

ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN

ĐỀ KIỂM TRA CUỐI KỲ
HỌC KỲ II NĂM HỌC 2021-2022

Môn thi: Cơ sở hóa học vật liệu (CHE1065)
Số tín chỉ: 03
Thời gian làm bài 90 phút

Câu 1 (3 điểm)

- Vẽ ô cơ sở của mạng lập phương tâm mặt (fcc);
- Xịnh số nguyên tử trong một ô cơ sở, xác định số phối trí của mỗi nguyên tử của mạng fcc;
- Tính số hốc bát diện (O) và số hốc tứ diện (T) trong một ô cơ sở mạng fcc;
- Tìm mối liên hệ giữa thông số mạng a và bán kính nguyên tử R ;
- Hãy chỉ ra rằng mức độ chắc đặc của mạng fcc là 0.74;
- Gắn hệ tọa độ xyz vào ô cơ sở trên và biểu diễn vị trí mặt (110) trong ô cơ sở này;

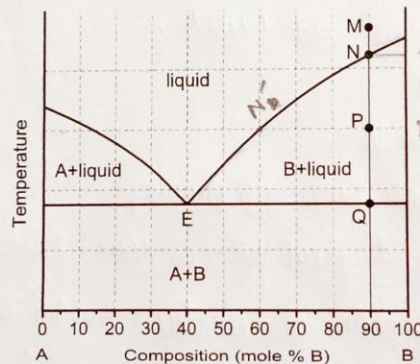
Câu 2 (2 điểm)

Fe có ô cơ sở thuộc hệ lập phương chứa 4 nguyên tử / ô cơ sở và được đại diện ở các vị trí:

$$0\ 0\ 0 \quad \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 0 \quad \frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{2} \quad 0 \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}$$

- Hãy biện luận và vẽ ô cơ sở của Fe. Ô cơ sở này thuộc kiểu mạng nào (đơn giản, tâm khối, hay tâm mặt)?
- Cho biết Fe có bán kính nguyên tử $R = 0.124$ nm, khối lượng mol nguyên tử $M = 55.85$ g/mol. Xác định khối lượng riêng ρ của Fe theo g/cm³.

Câu 3 (3 điểm)



Trong giản đồ pha của hệ hai cấu tử, làm nguội rất chậm một hỗn hợp lỏng chứa 10% mol A và 90% mol B từ điểm M.

- Xác định thành phần pha của hệ tại điểm N. Tính % mol của mỗi pha tại điểm này (sử dụng quy tắc đòn bẩy).
- Xác định thành phần pha của hệ khi làm nguội hệ đến điểm P. Tính % mol của mỗi pha tại P theo quy tắc đòn bẩy.
- Xác định thành phần của pha lỏng tại điểm P (% mol A và B)
- Pha mới nào xuất hiện khi làm nguội hệ đến điểm Q?
- Quá trình kết tinh xảy ra như thế nào khi giữ nhiệt độ ngay dưới điểm Q.

Câu 4 (2 điểm)

Tinh thể FeO có cấu trúc kiểu muối ăn với hằng số mạng $a = 0.4299$ nm.

- Xác định khối lượng riêng ρ_{LT} theo g/cm³
- Thực nghiệm xác định được khối lượng riêng của FeO là $\rho_{TN} = 5.57$ g/cm³. Từ sự khác biệt giữa ρ_{LT} và ρ_{TN} , hãy cho biết kiểu khuyết tật của sắt (II) oxit; Tính toán và viết công thức chính xác của oxit này.

Hết

Câu 1:

a, vẽ jcc

b,

Số nguyên tử trong 1 ô cơ sở: $4 = \frac{1}{8} \cdot 8 + 6 \cdot \frac{1}{2}$

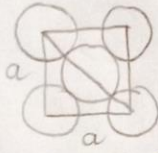
Số phối trí = 12

c,

Hố tứ diện là 8

Hố bát diện là $1 + 12 \cdot \frac{1}{4} = 4$

d,



$$a\sqrt{2} = 4r \Rightarrow r = \frac{a\sqrt{2}}{4}$$

e, số quả cầu trong 1 ô cơ sở: $6 \cdot \frac{1}{2} + 8 \cdot \frac{1}{8} = 4$

$$\frac{\text{Tổng thể tích quả cầu}}{\text{Tổng thể tích 1 ô cơ sở}} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a\sqrt{2}}{4}\right)^3}{a^3} = 0,74$$

f) ABCD là hình biểu diễn mặt (110).

