III.Fizika BSC *Kondenzált anyag fizika*

Zárthelyi dolgozat I. /A.

1.) A szilárdanyag állapotegyenletei (egy mólnyi mennyiségre, $n=1$):

$E = BT + D/2\,(V-V_o)^2$; *illetve* $p = -D\,(V-V_o) + AT$

(A, B, D, V_o) anyagi állandók! Határozza meg az entrópiának a fundamentális állapotegyenletét, azaz az $S(E,V)$ függvényt! ***15 pont***

2.) Egy FCC molekulakristály párpotenciálja (V) és kohéziós potenciálja (U):

$$V^{L.J.}(r) = -V_o\left\{2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}\right\};U(r)^{V.W.} = V_o\left(A_{12}\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - 2A_6\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right)$$

, ahol ismert az A_6^{FCC}; A_{12}^{FCC}, és adott a V_o és az $r_o=\sigma$.

a) Mekkora az egyensúlyi taszító **erő a kristályban** ($F_t^{W.V.}$=?)? ***10 pont***

b) Hányszorosára nő a taszító **erő**, ha R^*/R_o=0.95 atom-távolságúra „préselem" a kristályt ($F_{-5\%}/F_t$=?)? ***10 pont***

c) Határozza meg a kompresszió modulust is**!**$(\kappa = -(1/V)(\partial V/\partial p) =?)$! ***25 pont***

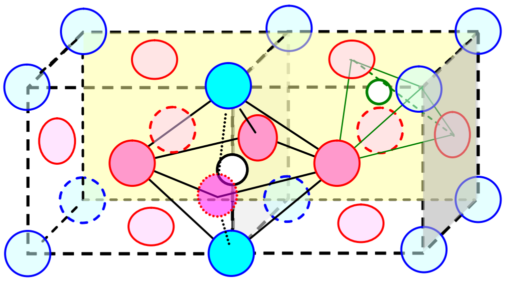
3.) Egy ***R*** sugarú atomokból álló ***FCC*** rácsban található oktaéderes üregeket maximálisan: $r_{oct.}^{FCC}$ méretű, a tetraéderes üregeket $r_{tetr.}^{FCC}$ méretű atomokkal lehet kitölteni.

a) Mekkora a: $r_{oct.}^{FCC}/R$=? , illetve a $r_{tetr.}^{FCC}/R$=? ***5 pont***

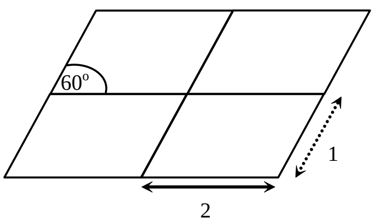
b) Határozzák meg milyen mértékű térkitöltés javulás érhető el /a merev gömb közelítésben/, ha a az **oktaéderes üregeket teljesen** és a tetraéderes üregeket egyáltalán nem töltjük ki a fenti maximális méretű gömbökkel? $K^{FCC + okt.ü.} / K^{FCC}$ =? ***20 pont***

(Def.: K= $V_{gömbök}/V_{cella}$)

Az FCC kristály
Oktéderes és a tetraéderes üregei



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



a) Rajzolja meg a Wigner-Seitz cellát! ***10 pont***

b) Határozza meg, hogy a Wigner-Seitz cella kerülete (éleinek összege:*É*), mennyivel kisebb, mint az eredeti cella kerülete? $(É^{W.S.} / É^{pr.}=?)$ ***15 pont***

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, 2009. Október 22. 11^{15} -12^{15}.

dr. Kojnok József

III.Fizika BSC *Kondenzált anyag fizika*

Zárthelyi dolgozat I. /B.

