

Wstęp do fizyki ciała stałego - projekt

Jan Biały

Styczeń 2024

Wstęp do fizyki ciała stałego		Projekt 1, zestaw 5			
(Jan Biały)		e-mail:	01169730@pw.edu.pl		
data:	11.01.2024	nr indeksu:	323614	grupa:	Z1
Oświadczam, że jestem jedynym autorem/jedyną autorką niniejszego projektu. Jestem świadomy/świadoma odpowiedzialności w przypadku podania fałszywej informacji. (podpis studenta)					

Cel projektu

Celem projektu było utrwalenie wiedzy nabytej na ćwiczeniach oraz wykładach z przedmiotu Wstęp do fizyki ciała stałego. Ten dokument jest sprawozdaniem z wykonania zadań projektowych zadanych przez prowadzącego przedmiot.

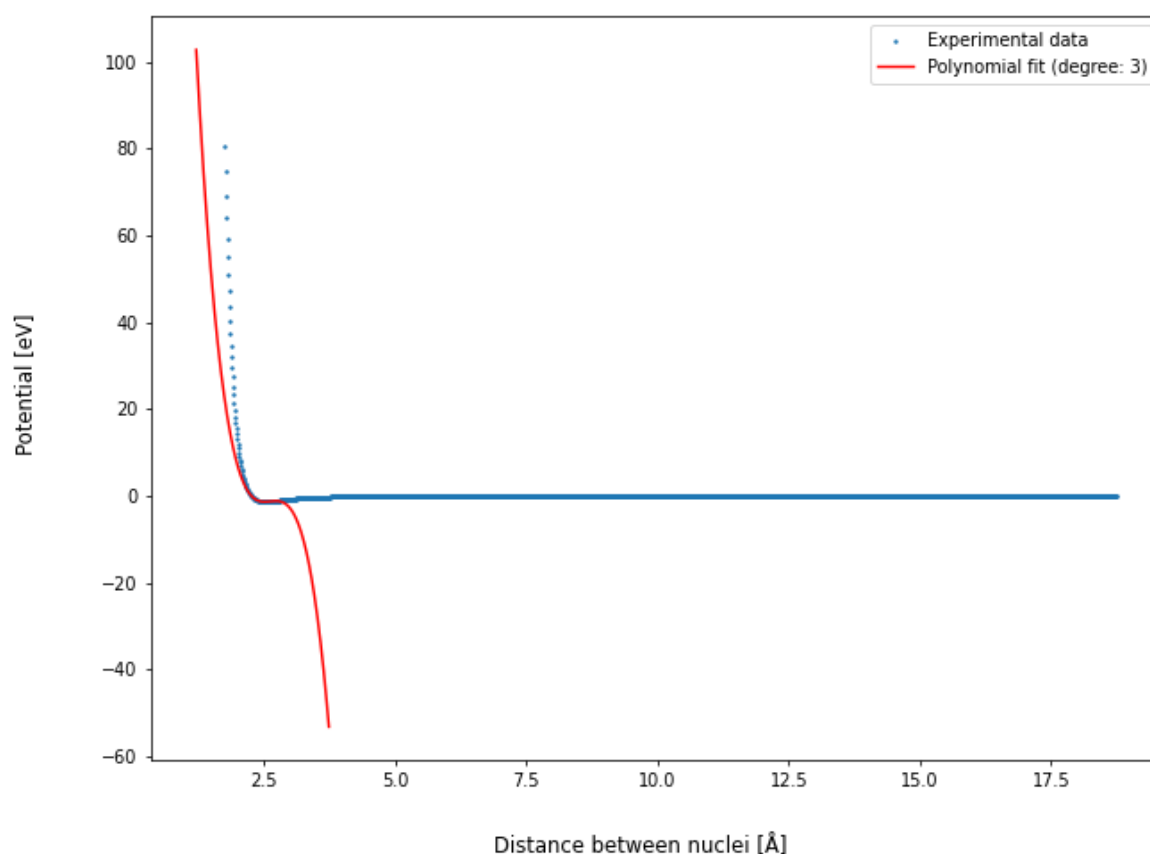
Zadanie 1

W tym zadaniu należało wykreślić zależność odległości między jądrami atomowymi od potencjału pewnego wiązania chemicznego na podstawie danych numerycznych zawartych w pliku *zad1_wch_n.txt* oraz przeanalizowanie tych danych w celu wyznaczenia:

