III.Fizika BSC *Kondenzált anyag fizika*

Zárthelyi dolgozat II.

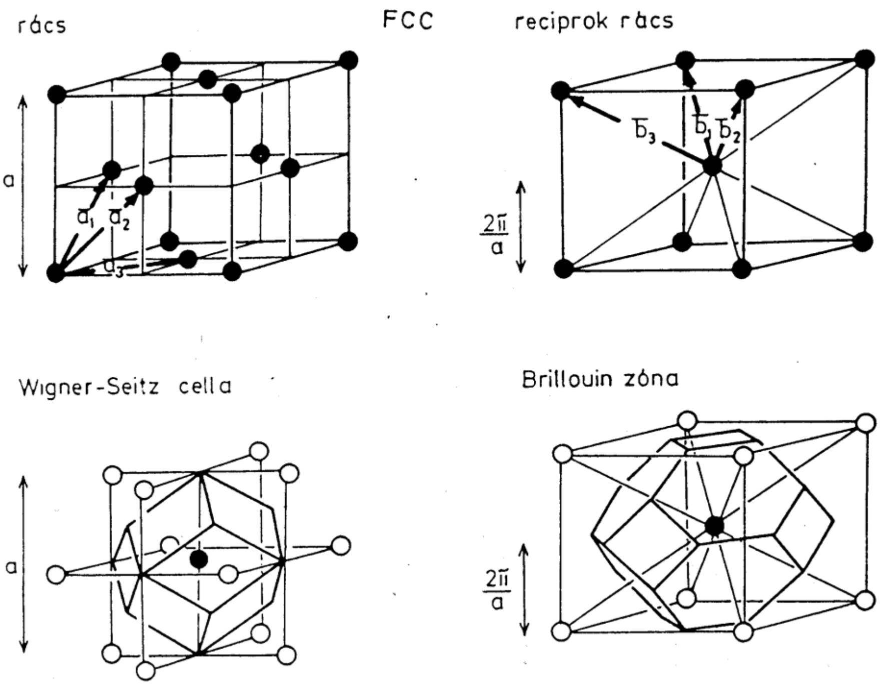
Megoldások

2012

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

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

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



a) Számold ki a **Wigner-Seitz** cellába beírható legnagyobb ***gömb*** térfogata és a **Wigner-Seitz** térfogatának hányadát ($\mathbf{V}^{\mathbf{W.S.}}_{gömb}/\,\mathbf{V}^{W.S.}_{cella}$=?)! ***10 pont***
Mi a hányados jelentése? ***5 pont***

b) Számold ki a **B**rillouin **z**ónába beírható legnagyobb ***gömb*** térfogata és a **B**rillouin **z**óna térfogatának hányadát ($\mathbf{V}^{B.z.}_{gömb}/\,\mathbf{V}^{B.z.}$=?)! ***10 pont***

c) Mekkora a két gömb sugarának szorzata ($\mathbf{r}^{W.S.}_{gömb}\, \mathbf{r}^{B.z.}_{gömb}$=?)? ***10 pont***

Megoldás:

a) $V^{W.S}_{gömb} = {}^4\!/_3\, \pi\, r^3_{W.S.}\,,ahol\, r_{W.S.} = a\, {}^{\sqrt{2}}\!/_4\,; V^{W.S}_{cella} = {}^1\!/_4\, a^3$

$$\frac{V^{W.S}_{gömb}}{V^{W.S}_{cella}} = \frac{{}^4\!/_3\, \pi\, (a\, {}^{\sqrt{2}}\!/_4)^3}{{}^1\!/_4\, a^3} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} \quad ; \quad K_{FCC} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6}$$ ***10 pont***

A hányados jelentése éppen a kitöltés, mivel a W.S. cella primitív cella, azaz egy rácspont (atom) lehet benne. ***5 pont***

b)

$$V^{B.z}_{gömb} = {}^4\!/_3\, \pi\, r^3_{W.S.}\,,ahol\, r_{B.z.} = b\, {}^{\sqrt{3}}\!/_4\,; V^{W.S}_{cella} = {}^1\!/_2\, b^3; ahol\, b = \frac{4\pi}{a}$$

$$\frac{V_{gömb}^{W.S}}{V_{cella}^{W.S}} = \frac{\frac{4}{3}\pi\left(b\frac{\sqrt{3}}{4}\right)^3}{\frac{1}{2}b^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} \qquad K_{BCC} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8}$$ ***10 pont***

c) $r_{W.S.} * r_{B.z.} = \left(a\frac{\sqrt{2}}{4}\right)\left(\frac{\sqrt{3}}{4}b\right) = \frac{\sqrt{6}}{4}$ ***10 pont***

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

ahol adott $\boldsymbol{r_o}$, $V(r_o)$ és ***n***, (nem adott: α, λ)! (Az $\boldsymbol{r_o}$ a párpotenciál minimum helye).

a) Az adott paraméterek, illetve az atom tömegének /$\boldsymbol{m_a}$/ az ismeretében határozza meg a **v** hangsebességet az egydimenziós ***L*** hosszúságú atomláncon /a Brillouin zóna centrumában: q≈0 -nál)./! ***20 pont***

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

c) Mekkora itt a körfrekvencia ($\boldsymbol{\omega_{K/6}}$**=?**)? Addja meg az ezen frekvenciához tartozó $\mathbf{D}(\boldsymbol{\omega_{K/6}})$ állapotsűrűséget! ***10** pont*

