

Dugga i fasta tillståndets fysik (FFY012 och FYP330)

Tid och plats: 2014-02-13 kl. 10.00–12.00, i V-salar

Examinatorer: Mats Granath [tel. 7869026, 0723087160, mats.granath@physics.gu.se] & Maths Karlsson [tel. 7728038, 0723526106, maths.karlsson@chalmers.se].

Hjälpmedel: Beta, Physics Handbook, Kursboken (Kittel), typgodkänd räknare eller annan räknare i fickformat dock utan inprogrammerad text eller ekvationer av intresse för duggan.

Bedömning: Max 10 p. 40 % av duggapoängen kan tillgodoräknas till påföljande tentor under ett års tid, d.v.s. till 2015-02-13.

Rättningsgranskning: Samtidigt som granskningen av ordinarie tenta.

Frågor under duggan: Bo Hellsing [tel. 0702 240 925] kommer titta till duggan för att svara på eventuella frågor. Mats och Maths är inte tillgängliga.

Uppgift 1

I ett röntgendiffraktionsexperiment ($\lambda = 1.54 \text{ \AA}$), utfört på blyoxid (PbO) som kristalliserar i en tetragonal struktur, fann man att de fyra starkaste reflexerna kunde relateras till följande diffraktionsvinklar:

hkl	θ (°)
101	14.32
110	15.91
112	24.30
211	27.30

Beräkna gitterparametrarna a och c för tetragonala fasen av PbO. (2 p)

Uppgift 2

Dispersionsrelationen för en oändligt lång endimensionell linjär kedja av atomer, med växelverkan endast mellan närmsta grannar, kan skrivas

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|, \quad (1)$$

där C är kraftkonstanten mellan närmsta grannar, m är en atoms massa, k är vågtalet, och $a = 2 \text{ \AA}$ är avståndet mellan närmsta grannar. I kontinuumgränsen (dvs för långa våglängder) är gittervågornas fortplantningshastighet 100 m/s.

a) Inom vilket energiintervall finner vi de möjliga fononenergierna? Ange den nedre och övre gränsen för intervallet i enheten meV. (2 p)

b) Vi antar nu att längden på kedjan är begränsad till 100 nm. Vad blir nu den minsta möjliga fononenergin? Samma dispersionsrelation som ovan antas gälla. (1 p)

c) Inelastisk neutronspridning kan användas för att mäta fonondispersioner. Varför fungerar inte inelastisk röntgenspridning lika bra? (1 p)

Uppgift 3

Betrakta en metall med fcc struktur och enkel kubisk enhetscell med gitterkonstant a och totalt antal atomer N . Metallen har en valenselektron per atom.

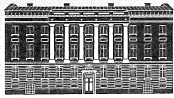
a) Skriv ner gittervektorer för den primitiva cellen och beräkna dess volym. Skriv ner reciproka gittervektorer och beräkna volymen av första Brillouinzonen (BZ). (1 p)

b) Visa att det får plats $N_{BZ} = 2N$ elektroner i 1sta BZ. (1 p)

c) Rita ut 1sta BZ i xy -planet. (Specificera explicit relevanta längder så att zonen är väldefinierad.) (1 p)

d) Beräkna radien på Fermisfären, och rita ut Fermiytan i xy -planet tillsammans med 1sta BZ. (1 p)

Lycka till!
Maths och Mats



CHALMERSKA
HUSET

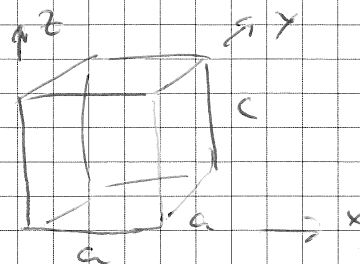
DUGGA 2014-02-13 - LÖSNINGAR

Uppgift 1

Röntgendiffraktion med röntgenstrålgång $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$

P_2 PbO

Tetragonal struktur



Starkaste reflexer $\theta(^{\circ})$

101 14.32

110 15.91

112 27.30

211 27.30

Braggs lag $\Rightarrow 2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{a}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}} \Rightarrow d_{hkl}^2 = \frac{1}{\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}$$

$$\Rightarrow 4 d_{hkl}^2 \sin^2 \theta = \lambda^2$$

$$\Leftrightarrow 4 \sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{d_{hkl}^2} \Leftrightarrow$$

$$\frac{4 \sin^2 \theta}{\lambda^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$



CHALMERSKA
HUSET

$$V. \text{ har } \frac{4 \sin^2 \Theta}{\lambda^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{c^2}{c^2}$$

