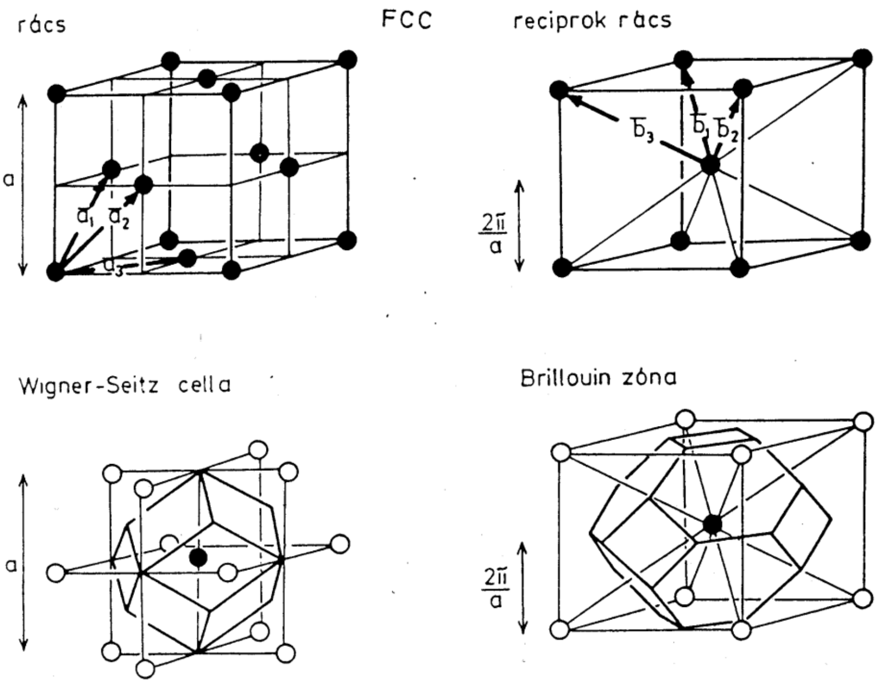
III.Fizika BSC *Kondenzált anyag fizika*
+ IV. Mérnök-fizikus *Szilárdtest fizika*

Zárthelyi dolgozat I. /A.

1. Az FCC rács és reciprokrácsa *(és tudjuk, hogy: $V^{W.S.} * V^{B.z.}/(2\pi)^3 = 1$ / mindig!/)*

$\mathbf{\underline{a}_1 = \tfrac{1}{2}\, a\, (0,1,1)}$; $\mathbf{\underline{a}_2 = \tfrac{1}{2}\, a\, (1,0,1)}$; $\mathbf{\underline{a}_3 = \tfrac{1}{2}\, a\, (1,1,0)}$

$\mathbf{\underline{b}_1 = (2\pi/a)\, (-1,1,1)}$; $\mathbf{\underline{b}_2 = (2\pi/a)\, (1,-1,1)}$; $\mathbf{\underline{b}_3 = (2\pi/a)\, (1,1,-1)}$



a) Számolja ki a **B**rillouin **z**ónája felszíne és az eredeti (direkt) rács Wigner-Seitz cellája felszínének szorzatát $4\pi^2$ egységben! ($(\mathbf{F}^{W.S.} * \mathbf{F}^{B.z.}/(2\pi)^2) = ?$) *20 pont*

b) Számolja ki a **B**rillouin **z**ónája élei **össz**hosszának ($L^{B.z.}$) és a Wigner-Seitz cella élhosszainak ($L^{W.S.}$) szorzatát 2π egységben! ($(\mathbf{L}^{W.S.} * \mathbf{L}^{B.z.}/2\pi) = ?$) *10 pont*

2. Egy FCC ionkristály potenciálja: $V_{10}(r) = -\alpha/r + \beta/r^{10}$; *ahol* α, β *közvetve adott.*

Ismert az $R_o = R_{min.}$ és $V_{min.}$ $(V(R_o) = V_{minimum})$.

