

PRZECZYTAJ, ZANIM ZACZNIESZ PRACĘ...

1. Maksymalnie za projekt można uzyskać **20 punktów**, są do zrobienia 3 zadania (jedno za 6pkt i dwa po 7 pkt każde) w ramach jednego z 9-ciu zestawów.
2. Przydział zadań do zrobienia oraz numeru zestawu jest podany w osobnych plikach (*grupa_przydzial_zadan.pdf*).
3. Punktacja ogólna oraz sposób przydziału punktów za poszczególne etapy rozwiązania są umieszczone razem z treścią zadań.
4. Pierwsza strona projektu powinna zawierać wypełnioną tabelkę tytułową (wzór znajduje się w oddzielnym pliku).
5. Termin oddania projektu to **18 stycznia 2018**. Projekty (wyłącznie w wersji papierowej) proszę oddać osobiście lub przez zaufanego „pełnomocnika” na zajęciach. Oddanie projektu z opóźnieniem skutkuje odjęciem 2pkt za każdy dzień opóźnienia.
6. Wykonując zadania proszę zwracać uwagę na następujące kwestie:
 - estetyka wykresów (odpowiednie skalowanie, tytuł, opisy osi, jednostki, typ wykresu),
 - wzory powinny być podane wraz z opisem użytych symboli,
 - poszczególne etapy obliczeń, przekształceń itd. proszę opatrywać komentarzami tak, żeby osoba czytająca mogła się zorientować co, w jaki sposób i dlaczego zostało policzone,
 - obliczenia powinny być w miarę szczegółowe, czyli nie wystarczy sam ogólny wzór i wynik końcowy, należy np. pokazać, jak podstawowy wzór został zastosowany do przypadku rozpatrywanego w zadaniu oraz jakie są wartości wszystkich użytych do obliczeń wielkości,
 - końcowe wyniki obliczeń proszę podawać z jednostkami.
7. Zastrzegam sobie prawo wyzerowania projektu, jeśli:
 - praca bezsprzecznie okaże się plagiatem,
 - wykonane zadania będą niezgodne z dokonany przeze mnie przydziałem.

Wioleta Ślubowska

ZADANIE 1
ANALIZA TERMICZNA (6 pkt)

Na podstawie pliku *analiza_termiczna_nr_zestawu.txt* dla szkła:

1. Wykonać termogram, czyli wykres przedstawiający zależność różnicy przepływu ciepła (HF – *heat flow*) między próbką badaną a próbką odniesienia od temperatury T próbki badanej.
2. Oznaczyć i zidentyfikować występujące w badanym materiale przemiany termiczne. Przy interpretacji przyjąć, że przemiany egzotermiczne zachodzą w górę.
3. Podać w tabeli charakterystyczne dla zaobserwowanych przemian temperatury i krótko opisać sposób ich wyznaczenia.

zadanie do wykonania	punkty max
wykres (termogram) – opisy osi, jednostki	2
zidentyfikowanie przemian termicznych	1
wyznaczenie temperatur przemian termicznych	2
wyjaśnienie sposobu wyznaczenia tych temperatur	1

ZADANIE 2

ZALEŻNOŚĆ ARRHENIUSA (7 pkt)

Pliki *Arrhenius_nr_zestawu.txt* zawierają w pierwszej kolumnie temperaturę T w $^{\circ}\text{C}$, a w drugiej opór R w Ω cylindrycznej próbki wykonanej z badanego materiału. Wymiary próbek dla poszczególnych zestawów przedstawia tabela.

1. Obliczyć wartości przewodności właściwej materiału w funkcji temperatury w skali bezwzględnej, $\sigma(T)$.
2. Sprawdzić, czy przewodność właściwa σ zmienia się z temperaturą zgodnie z zależnością Arrheniusa $\sigma T = \frac{\sigma_0}{T} e^{-\frac{E_a}{k_B T}}$
gdzie E_a – energia aktywacji, k_B – stała Boltzmanna, σ_0 - czynnik eksponencjalny
3. Jeśli zależność Arrheniusa jest spełniona, obliczyć wartość energii aktywacji E_a (w eV) oraz przewodności właściwej (w S/cm) w temperaturach 25°C oraz 125°C .

numer zestawu	pole powierzchni elektrod S/mm^2	grubość próbki d/mm
1	10	0,9
2	15	2
3	8,5	0,5
4	10,5	1,1
5	8	0,7
6	20	3,3
7	1,05	10
8	9	2,5
9	30	1

Jeśli po zlinearyzowaniu zależności $\sigma(T)$, punkty pomiarowe nie układają się na prostej w całym zakresie temperatury, zrobić dopasowanie liniowe dla prostoliniowego fragmentu tej zależności od strony niskich temperatur.