Titz p^2 (110) - reflexer \Rightarrow

$$\frac{4 \sin^2(15.91^\circ)}{(1.54)^2} = \frac{2}{a^2} + 0 \Rightarrow$$

$$a = \sqrt{\frac{2 \cdot 1.54^2}{4 \sin^2(15.91^\circ)}} = 3.97 \text{ \AA}$$

Titz nu p^2 (101) - reflexer \Rightarrow

$$\frac{4 \sin^2(14.32^\circ)}{1.54^2} = \frac{1}{(3.97)^2} + \frac{1}{c^2} \Rightarrow$$

$$\left[\frac{4 \sin^2(14.32^\circ)}{(1.54^2)} - \frac{1}{(3.97)^2} \right]^{-2} = c \Rightarrow$$

$$c = 5.02 \text{ \AA}$$

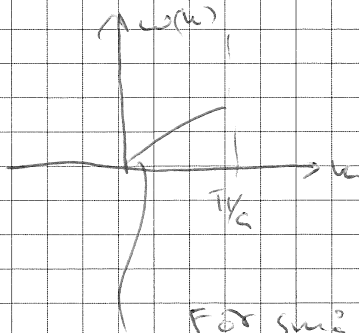
Svar:

$$a = 3.97 \text{ \AA}$$
$$c = 5.02 \text{ \AA}$$



Uppgift 2

V: har $\omega(k) = \sqrt{\frac{4c}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$



För små k gäller $\omega(k) = v_s \cdot k$

$$\Rightarrow \frac{d\omega}{dk} = v_s = \sqrt{\frac{4c}{m}} \cdot \frac{1}{2} a \cos\left(\frac{ka}{2}\right)$$

kontinuitetsgräns = $k \rightarrow 0 \Rightarrow \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \rightarrow 1$

a) $\Rightarrow v_s = \sqrt{\frac{4c}{m}} \cdot \frac{1}{2} a = 1000 \text{ m/s}$

• Öändligt lång kristall $\Rightarrow \lambda_{\text{max}} \rightarrow \infty \Rightarrow k_{\text{min}} = 0$

$$\Rightarrow \omega(k_{\text{min}}) = 0$$

• ω_{max} ? - FÖS för $k = k_{\text{max}} = \frac{\pi}{a}$

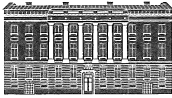
$$\omega_{\text{max}} = \sqrt{\frac{4c}{m}} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) = \sqrt{\frac{4c}{m}}$$

$$\sqrt{\frac{4c}{m}} = \frac{2 \cdot v_s}{a} \Rightarrow \omega_{\text{max}} = \frac{2 \cdot v_s}{a} = \frac{2 \cdot 1000 \text{ m/s}}{2 \cdot 10^{-10} \text{ m}}$$

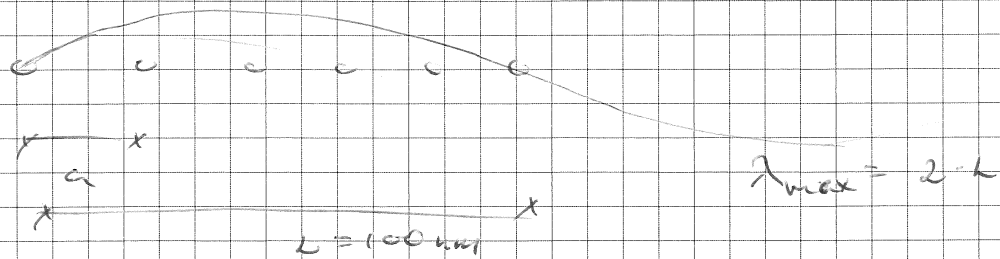
$$= 10^{12} \text{ (rad/s)}$$

$$\Rightarrow \text{minimal energi } E_{\text{min}} = \hbar \omega_{\text{min}} = 0$$

$$\text{maximal energi } E_{\text{max}} = \hbar \omega_{\text{max}} = \hbar \cdot 10^{12} \text{ rad/s} = \dots = \underline{\underline{0.658 \text{ eV}}}$$



b) Kedjans längd a nu begränsad till $100 \text{ nm} = L$
Vad blir nu E_{min} ?



