

---

# UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

First Semester Examination  
Academic Session 2012/2013

January 2013

## EBB 236/3 – Materials Thermodynamic [Termodinamik Bahan]

Duration : 3 hours  
[Masa : 3 jam]

---

Please ensure that this examination paper contains TEN printed pages before you begin the examination.

*[Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi SEPULUH muka surat yang bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.]*

This paper consists of SEVEN questions. ONE question from PART A and SIX questions from PART B.

*[Kertas soalan ini mengandungi TUJUH soalan. SATU soalan dari BAHAGIAN A dan ENAM soalan dari BAHAGIAN B.]*

**Instruction:** Answer FIVE questions. Answer **ALL** question from PART A and **FOUR** questions from PART B. If candidate answers more than five questions only the first five questions answered in the answer script would be examined.

**Arahan:** Jawab LIMA soalan. Jawab **SEMUA** soalan dari BAHAGIAN A dan **EMPAT** soalan dari BAHAGIAN B. Jika calon menjawab lebih daripada lima soalan hanya lima soalan pertama mengikut susunan dalam skrip jawapan akan diberi markah.]

The answers to all questions must start on a new page.

*[Mulakan jawapan anda untuk semua soalan pada muka surat yang baru.]*

You may answer a question either in Bahasa Malaysia or in English.

*[Anda dibenarkan menjawab soalan sama ada dalam Bahasa Malaysia atau Bahasa Inggeris.]*

In the event of any discrepancies, the English version shall be used.

*[Sekiranya terdapat sebarang percanggahan pada soalan peperiksaan, versi Bahasa Inggeris hendaklah diguna pakai.]*

**PART A / BAHAGIAN A**

1. [a] Estimate the melting point of the HCP ( $\epsilon$ ) phase from of pure titanium at one atmosphere pressure. Note that  $\epsilon$  is metastable above 1155K at one atmosphere. Given  $\Delta S^{\epsilon \rightarrow \beta} = 3.43 \text{ J/mol.K}$ ,  $\Delta S_m = 9.6 \text{ J/mol.K}$ ,  $T_m = 2000\text{K}$ .

*Anggarkan titik lebur fasa HCP ( $\epsilon$ ) dari titanium tulen pada tekanan satu atmosfera. Perhatikan bahawa  $\epsilon$  adalah penstabil atas 1155K pada satu atmosfera. Diberi  $\Delta S^{\epsilon \rightarrow \beta} = 3.43 \text{ J/mol.K}$ ,  $\Delta S_m = 9.6 \text{ J/mol.K}$ ,  $T_m = 2000 \text{ K}$ .*

(30 marks/markah)

- [b] The energy of vacancies formation in copper is about 0.5 eV. Assuming that there is no changes in vibration entropy associated with the formation of a vacancy, calculate the vacancy concentration in gold at 600K and 1100K. Given that  $\Delta S_v/k = 1.0$  and  $k = 8.617 \times 10^{-5}$ .

*Tenaga pembentukan kekosongan bagi kuprum adalah 0.5 eV. Diandaikan tiada sebarang perubahan dalam entropi getaran semasa pembentukan kekosongan, kirakan kepekatan kekosongan dalam emas pada suhu 600K dan 1100K. Diberi  $\Delta S_v/k = 1.0$  dan  $k = 8.617 \times 10^{-5}$ .*

(40 marks/markah)

- [c] (i) Consider a system with 4 particles that are allowed to occupy 2 energy states. Tabulate the macrostates and microstates of this system.

*Bayangkan satu sistem yang mempunyai 4 partikel yang boleh merangkumi 2 keadaan tenaga. Jadualkan keadaan makro dan keadaan mikro untuk sistem ini.*

(20 marks/markah)

- (ii) If Gibbs-Duhem relation is integrated, explain what you would expect to get.

*Jika persamaan Gibbs-Duhem dikamirkan, terangkan apa yang anda jangkakan untuk memperoleh.*

(10 marks/markah)

**PART B / BAHAGIAN B**

2. [a] The Clausius-Clayperon Equation is of great importance for calculating the effect of pressure (P) change on the equilibrium transformation temperature (T) of a pure substance. Derive the Clausius-Clayperon Equation for liquid vapour (vaporization) equilibrium.

*Ungkapan Clausius-Clayperon adalah penting untuk mengira perubahan tekanan (P) pada keseimbangan transformasi suhu (T) bagi bahan asli. Terbitkan ungkapan Clausius-Clayperon untuk keseimbangan pengewapan.*

(40 marks/markah)

- [b] The density of liquid nickel at melting point 1728K at 1 atm, is 7.77 g/cm<sup>3</sup>. The atomic weight of nickel is 58.71. Its volume  $\alpha$  coefficient of expansion, is  $1.42 \times 10^{-4} \text{K}^{-1}$ .
- (i) Calculate the increase in the free energy of liquid nickel at 2100K when the pressure is increased from 101,325 Pa to 10 MPa.
  - (ii) Find the activity of nickel in the high-pressure state.
  - (iii) If the vapor pressure of pure liquid nickel at 101,325 Pa is 53.77 Pa at 2100K, calculate its vapor pressure in the high-pressure state. State any assumptions made.

