他纸上无效；
2. 本科目允许~~不允许~~使用无字典存储和编程功能的计算器；
3. 原子量：Li:6.941, Co:58.933, Mn:54.938, O:15.999；电子电量： $1.6022 \times 10^{-19} \text{ C}$

一、填空题(30 分，每空 1 分)

1. 下述物理量：T、p、H、U、Q、W，属于强度性质的是：____，____；
属于容量性质的是：____，____；不属于状态函数的是____，____。
2. 服从 $p(V_m - b) = RT$ 状态方程的是实际气体经节流膨胀后温度将____。
3. 固体吸附气体或液体的本质是____。
4. 298 K 有一仅能透过水的渗透膜，将 0.01 mol/L 和 0.001 mol/L 的蔗糖溶液
分开，欲将该体系达平衡需在____溶液上方施加压力为____ Pa。
5. 下图是 A、B、C 三组分系统相图的等边三角形表示法，请写出系统中 M
所代表的系统组成(以摩尔分数表示)： $x_A =$ ____， $x_B =$ ____， $x_C =$ ____。



6. 写出下列常见高分子简写的中文名称：ABS 树脂____，
PE____，PVC____，PVA____。
7. 在恒熵、恒容、不做非膨胀功的封闭体系中，当热力学函数____到达最____值的
状态为平衡状态。

8. 范德华力包括: (1)_____ (2)_____ (3)_____
9. 可逆电池必须满足的条件是 (1)_____ (2)_____
10. 胶体中的电动现象为:_____
11. 实验证明: 两块表面无氧化膜的光滑洁净的金属紧靠一起时会自动粘合在一起。现有两个表面镀铬的宇宙飞船由地面进入外层空间对接时它们将_____自动粘合在一起。已知

10^{-4} Pa, 空气组成与地面相同, 不考虑温度影响

二、 选择题(30 分, 每题 2 分)

- 有一真空绝热瓶, 通过阀门和大气相隔。当阀门打开时, 大气(可视为理想气体)进入瓶内, 此时瓶内气体的温度将 ()
(A) 升高;
(B) 降低;
(C) 不变;
(D) 无法确定。
- 可逆机的效率最高, 在其他条件相同的情况下假设由可逆机牵引火车, 其速率将 ()
(A) 最快;
(B) 最慢;
(C) 中等;
(D) 无法确定。
- 恒温时在 A-B 双液体系统中, 若增加 A 组分使其分压 P_A 上升, 则 B 组分在气相中的分压 P_B 将 ()
(A) 上升;
(B) 下降;
(C) 不变;
(D) 无法确定。
- 一封闭容器内放一杯纯水 A 和一杯糖水 B, 静置足够长时间后发现 ()
(A) A 杯水减少, B 杯水满后不再变化;
(B) A 杯水变成空杯, B 杯水满后溢出;
(C) B 杯水减少, A 杯水满后不再变化;
(D) B 杯水变成空杯, A 杯水满后溢出。

5. 在刚性密闭容器中, 有下列理想气体反应达平衡 $A(g)+B(g)=C(g)$, 若在恒温下加入一定量惰性气体, 则平衡将 ()
- (A) 向右移动;
(B) 向左移动;
(C) 不移动;
(D) 无法确定.
6. $Al_2(SO_4)_3$ 的化学势 μ 与 Al^{3+} 、 SO_4^{2-} 的化学势 μ_+ 、 μ_- 之间的关系为 ()
- (A) $\mu = \mu_+ + \mu_-$;
(B) $\mu = 2\mu_+ + 3\mu_-$;
(C) $\mu = 3\mu_+ + 2\mu_-$;
(D) $\mu = \mu_+ \cdot \mu_-$.
7. 一个充满电的蓄电池以 1.7 V 的输出电压放电, 然后用 2.3 V 电压充电使其恢复原来状态, 则在充放电过程中, 若以电池为体系, 功和热的符号为 ($\Delta U = Q + W$) ()
- (A) $W=0$, $Q=0$;
(B) $W>0$, $Q>0$;
(C) $W>0$, $Q<0$;
(D) $W<0$, $Q<0$.
8. 当发生极化现象时, 两电极的电极电势将发生如下变化 ()
- (A) ϕ_+ 变大, ϕ_- 变小;
(B) ϕ_+ 变小, ϕ_- 变大;
(C) 两者都变大;
(D) 两者都变小.
9. 电解时, 在阳极首先发生氧化反应的是 ()
- (A) 标准还原电势最大者;
(B) 标准还原电势最小者;
(C) 考虑极化后实际析出电势最大者;
(D) 考虑极化后实际析出电势最小者.
10. 某化学反应的方程式为 $2A \rightarrow P$, 则在动力学研究中表明该反应为 ()
- (A) 二级反应;
(B) 基元反应;

