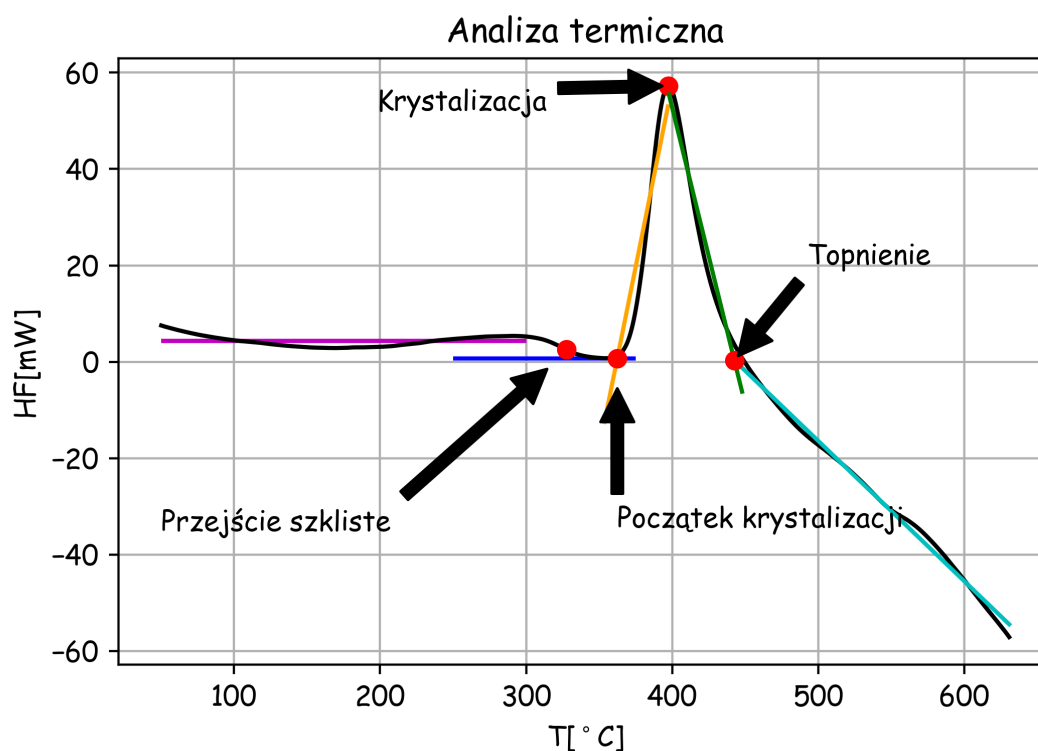


| Wstęp do Fizyki Ciała Stałego | | | | |
|-------------------------------|-----------|-------|--------------|--------------------|
| Zadanie Projektowe | | | | |
| Imię i nazwisko | nr albumu | grupa | data oddania | nr zestawu: 1 |
| Paulina Marikin | 284494 | R3 | 18 I 2018 | nr zadan: 1,3,5 |

1 Zadanie 1: Analiza Termiczna



1.1 Przejęcie szkliste

Temperatura: 327.571°C

Wyznaczanie:

- Do początkowej części wykresu przed rozpoczęciem przejścia (do około 300 °C) dopasowałam poziomą prostą (prosta fioletowa).
- Dla maksymalnego spadku temperatury po przejściu wyznaczyłam HF i na jego wysokości wyrysowałam poziomą prostą (prosta niebieska).
- Z powyższych wartości wyliczyłam średnią wartość HF.
- Pomiar o HF najbardziej zbliżonym do danej średniej uznałam za środek przejścia szklistego. Temperaturę w tym pomiarze uznałam za temperaturę przejścia szklistego.

1.2 Krystalizacja

Temperatura początku krystalizacji: 362.439 °C

Wyznaczanie:

Do pierwszej części krystalizacji (rosnące HF) dopasowałam prostą (pomarańczowa prosta). Następnie wyliczyłam punkt jej przecięcia z uprzednio wyrysowaną prostą niebieską. Temperatura tego punktu uznałam za temperaturę początku krystalizacji. Temperatura krystalizacji: 397.421 °C

Wyznaczanie:

Jest to temperatura pomiaru o najwyższym HF w pikie krystalizacji.

