

MENA1001 Gruppe Kap. 7b – Struktur og defekter

1. Diskusjonsoppgave

Gibbs faseregulering er ligning 119 i Kapittel 5 i læreboka. Repetér hva den sier.

Finn punkter med 1, 2 og 3 faser i et av diagrammene i Figur 5.29 – som er 1-komponentsystemer (tilstandsdiagrammer) – og sjekk om faseregelen og din forståelse av den stemmer.

Ta så for deg Figur 7.22 (venstre). Hvor mange komponenter har dette diagrammet og hva kaller vi et slikt diagram?

Finn 3 områder i diagrammet der du har 1 fase og der faseregelen sier at du har 3 variable. Disse er T , P og sammensetning.

Finn 3 områder der du har 2 faser. Nå sier faseregelen at en av frihetsgradene er blitt borte, dvs. en variabel er blitt konstant. Diskutér dette. Kan det være sammensetningen eller T eller begge?

Finn et punkt der du har 3 faser. Hva sier faseregelen nå om frihetsgradene (variablene)?

2 Treningsoppgave

(Denne tar vi på engelsk.) A compound has a random diffusion coefficient of 10^{-8} cm²/s and a jump distance of 3 Å for one of its constituents. What is the jump frequency? If the vibrational frequency is 10^{13} Hz (s⁻¹), what is the fraction of vibrations that end in a successful jump? How many jumps does the atom (or ion) make in an hour? What is the total jump distance?

3. Oppgaver i læreboka

Oppgavene merket ** fra og med 7.12 til 7.20 i læreboka omhandler bl.a. defekter, diffusjon, fasediagrammer og mikrostruktur. De er ikke enkle, men prøv å gjøre flest mulig av 7.12-7.15 og 7.17-7.20. (Dvs. hopp over 7.16 – hintet tilslutt der er feil. Nytt hint: Bruk ligning 202.)

4 Eksamensoppgave: Eksamen i MENA1001 2018 H

Oppgave 7

a) i) En krystall har kubisk atomstruktur og lineær termisk utvidelseskoeffisient på $20 \cdot 10^{-6}$ /K. Hva blir relativ endring i lengden på krystallen ved oppvarmingen fra 25 til 500 °C?

ii) Ved romtemperatur hadde krystallen en flatesentrert kubisk (fcc) struktur. Skissér eller forklar denne strukturen. Rundt 1000 °C gjennomgår den en faseovergang til en

romsentrert kubisk (bcc) struktur. Medfører denne faseovergangen en utvidelse eller sammentrekning av krystallen, og hvordan kan du vite det?

b) i) Rent zirkoniumoksid ZrO_2 er monoklint ved romtemperatur, men blir tetragonalt og kubisk ved høye temperaturer. Selvdifusjon av oksygen kan tenkes skje ved to forskjellige defektmekanismer. Forklar disse ved hjelp av enkel skjematisk tegning.

ii) Velg en av defektmekanismene og skriv en defektkjemisk reaksjonsligning for dannelsen av den aktuelle defekten, sammen med ladningskompenserende defekt(er). Dersom defektene som er dannet dominerer, hva er den tilnærmede elektronøytralitetsbetingelsen?

iii) Skriv også et uttrykk for likevektskoeffisienten (gjerne en forenklet form om du vil).

iv) Ut fra dette, hvilke entalpier inngår i aktiveringsenergien for selvdifusjonskoeffisienten til oksygen i ZrO_2 ?