- (C) 双分子反应;
(D) 以上都无法确定。
11. 半衰期为 10 天的某放射性元素净重 8 g, 40 天后其净重为 ()
(A) 4 g;
(B) 2 g;
(C) 1 g;
(D) 0.5 g;
12. 在相同的温度和压力, 把一定体积的水分散成许多小水滴: 经过这一变化, 以下性质保持不变的是 ()
(A) 总表面能;
(B) 比表面;
(C) 表面张力;
(D) 液面下的附加压力。
13. 用同一滴管分别滴下 1 cm^3 的 NaOH 水溶液、水、乙醇水溶液, 各自的滴数多少的顺序为 ()
(A) 三者一样多;
(B) 水 > 乙醇水溶液 > NaOH 水溶液;
(C) 乙醇水溶液 > 水 > NaOH 水溶液;
(D) NaOH 水溶液 > 水 > 乙醇水溶液。
14. 外加直流电场于胶体溶液, 向某一电极作定向移动的是 ()
(A) 胶粒;
(B) 胶核;
(C) 胶团;
(D) 紧密层
15. 在等压下, 无论用何手段进行一个 $A+B=C$ 的反应, 若 $\Delta_r H_m > 0$, 则该反应一定为 ()
(A) 吸热反应;
(B) 放热反应;
(C) 无热量变化;
(D) 视反应手段而定。

三、简答题(40 分, 每题 4 分)

- 若在实验室中, 需要制备偶数个碳的烷烃, 应采取何种方法, 并写出反应方程? (4')
- 在集成电路的制备中, 常常要采用光刻胶, 而光刻胶有正、负之分, 试简述正、负性光刻胶与光的相互作用和各自特点? (4')

3. 杠杆规则是相图中重要的规则之一，试简述杠杆规则的含义？(4')
4. 一般说来，同一种物质，其固体的表面能要比液体的表面能大，试解释其原因？(4')
5. 处理废旧轮胎的方法之一是通过液氮冷冻法来进行，试根据所学知识，解释液氮冷冻法处理废旧轮胎所采用的依据？(4')
6. 试估计是否能够像炼铁那样，直接用碳来还原 TiO_2 ？(已知 $\Delta_f G_m^\circ(\text{CO}_2) = -394.38 \text{ kJ/mol}$ ， $\Delta_f G_m^\circ(\text{TiO}_2) = -852.90 \text{ kJ/mol}$)
7. 在胶体中，布朗运动是普遍存在的现象，试简述布朗运动的本质是什么？(4')
8. 在粉料的制备中，均相沉淀法是常采用的一种方法，试简述均相沉淀法，并举一例说明？
9. 在功能薄膜的制备中，金属有机化合物化学气相沉积法(MOCVD)是常采用的一种方法，试简述金属有机化合物化学气相沉积法，并举一例说明？
10. 目前燃料电池的研究是研究热点之一，若要提高以氢气和氧气组成的燃料电池的电动势，可采取什么措施？并说明其原因？

四、ZnO 材料研究目前是一个热点，其中研究较多的是 p 型和 n 型的 ZnO 半导体，若想制备出 p 型和 n 型的 ZnO 半导体，采用什么掺杂方法可分别获得 p 型和 n 型的 ZnO 半导体？并写出相应的缺陷方程？(10')

