

Zadania projektowe

Zadanie 1 – wiązania chemiczne (6p)

W plikach *zad1_wch_n.txt*, gdzie *n* to numer Twojego zestawu, znajdują się dane numeryczne. Pierwsza kolumna zawiera odległość wyrażoną w Å, druga – wartość potencjału pewnego wiązania chemicznego przy tej odległości (w eV).

Wykreśl estetyczną zależność potencjału od odległości. Określ:

- równowagową długość wiązania (w Å),
- wartość energii wiązania (w eV),
- stałą siłową wiązania (w N/m),
- współczynnik anharmoniczności (w N/m²) oraz współczynnik rozszerzalności cieplnej materiału (w 1/K).

Aby określić stałą siłową i współczynnik anharmoniczności, dokonaj dopasowania odpowiedniego wielomianu (i w odpowiednim zakresie danych) do danych numerycznych. Zapisz, wraz ze współczynnikami, postać wielomianu, który otrzymałeś/otrzymałaś. Na wykresie potencjału od odległości umieść także krzywą dla dopasowanego wielomianu.

Zadanie 2 – testy ogniwa litowego (7p)

Przedstaw na estetycznym wykresie krzywą rozładowania baterii litowej z katodą z krystalizowanego szkła $90\text{V}_2\text{O}_5 \cdot 10\text{B}_2\text{O}_3$. Dane znajdują się w pliku *zad2_bat_n.txt*, gdzie *n* – numer Twojego zestawu. Pierwsza kolumna zawiera czas (w s), druga – napięcie (w V). Natężenia prądu oraz masy materiału aktywnego zostały podane w poniższej tabeli. Określ teoretyczną i doświadczalną pojemność grawimetryczną badanej katody. Jaką część pojemności teoretycznej pojemności grawimetrycznej stanowi doświadczalna? Ile wynosi nominalne napięcie ogniwa? Wykreśl krzywą różniczkową i ustal wartości napięć, dla których zachodzi interkalacja kolejnych moli litu.

Zakładamy, że procesie rozładowania ogniwa interkalowane są 3 mole jonów litu na jeden mol V_2O_5 (B_2O_3 nie bierze udziału w interkalacji, poprawia jedynie przewodnictwo jonowe materiału i umożliwia otrzymanie szkła).

Zestaw	1	2	3	4	5
Prąd [μA]	8.89	16.59	38.71	92.04	162.74
Masa [mg]	2.25	2.10	1.96	2.33	2.06

Zadanie 3 – dyfraktometria rentgenowska (7p)

Dla struktury krystalicznej wskazanego materiału (patrz tabela) oblicz położenia maksimów dyfrakcyjnych w zakresie kątów $20^\circ \leq 2\Theta \leq 90^\circ$ dla źródła o długości fali $\lambda = 1.4767 \text{ Å}$. Uwzględnij wpływ czynnika struktury na występowanie maksimum dyfrakcyjnego. Wyniki (dla rodzin płaszczyzn) przedstaw w tabeli o kolumnach: *h*, *k*, *l*, *d_{hkl}*, *2Θ*, *F* (uwzględnij także te maksima, które są wygaszane). Spośród dyfraktogramów zawartych w plikach *zad3_xrd_n.txt* wskaż ten, który jest dyfraktogramem „Twojego” kryształu. Odpowiedź uzasadnij (np. rysunkiem z zaznaczonymi pasującymi maksimami dyfrakcyjnymi). W plikach *zad3_xrd_n.txt* pierwsza kolumna zawiera kąty *2Θ*, druga – intensywność sygnału.

Zestaw	Pierwiastek	Struktura	Stała sieciowa [Å]
1	Platyna (Pt)	fcc	3.92
2	Wanad (V)	bcc	3.02
3	Pallad (Pd)	fcc	3.89
4	Molibden (Mo)	bcc	3.15
5	Nikiel (Ni)	fcc	3.52

Zadanie 4 – przewodnictwo elektryczne (7p)

Metodą spektroskopii impedancyjnej zmierzono przewodność elektryczną materiału katodowego typu NASICON. W plikach *zad4_is_n.txt* znajdziesz otrzymane dane pomiarowe. Pierwsza kolumna danych zawiera temperaturę (w skali Celsjusza), druga – zmierzony opór elektryczny (w omach). Wyznacz wartości przewodności właściwej materiału w funkcji temperatury, tj. $\sigma(T)$ oraz wykreśl ją w odpowiednim układzie współrzędnych, celem sprawdzenia, czy spełnia ona zależność Arrheniusa. Rozmiary próbki podane zostały w poniższej tabeli. Wyznacz wartość energii aktywacji oraz podaj wartości przewodności właściwej w temperaturze 25 °C (z interpolacji lub ekstrapolacji dopasowanej prostej).

Uwaga! W wyższej temperaturze dane w niektórych zestawach mogą odbiegać od liniowości w skali Arrheniusa – oznacza to zmianę mechanizmu przewodnictwa. Należy wówczas dopasować możliwie długi odcinek od strony niskiej temperatury.