Csökkentsük a taszító potenciál kitevőjét 10-ről 9-re úgy, hogy közben a $\mathbf{V_{min.}}$ nem változik:

$V_9^*(r) = -\alpha/r + \beta^*/r^9$; *ahol* α *változatlan, de a* β^* *változott.*

a) Mekkora lesz az új egyensúlyi távolság: $R_{9min}^*/R_o = ?$ *10 pont*

b) Határozza meg a kompresszió modulus κ módosulását is: $(\kappa_9^*/\kappa_{10} = ?)$ **!**

$(\kappa = -(1/V)(\partial V/\partial p)_S = ?)$! *30 pont*

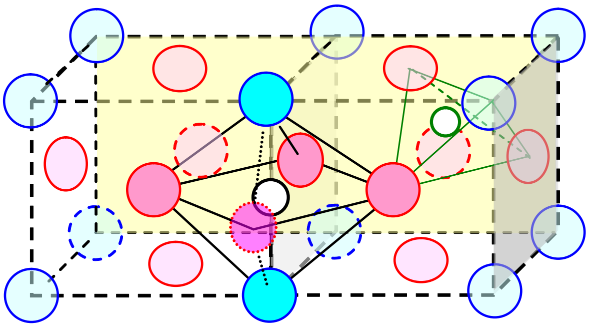
3. Egy ***R*** sugarú atomokból álló ***FCC*** rácsban található oktaéderes üregeket <u>maximálisan</u>: $\mathbf{r_{oct.}^{FCC}}$ méretű, a tetraéderes üregeket $\mathbf{r_{tetr.}^{FCC}}$ méretű atomokkal lehet kitölteni.

a) Mekkora a: $\mathbf{r_{oct.}^{FCC}/R=?}$, illetve a $\mathbf{r_{tetr.}^{FCC}/R=??}$ ***10*** *pont*

b) Határozza meg milyen mértékű **K térkitöltés** javulás érhető el /a merevgömb közelítésben/, ha az <u>oktaéderes üregeket **teljesen**</u> és <u>a tetraéderes üregeknek a **felét**</u> ki is töltjük a fenti maximális méretű gömbökkel? $\boldsymbol{K^{FCC + okt.ü. + ½tetr.ü.} / K^{FCC} =?}$ ***30*** *pont*

(Def.: K= $V_{gömbök}/V_{cella}$)

Az FCC kristály
Oktéderes és a tetraéderes üregei



Maximális pontszám: ***110 pont***

Megjegyzés:
-Részpontok is szerezhetők (a *jó* megoldáshoz vezető) részeredményekért.

-Ponthatárok: **2**: 45 pont-; **3**: 60 pont-; **4**: 75 pont-; **5**: 90 pont

Budapest, 2008. Október 20. 11^{15} -12^{05}

dr. Kojnok József

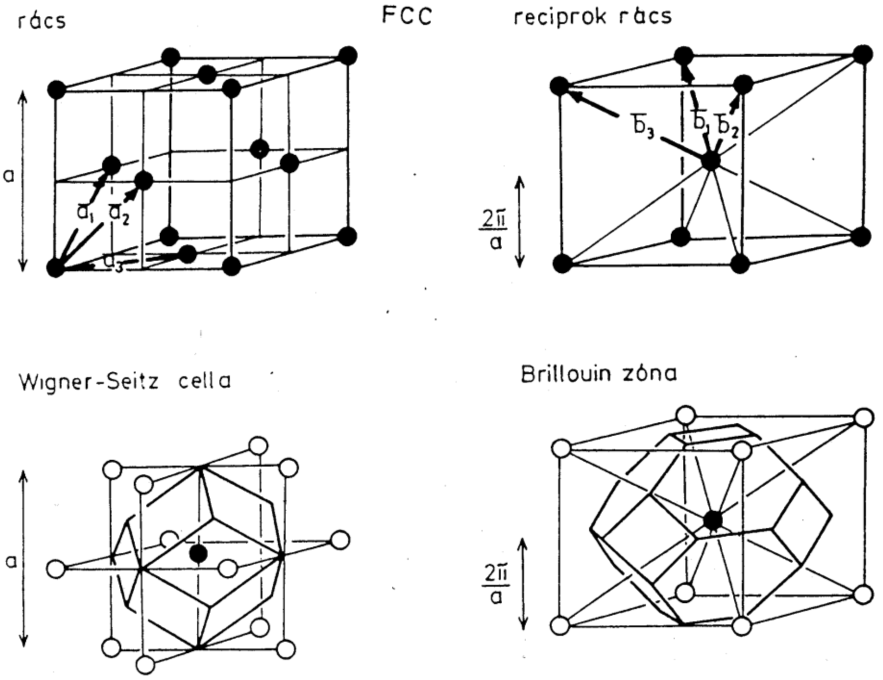
III.Fizika BSC *Kondenzált anyag fizika*
+ IV. Mérnök-fizikus *Szilárdtest fizika*

Zárthelyi dolgozat I. /B.

