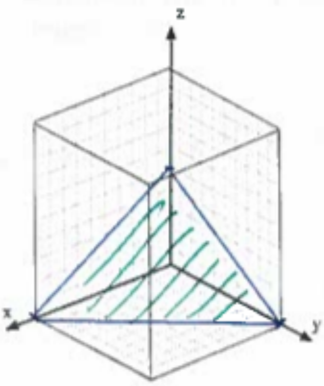
Kondenzált anyagok fizikája, 1. zárthelyi dolgozat

2018. NOVEMBER 16. (PÉNTEK) $08^{00} - 10^{00}$

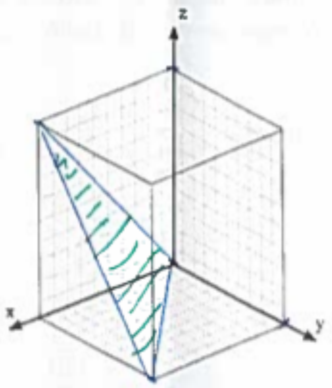
Tudnivalók

- feladatlapon is dolgozhat, a végén ezt is adja be! Minden lapon szerepeljen a név és a neptunkód!
- A feladatok megoldási ideje 90 perc.
- A rajzos feladatoknál nyugodtan használhat ceruzát, egyébként használjon tollat.
- A feladatok megoldásához író- és rajzeszközökön kívül semmilyen segédeszköz (könyv, füzet, mobileszköz, laptop stb.) **nem** használható.
- A megoldások egyes lépéseihez írjon 1-1 magyarázó mondatot is!

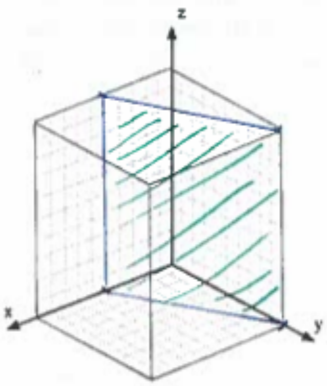
1. Miller indexek. (18 pont) Ebben a feladatban egy egyszerű köbös rács rácssíkját kell Miller-indexekkel jellemezni. Rajzoljon be a három üres koordináta-rendszerbe egy-egy olyan rácssíkot, amelynek helyzetét a koordináta-rendszer alatt található Miller-indexek írják le, valamint adja meg a három másik ábrán berajzolt sík Miller-indexét. (A felülvonás negatív Miller-indexet jelent.)



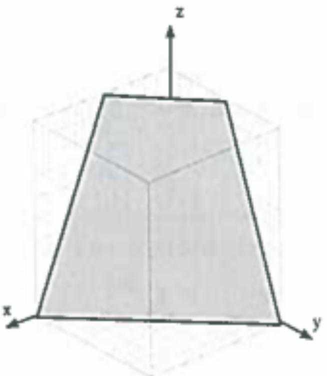
$hkl = 112$



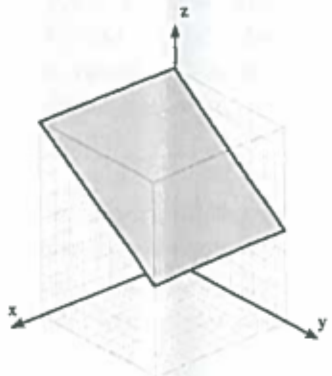
$hkl = \bar{1}11$



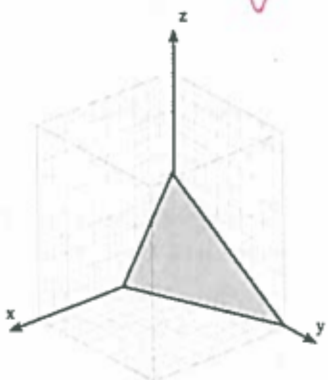
$hkl = 210$



$hkl =$ 2 2 1

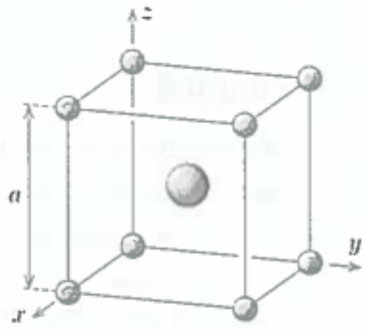


$hkl =$ 0 1 2



$hkl =$ 5 2 4

2. Röntgendiffrakció. (50 pont) Egy bizonyos kristály kétféle (**A** és **B**) atomból áll. A kristályos anyag kocka alakú konvencionális elemi cellája látható az ábrán. Az **A** jelű atomok a cella csúcsaiban (kisebb gömbök), a **B** jelű atom pedig a cella középpontjában (nagy gömb) helyezkedik el, a cella oldaléle (rácsparaméter) a hosszúságú. A kristályszerkezetet röntgentartományba eső, monokromatikus síkhullámmal sugározzuk be. Ebben a feladatban arra a kérdésre keressük a választ, hogy milyen lesz a kialakuló elhajlási kép szerkezete. Tegyük fel, hogy mind az **A**, mind pedig a **B** atomok elektronsűrűsége a mag körül nagyon jól lokalizált, ezért az atomszórási tényezők (a továbbiakban vizsgált hullámszámtartományban) jó közelítéssel konstansok, f_A és f_B. Tudjuk továbbá, hogy $f_B = 2fA$.



