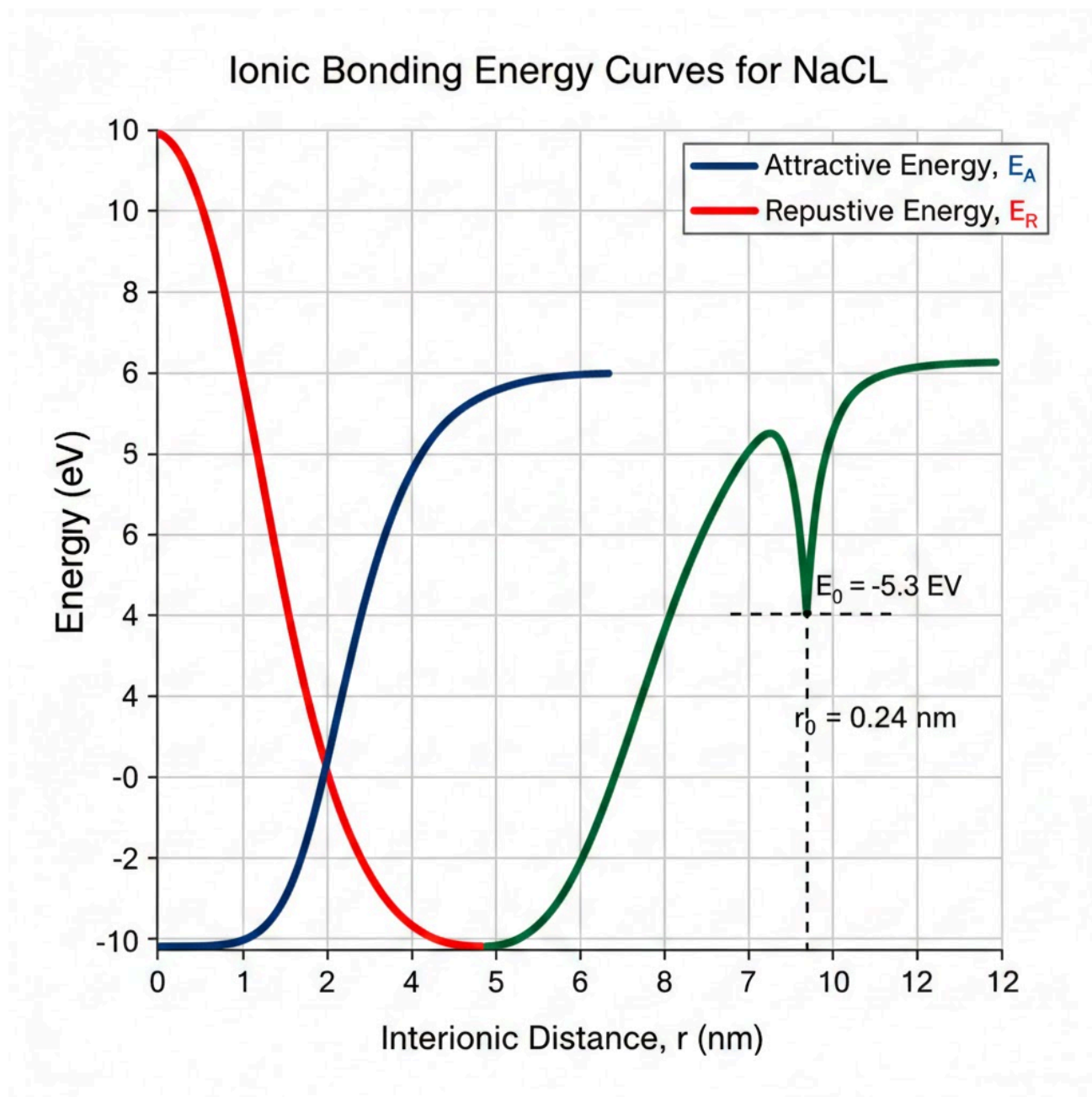


Løsningsforslag: Obligatorisk innlevering nr. 1 - MAS144

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: $E_A = -1,436r$
- Frastøtende energi: $E_R = 7,32 \cdot 10^{-6}r^8$
- Nettoenergi: $E_N = E_A + E_R$



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_c): 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: $dEN/dr = 1,436r^{-2} - 8 \cdot 7,32 \cdot 10^{-6}r^{-9} = 0$

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°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 $a = 4R\sqrt{3}$. $APF = \frac{V_{\text{atomer}}}{V_{\text{celle}}} = \frac{2 \cdot (4/3\pi R^3)}{(4R\sqrt{3})^3} = 0,68$

b) **Pakkefaktor (APF) for FCC** I en FCC-celle er det 4 atomer. Forholdet er $a = 4R\sqrt{2}$. $APF = \frac{4 \cdot (4/3\pi R^3)}{(4R\sqrt{2})^3} = 0,74$

c) **Teoretisk tetthet for jern (Fe)**

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

$$\rho = \frac{n \cdot A}{V_{\text{celle}} \cdot N_A} = \frac{2 \cdot 55,85}{(4 \cdot 1,24 \cdot 10^{-8})^3 \cdot 6,022 \cdot 10^{23}} \approx 7,88\text{g} / \text{cm}^3$$

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 $0,30nm \times 0,30nm \times 0,40nm$ ($a = b \neq c$), 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 (V_C):** $0,3 \cdot 0,3 \cdot 0,4nm^3 = 0,036nm^3 = 3,6 \cdot 10^{-23}cm^3$
- **Tetthet (ρ):** $\rho = 2 \cdot 1453,6 \cdot 10^{-23} \cdot 6,022 \cdot 10^{23} \approx 13,38g / cm^3$