- równowagową długość wiązania r_0 w [\AA],
- wartość energii wiązania $U(r_0)$ w [eV],
- stałą siłową wiązania k w [$\frac{N}{m}$],
- współczynnik anharmoniczności γ w [$\frac{N}{m^2}$]

Do wyznaczenia powyższych danych należało dopasować odpowiedni wielomian do wykresu danych numerycznych z analizowanego pliku.

Chart of the electric potential dependence on the distance between atomic nuclei

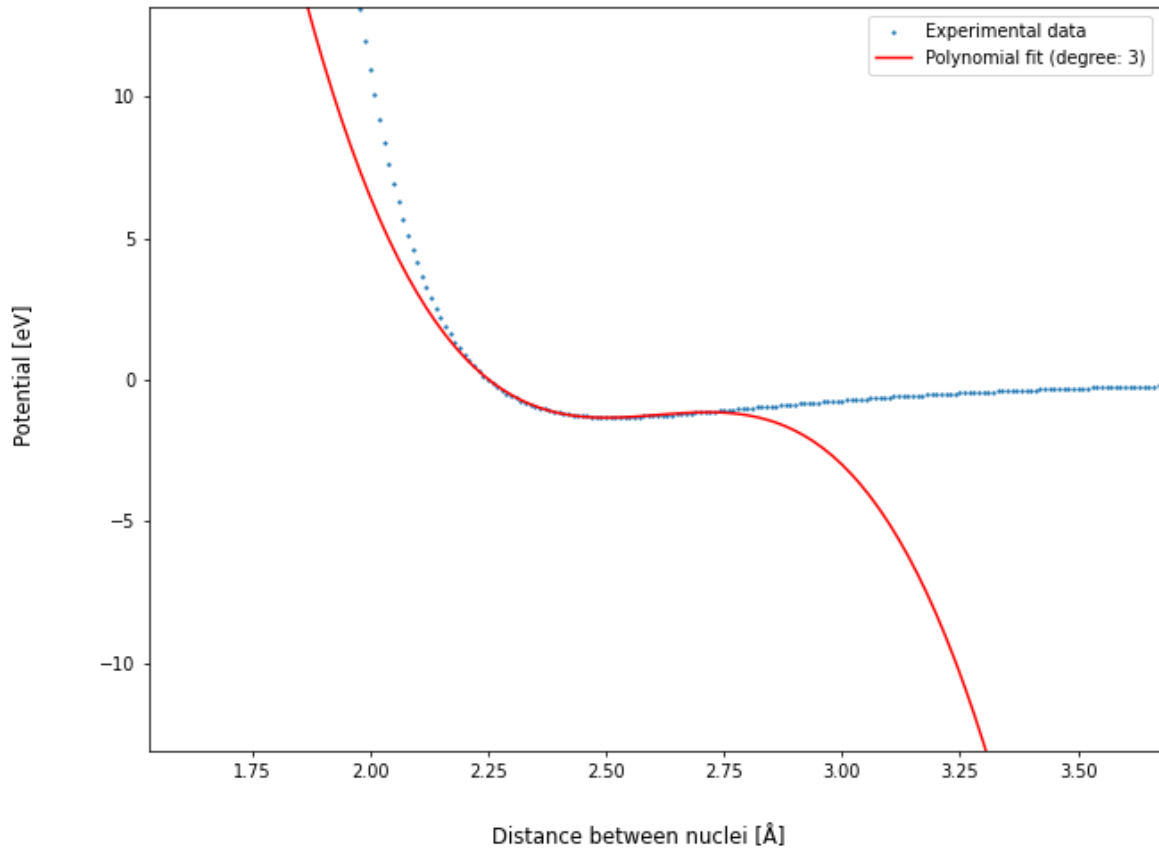


Rysunek 1: Wykres zależności potencjału analizowanego wiązania chemicznego od odległości między jądrami atomowymi.