Megoldás:

a)

$$V(r_o) = -\left(\frac{\alpha}{r_o}\right) + \left(\frac{\lambda}{r_o^n}\right); \; -\left(\partial V/\partial r\right)_{r_o} = -\frac{\alpha}{r^2} + \frac{n\lambda}{r^{n+1}}\Big|_{r_o} = 0$$

$$k = \left(\partial^2 V/\partial r^2\right)_{r_o} = -2\frac{\alpha}{r^2} + \frac{n(n+1)\lambda}{r^{n+1}}\Big|_{r_o}$$

$$V(r_o) = -\left(\frac{\alpha}{r_o}\right)\left(1 - \frac{1}{n}\right) = \left(\frac{\alpha}{r_o}\right)\left(\frac{n-1}{n}\right); \; \frac{n\lambda}{r_o^{n+2}} = \frac{\alpha}{r_o^3}$$

$$k = \left(\partial^2 V/\partial r^2\right)_{r_o} = -2\frac{\alpha}{r_o^3} + \frac{(n+1)\alpha}{r_o^3} = \frac{\alpha}{r_o^3}\left(-2 + (n+1)\right) = \frac{\alpha}{r_o^3}(n-1)$$

$$k = -\frac{nV_o}{r_o^2}$$

$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{k}{m}}\sin\left(\frac{qa}{2}\right); v_{cs.} = a\sqrt{\frac{k}{m}}\cos\left(\frac{qa}{2}\right)$$

$q \approx 0$ *esetén és* $a = r_o$!

$$v_{cs.} = a\sqrt{\frac{k}{m}} = r_o\sqrt{\frac{1}{m}\left(\frac{-nV_o}{r_o^2}\right)} = \sqrt{\frac{-nV_o}{m}}$$ ***20 pont***

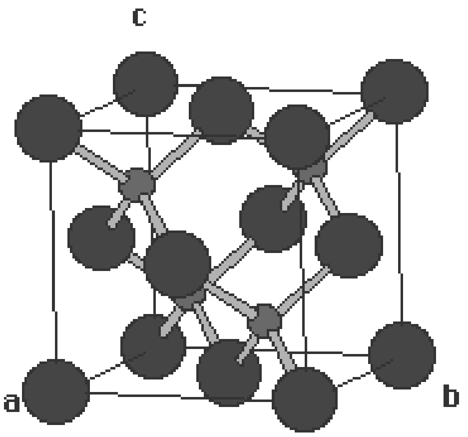
b) $q = \frac{K}{6} = \frac{\frac{2\pi}{a}}{6} = \frac{\pi}{3a}; \; \omega\left(\frac{K}{6}\right) = 2\sqrt{\frac{k}{m}}\sin\left(\frac{\pi}{6}\right) = \sqrt{\frac{k}{m}}$

$$v_f = \frac{\omega}{q} = \frac{\sqrt{\frac{k}{m}}}{\frac{\pi}{3a}} = \frac{3}{\pi} a \sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{3}{\pi}\sqrt{\frac{-nV_o}{m}}$$ **10 pont**

c) $$D(\omega) = \frac{L}{2\pi}\frac{1}{v_{csop}} = \frac{L}{2\pi}\frac{1}{r_o\sqrt{\frac{k}{m}}\cos\left(\frac{\pi}{3}\right)} = \frac{L}{2\pi}\frac{1}{r_o\sqrt{\frac{k}{m}}\,\sqrt{3}/2} = \frac{L}{\pi\sqrt{3}}\sqrt{\frac{-m}{nV_o}}$$ **10 pont**

3.) A zinkszulfid (ZnS) kristályszerkezete a gyémánthoz hasonlóan, két testátló negyed mentén egymásba tolt ***FCC*** rács.

A ZnS cella az alábbi ábrán látható.



Az atomi poziciók a cellában:
kén (S): (0,0,0), (0,½,½), (½,0,½), (½,½,0),
cink (Zn):(¼,¼,¼),(¼,¾,¾),(¾,¼,¾),(¾,¾,¼).
A Zn tehát az FCC kén (S) rács tetraéderes üregeiben (4-ben) ül.

a) Ismert a köbös (FCC) elemi cella ***a*** él-hossza, és tudjuk, hogy a kén és a cink atomok sugarainak aránya: ***R/r*** =2! Mekkora a kisebb (Zn) atom sugara (***r=?***)? ***15 pont***

b) Mekkora szerkezetben a kitöltés (***K =?)***? ***15 pont***

(Emlékeztetőül a kitöltés: $K = \frac{V^{gömb}}{V^{cella}}$)

Megoldás:

a) A Zn a testátló negyedében ül (az (¼,¼,¼) pontban), az origóban ül a S(0,0,0). A Zn és a S első szomszédok, érintkeznek a testátlón.

Tehát $R_{S.} + r_{Zn} = 3r_{Zn} = \left(\sqrt{3}/4\; a\right) \Rightarrow r = \frac{\sqrt{3}}{12}$ **15 pont**

b) Az ***a*** élhosszú (nagy) cellában (a fenti ábra) ***4 Zn*** (belül) és ***4 S*** (a határokon) atom van.

$$\frac{V_{gömb}}{V_{cella}} = \frac{4/3\,\pi(4r^3 + 4R^3)}{a^3} = \frac{4/3\,\pi 4(9r^3)}{a^3} = \frac{9\pi 16/3\left(\frac{\sqrt{3}}{12}a\right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{12}$$ **15 pont**

Emlékeztetőül a gyémánt kitöltése (amely fele a BCC-ének) ennek háromnegyede:

$$K_{Diamond} = \frac{\pi\sqrt{3}}{16}$$

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

Budapest, 2012. December 14.

dr. Kojnok József