2.1. Hány és milyen atomból áll a bázis, ha a fenti kockát választjuk elemi cellának? Adjuk meg a bázist alkotó atomok helyvektorait az ábrán látható koordináta-rendszerben!

2.2. A röntgendiffrakciós maximumok irányait a köbös celláknál szokásos h, k, l indexekkel jellemezhetjük. Töltse ki az alábbi táblázatot a következőképpen. Ha egy adott irányban tökéletes kioltás történik, a megfelelő mezőbe tegyen X-et. Ha egy adott irányban reflexiós csúcsot tapasztalhatunk, a megfelelő mezőbe írjon egy számot, amely megadja a diffrakciós maximum relatív intenzitását az adott kristályszerkezetnél tapasztalható *legerősebb* diffrakciós maximum intenzitásához képest. (A táblázatban $N = h^2 + k^2 + l^2$.)

N	hkl	rel. intenzitás	N	hkl	rel. intenzitás
1	100	1/9	8	220	1
2	110	1	9	300, 221	1/9 , 1/9
3	111	1/9	10	301	1
4	200	1	11	311	1/9
5	210	1/9	12	2~~3~~22	1
6	211	1	13	320	1/9
(7)	–	–	14	321	1

$S(\underline{k}) = f_A \left[1 + 2e^{i\pi(h+k+l)}\right.$

$I(\underline{k}) \propto |S(\underline{k})|^2$

2.3. A fenti kristályos anyagot elporítjuk, és a szerkezetét pordiffrakciós elrendezésben vizsgáljuk. A diffraktogramon az első (azaz legkisebb 2θ-hoz tartozó) Debye-Scherrer gyűrűt $2\theta = 39.6°$-os szögnél láthatjuk. (Itt 2θ szokásosan a szóródott és a beeső sugárzás hullámszámvektorai által bezárt szög.) Legfeljebb hány Debye-Scherrer gyűrűt láthatunk a diffraktogramon, ha a film a mintát teljesen körbevette?

3. Diszlokációhurok. (32 pont) A koordináta-rendszerünk $x - y$ síkjában egy tisztán él jellegű diszlokációhurok fekszik, amelynek alakja R sugarú kör, Burgers-vektorának nagysága b. Az anyagot homogén módon megnyírjuk úgy, hogy a feszültségtenzor nemzérus elemei $\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = \sigma_0$.

Mekkora a diszlokációhurokra ható eredő forgatónyomaték nagysága? Válaszunkat R, σ_0 és b segítségéveladjuk meg!

F1.

d) tengelymetszet: 1 1 2

reciprok: 1 1 1/2

Miller: 2 2 1

e) tengelymetszet: ∞ 2 1

reciprok: 0 1/2 1

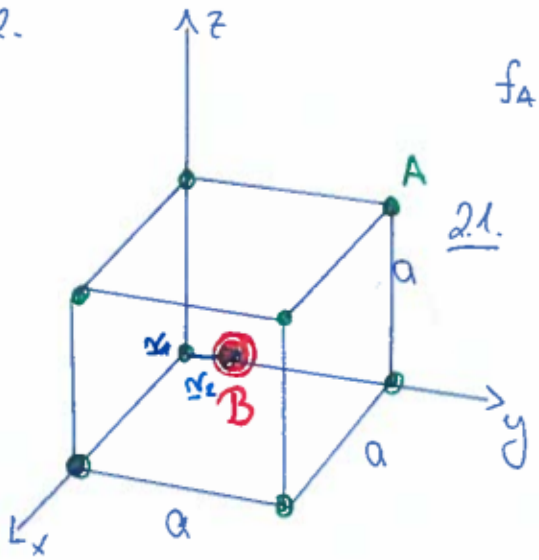
Miller: 0 1 2

f) tengelymetszet: 4/10 1 1/2

reciprok: $\frac{5}{2}$ 1 2

Miller: 5 2 4

F2.



