

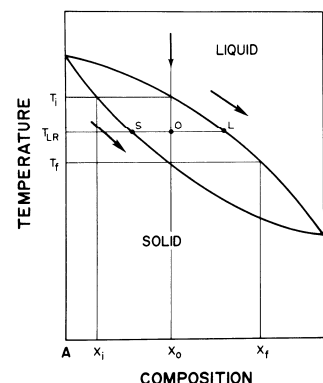
Lista tematów na kolokwium wykładowe z modeli wzrostu kryształów stałych, rok ak. 2015/2016, semestr letni

Temat 1. Termodynamiczne podstawy równowagi fazowej i krystalizacji.

1. Wyjaśnić pojęcia „funkcje ekstensywne” i „funkcje intensywne”. Podać jeden przykład iloczynu funkcji ekstensywnej i intensywnej o jednostce energii.
2. Pierwsza zasada termodynamiki.
3. Podać jedno dowolne sformułowanie drugiej zasady termodynamiki.
4. Kiedy cykl jest odwracalny?
5. Podać jedno dowolne sformułowanie definicja entropii w termodynamice klasycznej.
6. Entropia w termodynamice statystycznej wg Boltzmanna.
7. Definicja molowego potencjału chemicznego jednego składnika układu.
8. Podać równanie Gibbsa-Duhema (bez wyprowadzenia) wraz z opisem użytych symboli.
9. Definicja entalpii wraz z opisem użytych symboli.
10. Definicja funkcji Gibbsa (entalpii swobodnej) wraz z opisem użytych symboli.
11. Definicja funkcji Helmholtza wraz z opisem użytych symboli.
12. Związek funkcji Gibbsa (entalpii swobodnej) z potencjałem chemicznym.
13. Warunek równowagi transportu mas pomiędzy dwoma fazami układu wieloskładnikowego.
14. Warunek równowagi pomiędzy substratami i produktami reakcji chemicznej.

Temat 2. Równowaga fazowa i diagramy fazowe

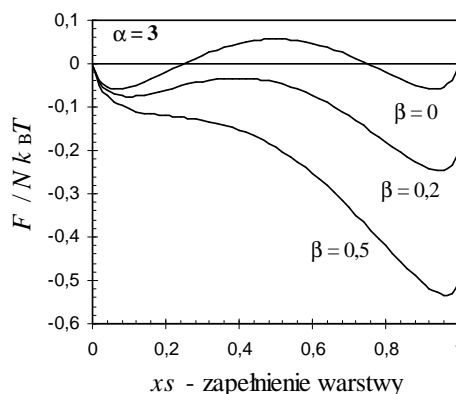
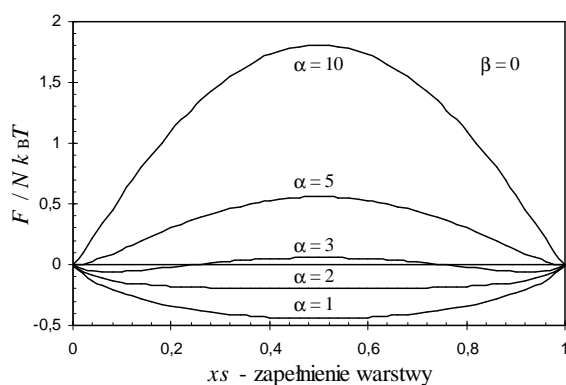
15. Reguła faz Gibbsa (bez wyprowadzenia) wraz z opisem użytych symboli.
16. Wymenić możliwe sposoby zapoczątkowania krystalizacji w układzie, który początkowo znajduje się w stanie równowagi.
17. Równanie Clausiusa-Clapeyrona (bez wyprowadzenia) wraz z opisem użytych symboli. Jakiego typu przemian fazowych dotyczy to równanie?
18. Co to jest przemiana fazowa 1-go rodzaju?
19. Na przykładzie wykresu we współrzędnych μ - T (potencjał chemiczny-temperatura) oznaczyć linie stanu metastabilnego w układzie jednoskładnikowym.
20. Naszkicować typowy diagram fazowy układu jednoskładnikowego i oznaczyć poszczególne fazy, punkt potrójny oraz punkt krytyczny.
21. Wyjaśnić pojęcia „odmiany alotropowe” oraz „odmiany polimorficzne”.
22. Wymenić i scharakteryzować krótko 3 podstawowe formy mieszania składników.
23. Co to znaczy, że molowa funkcja Gibbsa mieszaniny mechanicznej jest addytywna względem czystych składników?
24. Podać prawo Raoult'a.
25. Co to jest roztwór doskonały?
26. Zapisać molową funkcję Gibbsa roztworu doskonałego wraz z opisem symboli (bez dalszych wyprowadzeń wzorów).
27. Naszkicować typowy wykres równowagi fazowej pomiędzy idealnym roztworem ciekłym i stałym, oznaczyć likwidus, solidus oraz punkty wyznaczające składy roztworu ciekłego i roztworu stałego dla jednej wybranej temperatury.
28. Zapisać regułę dźwigni dla temperatury T_{LR} na diagramie równowagi fazowej przedstawionym obok.
29. Wyjaśnić pojęcie „topnienie kongruentne”. Czy takie topnienie jest możliwe w modelach: a) roztworu doskonałego, b) roztworu regularnego?
30. Zapisać molową funkcję Gibbsa roztworu niedoskonałego wraz z opisem symboli (bez dalszych wyprowadzeń wzorów). Kiedy roztwór niedoskonały możemy rozważać jako roztwór regularny?



