

Inlämning senast fredag 10.2 kl. 16:00

1. Defektkoncentrationen c vid termodynamisk jämvikt är proportionell mot

$$c \propto e^{-(E_f + P\Omega)/k_B T} \quad (1)$$

där E_f är defektens formationsenergi, P är trycket och Ω volymen per atom. Vid normalt atmosfäriskt tryck är den tryckberoende termen $P\Omega$ så liten att man inte behöver beakta den. Uppskatta vid hur högt tryck termen börjar få betydelse för en typisk FCC-metall.

2. Potentialenergin för ett gitter härlett från Lennard-Jones potentialen kan skrivas

$$V_i(r_{nn}) = \frac{1}{2} 4\epsilon \left[A_{12} \left(\frac{\sigma}{r_{nn}} \right)^{12} - A_6 \left(\frac{\sigma}{r_{nn}} \right)^6 \right], \quad (2)$$

där

$$A_n = \sum_j \frac{1}{p_{ij}^n}. \quad (3)$$

Konstanterna $p_{ij} = r_{ij}/r_{nn}$ berättar för en viss kristallstruktur förhållandet mellan närmaste grannars avstånd r_{nn} och längre grannars avstånd. Summan löper över alla grannar j till en atom i i gittret, så att $j \neq i$.

Visa att för FCC-gittret är gittersummorna $A_6 \approx 14,45$ och $A_{12} \approx 12,13$ med valfri metod. Kom ihåg att beräkningen bör inkludera någon form av bevis för att resultatet har konvergerat. (6p)

Tips: För att bevisa konvergensen kan du t.ex. ersätta summan i ekv. (3) med en integral, eller skriva ett program som räknar summorna som funktion av antalet atomer i en kubisk kristall (centrerad på atom i).

3. Intensiteten för röntgendiffraktion från N_i partiklar i positionerna \mathbf{R}_i kan beräknas med ekvationen

$$I(\mathbf{K}) = \left| \sum_i^N e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_i} \right|^2 \quad (4)$$

där \mathbf{K} är en vektor i den reciproka rymden, och behöver alltså inte vara en vektor i det reciproka gittret. Det är dock behändigt att använda notationen för enkla kubiska gitter, så att \mathbf{K} skrivs

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{a} (h\mathbf{i} + k\mathbf{j} + l\mathbf{k})$$

där h , k och l är godtyckliga reella tal. Om h , k och l alla är heltal, är \mathbf{K} nu en vektor i det reciproka gittret för det enkla kubiska gittret med gitterkonstanten a .

Skriv ett datorprogram i valfritt programmeringsspråk (t.ex. Python, C, Fortran, Matlab/Octave etc.) som innehåller följande steg:

- (a) Skapa ett FCC-gitter bestående av N_x , N_y , N_z konventionella enhetsceller, med $N_x = N_y = N_z = 20$. Kom ihåg att totala antalet atomer ska vara $4N_xN_yN_z$. (6p)
- (b) Låt vektorn \mathbf{K} variera längs x -axeln i den reciproka rummet, från punkten $\frac{2\pi}{a}(-1, 0, 0)$ till punkten $\frac{2\pi}{a}(5, 0, 0)$. Beräkna den normaliserade intensiteten $I(\mathbf{K})$ enligt ekvation (4), ca 500 punkter behövs för god resolution, och rita sedan en graf över den erhållna kurvan. (6p)
- (c) Låt \mathbf{K} variera i x -axelns riktning i den reciproka rummet, nu från punkten $\frac{2\pi}{a}(-1, 1, 1)$ till punkten $\frac{2\pi}{a}(5, 1, 1)$. Beräkna den normaliserade intensiteten $I(\mathbf{K})$ enligt ekvation (4) med ca 500 punkters resolution och rita en graf över den erhållna kurvan. (6p)
- (d) Ändra kristallens storlek från $N_x = N_y = N_z = 20$ till $N_x = N_y = N_z = 40$ och upprepa beräkningarna i (b) och (c). Vilka förändringar — om några — uppstår i intensitetskurvorna? (3p)
- (e) Stämmer positionerna för Bragg-pikarna du observerar överens med de teoretiskt förutsagda topparna? Motivera ditt svar. (3p)

I delarna (b)-(d) är det enklast att skriva ut komponenterna i formen $K_x/(2\pi/a) = h$ osv (eftersom man då genast ser vilka värden på h, k, l som maximerar intensiteten) samt intensiteten vid den punkten, och sedan rita ut grafer över datan.

Lämna in din uppgift genom att maila källkoden för programmet samt graferna och motiveringarna i något lättläsbart format till jesper.byggmatar@helsinki.fi. Inkludera också eventuella kompilerings- och användningsinstruktioner.