Câu 2. a) Hình vẽ như câu 1.

Vị trí 000 đóng góp $\frac{1}{8}$ phân tử

\Rightarrow có $1/1/8 = 8$ vị trí đỉnh hình lập phương

Vị trí $0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ đóng góp $\frac{1}{2}$ phân tử \Rightarrow có $1/1/2 = 2$ vị trí ở tâm mặt nắp và đáy

Vị trí $\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$ đóng góp $\frac{1}{2}$ phân tử \Rightarrow có $1/1/2 = 2$ vị trí ở 2 mặt bên hình lập phương

Vị trí $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$ đóng góp $\frac{1}{2}$ phân tử \Rightarrow có $1/1/2 = 2$ vị trí ở mặt trước và sau HLP

\Rightarrow hình vẽ. Từ hình vẽ, ta thấy ô cơ sở này thuộc kiểu lập phương tâm mặt.

b) $R = 0,124 \text{ nm} = \frac{a\sqrt{2}}{4} \Rightarrow a = 0,351 \text{ nm} = 0,351 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$

$M = 55,85 \text{ g/mol}$

$$\rho = \frac{n \cdot M}{N_A \cdot a^3} = \frac{4 \cdot 55,85}{6,023 \cdot 10^{23} \cdot (0,351 \cdot 10^{-7})^3} = 8,58 \text{ g/cm}^3$$

Câu 3.

Tại điểm N, tinh thể chất rắn đầu tiên xuất hiện như vẫn chứa thặng dư có.
 Coi như số pha $P = 2$; số bậc tự do $F = 1$.

$$\% \text{ Rắn A} = \frac{0}{N_x} = 0$$

$$\% \text{ Lỏng} = 100\%$$

Tại điểm P: thành phần pha lỏng phụ thuộc nhiệt độ.
 $P = 2$; $F = 1 \Rightarrow$ thành phần pha lỏng buộc phải chạy theo NN'

$$\text{Rắn (100\% B, 0\% A)} = \frac{N'P}{N'x'} = \frac{30}{40} = 0,75$$

$$\text{Lỏng (40\% A, 60\% B)} = \frac{Px'}{N'x'} = \frac{10}{40} = 0,25$$

Tại điểm Q, pha lỏng chạy từ N' đến E
 Có $P = 3$ (pha lỏng, rắn A, rắn B kết tinh) $\Rightarrow F = 0$

Pha mới xuất hiện rắn A kết tinh.
 Khi giữ nhiệt độ ngay dưới điểm Q thì quá trình kết tinh xảy ra chậm do đây là phản ứng dị thể.

Câu 4. Đổi $0,4299 \text{ cm} = 0,4299 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$

$$\rho_{LT} = \frac{n \cdot M}{N_A \cdot a^3} = \frac{4 \cdot (56 + 16)}{6,023 \cdot 10^{23} \cdot (0,4299 \cdot 10^{-7})^3} = 6,02 \text{ g/cm}^3$$

$$\text{Ta thấy } \rho_{LT} = 6,02 \text{ g/cm}^3 \neq 5,57 \text{ g/cm}^3 = \rho_{TN}$$

\Rightarrow Đây là kiểu khuyết tật Schottky.

Giả sử có x Fe bị bắt ra khỏi tinh thể $\Rightarrow x$ O bị bắt ra khỏi
 \Rightarrow Công thức oxit chính xác là $\text{Fe}_{1-x} \text{O}_{1-x} V_x^{\text{Fe}} V_x^{\text{O}}$

$$M = 72(1-x) \text{ g/mol}$$

$$\frac{\rho_{TN}}{\rho_{LT}} = \frac{\cancel{n} \cdot \cancel{M_{TN}}}{N_A \cdot V} \cdot \frac{n \cdot M_{TN}}{N_A \cdot V} = \frac{M_{TN}}{M_{LT}}$$

$$e) \frac{5,57}{6,02} = \frac{72(1-x)}{72} \Leftrightarrow x = 0,075$$

\Rightarrow Công thức chính xác là $\text{Fe}_{0,925} \text{O}_{0,925} V_{0,075}^{\text{Fe}} \cdot V_{0,075}^{\text{O}}$