

2012 年博士学位研究生入学考试试题

科目代码: 2202 科目名称: 化学与材料学中的物理方法 满分: 100 分

注意: ①认真阅读答题纸上的注意事项; ②所有答案必须写在答题纸上, 写在本试题纸或草稿纸上均无效; ③本试题纸须随答题纸一起装入试题袋中交回!

一、名词解释 (每题 3 分, 共 27 分)

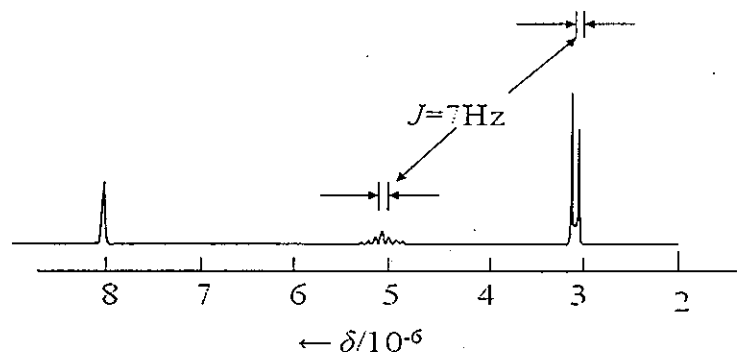
波茨曼分布 振动零点能 弛豫 魔角圆锥 拉曼散射
电子结合能 电子衍射 DTA (紫外) 荧光发射光谱

二、什么是晶体的晶胞? 什么是晶胞参数? 传统晶体共分哪七个晶系, 请用晶胞参数来表示这七个晶系。(10 分)

三、2011 年诺贝尔化学奖授予以色列海法大学的 D. Shechtman 教授, 以表彰他在准晶体研究方面取得的卓越成就。对于“准晶体”你了解多少知识? 请予叙述。(5 分)

四、什么是旋-轨耦合? 旋-轨耦合对 x-光电子能谱 (XPS) 有什么影响? (8 分)

五、分子式为 $C_4H_8O_2$ 的某化合物的 1H NMR 图谱如下, 请确定它的结构式? 简单说明理由。(10 分)



提示: 可能的结构有: $HCOOCH_2CH_2CH_3$, $HCOOCH(CH_3)_2$, $HCOCH_2CH_2OCH_3$, $HCOCH_2OCH_2CH_3$, $CH_3COOCH_2CH_3$, $CH_3COCH_2OCH_3$, $CH_3CH_2COOCH_3$, $CH_3CH_2CH_2COON$, $(CH_3)_2CHCOOH$,

六、ZnO 是立方晶系的晶体, 其 TEM 与 XRD 图如下: (12 分)

- 1) 指出 TEM 图上看到的晶格线是代表什么晶面?
- 2) 从 TEM 和 XRD 中得到该晶体的平均粒径各是多少?

XRD 实验使用 Cu 靶 K_{α} , $\lambda = 0.15418nm$ 。

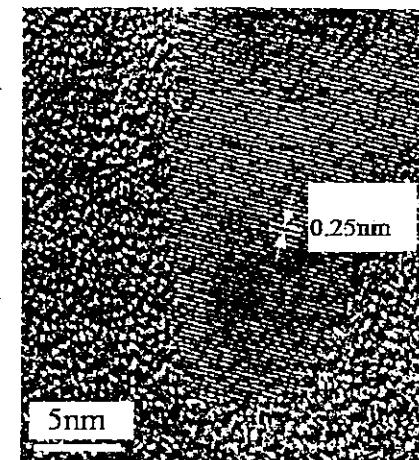
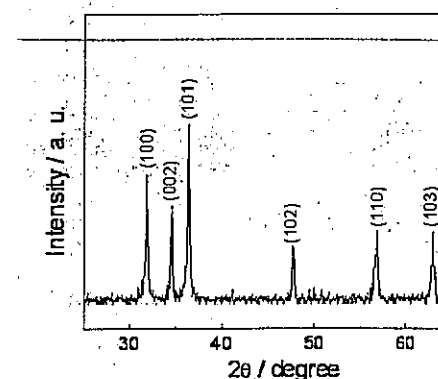
提示: Scherrer 公式如下

$$L = 0.94\lambda / (b \cos \theta)$$

b 为峰宽 (弧度), L 为平均粒径, λ 为波长

布拉格方程为 $2d \sin \theta = \lambda$

(12 分)



峰宽 2°

七、在温度 $27^\circ C$ 时, $1.0g$ 的 CH_3OH 放在磁感应强度 $B_0 = 2.5T$ 的静磁场中, 达到平衡时磁化强度矢量值 z 分量是多少。(8 分)

已知: (^{13}C 的自然丰度为 1.1%)

$$\gamma = 6.726 \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{T}^{-1} \text{ (} ^{13}C \text{ 的旋磁比)}$$

$$\hbar = 6.627 \times 10^{-34} / 2\pi \text{ J} \cdot \text{s} \text{ (普朗克常数)}$$

$$k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \text{ (波兹曼常数)}$$

$$N_0 = 6.023 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1} \text{ (阿伏加的罗常数)}$$

提示: 磁化强度矢量的公式如下

$$M_z = \frac{\gamma^2 \hbar^2 B_0}{4kT} N$$

(N 为体系内磁性核的数目, T 为绝对温度)

八、请在下表的空白格中填上适当的测试方法。(只要写出方法的中文名称或英文缩写, 可以有多种方法, 在答题纸上不必列表) (20 分)

方法 \ 样品	目的	测定分子量	确定分子结构	确定晶体单晶结构	确定是否是层状化合物	确定表面层的元素组成	确定平均粒径	确定比表面积
有机物					×	×	×	×
有机物高分子化合物				×	×	×	×	×
固体金属氧化物		×	×					