1.) A szilárdanyag állapotegyenletei (egy mólnyi mennyiségre, ***n=1***):

$E = BT + D/2\,(V-V_o)^2$; *illetve* $p = -D\,(V-V_o) + AT$

(A, B, D, V_o) anyagi állandók! Határozza meg az entrópiának a fundamentális állapotegyenletét, azaz az ***S(E,V)*** függvényt! ***15 pont***

2.) Egy FCC molekulakristály párpotenciálja (V) és kohéziós potenciálja (U):

$$V^{L.J.}(r) = -V_o\left\{2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}\right\};\ U(r)^{V.W.} = V_o\left(A_{12}\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - 2A_6\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right)$$

, ahol ismert az A_6^{FCC}; A_{12}^{FCC}, és adott a V_o és az $r_o=\sigma$.

a) Mekkora az egyensúlyi taszító **erő a kristályban** ($F_t^{W.V.}$=?)? ***10 pont***

b) Hányadrészére csökken a taszító **erő**, ha R^{**}/R_o=1.05 atom-távolságúra „tágítom" a kristályt ($F_{+5\%}/F_t$ =?)? ***10 pont***

c) Határozza meg a kompresszió modulust is**!** $(\kappa = -(1/V)(\partial V/\partial p) =?)$! ***25 pont***

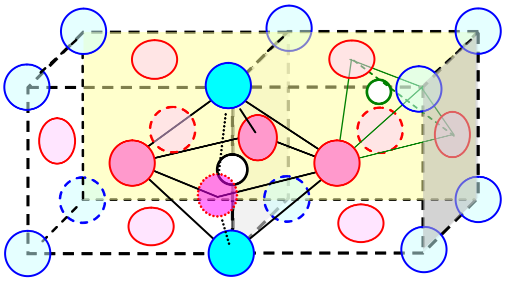
3.) Egy ***R*** sugarú atomokból álló ***FCC*** rácsban található oktaéderes üregeket maximálisan: $r_{oct.}^{FCC}$ méretű, a tetraéderes üregeket $r_{tetr.}^{FCC}$ méretű atomokkal lehet kitölteni.

a) Mekkora a: $r_{oct.}^{FCC}/R$=? , illetve a $r_{tetr.}^{FCC}/R$=? ***5 pont***

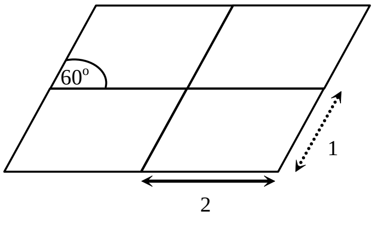
b) Határozzák meg milyen mértékű térkitöltés javulás érhető el /a merev gömb közelítésben/, ha az oktaéderes üregeket nem , s a tetraéderes üregeket **teljesen** ki is töltjük a fenti maximális méretű gömbökkel? $K^{FCC + tetr.ü.} / K^{FCC}$ =? ***20 pont***

(Def.: $K = V_{gömbök}/V_{cella}$)

Az FCC kristály
Oktéderes és a tetraéderes üregei



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



a) Rajzolja meg a Wigner-Seitz cellát! ***10 pont***

b) Határozza meg, hogy a Wigner-Seitz cella kerülete (éleinek összege:***É***), mennyivel kisebb, mint az eredeti cella kerülete? ***($É^{W.S.}/É^{pr.}$=?)*** ***15 pont***

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, 2009. Október 22. 11^{15}-12^{15}.

dr. Kojnok József

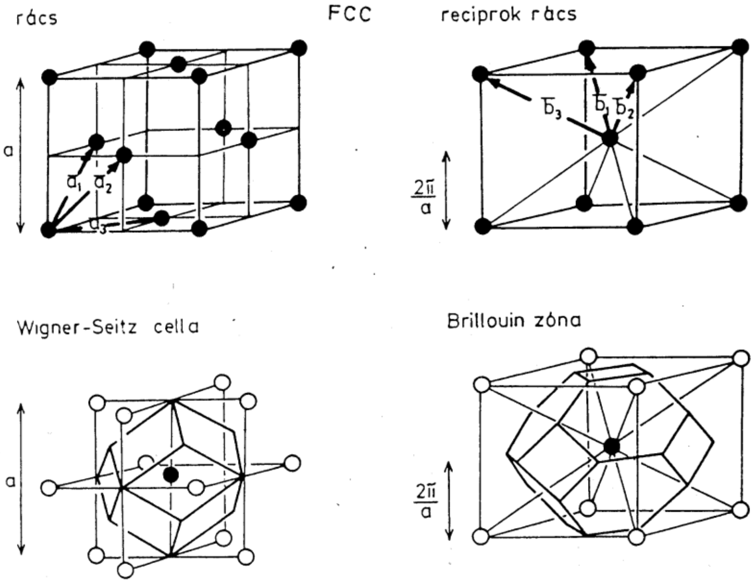
III.Fizika BSC *Kondenzált anyag fizika*

Zárthelyi dolgozat II. /A.