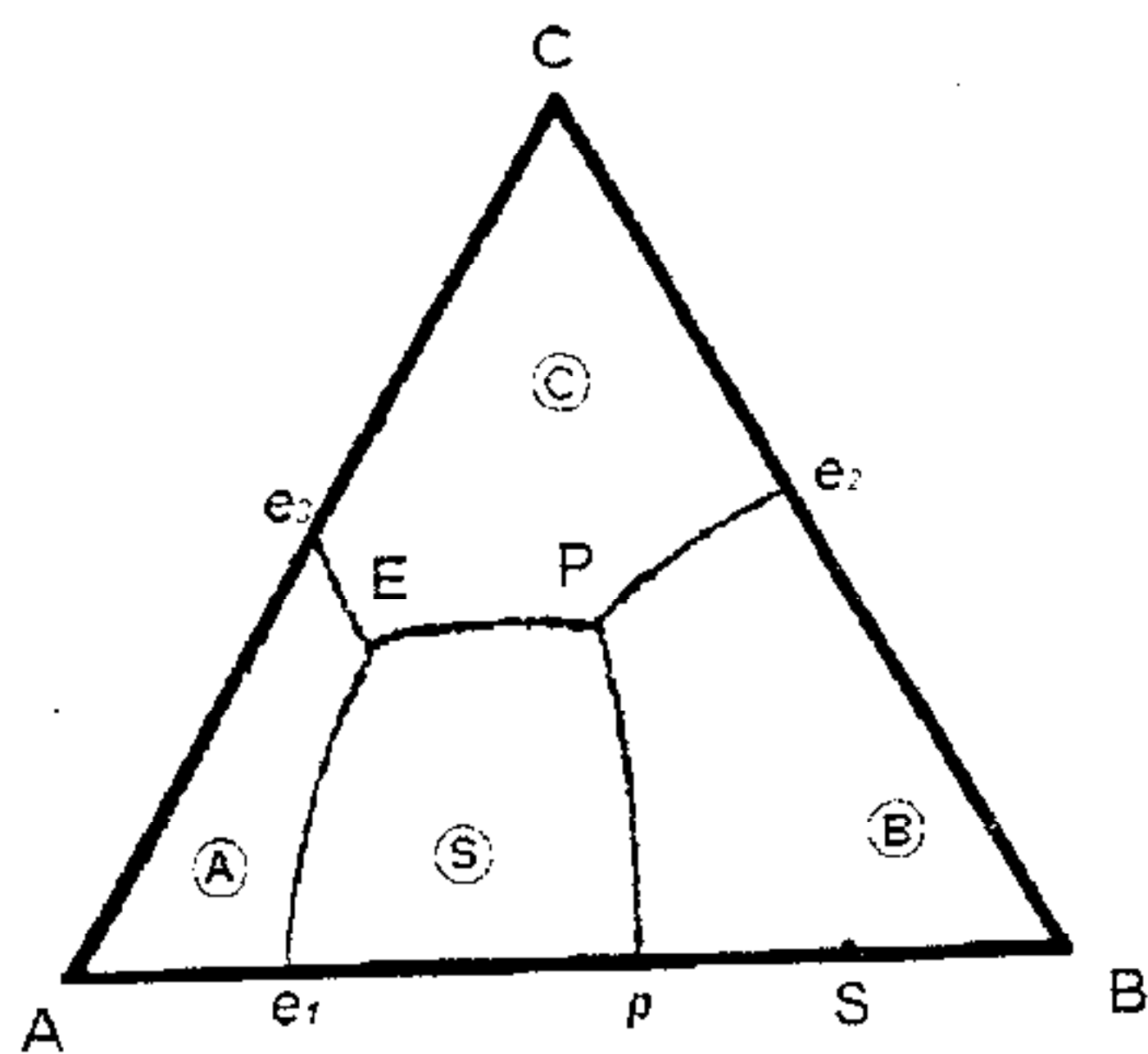
五、某电镀厂欲从镀银废液中回收金属银，废液中 AgNO_3 的浓度为 $1 \times 10^{-2} \text{ mol/kg}$ ，还含有少量的 Cu^{2+} ，今以银为阴极，石墨为阳极用电解法回收金属银，要求银的回收率达 99%，试问阴极电位应控制在什么范围之内？ Cu^{2+} 的浓度应低于多少才不致使 Cu(s) 和 Ag(s) 同时析出？(设所有活度系数均为 1， $\phi_{\text{Ag}^+/\text{Ag}}^\circ = 0.799 \text{ (V)}$ ， $\phi_{\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}}^\circ = 0.342 \text{ (V)}$) (10')

六、分别写出以 LiCoO_2 和 LiMn_2O_4 为正极，C 为负极锂离子电池的正、负极电极反应式及电池总反应式，比较 LiCoO_2 和 LiMn_2O_4 理论电容量的大小；实际使用中， LiCoO_2 和 LiMn_2O_4 的实际电容量分别为 150 mAh 和 115 mAh，解释其不能达到理论电容量的原因？(10')