$f_A, f_B \Rightarrow f_B = 2f_A$

2.1. $\left.\begin{array}{l} A: 8\cdot\frac{1}{8}=1 \\ B: 1 \end{array}\right\}$ 2 atomos bázis

$\underline{r}_1 = \begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix}, \quad \underline{r}_2 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$

2.2. szerkezeti tényező:

$$S(\underline{K}) = f_A e^{i\underline{K}\underline{r}_1} + f_B e^{i\underline{K}\underline{r}_2} \stackrel{(I)}{=}$$

$\underline{k}_0 - \underline{k}_i = \underline{K}$, köbös rács: $\underline{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}, \underline{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}, \underline{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$

$$\underline{K} = \underline{g}_{hkl} = h\underline{b}_1 + k\underline{b}_2 + l\underline{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\left\{h\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} + k\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} + l\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}\right\}$$

F2 folyt.

$$\stackrel{(*)}{=} f_A e^0 + f_B e^{i\pi(h+k+l)} = f_A\left[1+2e^{i\pi(h+k+l)}\right]$$

$$I(\underline{k}) \propto |S(\underline{k})|^2$$

$$I_{max}(\underline{k}) \propto f_A^2 \cdot (1+2)^2 = 9f_A^2$$ → ehhez viszonyítjuk a rel. intenzitást

$$\sqrt{N} = \sqrt{k^2+h^2+l^2}$$

2.3 Bragg-feltétel:

$$2 d_{hkl} \sin\Theta = \lambda$$

$$d_{hkl}^{SC} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} = \frac{a}{\sqrt{N}}$$

$$\frac{2a}{\sqrt{N}} \sin\Theta = \lambda$$

$$\Theta_1 = 19{,}8^\circ$$

$$2\Theta_1 = 39{,}6^\circ \rightarrow N=1$$

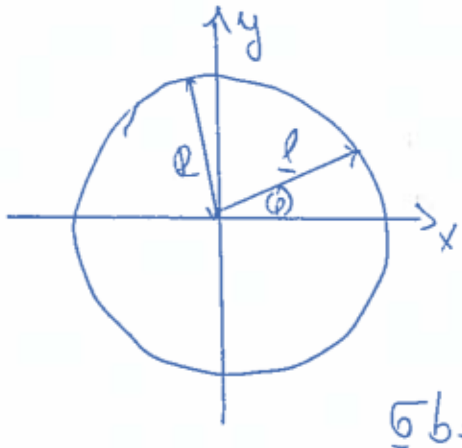
$$\frac{2a}{1} \sin\Theta_1 = \lambda \Rightarrow \sin\Theta_1 = \frac{\lambda}{2a} = 0{,}3387$$

A feltétel, hogy $|\sin\Theta| \leq 1$

$$\sin\Theta_N = \frac{\lambda}{2a}\sqrt{N} = 0{,}3387\cdot\sqrt{N} \Rightarrow \underline{\underline{N=8}}$$

Mivel $N=7$ nincs, ezért 7 gyűrűt lehet látni.

F3.



$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \sigma_0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \underline{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ b \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{\sigma}}\,\underline{b} = \begin{pmatrix} b\sigma_0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\underline{l} = R\begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \frac{d\underline{l}}{d\varphi} = R\begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow d\underline{l} = R\begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ 0 \end{pmatrix} d\varphi$$

Peach - Koehler

$$d\underline{F} = d\underline{l} \times (\underline{\underline{\sigma}}\,\underline{b}) = d\varphi R \begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} b\sigma_0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -d\varphi\, R b\sigma_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cos\varphi \end{pmatrix}$$

$$d\underline{T} = \underline{l} \times d\underline{F} = d\varphi\, R^2 b\sigma_0 \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cos\varphi \end{pmatrix} = d\varphi\, R^2 b\sigma_0 \begin{pmatrix} \sin\varphi\cos\varphi \\ -\cos^2\varphi \\ 0 \end{pmatrix} =$$

$$= d\varphi\, R^2 b\sigma_0 \begin{pmatrix} \sin(2\varphi)/2 \\ -\cos^2\varphi \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\cos^2\varphi = \frac{1+\cos(2\varphi)}{2} \qquad \int \cos^2\varphi\, d\varphi = \frac{\varphi}{2} + \frac{\sin(2\varphi)}{4} + C$$

$$\underline{T} = \int_0^{2\pi} d\varphi\, R^2 b\sigma_0 \begin{pmatrix} -\cos(2\varphi)/4 \\ -\frac{\varphi}{2} - \frac{\sin(2\varphi)}{4} \\ 0 \end{pmatrix}\Bigg|_{\varphi=0}^{2\pi} = R^2 b\sigma_0 \begin{pmatrix} 0 \\ -\pi \\ 0 \end{pmatrix} = -\pi R^2 b\sigma_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$