F6060 Programování zkouška – termín 25. 5. 2023

1. Lauegram

V roce 1912 provedli Paul Knipping a Walter Friedrich na mnichovské univerzitě jeden z klíčových experimentů v dějinách fyziky. Spočíval v pozorování difrakčního obrazce při ozáření monokrystalu svazkem bílého rentgenového záření. Tím se současně projevila vlnová povaha rentgenového záření a také periodické uspořádání krystalů na atomární úrovni. Max von Laue, ideový původce uvedeného experimentu a vedoucí Knippinga a Friedricha, za tento zásadní objev získal nedlouho poté Nobelovu cenu. Byla udělena již v roce 1914, což podtrhuje význam práce Maxe von Laue a jeho pomocníků.

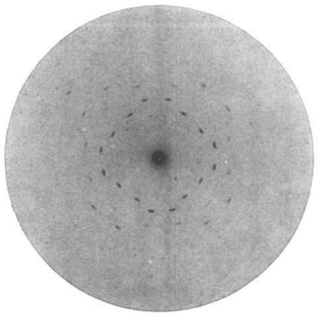
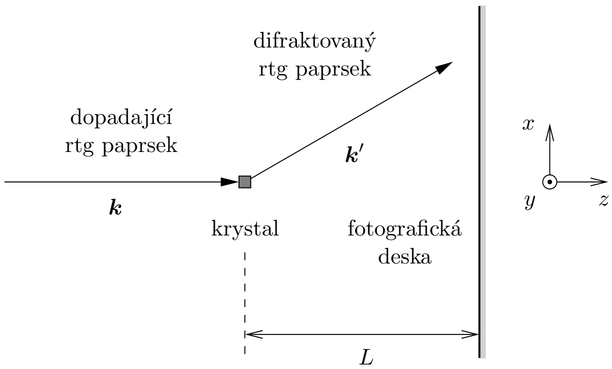


Fig. 5



V této úloze se pokusíte zkonstruovat příslušný difrakční obrazec, nazývaný obvykle lauegramem. Příklad lauegramu v podobě jedné z fotografií pořízených Knippingem a Friedrichem s použitím krystalu blejna zinkového (cizácky nazývaného sfalerit) je na levém obrázku.[1] Budeme uvažovat o uspořádání na průchod, jehož schéma je zachyceno na pravém obrázku. Náš krystal bude mít tzv. plošně centrovanou mřížku s mřížovým parametrem a. Vlnové vektory dopadajícího a difraktovaného paprsku jsou svázány difrakční podmínkou $\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}' = \boldsymbol{G}$, kde $\boldsymbol{G}$ je jeden z vektorů reciproké mřížky předepsaných vztahem $\boldsymbol{G} = \frac{2\pi}{a}(m_2 + m_3 - m_1, m_3 + m_1 - m_2, m_1 + m_2 - m_3)$ s celočíselnými hodnotami m_1, m_2, m_3. Vzhledem k použití bílého rentgenového záření, ve kterém je zastoupený široký rozsah vlnových délek, není obtížné podmínku splnit a lauegram tak obsahuje značné množství difrakčních stop. Detailní odvození jejich poloh zde provádět nebudeme, spokojíme se se vzniklým „receptem“ uvedeným v bodu (a).

(a) Sestavte lauegram v uspořádání na průchod s využitím následujícího postupu. Projděte všechny kombinace celočíselných indexů m_1, m_2, m_3, každý v rozsahu od -10 do 10, celkem tedy $21^3 = 9261$ kombinací. K tomuto účelu je vhodné použít tři vnořené cykly iterující postupně přes m_1, m_2, m_3. Pro každou kombinaci indexů vypočtěte redukovaný vektor reciproké mříže $\boldsymbol{g}$ s komponentami

$$g_x = m_2 + m_3 - m_1\,, \qquad g_y = m_3 + m_1 - m_2\,, \qquad g_z = m_1 + m_2 - m_3\,.$$

Je-li g_z kladné a velikost vektoru $\boldsymbol{g}$ menší než 15, t.j. $\sqrt{g_x^2 + g_y^2 + g_z^2} < 15$, pokračujte vyčíslením redukovaného vlnového vektoru rozptýleného paprsku s komponentami

$$k'_x = -g_x\,, \qquad k'_y = -g_y\,, \qquad k'_z = \frac{g_x^2 + g_y^2 + g_z^2}{2g_z} - g_z$$

Vyjde-li $k'_z > 0$, objeví se v rovině fotografické desky difrakční stopa o souřadnicích

$$x = L\,\frac{k'_x}{k'_z}\,, \qquad y = L\,\frac{k'_y}{k'_z}\,.$$

Uvedené podmínky se podaří splnit pro mnoho kombinací m_1, m_2, m_3 a získáte tak množství souřadnic x, y difrakčních stop, které vynesete do grafu jako body. Počítejte se vzdáleností fotografické desky od krystalu rovnou $L = 10$cm a difrakční stopy vykreslete v rozsahu $x \in [-5\text{cm}, +5\text{cm}]$, $y \in [-5\text{cm}, +5\text{cm}]$.

