

ΧΗΜΕΙΑ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ

ΘΕΜΑΤΑ

1. α) Το κράμα χαλκού-χρυσού (Cu-Au) είναι χαρακτηριστικό παράδειγμα συστήματος με μετάπτωση τάξης-αταξίας. Εάν οι θέσεις των ατόμων στην τακτική κυβική δομή ενός κράματος Cu-Au είναι: Au: (0, 0, 0), Cu: (0, ½, ½), (½, 0, ½), (½, ½, 0), να σχεδιαστεί η μοναδιαία κυψελίδα και να καθοριστεί η τυπική μονάδα του.

β) Σε θερμοκρασία δωματίου, το άφνιο (Hf) υιοθετεί δομή HCP με παραμέτρους πλέγματος $a=0.3195$ nm, και $c=0.5051$ nm. Να εκτιμηθεί η μεταλλική ακτίνα του Hf σε αυτή τη δομή.

2. Το ταντάλιο (Ta) έχει κυβική χωροκεντρωμένη δομή με $a = 0.3303$ nm. Δείγμα Ta σε σκόνη ακτινοβολείται με ακτίνες X μήκους κύματος 0.1542 nm. Ποιες είναι οι γωνίες που σχηματίζουν οι δέσμες περίθλασης από κρυσταλλογραφικά επίπεδα (110), (211) και (310) με τη διεύθυνση της προσπίπτουσας.

3. Για τις δομές γλωριούχου καισίου, φθορίτη και αρσενικούχου νικελίου, να σχεδιαστούν προβολές των μοναδιαίων κυψελίδων και να σημειωθούν οι κλασματικές συντεταγμένες των ατόμων.

4. Να παραχθεί μια γενική σχέση μεταξύ του παράγοντα ιοντικής στοιβαξης (IPF) της δομής τύπου γλωριούχου νατρίου και του λόγου των ιοντικών ακτίνων (r/R). Να προσδιορισθούν η ελάχιστη και η μέγιστη τιμή του λόγου r/R για τις οποίες αναμένεται να ισχύει η παραχθείσα σχέση.

5. Να εκτιμηθεί η διπλή ηλεκτρονική συγγένεια (A) και η ενθαλπία προσάρτησης δύο ηλεκτρονίων [$\Delta H(O^2)$] στο οξυγόνο (O) μέσω θερμοχημικού κύκλου για το οξείδιο του μαγνησίου (MgO), με βάση τα ακόλουθα δεδομένα (όλες οι τιμές είναι σε $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$):

$$\Delta H_v^\circ [\text{Mg}(s)] = 147.7 \text{ (ενθαλπία εξαχνωσης)}$$

$$D(\text{O}-\text{O}) = 498 \text{ (ενέργεια διάστασης μορίου οξυγόνου)}$$

$$I_1(\text{Mg}) = 736 \text{ (ενέργεια ιονισμού)}$$

$$I_2(\text{Mg}) = 1452 \text{ (ενέργεια ιονισμού)}$$

$$A_1(\text{O}) = 141 \text{ (ηλεκτρονική συγγένεια)}$$

$$\Delta H_f^\circ [\text{MgO}(s)] = -601.7 \text{ (ενθαλπία σχηματισμού)}$$

$$U_L [\text{MgO}(s)] = -3836 \text{ (πλεγματική ενέργεια)}$$