1.3 Topnienie

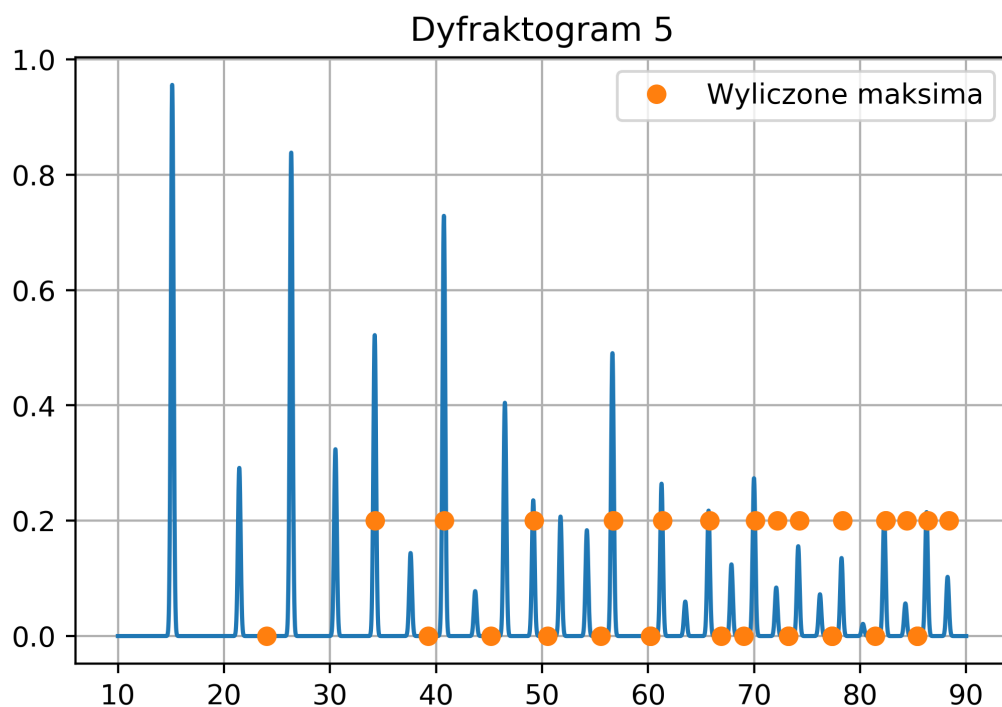
Temperatura: 442.567°C

Wyznaczanie:

Jest to temperatura punktu przecięcia prostej dopasowanej do drugiej części pikie krystalizacji (dla malejącego HF) z prostą dopasowaną do dalszego spadku HF (kolejno proste zielona i błękitna).

2 Zadanie 3: Dyfraktometria Rentgenowska

Położenie maksimów wyznaczyłam dla kryształu manganu (stała sieciowa: 8.91 Å) mającego strukturę BCC, więc jego atomy w komórce elementarnej mają położenia: $[0,0,0]$ i $[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$. Na mangan świecono falą o długości $\lambda = 1.66$ Å. Dla struktury BCC, będącej wariacją struktury sześcienniej $d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$. Z twierdzenia Wulfa-Braggów wiadomo że $2d \sin \theta = n\lambda$, więc $2\theta = \arcsin \frac{n\lambda}{2d}$, gdzie n to rząd ugięcia. Czynnik struktury F ma postać $F = \sum_j f_j * e^{2\pi i(h*x_j+k*y_j+l*z_j)}$ co dla manganu daje $F = f * (1 + e^{i\pi(h+k+l)})$