*Ketumpatan nikel cecair pada takat lebur 1728K, pada 1 atm, ialah 7,77 g/cm<sup>3</sup>. Berat atom nikel adalah 58.71. Pekali isipadu pengembangan,  $\alpha$  ialah  $1,42 \times 10^{-4} \text{K}^{-1}$ .*

- (i) *Kira peningkatan dalam tenaga bebas nikel cecair pada 2100K apabila tekanan meningkat dari 101,325 Pa ke 10 MPa.*
- (ii) *Cari aktiviti nikel dalam keadaan tekanan tinggi.*
- (iii) *Jika tekanan wap nikel cecair tulen (pada 101,325 Pa) adalah 53.77 Pa pada 2100K, hitungkan tekanan wap dalam keadaan tekanan tinggi. Nyatakan sebarang andaian yang dibuat.*

(60 marks/markah)

...5/-

3. [a] Suppose the interaction parameters for divacancies are about 10 % of the values of corresponding single defect parameters:

$$\overline{\Delta H_{\text{int}}} = 0.1\overline{\Delta H_v}$$

$$\overline{\Delta S_{\text{int}}} = 0.1\overline{\Delta S_v}$$

$$\overline{\Delta H_v} = 95800 \text{ J / mole} \quad \overline{\Delta S_v} = 8.85 \text{ J / mole.K}$$

Calculate the equilibrium concentration of divacancies at 300K and 1400K.

*Katakan parameter interaksi bagi dwikekosongan adalah 10 % daripada nilai parameter kecacatan tunggal berikut:*

$$\overline{\Delta H_{\text{int}}} = 0.1\overline{\Delta H_v}$$

$$\overline{\Delta S_{\text{int}}} = 0.1\overline{\Delta S_v}$$

$$\overline{\Delta H_v} = 95800 \text{ J / mole} \quad \overline{\Delta S_v} = 8.85 \text{ J / mole.K}$$

*Kirakan kepekatan keseimbangan bagi dwikekosongan pada 300K dan 1400K.*

(40 marks/markah)

- [b] Take the energy to form a mole of vacancies in Fe a 20,000 calories and the vibrational entropy as  $1.0k$  per vacancy, where  $k$  is Boltzman's constant. Compute the number of vacancies per cubic centimeter of Fe at  $50^\circ\text{C}$  and at its melting point ( $1538^\circ\text{C}$ ). Take the density of Fe as  $7.88 \text{ g/cm}^3$  and the AMR for Fe = 56.

1 calorie = 4.184 J/mole.

*Katakan tenaga untuk membentuk satu mol kekosongan dalam Fe adalah 20,000 kalori dan entropi getaran adalah  $1.0k$ /kekosongan, yang mana  $k$  adalah pemalar Boltzman. Kirakan bilangan kekosongan per sentimeter kubik bagi Fe pada suhu  $50^\circ\text{C}$  dan pada suhu takat lebur ( $1538^\circ\text{C}$ ). Diberikan ketumpatan Fe adalah  $7.88 \text{ g/cm}^3$  dan JMR untuk Fe = 56.*

*1 kalori = 4.184 J/mol.*

(60 marks/markah)

...6/-

4. [a] Sketch and explain the phase diagram of a one component system on the axes  $\ln P$  versus  $1/T$ .

*Lakarkan dan terangkan gambarajah fasa sistem satu komponen pada paksi  $\ln P$  lawan  $1/T$ .*

(20 marks/markah)

- [b] Silicon has a melting point of 1683K and boiling point of 2750K at 1 atmosphere, with a heat of fusion 46.7 kJ/mole and a heat of vaporization of 297 kJ. Find the triple point and sketch the phase diagram.

*Silikon mempunyai takat lebur pada 1683K dan takat didih pada 2750K pada 1 atmosfera dengan haba pelakuran bagi silikon adalah 46.7 kJ/mol dan haba penyejatan adalah 297 kJ. Dapatkan takat tripel dan lakarkan gambarajah fasa.*

(40 marks/markah)

- [c] Sketch a schematic diagram to show the energies involved in homogeneous nucleation.

*Lakarkan gambarajah skematik untuk menunjukkan tenaga-tenaga yang berkaitan dengan penukleusan homogen.*

(10 marks/markah)

- [d] What would be  $\Delta T/T_o$  for a critical nucleus of size  $10^{-7}$  cm? What would be the critical size at  $\Delta T/T_o = 0.01$ ? Assume  $\gamma_{SL} = 200$  erg/cm<sup>2</sup> and  $\Delta H = -1254$  J/cm<sup>3</sup>.

