

III.Fizika BSC Kondenzált anyag fizika

2010. ZH-k.

Zárthelyi dolgozat I.

I.) A szilárd anyag állapotegyenlete (egy mólnyi mennyiségre, $n=1$):

$p = -D(V - V_o) + AT$, ahol az A, D , pozitív anyagi állandók!

A szilárdtestet, mely kezdetben p_1, T_1 intenzív állapotátározókkal rendelkezik, **izoterm** módon összenyomjuk, p_1 -ről $\rightarrow p_2$ -re növelve nyomását.

a) Határozd meg a belsőenergia növekedését ebben az **izoterm** folyamatban ($\Delta E = ?$)!

15 pont

b) Mekkora az entrópia növekedés ugyanekkor? ($\Delta S = ?$)

15 pont

Útmutató: $\left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial p}\right)_T = -\left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial T}\right)_p$, ahol $\left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial T}\right)_p = A/D$.

Megoldás:

a) A belsőenergia növekedés az **izoterm** folyamatban:

$$\Delta E = \int T dS - \int p dV;$$

$$\Delta E = \int dE = T_1 \int dS - \int p dV;$$

$$\int dS|_{T=\text{áll.}} = \int \left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial p}\right)_T dp = -\int \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial T}\right)_p dp; \text{ és } \int p dV|_{T=\text{áll.}} = \int p \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial p}\right)_T dp$$

$$T_1 \int dS = -T_1 \int_{p_1}^{p_2} \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial T}\right)_p dp = -T_1 \left(\frac{A}{D}\right) p|_{p_1}^{p_2} = -T_1 \left(\frac{A}{D}\right) (p_2 - p_1);$$

$$\left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial p}\right)_T = -1/D; \quad -\int p \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial p}\right)_T dp = 1/D \int_{p_1}^{p_2} p dp = \frac{p_2^2 - p_1^2}{2D};$$

$$\Delta E = -T_1 \frac{A(p_2 - p_1)}{D} + \frac{p_2^2 - p_1^2}{2D} = \frac{(p_2 - p_1)}{D} \left(\frac{p_2 + p_1}{2} - AT_1 \right);$$

15 pont

Második megoldás:

Korábban tudható a második állapotegyenlet: $E = BT + D/2 (V - V_o)^2$;

$$\Delta E = \frac{D((V_2 - V_o)^2 - (V_1 - V_o)^2)}{2} = D \frac{(V_2^2 - V_1^2 + 2V_o(V_2 - V_1))}{2} =$$

$$= D(V_2 - V_1) \left(\frac{V_2 + V_1}{2} - V_o \right) = (p_2 - p_1) \left(V_o - \frac{V_2 + V_1}{2} \right) = \dots \text{mint fent!}$$

b) $\Delta S = \int dS = -\int_{p_1}^{p_2} \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial T}\right)_p dp = -\left(\frac{A}{D}\right) p|_{p_1}^{p_2} = -\left(\frac{A}{D}\right) (p_2 - p_1)$

15 pont

2.) Egy ionkristály kohéziós potenciálja: $U(r)^{ion} = -\left(\frac{\alpha}{r}\right) + \left(\frac{\lambda}{r^n}\right)$, ahol adott α , R_o és n .

a) Mekkora az egyensúlyi **taszító** erő ($F_t(R_o) = ?$)? **5 pont**

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

c) A polinomiális taszító tagot cseréljük le Born-Mayer féle /exponenciális/ taszító tagra, hogy sem az energiaminimum helye (R_o), sem értéke (U_{min}) ne változzék!

$$U(r)^{ion} = -\left(\frac{\alpha}{r}\right) + C \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right)$$

Mekkora ezen új potenciára, az új helyen (R^*) az „összepréselt” **taszító** erő és a **vonzó** erő aránya ($F_t(R^*)/F_v(R^*) = ?$)? **20 pont**

Megoldás:

a) Az erő a potenciál negatív gradiense: $F = -\text{grad } U$;

Az egyensúlyban a **taszító erő** = a **vonzó erővel**!

