

# Fasta tillståndets fysisk VT 2015, RÖ 4

Sista inlämning 4.3. kl. 16:00.

## Uppgift 1

Visa att koncentrationen av Frenkel-par ges av uttrycket

$$c_{FP} = \sqrt{g_v g_i} e^{(S_v^f + S_i^f)/(2k_B)} e^{-(E_v^f + E_i^f)/(2k_B T)},$$

då trycket antas vara negligerbart.

## Uppgift 2

De vanliga ädelgaserna Ne, Ar, Kr och Xe har FCC-struktur och kan beskrivas med Lennard-Jones potentialen, med parameter värdena

	$\epsilon$ (eV)	$\sigma$ (Å)
Ne	0.0031	2.74
Ar	0.0104	3.40
Kr	0.0140	3.65
Xe	0.0200	3.98

som härletts i gasfas.

Förutspå på basen av dessa parametrar (a) jämviktsgitterkonstanten, (b) kohesionsenergin och (c) bulkmodulen för Ne, Kr, Ar och Xe och jämför med de experimentella värdena

## Uppgift 3

En "minimal" Tersoff-typs potential kan formuleras så att energin per bindning skrivs

$$V_{ij}(r_{ij}) = D e^{-2\alpha r} - 2b D e^{-\alpha r}$$

där  $b$  beror på atomens koordinationsstal  $Z$  som

$$b = \frac{a}{\sqrt{Z}}$$

Bara bindningar till närmaste grannar räknas. Konstanterna har värdena  $D = 164$  eV,  $\alpha = 1.23$  1/Å och  $a = 0.3$ . Vad är jämviktsavståndet till de närmaste grannarna för koordinationsstalen  $Z = 1, 3, 4, 12$  i denna potential? Vad är energin per bindning och kohesionsenergin för samma koordinationsstal?

Kommentera om bindingsavståndets, bindingsenergens och kohesionsenergens beroende på  $Z$  är ens kvalitativt rimliga?

## Uppgift 4

För isotropiska material anger man ofta Youngs modul och Poissons kvot istället för de elastiska modulerna. För vissa beräkningar behöver man ändå värdet på de elastiska modulerna.

Skriv de elastiska modulerna för ett isotropiskt material med hjälp av Youngs modul och Poissons kvot, och beräkna på basen av detta de elastiska modulerna för Wolfram ( $Y = 411$  GPa och  $\mu = 0.28$ ).

## Uppgift 5

Visa att i perfekta monatomära kubiska gitter gäller för Youngs modul

$$Y = (C_{11} + 2C_{12}) \frac{C_{11} - C_{12}}{C_{11} + C_{12}},$$

och Poissons kvot

$$\mu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}}.$$

## Uppgift 6

Material med hexagonala (HCP) gitter har fem oberoende elastiska moduler, som kan skrivas som följer, då  $\mathbf{e}_3$  är parallell med  $[0001]$  riktningen i gittret:

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & (C_{11} - C_{12})/2 \end{pmatrix}$$

Härled uttrycket för (den isothermiska) bulkmodulen  $B = -V(\partial P/\partial V)_T$  i form av de elastiska modulerna.

Räkna värdet på bulkmodulen för beryllium och kobolt, då elastiska modulerna i ordningen  $(C_{11}, C_{33}, C_{44}, C_{12}, C_{13})$  har värdena: Be (292.3, 336.4, 162.5, 26.7, 14) och Co (307, 358.1, 78.3, 165, 103) i GPa. Jämför med de experimentella värdena.

*Tips:* Du kan betrakta en storleksförändring  $e_{xx} = e_{yy} = e_{zz}$  och behöver inte ta i beaktande förändringen i förhållandet  $c/a$ .