

Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών
Εισαγωγή στη Φυσική Στερεάς Κατάστασης

Εβδομάδα 11

- (1) Να δείξετε ότι το αντίστροφο πλέγμα του απλού κυβικού (πλεγματικής σταθεράς a) είναι πάλι απλό κυβικό (πλεγματικής σταθεράς $2\pi/a$)
- (2) Να δείξετε ότι το αντίστροφο πλέγμα του FCC είναι το BCC. Αν για το ευθύ FCC η πλεγματική σταθερά είναι a , πόση είναι για το αντίστροφο BCC;
- (3) Να δείξετε ότι το αντίστροφο του αντιστρόφου πλέγματος είναι το ευθύ. Με βάση αυτό και την προηγούμενη άσκηση, αμέσως συμπεραίνουμε ότι και το αντίστροφο του BCC είναι το FCC.

Εβδομάδα 12

- (1) Να υπολογίσετε στα πλαίσια του κλασικού δυναμικού Lennard–Jones (με δεδομένα τα ϵ, σ) και για τις δομές SC, BCC, FCC:
 - (α) την απόσταση ισορροπίας d_0 (εκεί που ελαχιστοποιείται η ενέργεια συνοχής)
 - (β) την ενέργεια συνοχής στην ισορροπία $U_0 \equiv U(d_0)$
 - (γ) το μέτρο ελαστικότητας στην ισορροπία $B_0 \equiv B(d_0)$

Θα πρέπει να καταλήξετε σε εκφράσεις της μορφής

$$\begin{aligned}d_0 &= \alpha \sigma \\ U_0 &= \beta \epsilon \\ B_0 &= \gamma \epsilon / \sigma^3\end{aligned}$$

όπου τα α, β, γ είναι αριθμητικοί παράγοντες, ανεξάρτητοι των ϵ, σ (των χαρακτηριστικών του υλικού), αλλά εξαρτώνται, μέσω των s_6, s_{12} , από τη δομή του πλέγματος. Υπολογίστε τα α, β, γ για τις δομές SC, BCC, FCC και συγκρίνετέ τα μεταξύ τους. Ποιά είναι η αναμενόμενη (σταθερότερη) δομή; Τι σημαίνει από φυσική άποψη το ότι το B_0 είναι μεγαλύτερο στο FCC;

Δίνονται τα πλεγματικά αθροίσματα $s_n = \sum_{i,j} \frac{1}{r_{ij}^n}$

	SC	BCC	FCC
s_6	8.40	12.25	14.45
s_{12}	6.20	9.11	12.13

- (2) Άσκηση 6 και 7, φυλλάδιο LCAO