zadanie do wykonania	punkty max
obliczenie $\sigma(T)$ – wzór, dane w tabeli	1
wykres Arrheniusa postaci $\log(\sigma T)$ w funkcji $1000/T$ – opisy osi, jednostki	2
dopasowanie liniowe	1
wyznaczenie E_a i σ_0 z parametrów dopasowania	2
wyznaczenie przewodności właściwej (w S/cm) w temperaturach 25°C oraz 125°C	1

ZADANIE 3
DYFRAKTOMETRIA RENTGENOWSKA (7 pkt)

Dla struktury krystalicznej wskazanego materiału obliczyć położenia maksimów dyfrakcyjnych w zakresie kątów $10^\circ \leq 2\theta \leq 90^\circ$ dla podanej długości fali padającego promieniowania. Uwzględnić wpływ czynnika struktury na występowanie maksimum dyfrakcyjnego. Wyniki dla różnych rodzin płaszczyzn przedstawić w tabeli o polach: h , k , l , d_{hkl} , 2θ , F_{hkl} (uwzględnić również te maksima, które są wygaszane). Spośród widm dyfrakcyjnych zawartych w plikach *dyfraktogram_A-l.xy* wskazać to, które odpowiada badanemu kryształowi. Odpowiedź uzasadnić, wykreślając dany dyfraktogram i nanosząc na wykres położenia obliczonych maksimów.

numer zestawu	materiał	typ struktury	stała sieci /Å	długość fali użytego promieniowania / Å
1	Mn	bcc	8,91	1,66
2	GaP	fcc z bazą	5,45	1,66
3	Pt	fcc	3,92	2,29
4	NaCl	fcc z bazą	5,64	1,54
5	Zr	hcp	3,23 5,15	1,79
6	Cd	hcp	2,98 5,62	1,66
7	Ti	hcp	2,95 4,68	1,66
8	C (diament)	fcc z bazą	3,57	0,70
9	Cs	bcc	6,14	1,54

Dla układu heksagonalnego obowiązuje wzór:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3} \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

zadanie do wykonania	punkty max
wyznaczenie położenia maksimów dyfrakcyjnych – wzory, tabela z obliczeniami	3
wskazanie, które maksima będą widoczne – wzory, przykładowe obliczenia czynnika struktury	2
wskazanie właściwego pliku z dyfraktogramem – wykres porównawczy	2

ZADANIE 4
FONONY (6 pkt)

Przedstawić (w formie rękopisu) obliczenia zależności dyspersyjnej $\omega(k)$ dla fali płaskiej propagującej się w jednowymiarowym, dwuatomowym łańcuchu periodycznym przy podanych w tabeli założeniach. Narysować wykres otrzymanych gałęzi fononowych dla pierwszej strefy Brillouina (tj. $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$, gdzie a jest znaną stałą sieci).

numer zestawu	m_1	m_2	γ_1	γ_2
1	1	2	2	3
2	1	1	1	1
3	2	2	3	3
4	10	1	2	1
5	10	10	1	3
6	10	5	10	5
7	1	10	5	5
8	5	5	20	1
9	3	1	1	4

zadanie do wykonania	punkty max
obliczenia – szczegółowe i czytelne	4
wykres $\omega(k)$ dla pierwszej strefy Brillouina, wskazanie gałęzi fononów optycznych i akustycznych	2

ZADANIE 5

TESTY BATERII LI-ION (7 pkt)

W plikach *bateria_nr_zestawu.txt* znajdują się wyniki pomiarów napięcia ogniwa z wybranym materiałem katodowym w funkcji czasu ładowania lub rozładowania stałym prądem. Masa katody oraz prądy ładowania/rozładowania są zawarte w tabeli.

1. Na podstawie tych danych wykreślić krzywą ładowania lub rozładowania, tzn. zależność napięcia na ogniwie w funkcji pojemności grawimetrycznej.
2. Ile wynosi teoretyczna pojemność badanej katody? Przedstawić szczegółowe obliczenia. Jaki ułamek (podać w procentach) pojemności teoretycznej stanowi doświadczalna pojemność badanej katody?
3. Wykreślić krzywą zróżniczkowanej pojemności ogniwa w funkcji napięcia i zaznaczyć na niej ekstrema odpowiadające reakcjom redox związanym z interkalacją/deinterkalacją Li^+ w wybranych materiałach.