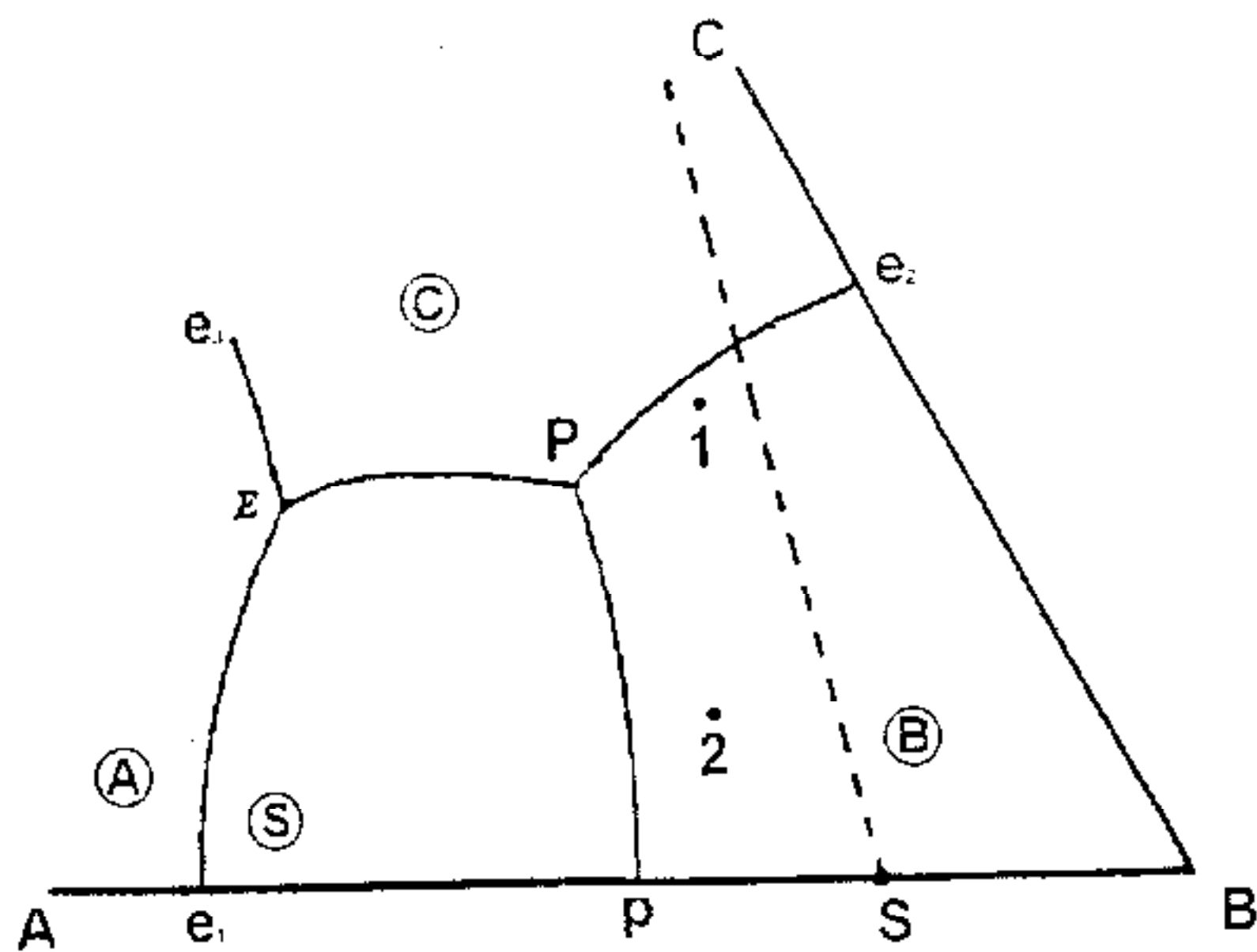
七、在 298.15 K、101.325 kPa 下，将直径为 $1 \mu\text{m}$ 的毛细管插入水中，问需在管内加多大压力才能防止水面上升？若不加额外的压力，让水面上升，达平衡后，管内液面上升多高？已知在该温度下，水的表面张力为 0.072 N/m，水的密度为 1000 kg/m^3 ，设接触角为 0° ，重力加速度 $g = 9.8 \text{ m/s}^2$ 。(10')

八、 下图为生成一个三元化合物的三元相图，图二是图一中富 B 部分的放大图，试问：(10')

- (1) 判断化合物 S 的性质？
- (2) 标出边界曲线的温降方向(转熔界线用双箭头)？
- (3) 指出三元无变点 E、P 的性质？
- (4) 分析图二中点 1、点 2 的结晶路程(需注明液固相组成点的变化及各阶段的相变化)？



图一



图二