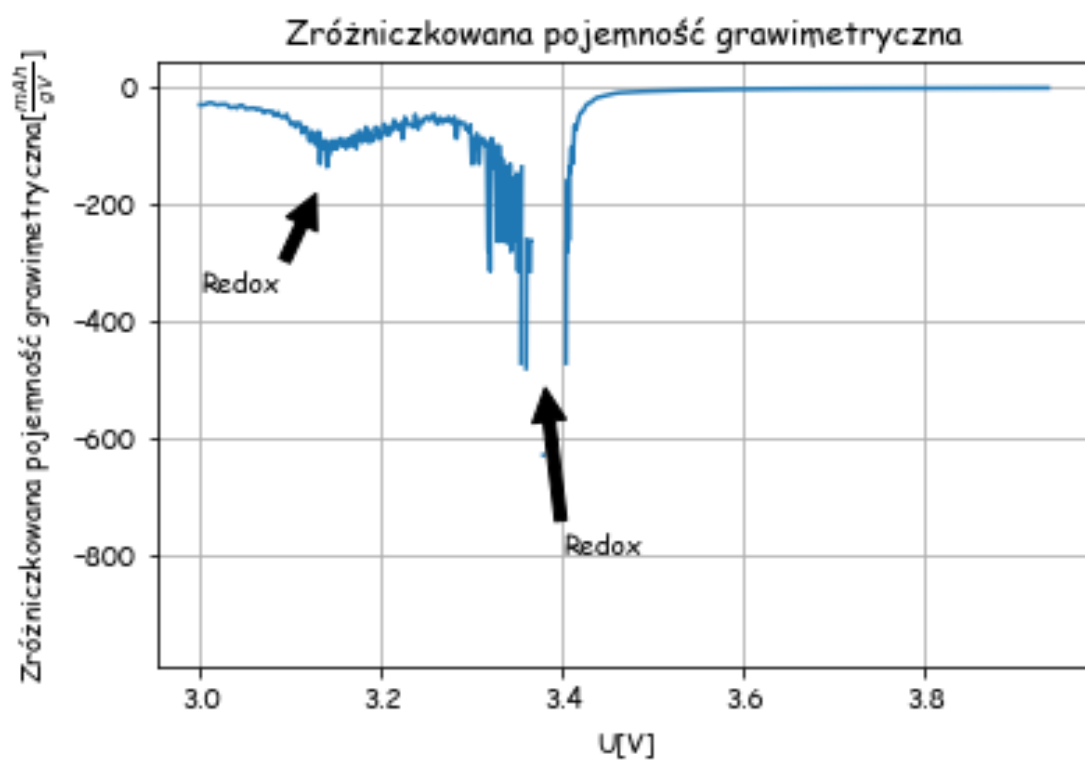
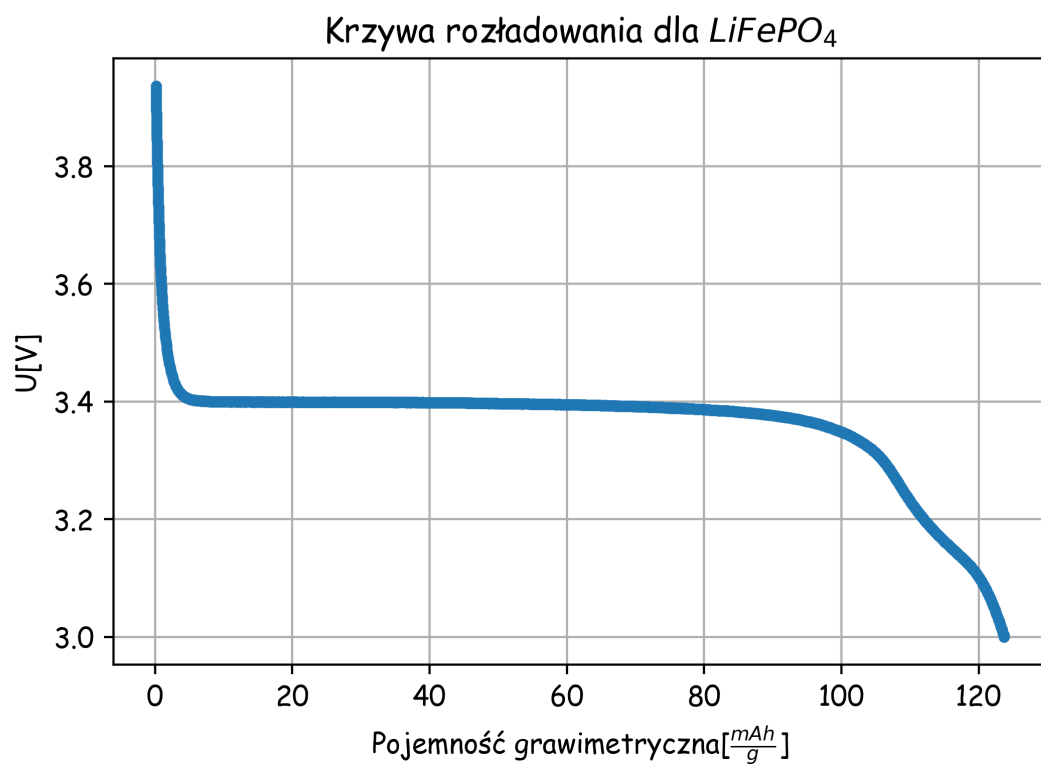


