
ΧΗΜΕΙΑ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ

ΘΕΜΑΤΑ

1. Το ιοντικό οξείδιο CaO κρυσταλλώνεται σε δομή ορυκτού άλατος (με σταθερά Madelung: $A_M = 1.75$, και εκθέτη του Born: $n = 9$) με μήκος δεσμού ισορροπίας Ca-O: $r_0 = 0.240 \text{ nm}$. Αν η δυναμική ενέργεια του κρυσταλλικού πλέγματος, U_L , συναρτήσει της απόστασης μεταξύ πλησιέστερων ιόντων, δίνεται από τη σχέση:

$$U_L(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{N_A A_M |z_c z_a| e^2}{r} + \frac{N_A B}{r^n}$$

(με z_c και z_a τα σθένη φορτίου κατιόντων και ανιόντων, αντίστοιχα, και B θετική σταθερά), να υπολογίσετε την πλεγματική ενέργεια του κρυστάλλου CaO.

2. a) Να δειχτεί ότι για τις ισαποστάσεις d των πλεγματικών επιπέδων σε ένα απλό κυβικό πλέγμα, ισχύει: $d_{100} : d_{110} : d_{111} = \sqrt{6} : \sqrt{3} : \sqrt{2}$.

β) Να υπολογιστεί η πλεγματική παράμετρος, a , κυβικής δομής, αν η γωνία Bragg για ανάκλαση πρώτης τάξης από επίπεδα (111) είναι 30° , όταν χρησιμοποιείται ακτινοβολία X με μήκος κύματος 1.75 \AA .

3. Η κυβική μοναδιαία κυψελίδα του οξειδίου του νικελίου, NiO, έχει μήκος πλευράς $a=0.417 \text{ nm}$ και περιέχει τέσσερα άτομα νικελίου και τέσσερα άτομα οξυγόνου. Δοθέντος ότι το κλάσμα των αταξιών Schottky στον κρύσταλλο του NiO, στους 1000°C , είναι 1.25×10^{-4} , να υπολογίσετε την αριθμητική πυκνότητα (m^{-3}) των κενών δομικών θέσεων Ni στον κρύσταλλο, στην παραπάνω θερμοκρασία.

4. Τα μέταλλα A και B, με κανονικά σημεία τήξης T_A και T_B αντίστοιχα, είναι πλήρως αναμίξιμα τόσο στην υγρή όσο και στη στερεά κατάσταση. Το σημείο τήξης μίγματος A+B μειώνεται με προσθήκη του συστατικού B και αυξάνεται με προσθήκη του A.

α) Για το μίγμα A+B, να σχεδιαστεί πιθανό διάγραμμα ισορροπίας φάσεων [θερμοκρασίας (T) – κατά μάζα σύστασης (% κ.β.)] για ατμοσφαιρική πίεση, και να καθοριστούν ποιοτικά οι φάσεις σε κάθε περιοχή του διαγράμματος.

β) Για μίγμα ολικής σύστασης I % κ.β. σε συστατικό A, και για (αυθαίρετη) θερμοκρασία T εντός της διφασικής περιοχής μερικής τήξης, να γραφούν οι σχέσεις υπολογισμού της σύστασης κάθε φάσης, καθώς και της ποσοτικής αναλογίας αυτών.

Δεδομένα

$$N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}, (1/4\pi\epsilon_0) = 8.99 \times 10^9 \text{ J}\cdot\text{C}^{-2}\cdot\text{m}, e = 1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$$

M. Μπουρουσιάν

Εργαστήριο Γενικής Χημείας, Τομέας Χημικών Επιστημών Σχολής Χημικών Μηχανικών