1. Az FCC rács és reciprokrácsa *(és tudjuk, hogy:* $V^{W.S.} * V^{B.z.}/(2\pi)^3 = 1$ */ mindig!/)*

$\underline{a}_1$ = ½ a (0,1,1) ; $\underline{a}_2$ = ½ a (1,0,1) ; $\underline{a}_3$ = ½ a (1,1,0)

$\underline{b}_1$ = (2π/a) (-1,1,1); $\underline{b}_2$ = (2π/a) (1,-1,1); $\underline{b}_3$ = (2π/a) (1,1,-1)



a) Számolja ki a **B**rillouin **z**ónája felszíne és az eredeti (direkt) rács Wigner-Seitz cellája felszínének szorzatát $4\pi^2$ egységben! ($(\mathbf{F}^{W.S.} * \mathbf{F}^{B.z.}/(2\pi)^2) = ?$) *20 pont*

b) Számolja ki a **B**rillouin **z**ónája élei összhosszának ($L^{B.z.}$) és a Wigner-Seitz cella élhosszainak ($L^{W.S.}$) szorzatát 2π egységben! ($(\mathbf{L}^{W.S.} * \mathbf{L}^{B.z.}/2\pi) = ?$) *10 pont*

2. Egy FCC ionkristály potenciálja: $V_{10}(r) = -\alpha/r + \beta/r^{10}$; *ahol* α, β *közvetve adott.*

Ismert az $R_o = R_{min.}$ és $V_{min.}$ $(V(R_o) = V_{minimum})$.

Növeljük a taszító potenciál kitevőjét 10-ről 12-re úgy, hogy közben a $\mathbf{V_{min.}}$ <u>nem változik</u>:

$$V_{12}^{**}(r) = -\alpha/r + \beta^{**}/r^{12}\ ;\ \textit{ahol } \alpha \textit{ változatlan, de a } \beta^{**} \textit{ változott.}$$

a) Mekkora lesz az új egyensúlyi távolság: $R_{12min}^{**}/R_o = ?$ *10 pont*

b) Határozza meg a kompresszió modulus κ módosulását is: $(\kappa_{12}^{**}/\kappa_{10} = ?)$!

($\kappa = -(1/V)(\partial V/\partial p)_S = ?$) ! *30 pont*

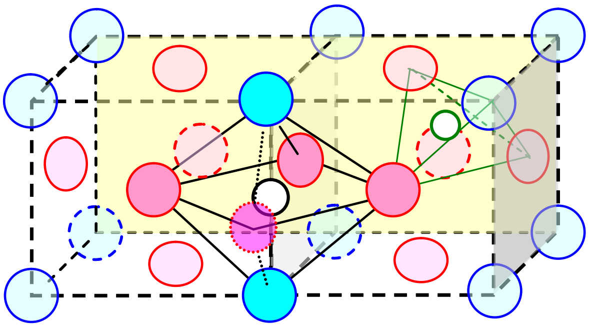
3. Egy ***R*** sugarú atomokból álló ***FCC*** rácsban található oktaéderes üregeket <u>maximálisan</u>: $\mathbf{r_{oct.}^{FCC}}$ méretű, a tetraéderes üregeket $\mathbf{r_{tetr.}^{FCC}}$ méretű atomokkal lehet kitölteni.

a) Mekkora a: $\mathbf{r_{oct.}^{FCC}/R=?}$, illetve a $\mathbf{r_{tetr.}^{FCC}/R=??}$ ***10*** *pont*

b) Határozza meg milyen mértékű **K térkitöltés** javulás érhető el /a merevgömb közelítésben/, ha az <u>oktaéderes üregeknek a **felét**</u> és <u>a tetraéderes üregeket **teljesen**</u> ki is töltjük a fenti maximális méretű gömbökkel? $\boldsymbol{K^{FCC+½ okt.ü.+tetr.ü.}/K^{FCC}=?}$ ***30*** *pont*

(Def.: K= $V_{gömbök}/V_{cella}$)

Az FCC kristály
Oktédederes és a tetraéderes üregei



Maximális pontszám: ***110 pont***

Megjegyzés:
-Részpontok is szerezhetők (a *jó* megoldáshoz vezető) részeredményekért.