| h | k | l | $d_{hkl}[\text{\AA}]$ | $2\theta[^\circ C]$ | $F_{hkl}[*f]$ |
|---|---|---|-----------------------|---------------------|---------------|
| 0 | 1 | 2 | 3.984673 | 24.045275 | 0 |
| 0 | 1 | 3 | 2.817589 | 34.264475 | 2 |
| 0 | 1 | 4 | 2.160992 | 45.173621 | 0 |
| 0 | 1 | 5 | 1.747395 | 56.717768 | 2 |
| 0 | 1 | 6 | 1.464795 | 69.031422 | 0 |
| 0 | 1 | 7 | 1.260064 | 82.401080 | 2 |
| 0 | 2 | 3 | 2.471189 | 39.250982 | 0 |
| 0 | 2 | 4 | 1.992337 | 49.239764 | 2 |
| 0 | 2 | 5 | 1.654545 | 60.218228 | 0 |
| 0 | 2 | 6 | 1.408795 | 72.194292 | 2 |
| 0 | 2 | 7 | 1.223883 | 85.401550 | 0 |
| 0 | 3 | 4 | 1.782000 | 55.519978 | 0 |
| 0 | 3 | 5 | 1.528052 | 65.800088 | 2 |
| 0 | 3 | 6 | 1.328224 | 77.348877 | 0 |
| 0 | 4 | 5 | 1.391508 | 73.235720 | 0 |
| 0 | 4 | 6 | 1.235595 | 84.403206 | 2 |
| 1 | 2 | 3 | 2.381298 | 40.797238 | 2 |
| 1 | 2 | 4 | 1.944321 | 50.539965 | 0 |
| 1 | 2 | 5 | 1.626736 | 61.357524 | 2 |
| 1 | 2 | 6 | 1.391508 | 73.235720 | 0 |
| 1 | 2 | 7 | 1.212497 | 86.398496 | 2 |
| 1 | 3 | 4 | 1.747395 | 56.717768 | 2 |
| 1 | 3 | 5 | 1.506065 | 66.885718 | 0 |
| 1 | 3 | 6 | 1.313708 | 78.366029 | 2 |
| 1 | 4 | 5 | 1.374843 | 74.271476 | 2 |
| 1 | 4 | 6 | 1.223883 | 85.401550 | 0 |
| 2 | 3 | 4 | 1.654545 | 60.218228 | 0 |
| 2 | 3 | 5 | 1.445393 | 70.092620 | 2 |
| 2 | 3 | 6 | 1.272857 | 81.396662 | 0 |
| 2 | 4 | 5 | 1.328224 | 77.348877 | 0 |
| 2 | 4 | 6 | 1.190649 | 88.389420 | 2 |
| 3 | 4 | 5 | 1.260064 | 82.401080 | 2 |

Ze wszystkich danych nam dyfraktogramów ten(5) najlepiej zgadza się z powyższą tabelką. Nie wszystkie zawarte na nim wzmocnienia zostały wyliczone, ale wszystkie wyliczone wzmocnienia są na nim zawarte, zaś żadne z nieprzewidywanych wzmocnień nie występuje w miejscu wyliczonego wygaszenia.

3 Zadanie 5: Testy Baterii Li-Ion

Pojemność grawimetryczną (q) wyliczyłam ze wzoru $q = \frac{tI}{m}$, gdzie t to czas rozładowania, I to prąd (w tym przypadku $I = 59.8\mu A$, zaś m to masa próbki (tutaj $m = 3.53mg$). Doświadczalna pojemność grawimetryczna jest maksimum pojemności grawimetrycznej na poniższym wykresie czyli $123.72 \frac{mAh}{g}$. Teoretyczną pojemność grawimetryczną wyznaczyłam ze wzoru użytego na zajęciach czyli $q = \frac{N_A e}{M_{LiFePO_4}}$ co w rezultacie dało wynik $169.89 \frac{mAh}{g}$. Dla takich wartości pojemność doświadczalna stanowi 72.82% pojemności teoretycznej.



Na powyższym wykresie minima oznaczają reakcje redox powiązane z interkalacją litu. Są one w położeniach $U = 3.1\text{V}$ i $U = \text{ok.}3.4\text{V}$.