

Inlämning senast fredag 17.2 kl. 16:00.

1. Visa att koncentrationen av Frenkel-par ges av uttrycket

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

då trycket antas vara negligerbart.

2. Vilken är den minsta Burgers-vektorn parallell med riktningen [111] som en dislokation i ett FCC-gitter kan ha?
3. Härled uttryck för

(a) jämviktsgitterkonstanten

(b) bulkmodulen

för en Lennard-Jones FCC-kristall, där potentialenergin för en atom  $i$  ges (som i RÖ3) av:

$$V_i(r_{nn}) = \frac{1}{2} 4\epsilon \left[ A_{12} \left( \frac{\sigma}{r_{nn}} \right)^{12} - A_6 \left( \frac{\sigma}{r_{nn}} \right)^6 \right], \quad A_{12} \approx 14,45, \quad A_6 \approx 12,13$$

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

	$\epsilon$ (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 och de härledda uttrycken ädelgasernas gitterkonstanter, kohesionsenergies och bulkmoduler. Jämför med experimentella värden.

4. 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  $a = 0.3$ .

Beräkna

- (a) jämviktsavståndet till de närmaste grannarna för koordinationstalen  $Z = 1, 3, 4, 12$
- (b) energin per bindning och kohesionsenergin för samma koordinationstal

Är bindningsavståndets, bindningsenergin och kohesionsenergin beroende på  $Z$  ens kvalitativt rimliga?

Parametrarna är valda så att bindningsavstånden och kohesionsenergin för  $Z = 3, 4$  ungefär motsvarar ett verkligt grundämne. Vilket är det?

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

Skriv de elastiska modulerna för ett isotropiskt material som funktioner av Youngs modul och Poissons kvot, och beräkna på basen av dessa de elastiska modulerna för wolfram ( $Y = 411$  GPa,  $\mu = 0,28$ ).

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 isotermska) 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  $c/a$ .