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)

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



a) Számolja ki a **B**rillouin **z**ónába beírható legnagyobb ***gömb*** térfogata és az eredeti (direkt) rács Wigner-Seitz cellájába beírható legnagyobb ***gömb*** térfogatának szorzatát $8\pi^3$ egységben! $((\mathbf{V}^{W.S}_{gömb} * \mathbf{V}^{B.z.}_{gömb}/(2\pi)^3) = ?)$ ***10 pont***

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

2.) Egy Ar atomlánc párpotenciálja (V): $V^{L.J.}(r) = -V_o \left\{ 2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} \right\}$;

ahol adott a $\boldsymbol{V_o}$ és az $\boldsymbol{r_o} = \boldsymbol{\sigma}$.

a) E potenciál paramétereinek, illetve az Ar atom tömegének /$\boldsymbol{m_{Ar}}$/ az ismeretében határozza meg a **v** hangsebességet az egydimenziós ***L*** hosszúságú Ar atomláncon /a Brillouin zóna centrumában: $q \approx 0$ -nál)./! ***20 pont***

b) Mekkora lesz a hangsebesség a Brillouin zóna kétharmadánál (q=K/3-nél; $\mathbf{v_{K/3}=?}$)? ***10 pont***

c) Mekkora itt a körfrekvencia ($\boldsymbol{\omega_{K/3}=?}$)? ***5 pont***

<u>**d)** Addja meg ezen frekvenciához tartozó $\mathbf{D}(\boldsymbol{\omega_{K/3}})$ állapotsűrűséget!</u> ***<u>10 pont</u>***

3.) „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:

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

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

b) A ***foneltron*** Fermi energiájának hányad része az **átlagenergia**?

<u>($\mathbf{E}_{átl.} = \gamma\ \mathbf{E}_F$; $\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{?}$) (def.: $\mathbf{E}_{átl.} = E_{össz.}/N$)</u> ***<u>15 pont</u>***

Maximális pontszám: ***<u>105 pont</u>***

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

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

Budapest, 2009. december 3. 11^{15}- 12^{15}

dr. Kojnok József

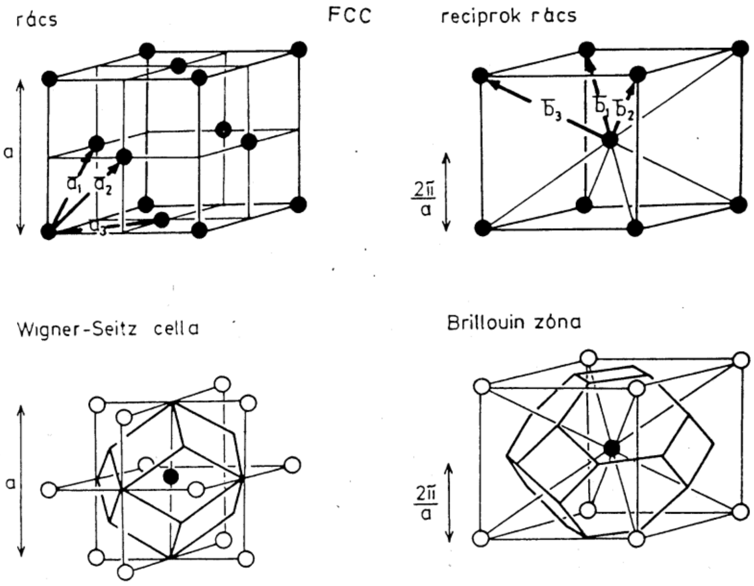
III.Fizika BSC *Kondenzált anyag fizika*

Zárthelyi dolgozat II. /B.