(b) Zkonstruujte i lauegram v uspořádání na odraz. K tomu postačí změnit podmínku $k'_z > 0$ na $k'_z < 0$.

[1] Snímek pochází z publikace W. Friedrich, P. Knipping, M. Laue, *Interferenz-Erscheinungen bei Röntgenstrahlen*, Sitzungsberichte der mathematisch-physikalischen Klasse der Königlich Bayerischen Akademie der Wissenschaften zu München, Mnichov 1912. Přetištěno v Annalen der Physik 41, 971 (1913). Bohužel je k dispozici jen poměrně nekvalitní sken.

2. Maxwellovský plyn

V této úloze statisticky vyhodnotíte údaje o souboru částic, který imituje klasický plyn. Rychlosti částic tohoto plynu byly vygenerovány náhodně, ale řídí se Maxwellovým rozdělením vyplývajícím z předpokladu rovnovážného stavu s určitou teplotou T. Jedním z vašich úkolů bude odhalení její hodnoty. Maxwellovo rozdělení je popsáno hustotou pravděpodobnosti

$$f(v_x, v_y, v_z) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right),$$

z níž lze odvodit pro tuto úlohu klíčové vztahy pro střední velikost rychlosti

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8k_\mathrm{B}T}{\pi m}}$$

a střední kvadratickou rychlost

$$\sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3k_\mathrm{B}T}{m}}\,.$$

Zde $k_\mathrm{B} = 1{,}3807 \cdot 10^{-23}\ \mathrm{J \cdot K^{-1}}$ značí Boltzmannovu konstantu a m je hmotnost částic plynu. Pro konkrétnost považujme náš plyn za dusík, jeho molekuly N_2 mají hmotnost $m = 4{,}65 \cdot 10^{-26}$ kg.
V souboru `molekuly.txt` jsou obsaženy údaje o souboru molekul v celkovém počtu $N = 10^5$. Každý řádek souboru `molekuly.txt` odpovídá jedné molekule a obsahuje trojici souřadnic x, y, z této molekuly zadanou v metrech a trojici komponent rychlosti v_x, v_y, v_z zadanou v metrech za sekundu.

(a) Stanovte střední velikost rychlosti a střední kvadratickou rychlost daného souboru molekul. Střední velikost rychlosti vyčíslujte jako aritmetický průměr

$$\langle v \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sqrt{v_{x,i}^2 + v_{y,i}^2 + v_{z,i}^2}\,,$$

kde $v_{x,i}$, $v_{y,i}$, $v_{z,i}$ jsou složky rychlosti i-té molekuly. Střední kvadratickou rychlost pak určíte ze vztahu

$$\sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(v_{x,i}^2 + v_{y,i}^2 + v_{z,i}^2\right)}.$$

Ze získaných hodnot středních rychlostí se pak pokuste pomocí výše uvedených vztahů určit teplotu plynu. Hodnoty teplot vypočtené na základě $\langle v \rangle$ a $\sqrt{\langle v^2 \rangle}$ se budou mírně lišit v důsledku příliš malého počtu molekul.

(b) V okamžiku, pro který platí údaje ze souboru `molekuly.txt`, vyplňují molekuly kouli o poloměru 1 cm se středem v počástku soustavy souřadnic. Zjistěte, kolik molekul následně zasáhne kruhový disk o poloměru $R = 5$ cm, jehož střed se nachází na kladné poloose x ve vzdálenosti $L = 10$ cm od počátku a jehož osa splývá s osou x. Za tímto účelem spočtěte molekuly s kladnou složkou $v_x > 0$, které navíc splňují jednoduše odvoditelnou podmínku

$$\sqrt{\left(y + L\,\frac{v_y}{v_x}\right)^2 + \left(z + L\,\frac{v_z}{v_x}\right)^2} \leq R\,.$$