31. Wyjaśnić przybliżenie zerowego rzędu (przybliżenie Bragga-Williamsa) na przykładzie rozmieszczenia atomów dwóch rodzajów w sieci regularnej prostej.
32. Narysować typowe kształty diagramów fazowych układów dwuskładnikowych wynikających z modelu roztworu regularnego dla przypadku ujemnej entalpii mieszania Δh^{XS} .
33. Narysować typowy kształt diagramu niemieszalności w układzie dwuskładnikowym wynikający z modelu roztworu regularnego.
34. Co to jest punkt inwariantny? Oznaczyć ten punkt na szkicu wybranej przemiany fazowej.
35. Zapisać równanie przemiany eutektycznej wraz z opisem użytych symboli.
36. Co to jest skład eutektyczny?
37. Zapisać równanie przemiany eutektoidalnej wraz z opisem użytych symboli.
38. Zapisać równanie przemiany monotektycznej wraz z opisem użytych symboli.
39. Zapisać równanie przemiany perytektycznej wraz z opisem użytych symboli.
40. Zapisać równanie przemiany eutektoidalnej wraz z opisem użytych symboli.
41. Wyjaśnić pojęcie „topnienie inkongruentne”.

Temat 3. Termodynamiczne modele blokowe wzrostu kryształów

42. Dwa parametry opisujące warunki wzrostu ściany kryształu w termodynamicznych modelach blokowych Jacksona oraz Temkina.
43. Trzy składniki energii swobodnej układu wymieszanych bloków stałych i ciekłych według termodynamicznego modelu Jacksona (bez dalszych wyprowadzeń wzorów).
44. Oszacowanie liczby wiązań pomiędzy blokami solid-fluid w termodynamicznym modelu Jacksona.
45. Na poniższych wykresach przedstawiono zależność funkcji Gibbisa F od ułamka x_s zapełnienia warstwy granicznej blokami stałymi przewidywaną przez termodynamiczny model Jacksona. Dokonać interpretacji wyników w kategorii mechanizmów wzrostu ściany kryształu przewidywanych dla poszczególnych wartości parametrów α i β .



46. Na czym polega założenie „solid-on-solid” w modelach wzrostu kryształów?
47. Opisać w jaki sposób stan n -tej warstwy bloków w modelu Temkina w połączeniu z założeniem „solid-on-solid” wpływa na obliczenia liczby możliwych konfiguracji bloków w warstwie $(n+1)$?
48. Jaki warunek jest badany w termodynamicznym modelu blokowym Temkina w celu sprawdzenia, kiedy granica faz kryształ-faza macierzysta będzie stabilna?

Temat 4. Zarodkowanie kryształów

49. Co to jest zarodkowanie homogeniczne i zarodkowanie heterogeniczne?
50. Co to są zarodki o rozmiarach krytycznych?
51. Podać związek pomiędzy różnicą potencjałów chemicznych fazy ciekłej/gazowej oraz fazy stałej a przesyconieniem roztworu lub pary.
52. Podać związek pomiędzy przechłodzeniem roztworu a zmianą funkcji Gibbsa związaną z utworzeniem jednostkowej objętości zarodka Δg_v .
53. Związki pomiędzy przechłodzeniem roztworu a wartością promienia krytycznego oraz pracy utworzenia zarodka homogenicznego.
54. Szybkość tworzenia się zarodków krytycznych jako funkcja przechłodzenia roztworu.
55. Podać warunek równowagi napięć powierzchniowych dla zarodka heterogenicznego w kształcie odcinka kuli.
56. W jakich warunkach powstają płaskie (monoatomowe) zarodki heterogeniczne?
57. Związek energii utworzenia heterogenicznego zarodka krytycznego z energią utworzenia homogenicznego zarodka krytycznego.

Temat 5. Komputerowe symulacje wzrostu kryształów metodą Monte Carlo

58. Podać zestaw typowych założeń przyjmowanych w symulacjach Monte Carlo wzrostu ściany kryształu.
59. Podać prawo opisujące częstotliwość zachodzenia procesu związanego z pokonywaniem bariery energii.
60. Opisać bariery energetyczne dla zjawisk kreacji oraz anihilacji przy wzroście kryształu z pary.
61. Opisać bariery energetyczne dla zjawisk kreacji oraz anihilacji przy wzroście kryształu z roztworu.
62. Realizacja dyfuzji powierzchniowej w symulacjach Monte Carlo wzrostu ściany kryształu według modelu Gilmera i Bennemy (bez wyprowadzeń wzorów opisujących częstotliwość dyfuzji).
63. Określanie szybkości wzrostu ściany kryształu w modelu Gilmera i Bennemy.
64. Jak można wprowadzić do algorytmu symulacji czas upływający w układzie kryształu?
65. Jakie znaczenie ma wybór rozmiarów tablicy opisującej stan wycinka ściany kryształu podczas symulacji Monte Carlo wzrostu tej ściany?
66. Opisać krótko wpływ współczynnika Temkina α oraz współczynnika chropowacenia kinetycznego β na mechanizm wzrostu oraz szybkość wzrostu ściany kryształu bez defektów wg wyników symulacji Monte Carlo.
67. Rozważyć dwa mechanizmy wzrostu ściany kryształów: 1) przez przesuwanie się stopni powstających wokół dyslokacji śrubowej oraz 2) przez dwuwymiarowe zarodkowanie. W jakich warunkach jeden z tych dwóch mechanizmów staje się dominujący wg wyników symulacji Monte Carlo?
68. Co to jest źródło Franka-Reada i w jaki sposób można je wprowadzić do symulacji Monte Carlo wzrostu ściany kryształu?
69. Porównać model termodynamiczny Temkina z wynikami symulacji Monte Carlo pod względem przewidywanych mechanizmów wzrostu ściany kryształu.
70. Porównać model termodynamiczny Temkina z symulacjami Monte Carlo pod względem struktur danych używanych do opisu stanu granicy faz kryształ-faza macierzysta.