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

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

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



a) Számolja ki a **B**rillouin **z**ónába beírható legnagyobb ***gömb*** térfogata és az eredeti (direkt) rács Wigner-Seitz cellájába beírható legnagyobb ***gömb*** térfogatának szorzatát $8\pi^3$ egységben! $((\mathbf{V}^{W.S}_{gömb} * \mathbf{V}^{B.z.}_{gömb}/(2\pi)^3) = ?)$ ***10 pont***

b) Számolja ki a **B**rillouin **z**ónája élei <u>**össz**</u>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 Ar atomlánc párpotenciálja (V): $V^{L.J.}(r) = -V_o \left\{ 2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} \right\}$;

ahol adott a $\boldsymbol{V_o}$ és az $\boldsymbol{r_o = \sigma}$.

a) E potenciál paramétereinek, illetve az Ar atom tömegének /$\boldsymbol{m_{Ar}}$/ az ismeretében határozza meg a **v** hangsebességet az egydimenziós ***L*** hosszúságú Ar atomláncon /a Brillouin zóna centrumában: $q \approx 0$ -nál)./! ***20 pont***

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

c) Mekkora itt a körfrekvencia ($\boldsymbol{\omega_{K/6}}$**=?**)? ***5 pont***

d) Addja meg ezen frekvenciához tartozó $\mathbf{D}(\boldsymbol{\omega_{K/6}})$ állapotsűrűséget! ***10 pont***

3.) „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 háromdimenziós ***foneltron*** állapotsűrűsége? ($\mathbf{D}(E) \sim E^{\phi}$; ϕ=?) ***25 pont***

b) A ***foneltron*** Fermi energiájának hányad része az **átlagenergia**?
($\mathbf{E}_{átl.} = \gamma\, \mathbf{E}_F$; γ=?) (def.: $\mathbf{E}_{átl.} = E_{össz.}/N$) ***15 pont***

Maximális pontszám: <u>***105 pont***</u>

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

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

Budapest, 2009. december 3. 11^{15}- 12^{15}

dr. Kojnok József

III.Fizika BSC *Kondenzált anyag fizika*
Javító zárthelyi dolgozat III.

1.) Egy ionkristály potenciálja*:* $V(r)^{ion} = -\left(\frac{Ze^2}{r}\right) + \left(\frac{\lambda}{r^n}\right)$, ahol adott Ze^2, r_o és n.

a) Mekkora az egyensúlyi taszító **erő** (**$F_t(r_o)$=?**)? *5 pont*
b) Ha összepréselem" a kristályt 5 %-nyit ($r'=0.95r_o$), mekkora lesz a **taszító erő** és a **vonzó** erő aránya, (**$F_t(r')/F_v(r')$=?**)? *15 pont*
c) A polinomiális taszító tagot cseréljük le Born-Mayer féle /exponenciális/ taszító tagra, hogy sem az energiaminimum helye (r_o), sem értéke (V_{min}) ne változzék!

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

Mekkora ezen új potenciára **b)** alkérdésben kérdezett „összepréselt" **taszító erő** és a **vonzó** erő arány, (**$F_t(r')/F_v(r')$=?**)? *15 pont*

2.) **a)** 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 (FCC) elemi cella élhossza (***a=?***) ? /Emlékeztetőül az Avogadro szám: $6 \cdot 10^{23}$ /mol./ ***10 pont***
b) Mekkora a **t**ér**c**entrumba elhelyezhető legnagyobb idegen atom sugara (**r_{max}/a=?)?** ***10 pont***
c) Ilyen maximális sugarú atomot elhelyezve mennyit javítható a kitöltés (***$K^{D+t.c.ü.}/K^{D.}$ =?)***?
(Def.: K= $V_{gömbök}/V_{cella}$) *15 pont*

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!
a) Mekkora a $\mathbf{v}_h$ hangsebesség a Brillouin zóna centrumában: /q≈0 -nál)./! ***15 pont***
b) 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 aránya a Brillouin zóna határán és mekkora a tiltott sáv?

$$\omega_+^2(K/2) \Big/ \omega_-^2(K/2) = ?;\ \omega_+(K/2) - \omega_-(K/2) = ?$$ *15 pont*

Maximális pontszám: ***100 pont***
Megjegyzés: Részpontok is szerezhetők (a *jó* megoldáshoz vezető) részeredményekért.

-A 3.ZH Ponthatárai: **2**: 45 pont-; **3**: 60 pont-; **4**: 75 pont-; **5**: 90 pont

(Az itt szerzett pontok kétszeres a súllyal adódnak az eddig megszerzett pontokhoz!)

Budapest, 2009. december 16. 12^{15}- 13^{15}

dr. Kojnok József