(Utóbbit sokkal könnyebb meghatározni, mert λ nincs megadva!)

$$F_{tasz.}(R_o) = F_{vonz.}(R_o) = -\left(\frac{\partial U_{vonz.}}{\partial r}\right)_{R_o} = \left| \left(\frac{\partial \left(\frac{\alpha}{r}\right)}{\partial r}\right)_{R_o} \right| = \frac{\alpha}{R_o^2} \quad \text{5 pont}$$

b) Nem egyensúlyi helyen (R^*) nincs a fenti kényelem, λ kiküszöbölendő!

$$\begin{aligned} F_{tasz.}(R^*) &= -\left(\frac{\partial U_{tasz.}}{\partial r}\right)_{R^*} = \left| \left(\frac{\partial \left(\frac{\lambda}{r^n}\right)}{\partial r}\right)_{R^*} \right| = \frac{n\lambda}{(R^*)^{n+1}} = \frac{n\lambda}{(R_o)^{n+1}} \frac{(R_o)^{n+1}}{(R^*)^{n+1}} = \\ &= \frac{\alpha}{(R_o)^2} \frac{(R_o)^{n+1}}{(R^*)^{n+1}} = F_{tasz.}(R_o) \frac{(R_o)^{n+1}}{(R^*)^{n+1}} \\ \frac{F_{tasz.}(R^*)}{F_{tasz.}(R_o)} &= \frac{(R_o)^{n+1}}{(R^*)^{n+1}} = \left(R^*/R_o\right)^{-(n+1)} \quad \text{10 pont} \end{aligned}$$

c)

$$F^{B.M.}(R^*) = -\left(\frac{\partial U^{B.M.}}{\partial r}\right)_{R^*} = \left| \left(\frac{\partial \left(C \exp(-r/\rho)\right)}{\partial r}\right)_{R^*} \right| = C/\rho \exp(-R^*/\rho) =$$

$$F_t(R_o) = F_v(R_o) \text{ alapján : } F^{B.M.}(R_o) = -C/\rho \exp(-R_o/\rho) = \frac{\alpha}{R_o^2}$$

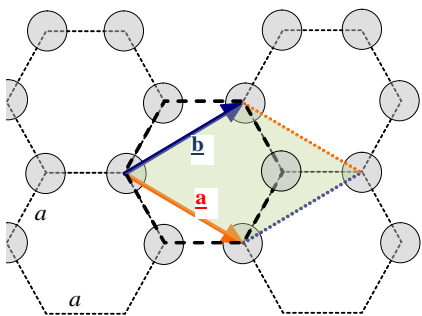
$$U_{tasz.}(R_o) = \frac{1}{n} |U_{vonz.}(R_o)| \text{ alapján : } U^{B.M.}(R_o) = C \exp(-R_o/\rho) = \frac{\alpha}{nR_o} ; \Rightarrow \rho = R_o/n$$

$$\frac{F_t(R^*)}{F_v(R^*)} = \left[\frac{F_t(R^*)}{F_t(R_o)} \right] \left\{ \frac{F_v(R_o)}{F_v(R^*)} \right\} = \left[\exp(-\langle R^*/\rho - R_o/\rho \rangle) \right] \left\{ \frac{R^{*2}}{R_o^2} \right\}$$

$$\frac{F_t(R^*)}{F_v(R^*)} = \left[\exp(-n \langle R^*/R_o - R_o/R_o \rangle) \right] \left\{ \left(\frac{R^*}{R_o} \right)^2 \right\} = \left[\exp(n \langle 1 - (R^*/R_o) \rangle) \right] \left\{ \left(\frac{R^*}{R_o} \right)^2 \right\}$$

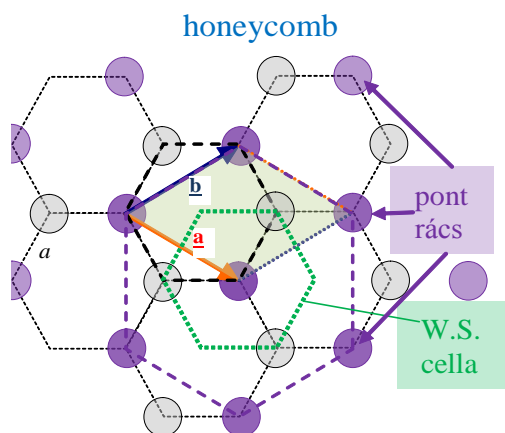
20 pont

3.) A kétdimenziós a oldalú méhsejt (hatszög) rács (honeycomb) és az elemi cellája az