Minimum tej zależności przypadło na punkt (2,52; -9131898489). Wartość współrzędnej x tego punktu oznacza wartość równowagowej długości wiązania r_0 zaś współrzędna y tego punktu jest wartością energii wiązania $U(r_0)$ zatem.

- $r_0 = 2,52[\text{\AA}]$
- $U(r_0) = -9131898489[\text{eV}]$

Chart of the electric potential dependence on the distance between atomic nuclei



Rysunek 2: Wykres zależności potencjału analizowanego wiązania chemicznego od odległości między jądrami atomowymi (zbliżenie na dopasowanie wielomianu do wykresu).

Generacja jak i dopasowanie wielomianu odbyło się przy użyciu programu DataPyTool własnego autorstwa. Do wykresu danych dopasowano wielomian trzeciego stopnia o ogólnym wzorze $ax^3 + bx^2 + cx + d$. Wielomian dopasowano na przedziale od 45 do 150 numeru pomiaru czyli na przedziale (2,2;2,55) odległości między jądrami atomowymi.

Dopasowany do danych wielomian miał postaci:

$$-37,85x^3 + 296,24x^2 - 771,46x + 665,95 \quad (1)$$

Wartości współczynników przy potęgach x^3 jak i x^2 wykorzystano do obliczenia stałej siłowej k oraz współczynnika anharmoniczności γ , ponieważ zależność $U(r)$ można rozwinąć w szereg Taylor'a wokół analizowanego otoczenia. Zatem wartość stałej siłowej wynosi:

$$k = 2! \cdot b = 2! \cdot 296,24 = 592,48 \frac{\text{eV}}{\text{\AA}^2} = 9492,576121 \frac{\text{N}}{\text{m}}, \quad (2)$$

zaś współczynnik anharmoniczności wynosi:

$$\gamma = 3! \cdot a = 3! \cdot 37,85 = 227,1 \frac{\text{eV}}{\text{\AA}^3} = 3,638543136 \cdot 10^{13} \frac{\text{N}}{\text{m}^2} \quad (3)$$

Zadanie 2

W tym zadaniu należało przeanalizować dane z pliku *zad2_bat_5.txt* opisujące proces rozładowania ogniwa litowego z katodą z krystalizowanego szkła $90V_2O_5 \cdot 10B_2O_3$ oraz wyznaczenie na podstawie tych danych wartości:

- teoretycznej pojemności grawimetrycznej Q_t ogniwa,
- doświadczalnej pojemności grawimetrycznej Q_d ogniwa,
- stosunku teoretycznej pojemności grawimetrycznej do pojemności doświadczalnej
- napięcie nominalne ogniwa U_{nom} .