-Ponthatárok: **2**: 45 pont-; **3**: 60 pont-; **4**: 75 pont-; **5**: 90 pont

Budapest, 2008. Október 20. 11^{15} -12^{05}.

dr. Kojnok József

III.Fizika BSC *Kondenzált anyag fizika*
+ IV. Mérnök-fizikus *Szilárdtest fizika*

Zárthelyi dolgozat II./A

1.) A fém Na pár potenciálja*:* $V(r) = V_0\left(\exp\left(2\alpha\left(1-\frac{r}{\sigma}\right)\right) - 2\exp\left(\alpha\left(1-\frac{r}{\sigma}\right)\right)\right)$

ahol a $\boldsymbol{V_o}$ *, az* $\boldsymbol{\alpha}$ *és a* $\boldsymbol{\sigma}$ *adott!*

a) E potenciál paramétereinek, illetve a Na atom tömegének /$\boldsymbol{m_{Na}}$/ az ismeretében határozd meg a **v** hangsebességet az egydimenziós ***L*** hosszúságú Na atomláncon /a Brillouin zóna centrumában: q≈0 -nál)./! ***25 pont***

b) Mekkora lesz a hangsebesség a Brillouin zóna felénél (q=K/4-nél; $\mathbf{v_{K/4}}$**=?**)? ***10*** *pont*

c) Mekkora itt a körfrekvencia ($\boldsymbol{\omega_{K/4}}$**=?**)? ***10*** *pont*

d) Add meg ezen frekvenciához tartozó $\mathbf{D}(\boldsymbol{\omega_{K/4}})$ állapotsűrűséget! ***15*** *pont*

2.) „Felfedeztek egy új részecskét a ***foneltron*** -t „!
Ez egy olyan fermion, amelynek a ***diszperziós relációja*** az a **fon**on és az **elek**tr**on** között van félúton (*mértani közép*), definició szerint:

$$\mathbf{E}(\boldsymbol{k}) = \alpha\, \boldsymbol{k}^{3/2}$$

a) Milyen a kétdimenziós ***foneltron*** állapotsűrűsége? (**D**(E) ~ E^{ϕ}; ϕ=?) ***25*** *pont*

b) A ***foneltron*** Fermi energiájának hányad része az **átlagenergia**?
($\mathbf{E}_{\text{átl.}} = \gamma\, \mathbf{E}_F$; γ**=?**) (def.: $\mathbf{E}_{\text{átl.}} = E_{\text{össz.}}/N$) ***20*** *pont*

Maximális pontszám: ***105 pont***

Megjegyzés: Részpontok is szerezhetők (a *jó* megoldáshoz vezető) részeredményekért.
(Ponthatárok: 1- 44 p-ig**, 2 -**45 p-tól **, 3 -**60 p-tól**, 4 -**75 p-tól**, 5 -**90 p-tól)

Budapest, ***2008.december 1****.* *11^{15}- 12^{05}*

dr. Kojnok József

III.Fizika BSC *Kondenzált anyag fizika*
+ IV. Mérnök-fizikus *Szilárdtest fizika*

Zárthelyi dolgozat II./B

1.) A fém Na pár potenciálja*:* $V(r) = V_0\left(\exp\left(2\alpha\left(1-\frac{r}{\sigma}\right)\right) - 2\exp\left(\alpha\left(1-\frac{r}{\sigma}\right)\right)\right)$

ahol a $\boldsymbol{V_o}$ *, az* $\boldsymbol{\alpha}$ *és a* $\boldsymbol{\sigma}$ *adott!*

e) E potenciál paramétereinek, illetve a Na atom tömegének /$\boldsymbol{m_{Na}}$/ az ismeretében határozd meg a **v** hangsebességet az egydimenziós ***L*** hosszúságú Na atomláncon /a Brillouin zóna centrumában: q≈0 -nál)./! ***25** pont*

f) Mekkora lesz a hangsebesség a Brillouin zóna harmadánál? (q=K/6-nél; $\mathbf{v_{K/6}=?}$) ***10** pont*

g) Mekkora itt a körfrekvencia ($\boldsymbol{\omega_{K/6}=?}$)? ***10** pont*

h) Add meg ezen frekvenciához tartozó $\mathbf{D}(\boldsymbol{\omega_{K/6}})$ állapotsűrűséget! ***15** pont*