<p>az alábbi ábrán látható. honeycomb</p> 	<p>a) Mekkora a méhsejt rácsban a kitöltés? (A kitöltés 2 dim.-ban: $K = T_{kör}/T_{cella}$) 10 pont</p> <p>b) Hányadrésze ez a kitöltés a szoros pakolású háromszög rács kitöltésének ($K^{hc}/K^{tr}=?$) 5 pont</p> <p>c) Rajzold meg az \underline{a}, \underline{b} rácsvektorok alkotta pontrácsot és a hozzá tartozó Wigner-Seitz cellát! 10 pont</p> <p>d) Határozd meg, hogy e Wigner-Seitz cella területét és kerületét! ($T^{W.S}=?$, $K^{W.S}=?$) 15 pont</p> <p>e) Határozd meg, hogy a méhsejt rács üregeibe hányszor nagyobb atom fér be, mint a szoros pakolású rácsba! ($r^{hc}/r^{tr}=?$) 10 pont</p>
---	---

Megoldás:

a)



10 pont

$$N^{h.c.} = 6 * \frac{1}{3} = 2; T^{h.c.} = 6 * a^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{4} \right); a = 2R$$

$$a) \quad K^{h.c.} = \frac{N^{h.c.} * (R^2 * \pi)}{T^{h.c.}} = \frac{2R^2 \pi}{3\sqrt{3}/2 (2R)^2} = \frac{\sqrt{3}\pi}{9}$$

5 pont

$$N^{t.r.} = 6 * \frac{1}{3} + 1 = 3; T^{t.r.} = 6 * a^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{4} \right); a = 2R$$

$$b) \quad K^{t.r.} = \frac{N^{t.r.} * (R^2 * \pi)}{T^{t.r.}} = \frac{3R^2 \pi}{3\sqrt{3}/2 (2R)^2} = \frac{\sqrt{3}\pi}{6}$$

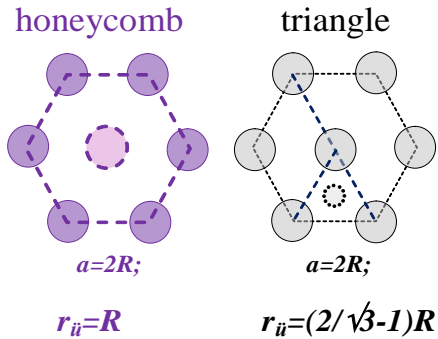
10 pont

$$\frac{K^{h.c.}}{K^{t.r.}} = \frac{N^{h.c.}}{N^{t.r.}} = \frac{2}{3}$$

- c) A pontrácsot a fenti rajz lila atomjai (minden második atom) alkotják.
Ez $\sqrt{3}a$ oldalú háromszögrács (*triangle*), melynek a *Wigner-Seitz* cellája a *zöld hatszög*.
- d) A hatszög éle a , ebből következően kerülete : $K^{W.S.} = 6a$; területe: $T^{W.S.} = 3\sqrt{3} a^2 / 2$.

15 pont

e)



-A méhsejt rács üregébe egy eredeti atomokkal egyező méretű atom fér be.

$$r^{h.c.} = R.$$

-A háromszögrácsban a súlyvonal kétharmada a kis és a nagy sugár összege:

$$r^{\ddot{u}} + R = 2R/\sqrt{3} ; r^{tr.} = (2/\sqrt{3} - 1)R , \text{ tehát}$$

$$\frac{r^{h.c.}}{r^{tr.}} = \frac{1}{\frac{2}{\sqrt{3}} - 1} = (2\sqrt{3} + 3)$$

10 pont

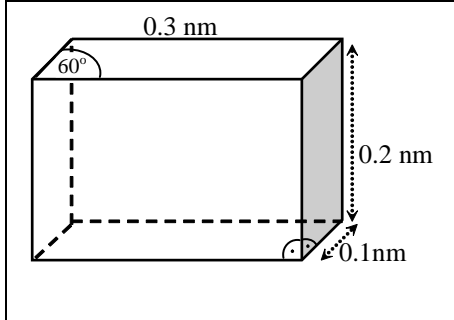
Budapest, 2010. Október 25.