*Apakah nilai  $\Delta T/T_o$  untuk nukleus kritikal bersaiz  $10^{-7}$  cm? Apakah saiz kritikal pada  $\Delta T/T_o = 0.01$ ? Andaikan  $\gamma_{SL} = 200$  erg/cm<sup>2</sup> dan  $\Delta H = -1254$  J/cm<sup>3</sup>.*

(30 marks/markah)

5. [a] In an oxidation process of metal sheets, thermodynamic is useful in determining if the condition at which the metal sheets are exposed to would allow the oxidation process to happen or not. Answer the following questions:

*Di dalam satu proses pengoksidaan kepingan logam, termodinamik boleh digunakan untuk menentukan keadaan di mana apabila kepingan logam itu didedahkan kepada keadaan ini, proses pengoksidaan akan berlaku atau tidak. Jawab soalan di bawah:*

- (i) You are given nickel sheet to be oxidized. Explain how Richardson-Ellingham diagram can be used to predict if oxidation of nickel can happen at 800°C in air.

*Anda diberikan kepingan nikel untuk dioksidakan. Terangkan bagaimana carta Richardson-Ellingham boleh digunakan untuk menentukan sama ada nikel akan teroksida pada 800°C di dalam udara.*

(35 marks/markah)

- (ii) For Ni-Cr determine if this alloy can be oxidized in steam at 800°C. Use appropriate equations to answer the question.

*Untuk Ni-Cr tentukan jika aloi ini boleh teroksida di dalam wap pada 800°C. Gunakan persamaan yang sesuai untuk menjawab soalan ini.*

(35 marks/markah)

- [b] Partial molar quantities can be determined by a method called method of intercepts. Given a system containing  $n_A$  molecules of pure A and  $n_B$  molecules of pure B and they are mixed. Derive the partial molar free energy of mixing for this system then by using a sketch of plot of  $G_M$  versus  $N_B$  show how the composition of  $n_B$  can be determined. (30 marks)

*Kuantiti molar separa boleh ditentukan dengan kaedah yang dinamakan kaedah pintasan. Diberikan satu sistem yang mengandungi molekul  $n_A$  daripada A dan molekul  $n_B$  daripada B dan molekul-molekul ini dicampurkan. Terbitkan satu persamaan tenaga bebas separa untuk campuran ini dan dengan menggunakan satu lakaran graf  $G_M$  melawan  $N_B$  tunjukkan bagaimana komposisi  $n_B$  boleh ditentukan.*

(30 marks/markah)

6. [a] Define the surface tension and stress.

*Berikan definisi permukaan tegang dan permukaan tekanan.*

(20 marks/markah)

- [b] Three phases  $\alpha$ ,  $\beta$  and  $\delta$  meet at a common boundary which is normal to section of the sample examined. The angles measured inside the phases  $\alpha$ ,  $\beta$  and  $\delta$  are  $90^\circ$ ,  $130^\circ$  and  $140^\circ$ , respectively. If the value of interface energy for  $\alpha$ - $\beta$  interfaces is  $0.8 \text{ J/m}^2$ , find the corresponding values for the other two interfaces.

*Tiga fasa  $\alpha$ ,  $\beta$  dan  $\delta$  berkumpul di sempadan yang normal kepada bahagian sampel yang diperiksa. Sudut yang diukur di dalam fasa  $\alpha$ ,  $\beta$  dan  $\delta$  adalah masing-masing  $90^\circ$ ,  $130^\circ$  dan  $140^\circ$ . Jika nilai tenaga antaramuka bagi antaramuka  $\alpha$ - $\beta$  ialah  $0.8 \text{ J/m}^2$ , kirakan nilai bagi antaramuka yang selainnya.*

(50 marks/markah)



- [c] Give and describe one example of engineering application that uses the interface principle.

*Berikan dan jelaskan satu contoh aplikasi kejuruteraan yang menggunakan prinsip antaramuka.*

(30 marks/markah)

7. [a] An Einstein's Model of a Crystal is useful in explaining energy distribution within the crystal faces of a given crystal like cubic crystal for example. By using statistical thermodynamic, explain this model.

*Model Hablur Einstein berguna untuk menerangkan berkenaan dengan taburan tenaga pada permukaan hablur seperti hablur kubik. Dengan menggunakan model termodinamik statistik, terangkan model ini.*

(30 marks/markah)

- [b] Define fugacity for non-ideal gas by deriving an appropriate equation. Then state the relationship between fugacity and activity of a given gas system.

*Takrifkan fugasitas untuk gas-tak-ideal dengan menerbitkan satu persamaan yang sesuai. Kemudian nyatakan hubungan fugasitas dengan aktiviti untuk sistem gas yang diberikan.*

(20 marks/markah)

- [c] Determine the maximum water content that could be tolerated in a hydrogen atmosphere used to prevent oxidation of copper at 800°C.

*Dapatkan kandungan air yang paling maksimum yang boleh ditoleransi di dalam atmosfera hidrogen yang digunakan untuk menghalang pengoksidaan kuprum pada 800°C.*

(25 marks/markah)

[d] To decompose  $ZrO_2$  on Zr surfaces, heating can be done in an appropriate atmosphere. Using the concept of equilibrium constant, determine a condition that needs to be satisfied to allow decomposition to happen.

*Untuk menguraikan  $ZrO_2$  daripada permukaan Zr, pemanasan boleh dilakukan di dalam keadaan yang sesuai. Dengan menggunakan konsep pemalar keseimbangan, tunjukkan apakah keadaan yang perlu untuk membenarkan penguraian berlaku.*

(25 marks/markah)