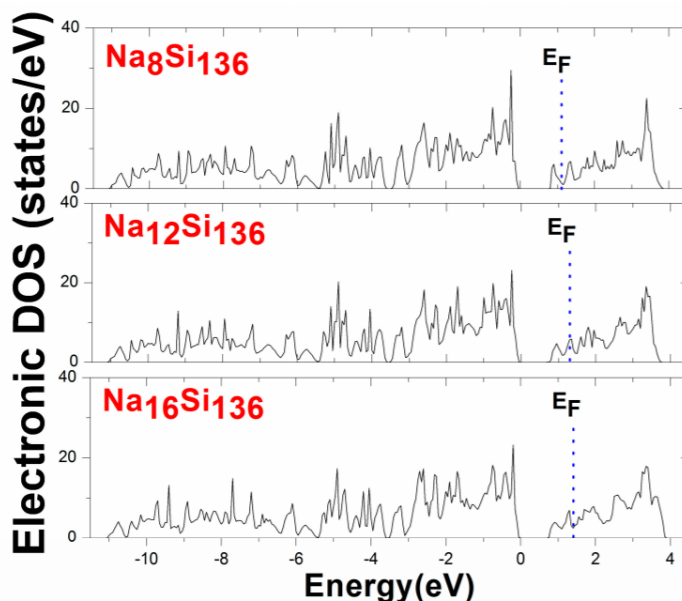


Домашняя контрольная работа по курсу «Химия твердого тела».

- Даны длины сторон элементарных ячеек веществ, имеющих структуру каменной соли: ScP (5.312 Å), YP (5.652 Å), NdP (5.682 Å), LaP (6.025 Å). Определите радиус катиона для всех случаев. Чтобы рассчитать радиус P^{3-} , предположите, что в ScP ионы P^{3-} находятся в прямом контакте.
- Объясните, для какого соединения из указанных ниже расчеты энергии кристаллической решетки при учете чисто кулоновских взаимодействий будут ближе к экспериментальным данным? Существенно различаться? Рассмотрите соединения NaCl, AgCl (оба – структура каменной соли), AuCl (оригинальный структурный тип с зигзагообразными цепями Cl-Au-Cl-Au...).

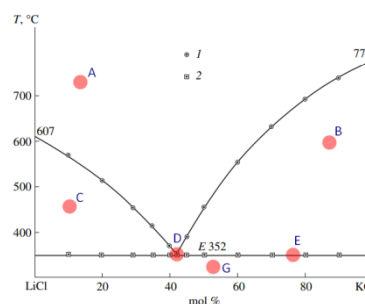
- На рисунке приведена плотность состояний для соединений Na_xSi_{136} – т.н. клатратов, в которых сложный ковалентно-связанный каркас кремния инкорпорирует Na^+ . Определите:

- тип проводимости соединения
- характер изменения электронной структуры вблизи уровня Ферми с увеличением содержания Na.
- предположите, что произойдет при уменьшении содержания Na до нуля.



- На рисунке ниже изображена фазовая диаграмма системы LiCl-KCl. Ответьте на следующие вопросы:

- Как изменилась бы диаграмма, если бы для KCl/LiCl существовали бы твердые растворы с граничными составами $Li_{0.9}K_{0.1}Cl$ и $Li_{0.15}K_{0.85}Cl$?
- Каков фазовый состав и число степеней свободы в отмеченных точках?
- Как будет меняться фазовый состав системы при охлаждении ее из точки A?



Phase diagram of the lithium chloride-potassium chloride system: (1) OPA data and (2) TA data. Regions of solid solutions near the components are not shown.

- Перед Вами поставили задачу: получить пирозлектрик допированием SeO_2 . Соединение должно остаться изолятором, но при этом приобрести пирозлектрические свойства. Предложите:

- допирующие агенты (обязательно обоснуйте выбор!)
- план эксперимента
- план исследования полученных материалов

Значения ионных радиусов для решения первой части этой задачи – на <http://www.webelements.com>