2.) „Felfedeztek egy új részecskét a ***foneltron*** -t „! Ez egy olyan fermion, amelynek a ***diszperziós relációja*** az a **fon**on és az **el**ek**tron** között van félúton (*mértani közép*), definició szerint:

$$\mathbf{E}(\boldsymbol{k}) = \alpha\, \boldsymbol{k}^{3/2}$$

a) Milyen a kétdimenziós ***foneltron*** állapotsűrűsége? ($\mathbf{D}$(E) ~ E^{ϕ}; $\boldsymbol{\phi}$=?) ***25** pont*

b) A ***foneltron*** Fermi energiájának hányad része az **átlagenergia**? ($\mathbf{E}_{\text{átl.}} = \gamma\, \mathbf{E}_F$; $\boldsymbol{\gamma}$**=?**) (def.: $\mathbf{E}_{\text{átl.}} = E_{\text{össz.}}/N$) ***20** pont*

Maximális pontszám: ***105 pont***

Megjegyzés: Részpontok is szerezhetők (a *jó* megoldáshoz vezető) részeredményekért.
(**Ponthatárok: 1-** 44 p-ig**, 2 -**45 p-tól **, 3 -**60 p-tól**, 4 -**75 p-tól**, 5 -**90 p-tól)

*Budapest, **2008. december 1**. 11^{15}- 12^{05}*

dr. Kojnok József

III.Fizika BSC ***Kondenzált anyag fizika***
+ IV. Mérnök-fizikus ***Szilárdtest fizika***

Javító zárthelyi dolgozat III.

1.) Egy molekula kristály potenciálja: $V^{L.J.}(r) = -V_o \left\{ 2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} \right\}$

, ahol $\boldsymbol{V_o}$ =1.0 eV és r_o=($\boldsymbol{\sigma}$=) 0.4 nm.

a) Mekkora ilyenkor a <u>taszító</u> **erő** /Newtonban/ (**F_t=?**)? ***5 pont***

b) Hányszorosára nő ez a taszító **erő**, ha $\mathbf{r^*}$= 0.38nm atom-távolságúra „összepréselem” a kristályt ($\mathbf{F_{-5\%}^{L.J.}}$**=?**)? (1 eV = 1.6 10^{-19} J) ***10 pont***

c) A polinomiális taszító tagot cseréljük le úgy Born-Mayer féle /exponenciális/ taszító tagra, hogy sem az energiaminimum helye (r_o), sem értéke (V_{min}) ne változzék!
Mekkora ilyenkor az exponenciális tag (ρ) hosszparamétere *(ρ/σ=?)?* ***10 pont***

$$V(r)^{ion} = -V_o \left\{ 2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right\} + C\exp\left(-\frac{r}{\rho}\right)$$

d) Mekkora ez az új ***Born –Mayer*** féle ***taszító erő*** $\mathbf{r^*}$= 0.38 nm atom-távolságnál ($\mathbf{F_{-5\%}^{B.M}}$**=?**)? ***<u>10 pont</u>***

2.) Az ezüst (Ag) sűrűsége: ***10.5*** g/cm^3 , kristályszerkezete: ***FCC***, atomsúlya ***108***. Mekkora az elemi cellájának az élhossza (***a=?***) ? /Emlékeztetőül az Avogadro szám: 6 $^{x}10^{23}$ /mol./ ***<u>15 pont</u>***

3.) A kétatomos lineáris lánc diszperziós relációja:
(A + pozitív az optikai, a - negatív az akusztikus ág relációja.)

$$\omega_{\pm}(q) = \sqrt{D}\sqrt{\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2 qa}{mM}}}$$

, ahol ***D*** a rúgóállandó, az ***m*** és ***M*** a két eltérő tömeg, az ***a*** pedig az atomtávolság!

i) Mekkora a $\mathbf{v}_h$ hangsebesség a Brillouin zóna centrumában: /q≈0 -nál)./! ***<u>15 pont</u>***

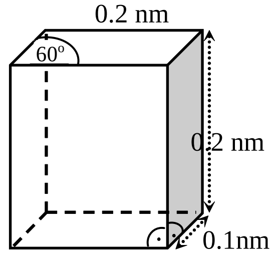
j) Tudjuk, hogy az ω^2–k összege a Brillouin zónahatáron ugyanannyi, mint a centrumban. (Tetszőleges q-ra is van megmaradás!):

$$\omega_+^2(K/2) + \omega_-^2(K/2) = \omega_+^2(0) + \omega_-^2(0) = \omega_+^2(q) + \omega_-^2(q)!$$

Mekkora az ω^2 -k <u>aránya</u> a Brillouin zóna határán és mekkora a tiltott sáv?

$$\omega_+^2(K/2) \big/ \omega_-^2(K/2) = ?;\ \omega_+(K/2) - \omega_-(K/2) = ?$$ ***<u>20 pont</u>***

4.) Egy pontrács primitív cellája az alábbi ábrán látható:



a) Határozza meg a Wigner-Seitz cellát!
b) A reciprok rács elemi celláját!
c) A Brillouin zónát!