Zestaw	Grubość próbki [mm]	Powierzchnia próbki [mm ²]
1	0.5	23.6
2	0.8	10.1
3	1.04	18.9
4	0.56	9.8
5	1.01	25.6

Zadanie 5 – nanostruktury półprzewodnikowe (7p)

Zaprojektuj nanostrukturę półprzewodnikową opartą na studni kwantowej, która, dzięki zjawisku elektroluminescencji, emituje światło o długości fali λ . Dobierając materiały uwzględnij dopasowanie stałych sieci poszczególnych warstw. W obliczeniach użyj wartości stanów energetycznych dla prostokątnej studni kwantowej o nieskończonym potencjale. Pożądaną długość fali świecenia oblicz według wzoru: $\lambda = [i(\bmod 6) + 2] \cdot 100 + i(\bmod 100)$ [nm], gdzie i – numer albumu. Na jaki kolor świeci zaprojektowana struktura?

Aby dokonać wyboru materiałów, posłuż się dołączonymi wykresami prezentującymi stałe sieci i przerwy energetyczne różnych półprzewodników.

Zadanie 6 – analiza termiczna (6p)

Przedstaw na estetycznym wykresie krzywą DSC materiału szklistego. Dane zawarte są w pliku *zad6_dsc_n.txt*, gdzie n – wybrany numer zestawu. Pierwsza kolumna zawiera temperaturę (w °C), druga – sygnał mierzony w metodzie DSC. Zidentyfikuj i oznacz na wykresie występujące w materiale przemiany. W tabeli zestaw charakterystyczne dla zaobserwowanych przemian temperatury. Pokrótce opisz sposób ich oszacowania/wyznaczenia. Wyznacz ciepła przemian.

Wiązania chemiczne (6p)		
1	Wykreślenie (na jednym wykresie) krzywej $U(r)$ oraz dopasowania. Oznaczenie wykresu (legenda, poprawne jednostki i opisy osi)	1
2	Określenie równowagowej długości wiązania i energii wiązania	1
3	Opisanie sposobu wyznaczenia powyższych wielkości	1
4	Określenie stałej siłowej wiązania oraz współczynnika anharmoniczności	1
5	Opisanie sposobu wyznaczenia powyższych wielkości	1
6	Wyznaczenie współczynnika rozszerzalności cieplnej	0.5
7	Podanie postaci wielomianu, który został użyty do dopasowania zależności $U(r)$	0.5
Ogniwa elektrochemiczne (7p)		
1	Przeliczenie danych na pojemność grawimetryczną baterii (podanie odpowiedniego wzoru z wyjaśnieniem)	1
2	Wykreślenie krzywej rozładowania i oznaczenie wykresu (poprawne jednostki i opisy osi)	1
3	Obliczenie teoretycznej i doświadczalnej pojemności grawimetrycznej katody	1
4	Określenie, jaką część pojemności teoretycznej stanowi doświadczalna	0.5
5	Wyznaczenie nominalnego napięcia ogniwa	1
6	Wykreślenie krzywej różniczkowej i oznaczenie wykresu (poprawne jednostki i opisy osi)	1
7	Wskazanie napięć interkalacji na krzywej i podanie ich wartości	1.5
Dyfraktometria rentgenowska (7p)		
1	Wskazanie (wraz ze zwięzłym opisem) używanych wzorów	2
2	Określenie ogólnego wzoru na czynnik struktury dla danej struktury	1
3	Obliczenie i zestawienie w tabeli położenia maksimów interferencyjnych	1.5
4	Obliczenie, dla danych z tabeli, czynnika struktury i wyróżnienie niewygaszonych maksimów	1.5
5	Wykreślenie (na jednym wykresie) teoretycznego i doświadczalnego dyfraktogramu i oznaczenie wykresu (poprawne jednostki i opisy osi)	1
Przewodnictwo elektryczne (7p)		
1	Wyznaczenie współczynnika kształtu próbki ($k = l/S$)	0.5
2	Wykreślenie danych w odpowiednich współrzędnych, oznaczenie wykresu (jednostki i opisy osi)	2
3	Dopasowanie prostej i wyznaczenie parametrów dopasowania	1
4	Opis linearyzacji funkcji wykładniczej, powiązanie wielkości fizycznych z funkcji wykładniczej z parametrami funkcji liniowej	1
5	Obliczenie energii aktywacji	1
6	Obliczenie wartości przewodności w 25 °C	1.5
Nanostruktury półprzewodnikowe (7p)		
1	Wybór materiałów na studnię z uwzględnieniem ich przerw energetycznych i stałych sieciowych, odpowiedni komentarz uzasadniający wybór	4
2	Określenie grubości studni	2
3	Rysunek – schemat struktury	0.5
4	Wskazanie koloru emitowanego światła	0.5
Analiza termiczna (6p)		
1	Wykreślenie krzywej, oznaczenie wykresu (jednostki i opisy osi)	1
2	Zidentyfikowanie przemian termicznych na wykresie	1
3	Wyznaczenie temperatur charakterystycznych i zwięzły opis sposobu wyznaczenia	2
4	Zaznaczenie temperatur charakterystycznych na wykresie	1
5	Obliczenie ciepła przemian	1