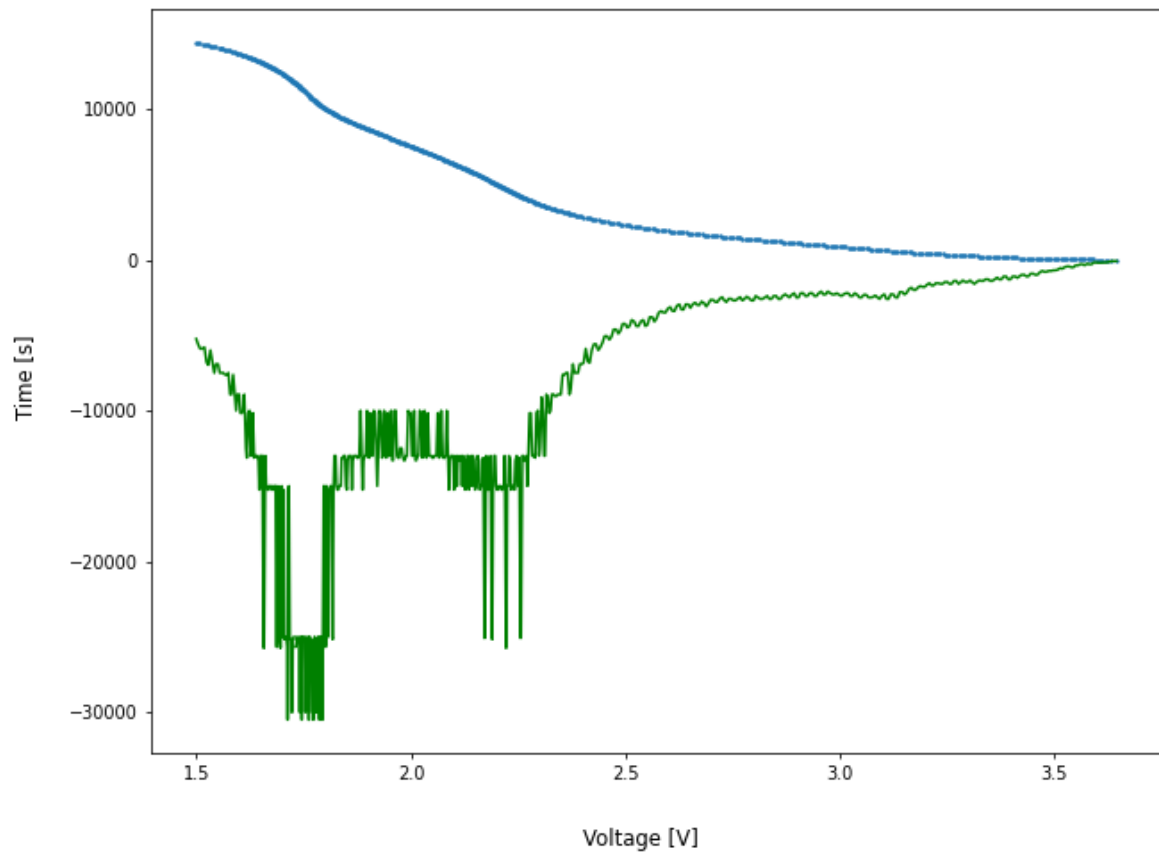
Dla zestawu 5 podane były masa materiału aktywnego $m = 2,06[mg]$ oraz natężenie prądu $I, 162,74[\mu A]$.

Wartość teoretycznej pojemności grawimetrycznej wyznaczono z zależności:

$$Q_t = \frac{neN_A}{M_{V_2O_5}} = 3 \cdot 529,23\left[\frac{C}{g}\right] = 441\left[\frac{mAh}{g}\right], \quad (4)$$

gdzie $e = 1,602176634 \cdot 10^{-19}[C]$ - ładunek elementarny, $N_A = 10^{-10}$ - stała Avogadro, $M_{V_2O_5} = 2 \cdot 51\left[\frac{g}{mol}\right] + 5 \cdot 16\left[\frac{g}{mol}\right] = 182\left[\frac{g}{mol}\right]$ - masa molowa V_2O_5 biorącego udział w interkalacji, $n = 3$ - liczba interkalowanych jonów litu na jeden jon V_2O_5 .

Chart of the voltage dependence on time for the discharge of lithium battery with cathode made of 90V2O5*10B2O3 glass



Rysunek 3: Wykres zależności napięcia badanym ogniwie w zależności od czasu dla procesu rozładowania wraz numerycznie policzoną pochodną wykresu.

Na podstawie podanych danych wyznaczono doświadczalną pojemność grawimetryczną Q_d ze wzoru:

$$Q_d = \frac{\int_0^T U(t)}{T} = \quad (5)$$

gdzie T