dr. Kojnok József

III. Fizika BSC Kondenzált anyag fizika
Zárthelyi dolgozat II.A

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

$$\mathbf{a}_x = 3a (1, 0, 0); \quad \mathbf{a}_y = \frac{1}{2}a (1, \sqrt{3}, 0); \quad \mathbf{a}_z = 2a (0, 0, 1) \quad ; \quad (a = 0.1 \text{ nm})$$



a) Rajzolja le a Wigner-Seitz cella xy-síkra vett vetületét és adja meg a térfogatát!

$$(V_{w.s.}=?)$$

20 pont

b) Határozza meg a reciprok rácsvektorokat és a Brillouin zóna térfogatát! ($\mathbf{b}_i=?; V_{B.z.}=?$)

15 pont

2.) Egy $2N$ tagú ionláncban N db m tömegű pozitív és N db M tömegű negatív ion váltakozik egymástól a távolságra.

Az ionos kötés párpotenciálja: $V(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\lambda}{r^n}$ ahol adott az α , a λ és az n .

Segítségül a diszperziós reláció:

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

ahol a D rugóállandó és az a atomtávolság a fenti paraméterekből származtatandó!

a) Mekkora a \mathbf{v}_h hangsebesség a Brillouin zóna centrumában: ($q \approx 0$ -nál).!

10 pont

b) Mekkora lesz a csoportsebesség a Brillouin zóna felénél ($q = K/4$ -nél; $\mathbf{v}_{K/4}=?$) az **akusztikus** ágban?

15 pont

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

5 pont

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

3.) Egy fermion-szerű részecske **diszperziós relációja** a definíció szerint:

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}) = \alpha k^{5/4}$$

a) Ábrázolja e **kétdimenziós** részecske állapotosságát és adja meg az energiafüggését? ($\mathbf{D}(E) \sim E^{\phi}; \phi=?$)

25 pont

b) E részecske Fermi energiájának hányad része az **átlagenergia**?

$$(\mathbf{E}_{\text{átl.}} = \gamma \mathbf{E}_F; \gamma=?) \quad (\text{def.: } \mathbf{E}_{\text{átl.}} = E_{\text{össz.}}/N)$$

10 pont

Maximális pontszám: **115 pont**

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

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

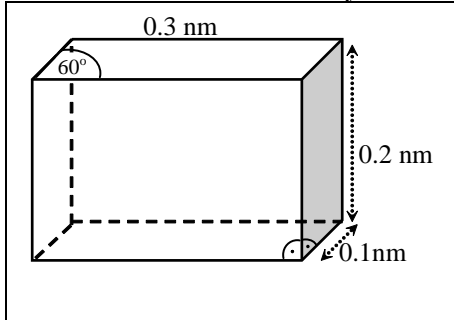
Budapest, 2010. December 9. 9⁵⁰ -10⁵⁰.

dr. Kojnok József

III. Fizika BSC Kondenzált anyag fizika
Zárthelyi dolgozat II.B

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

$$\mathbf{a}_x = 3a (1, 0, 0); \quad \mathbf{a}_y = \frac{1}{2}a (1, \sqrt{3}, 0); \quad \mathbf{a}_z = 2a (0, 0, 1); \quad (a = 0.1 \text{ nm})$$



b) Rajzolja le a Wigner-Seitz cella xy-síkra vett vetületét és adja meg a térfogatát!

$$(V_{w.s.}=?)$$

20 pont

b) Határozza meg a reciprok rácsvektorokat és a Brillouin zóna térfogatát! ($\mathbf{b}_i=?; V_{B.z.}=?$)

15 pont

2.) Egy $2N$ tagú ionláncban N db m tömegű pozitív és N db M tömegű negatív ion váltakozik egymástól a távolságra.

Az ionos kötés párpotenciálja: $V(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\lambda}{r^n}$ ahol adott az α , a λ és az n .

Segítségül a diszperziós reláció:

$$\omega_{\pm}(q) = \sqrt{D} \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4 \sin^2 qa}{mM}}}, \text{ ahol a } D \text{ rúgóállandó és az } a$$

atomtávolság a fenti paraméterekből származtatandó!

a) Mekkora a v_h hangsebesség a Brillouin zóna centrumában: ($q \approx 0$ -nál)!/

10 pont

b) Mekkora lesz a csoportsebesség a Brillouin zóna felénél ($q = K/4$ -nél; $v_{K/4}=?$) az **optikai** ágban?