nr zestawu	materiał katodowy	masa /mg	prąd rozładowania lub ładowania/ μA	cykl
1	LiFePO_4	3,53	59,8	rozładowanie
2	LiVPO_4F	4,7	36,6	ładowanie
3	LiVPO_4F	4,47	34,3	rozładowanie
4	LiVPO_4F	4,7	36,6	rozładowanie
5	LiFePO_4	3,53	29,9	rozładowanie
6	LiVPO_4F	4,47	34,7	ładowanie
7	LiFePO_4	3,28	55,4	rozładowanie
8	LiVPO_4F	1,47	11,4	ładowanie
9	LiFePO_4	3,28	27,7	rozładowanie

zadanie do wykonania	punkty max
wykreślenie krzywej ładowania/rozładowania	2
obliczenie teoretycznej pojemności katody i porównanie z pojemnością eksperymentalną	2
wykreślenie krzywej zróżniczkowanej pojemności	2
wskazanie ekstremów odpowiadających reakcjom redox	1

ZADANIE 6

LASER PÓŁPRZEWODNIKOWY NA STUDNI KWANTOWEJ (6 pkt)

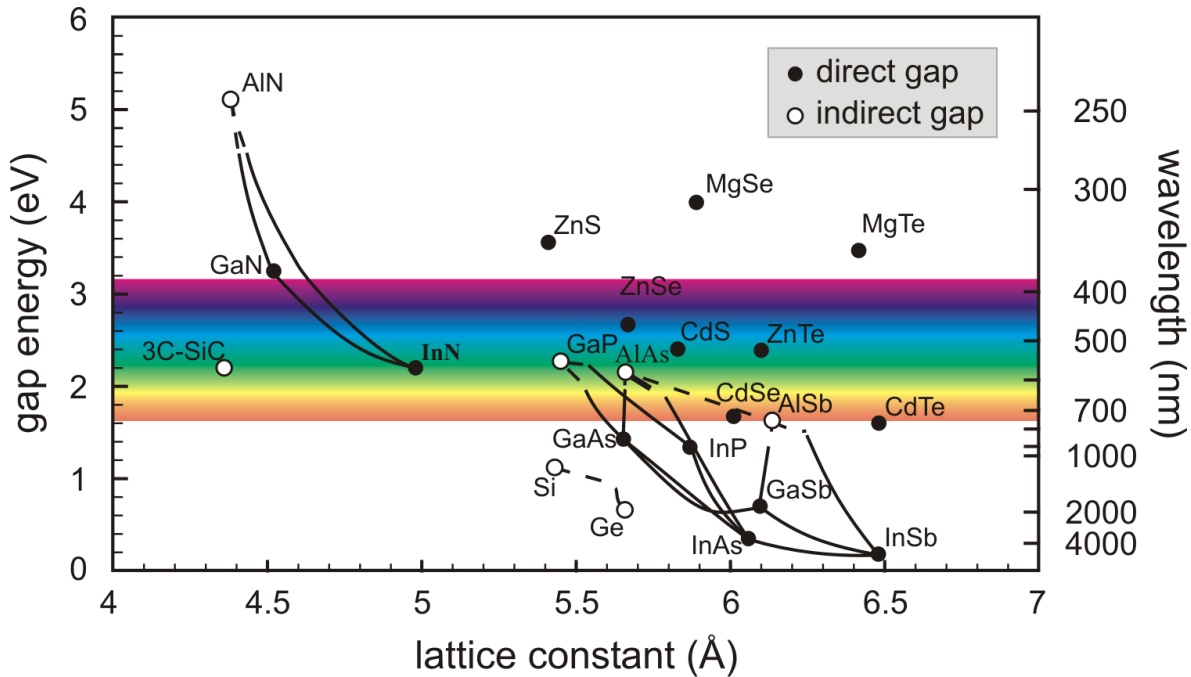
Zaprojektować nanostrukturę półprzewodnikową opartą na studni kwantowej, która dzięki zjawisku elektroluminescencji emituje światło o długości λ . Dobierając materiały uwzględnić dopasowanie stałej sieciowej poszczególnych warstw. W obliczeniach użyć wartości stanów energetycznych dla prostokątnej studni kwantowej o nieskończonym potencjale.

Długość fali obliczamy indywidualnie według wzoru: $\lambda = (z + 2,25) \cdot 100\text{nm} + i(\text{mod } 100) \cdot 1\text{nm}$, gdzie z – numer przydzielonego zestawu, i – numer albumu Autora. Na jaki kolor powinna świecić zaprojektowana struktura? Wykonać schematyczny rysunek tej struktury.

Założyć, że energie nośników w studni są skwantowane i wyrażają się zależnością:

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2}$$

gdzie n – numer kolejnego poziomu, m^* – masa efektywna elektronu/dziury (dla uproszczenia założyć, że jest równa masie spoczynkowej elektronu), a – szerokość studni (rzędu nm)



zadanie do wykonania	punkty max
obliczenie długości fali λ i wskazanie koloru światła emitowanego	1
wyznaczenie przerwy energetycznej materiału na obszar czynny lasera	2
wybranie na podstawie diagramu odpowiednich materiałów do konstrukcji lasera	2
schematyczny rysunek zaprojektowanej struktury	1