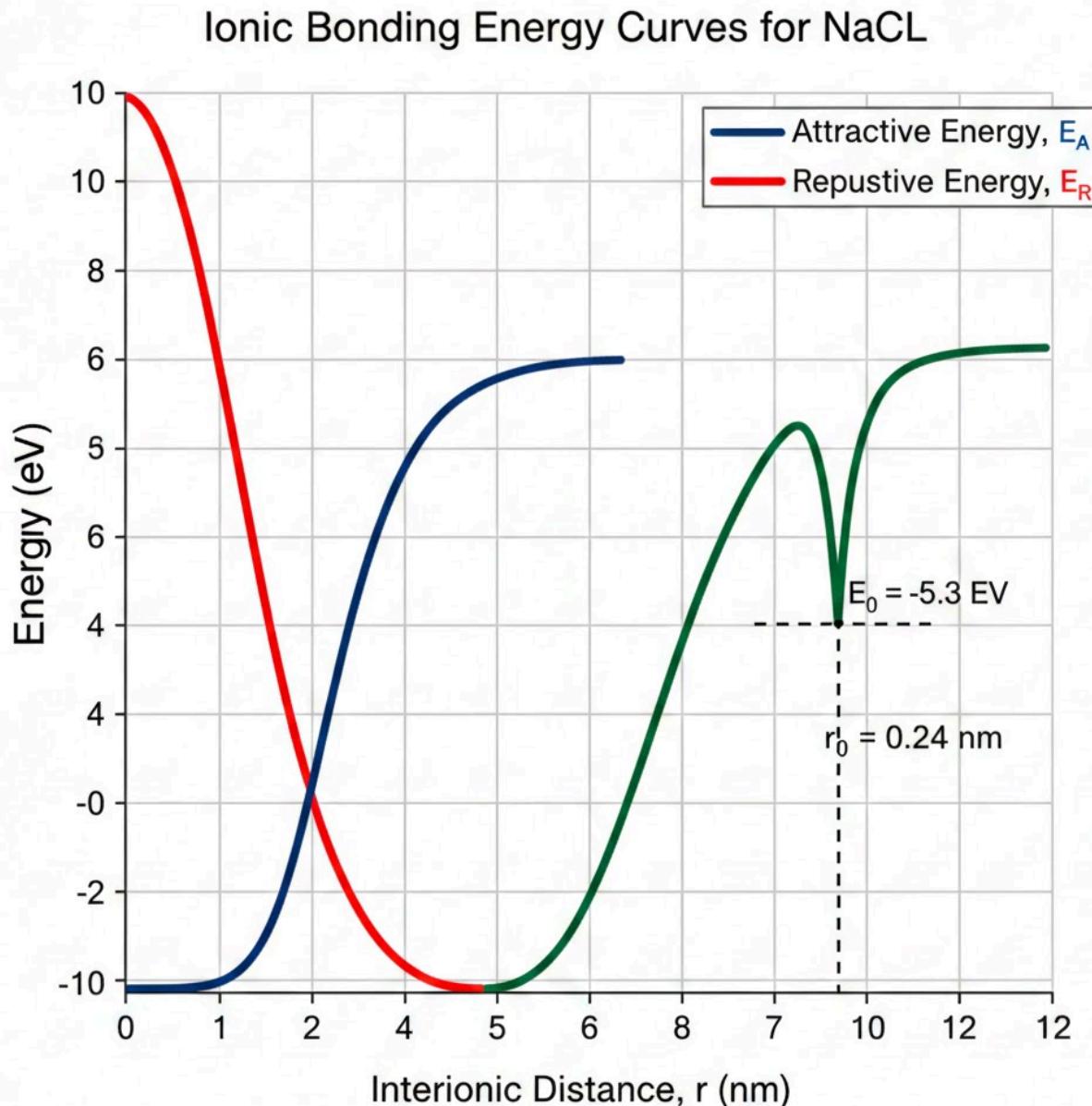


Løsningsforslag: Obligatorisk innlevering nr. 1 - MAS144

Oppgave 1: Ionisk binding for NaCl

a) Plot av energikurver For å generere plottet benyttes følgende funksjoner for avstanden r fra 0 til 1,2 nm:

- Tiltrekkende energi: $EA = -1,436r$
- Frastøtende energi: $ER = 7,32 \cdot 10 - 6r^8$
- Nettoenergi: $EN = EA + ER$



b) Grafisk avlesning Ved å studere minimumspunktet på kurven for EN i diagrammet (der kurven snur) finner man:

- Likevektsavstand (r_0): Ca. 0,24 nm.
- Potensiell energi (E_0): Ca. -5,3 eV.

c) Beregning av r_0 og E_0 For å finne r_0 matematisk settes den deriverte av nettoenergien lik null: $dEN/dr = 1,436r^2 - 8 \cdot 7,32 \cdot 10 - 6r^9 = 0$

Løser for r_0 : $r_0 \approx 0,236\text{nm}$

Innsetting av r_0 i formelen for EN gir E_0 : $E_0 \approx -5,32\text{eV}$

Oppgave 2: Smeltetemperatur og bindingsenergi

Basert på tabell 2.3 lages en trendlinje i Excel med smeltetemperatur [°C] på x-aksen og bindingsenergi [eV] på y-aksen.

Beregning for Molybden (Mo):

- Smeltepunkt for Mo: $2617^\circ C$.
- Ved å bruke trendlinjen ($y = mx + b$) fra tabellens data, finner vi at bindingsenergien for Molybden er ca. 6,8 eV.

Oppgave 3: Krystallstrukturer og tetthet

a) Pakkefaktor (APF) for BCC I en BCC-celle er det 2 atomer. Forholdet mellom sidelengden a og radius R er $a = 4R3$. $APF = V_{atomer}V_{celle} = 2 \cdot (43\pi R^3)(4R3)^3 = 0,68$

b) Pakkefaktor (APF) for FCC I en FCC-celle er det 4 atomer. Forholdet er $a = 4R2$.
 $APF = 4 \cdot (43\pi R^3)(4R2)^3 = 0,74$

c) Teoretisk tetthet for jern (Fe)

- Struktur: BCC ($n = 2$)
- Atommasse (A): 55,85 g/mol
- Radius (R): $0,124 \text{ nm} = 1,24 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$
- Avogadros tall (NA): $6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
- Beregning:
 $\rho = n \cdot AVC \cdot NA = 2 \cdot 55,85(4 \cdot 1,24 \cdot 10^{-8})^3 \cdot 6,022 \cdot 10^{23} \approx 7,88 \text{ g / cm}^3$

Oppgave 4: Materialegenskaper

- a) Atomstruktur vs. Krystallstruktur: Atomstruktur omhandler oppbygningen av det enkelte atom (elektroner/kjerne), mens krystallstruktur beskriver hvordan atomer er organisert i et repeterende mønster i rommet.
- b) Polymorfi/Allotropi: Evnen et materiale har til å endre krystallstruktur ved endring i temperatur eller trykk. Eksempler: Jern (Fe), Karbon (C) og Titan (Ti).
- c) Polykrystallinske materialer: Består av mange små krystallkorn. De er ofte isotropiske fordi de tilfeldige retningene til hvert korn utligner hverandre, slik at egenskapene blir like i alle retninger.

Oppgave 5: Hypotetisk metall

- a) **Krystallsystem:** Siden vinklene er 90° og dimensjonene er $0,30\text{nm} \times 0,30\text{nm} \times 0,40\text{nm}$ ($a = b \neq c$), er dette det **tetragonale** systemet.
- b) **Krystallstruktur:** Figuren viser et atom i hvert hjørne og ett i midten, som tilsvarer **Body-Centered Tetragonal (BCT)**.
- c) **Tetthet:**
- **Antall atomer (n):** 2
 - **Atomvekt (A):** 145 g/mol
 - **Volum (VC):** $0,3 \cdot 0,3 \cdot 0,4\text{nm}^3 = 0,036\text{nm}^3 = 3,6 \cdot 10^{-23}\text{cm}^3$
 - **Tetthet (ρ):** $\rho = 2 \cdot 145 \cdot 3,6 \cdot 10^{-23} \cdot 6,022 \cdot 10^{23} \approx 13,38\text{g / cm}^3$