Department of Materials Science and Engineering
Pohang University of Science and Technology

AMSE205 Thermodynamics I

due date: Oct. 26, 2021

Problem Set #3

Prof. Byeong-Joo Lee
calphad@postech.ac.kr
Room 1- 311

1. Calculate ΔH_{1600} and ΔS_{1600} for the reaction $Zr(\beta) + O_2 = ZrO_2(\beta)$.
   (Utilize the Tables in the APPENDIX of the textbook.)

2. Calculate the value of ΔG for the reaction

   $$Si_3N_4 + 3\ O_2 = 3\ SiO_2\ (\alpha\text{-quartz}) + 2\ N_2$$

   at 800 K. What percentage error occurs if it is assumed that ΔC_p for the reaction is zero?

3. 모든 결정은 원자가 일정한 격자 자리에 위치하고 있다. 원자가 있어야 할 격자 자리가 비어 있는 경우 원자공공 (vacancy)이 발생했다고 한다. Vacancy formation energy 는 vacancy 가 하나 생겼을 때 증가하는 system 의 에너지를 말하며 ΔH_v 로 표시한다. N 개의 격자 자리로 이루어진 순수 결정에서 평형 vacancy 수 (n) 또는 vacancy 와 총 격자 자리 개수 비율 (n/N)의 표현 식을, 통계열역학적 접근 방식과 고전열역학적 접근 방식을 사용하여 각각 유도하시오.