III.Fizika BSC ***Kondenzált anyag fizika***

Zárthelyi dolgozat I.

Megoldások.

2012

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

$p = -D(V-V_o) + AT$, és $E = CT + \frac{1}{2} D (V-V_o)^2$,

ahol az ***A, C, D,*** V_o ***ismert*** pozitív anyagi állandók!

Mólnyi mennyiségű szilárdtestet, mely kezdetben p_1, T_1 állapothatú, **állandó nyomáson** felmelegítünk T_1-ről → T_2-re.

a) Határozd meg az entrópia1 növekedését ebben az izobár folyamatban (S_2-S_1 =ΔS =?)! ***20 pont***

b) Határozd meg a belsőenergia növekedését is (ΔE =?)! ***10 pont***

Megoldás:

a) $dE = T\,dS - p\,dV$

$$\Delta S = \int dS = \int \frac{dE}{T} + \int \frac{p}{T} dV = \int \frac{CdT + D(V-V_o)dV}{T} + \int \frac{-D(V-V_o) + AT}{T} dV$$

$$\Delta S = \int \frac{CdT}{T} + \int \frac{AT}{T} dV = C \ln T\Big|_1^2 + AV\Big|_1^2 = C\ln\left(T_2/T_1\right) + A(V_2 - V_1)$$

$$V_i = V_o + \frac{AT_i - p}{D}, \quad V_2 - V_1 = \frac{A}{D}(T_2 - T_1)$$

$$\Delta S = C\ln\left(T_2/T_1\right) + \frac{A^2}{D}(T_2 - T_1)$$ ***20 pont***

b) A belsőenergia növekedés: $\Delta E = E_2 - E_1$

$$\Delta E = C(T_2 - T_1) + \tfrac{1}{2} D\left((V_2 - V_o)^2 - (V_1 - V_o)^2\right) =$$

$$E_2 - E_1 = C(T_2 - T_1) + \tfrac{1}{2} D\left(\left(\frac{AT_2 - p_1}{D}\right)^2 - \left(\frac{AT_1 - p_1}{D}\right)^2\right)$$ ***10 pont***

$$\Delta E = \left(C - \frac{A}{D} p_1\right)(T_2 - T_1) + \frac{A^2}{2D}\left(T_2^2 - T_1^2\right)$$

2.) Egy ionkristály párpotenciálja: $V(r)^{ion} = -\left(\frac{\alpha}{r}\right) + \left(\frac{\lambda}{r^n}\right)$,

kohéziós potenciálja: $U(R)^{ion} = -\left(\frac{\alpha}{R}\right)A_M + \left(\frac{\lambda}{R^n}\right)A_n$, ahol adott ***α,*** λ, és ***n,*** A_M, A_n.

Az r_o a párpotenciál minimum helye, az R_o kohéziós potenciál minimumhelye.

a) Határozd meg e két egyensúlyi távolság viszonyát a megadott paraméterek függvényében! ($\left(\frac{r_o}{R_o}\right) = ?$) ***25 pont***

b) Mekkora a két potenciál minimum aránya? $\frac{V(r_o)}{U(R_o)} = ?$ ***10 pont***

Megoldás:

a) $$\left.\frac{\partial V(r)^{ion}}{\partial r}\right|_{r_o} = 0 = -\left(\frac{\alpha}{r_o}\right)+\left(\frac{\lambda}{r_o^{\,n}}\right)n \Rightarrow r_o = \sqrt[n-1]{n\frac{\lambda}{\alpha}}$$

$$\left.\frac{\partial U(r)^{ion}}{\partial r}\right|_{R_o} = 0 = -\left(\frac{\alpha}{R_o}A_M\right)+\left(\frac{\lambda}{R_o^{\,n}}A_n\right)n \Rightarrow R_o = \sqrt[n-1]{n\frac{\lambda A_n}{\alpha A_M}}$$

$$\left(\frac{r_o}{R_o}\right) = \sqrt[n-1]{\frac{A_M}{A_n}}$$

25 pont

$$V(r_o)^{ion} = -\left(\frac{\alpha}{r_o}\right)+\left(\frac{\lambda}{r_o^{\,n}}\right) = -\left(\frac{\alpha}{r_o}\right)\left(1-\frac{1}{n}\right)$$

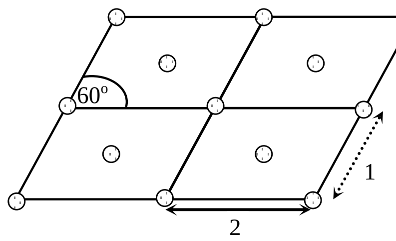
$$U(R_o)^{ion} = -\left(\frac{\alpha}{R_o}A_M\right)+\left(\frac{\lambda}{R_o^{\,n}}A_n\right) = -\left(\frac{\alpha}{R_o}A_M\right)\left(1-\frac{1}{n}\right)$$

b) $$\frac{V(r_o)}{U(R_o)} = \frac{R_o}{r_o}\frac{1}{A_M} = A_M^{-1}\sqrt[n-1]{\frac{A_n}{A_M}}$$

10 pont

3.) Egy kétdimenziós *négyszög* rács cellája közepén is van rácspont!

A cella az alábbi ábrán látható. Az élek 1 és 2 egység hosszúak.



Az élszögek 60° és 120°.

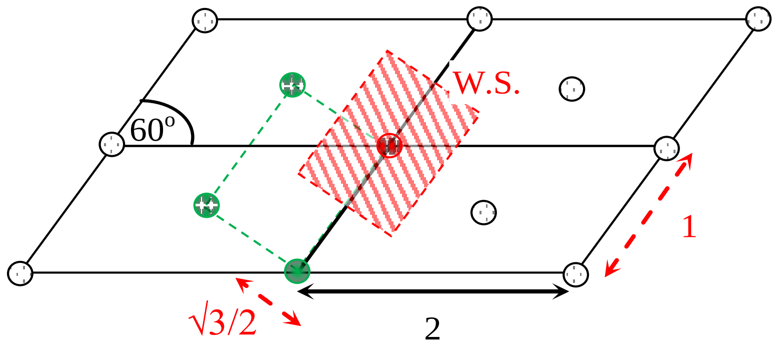
a) Rajzold meg a Wigner-Seitz cellát! ***15 pont***

b) Határozd meg, hogy e Wigner-Seitz cella területét! ***(*** $t^{W.S.}$***=?)*** ***15 pont***

c) Mekkora a kitöltés (***K=?)*** ***10 pont***

(A kitöltés 2 dim.-ban: $K = T_{kör}/T_{cella}$)

Megoldás:



a) A rács négyszög-rács. A zöld téglalap a primitív cella.
A Wigner-Seitz cella ezzel egybevágó téglalap.
Az oldalak 1 és √3/2 hosszúságúak.
15 pont

b) A Wigner-Seitz cella területe: $t^{W.S.} = \sqrt{3}/2$! ***15 pont***

c) A kitöltéskor a téglalap rövidebb oldalán van érintkezés, azaz $R=\sqrt{3}/4$!

$$K = \frac{\pi R^2}{T^{W.S.}} = \frac{\pi\left(\sqrt{3}/4\right)^2}{\sqrt{3}/2} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8}$$

10 pont