15 pont

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

5 pont

d) Add meg ezen frekvenciához tartozó $D(\omega_{K/4})$ állapotűrűsége! _____

15 pont

3.) Egy fermion-szerű részecske **diszperziós relációja** a definíció szerint:

$$E(\mathbf{k}) = \alpha k^{5/4}$$

a) Ábrázolja e **kétdimenziós** részecske állapotűrűségét és adja meg az energiafüggését? ($D(E) \sim E^{\phi}; \phi=?$)

25 pont

b) E részecske Fermi energiájának hányad része az **átlagenergia**?

$$(E_{\text{átl.}} = \gamma E_F; \gamma=?) \text{ (def.: } E_{\text{átl.}} = E_{\text{össz.}}/N)$$

10 pont

Maximális pontszám: **115 pont**

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

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

Budapest, 2010. December 9. 9⁵⁰ -10⁵⁰.

dr. Kojnok József

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

1.) $M_j (=8 \text{ gramm})$ tömegű, 0°C -os jeget megolvasztunk, majd a vizet 100°C -ra melegítjük, s aztán gőzzé forraljuk el. Mennyivel nőtt eközben az entrópia ($S_{g\ddot{o}z}^{100C} - S_{j\ddot{e}g}^{0C} = ?$)?

(A jég olvadáshője: $L_{olv.} (= 334 \text{ kJ/kg})$, a víz fajhője: $c (= 4.2 \text{ kJ/kgK})$, a víz forráshője: $L_{forr.} (= 2256 \text{ kJ/kg})$). 15 pont

2.) 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 $V_o = 1.0 \text{ eV}$ és $r_o = (\sigma) = 0.4 \text{ nm}$.

a) Mekkora ilyenkor a taszító erő /Newtonban/ ($F_{\tau} = ?$)? 5 pont

b) Hányadrészére csökken ez a taszító erő, ha $r^* = 0.42 \text{ nm}$ atom-távolságúra „tágítom” a kristályt ($F_{\tau} = ?$)? ($1 \text{ eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$) 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 ($\rho/\sigma = ?$)? 15 pont

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

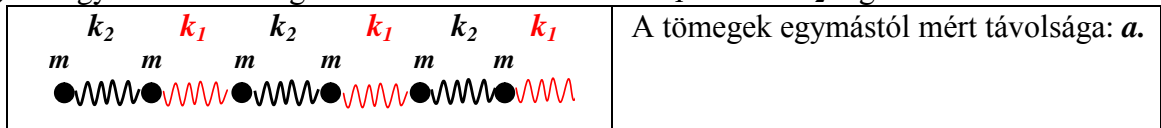
3.) a) A gyémánt (D) sűrűsége: 3.52 g/cm^3 , kristályszerkezete: gyémánt amely, két egymásba tolt FCC rács, ahol az atomi pozíciók a cellában: $(0,0,0)$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, továbbá: $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$, $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$, $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$. A szén atomsúlya **12**. Mekkora a köbös (FCC) elemi cella élhossza ($a = ?$)? /Emlékeztetőül az Avogadro szám: $6 \times 10^{23} / \text{mol}$./ 10 pont

b) Mekkora a tércentrumba 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.: $K = V_{g\ddot{o}mb\ddot{o}k} / V_{cella}$) 10 pont

4.) Az egyforma m tömegek alkotta atomláncot N db k_1 és N db k_2 rugó köti össze váltakozva.



Ekkor a diszperziós reláció:

$$\omega^2 = (2k^+/m) \pm \sqrt{(2k^+/m)^2 \cos^2(qa) + (2\Delta k/m)^2 \sin^2(qa)}$$

, ahol $k^+ = (k_1 + k_2)/2$ és $\Delta k = (k_1 - k_2)/2$!

e) Mekkora a v_h hangsebesség a Brillouin zóna centrumában: ($q \approx 0$ -nál)! 20 pont

f) Mekkora lesz a csoportsebesség a Brillouin zóna harmadánál ($q = K/6$ -nél; $v_{K/6} = ?$) az akusztikus ágban? 15 pont

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

Maximális pontszám: 115 pont

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

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

Budapest, 2010. December 21. 10⁴⁵ - 11⁴⁵.

dr. Kojnok József