<u>20 pont</u>

Maximális pontszám: ***105 pont***

Megjegyzés: Részpontok is szerezhetők (a *jó* megoldáshoz vezető) részeredményekért.
(**Ponthatárok: 1-** 44 p-ig**, 2** -45 p-tól **, 3** -60 p-tól, **4** -75 p-tól**, 5** -90 p-tól)

Budapest, ***2008.december 15****. 11^{15}- 12^{30}.* ***dr. Kojnok József***

III.Fizika BSC *Kondenzált anyag fizika*
+ IV. Mérnök-fizikus *Szilárdtest fizika*

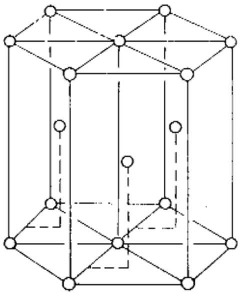
UV zárthelyi dolgozat IV.

1.) A gyémánt (C) sűrűsége: ***3.52*** g/cm^3, kristályszerkezete: gyémánt amely, két egymásba tolt ***FCC*** rács, ahol az atomi poziciók a cellában: (0,0,0), (0,½,½), (½,0,½), (½,½,0), továbbá: (¼,¼,¼), (¼,¾,¾), (¾,¼,¾), (¾,¾,¼). A szén atomsúlya ***12***. Mekkora a köbös elemi cella élhossza (***a=?***) ? /Emlékeztetőül az Avogadro szám: 6×10^{23} /mol./ ***20 pont***

2.) Szoros illeszkedésű hatszöges (HCP) rács és reciprokrácsa.

$\underline{a}_1 = a\,(1,\ 0,\ 0)$; $\underline{a}_2 = \frac{1}{2} a\,(1, \sqrt{3}, 0)$; $\underline{a}_3 = c\,(0,\ 0,\ 1)$ $V_o = a^2 c \sqrt{3}/2$

a) Igazolja, hogy egy szoros illeszkedésű rácsban: ***$c/a = 2\sqrt{2/3}$!*** ***15*** *pont*



b) Számolja ki a Brillouin zóna egységvektorait és térfogatát!
($\underline{b}_1$ =?; $\underline{b}_2$ = ?;$\underline{b}_3$ =? ; V_B = ?) ***15 pont***

3.) A ***diszperziós reláció*** a hullámszám-vektor-komponensek abszulút értékeinek az összege:

$$\mathbf{E}(\boldsymbol{k}) = \mathbf{E_o}\{\,|\boldsymbol{k}_x| + |\boldsymbol{k}_y| + |\boldsymbol{k}_z|\,\}$$

a) Milyen ezen anyag állapotsűrűsége háromdimenzióban?
(**D**(E) ~ E^{ϕ}; ϕ=?) ***15*** *pont*

b) Ilyenkor a Fermi energiának hányad része az **átlagenergia**?
($\mathbf{E}_{átl.} = \gamma\, \mathbf{E}_F$; ***γ=?***) (def.: $\mathbf{E}_{átl.} = E_{össz.}/N$) ***10 pont***

4.) Egy kristály potenciálja*:*
$$V(r) = V_0\left(\exp\left(2\alpha\left(1-\frac{r}{\sigma}\right)\right) - 2\exp\left(\alpha\left(1-\frac{r}{\sigma}\right)\right)\right)$$
30 pont

Maximális pontszám: ***105 pont***

Megjegyzés: Részpontok is szerezhetők (a *jó* megoldáshoz vezető) részeredményekért.
(**Ponthatárok: 1-** 49 p-ig**, 2** -50 p-tól **, 3** -60 p-tól**, 4** -75 p-tól**, 5** -90 p-tól)

Budapest, ***2008.december 29****. 11^{15}- 12^{30}.*

dr. Kojnok József