$$\text{Maximalt } \lambda = 2 \cdot L$$

$$\Rightarrow k_{\text{min}} = \frac{2\pi}{\lambda_{\text{max}}} = \frac{2\pi}{2L} = \frac{\pi}{L}$$

$$\Rightarrow \omega_{\text{min}} = \sqrt{\frac{4c}{m}} \cdot \sin\left(\frac{k_{\text{min}} \cdot a}{2}\right) = \sqrt{\frac{4c}{m}} \sin\left(\frac{\pi a}{2L}\right)$$

$$= 10^{12} \text{ rad/s} \cdot \sin\left(\frac{\pi \cdot 2}{1000 \cdot 2}\right) = 10^{12} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{1000}\right)$$

$$\approx 10^{12} \cdot \frac{\pi}{10^3} = \pi \cdot 10^9 \text{ (rad/s)}$$

$$\Rightarrow E_{\text{min}} = \hbar \omega_{\text{min}} = 0.207 \cdot 10^{-2} \text{ meV}$$

c) $E_{\text{foton}} = \frac{\hbar c}{\lambda}$, för $\lambda = 1.5 \text{ \AA} \Rightarrow E_{\text{foton}} \approx \underline{\underline{8.3 \cdot 10^6 \text{ meV}}}$

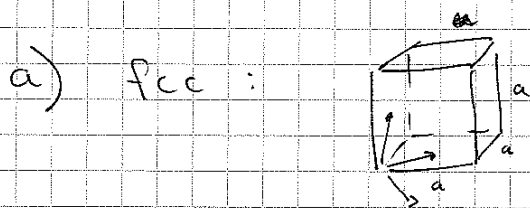
Att jämföras med $E_{\text{fonon}} \approx \underline{\underline{1-500 \text{ meV}}}$

Blir svart att upplösa den lilla skillnaden rent experimentellt

För neutroer gäller $E_{\text{neutr}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \left\{ k = \frac{2\pi}{\lambda}, \lambda = 1.5 \text{ \AA} \right\} \approx \underline{\underline{37 \text{ meV}}}$

∴ Inelastisk spridning med neutroer leder till stor skillnad

Dugga 13/2 2014, Uppgift 3



tex

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$$

$$V_{\text{cell}} = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)| = \dots = \frac{a^3}{4}$$

6.01 använd
 $\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$
 $\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y})$
 $\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 1, -1)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(1, -1, 1)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 1)$$

[lite ortodox, ekvivalent
 med $\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(-1, 1, 1)$]

$$V_{BZ} = |\vec{b}_3 \cdot (\vec{b}_1 \times \vec{b}_2)| = 2 \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 \left| \frac{1}{2} \cdot (-2, -2, \dots) \right| = 4 \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

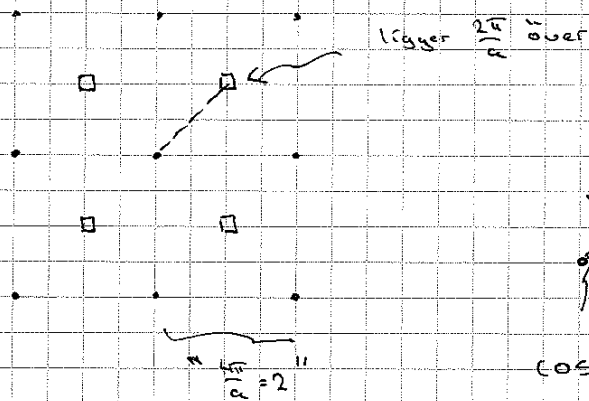
b)

$$N_{BZ} = 2 \cdot \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \cdot V_{BZ} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} V_{BZ} =$$

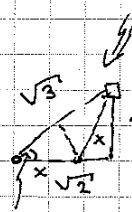
↑
språn

$$= 2 \frac{N V_{\text{cell}}}{(2\pi)^3} V_{BZ} = \underline{\underline{2N}}$$

c) i x-y planet
 reciproka gitter



i enhet $\frac{2\pi}{a}$



vi behöver x
 så att sträckorna
 är lika långa

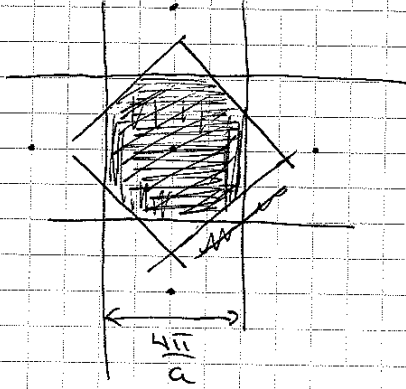
$$\cos\theta = \frac{\sqrt{3}/2}{1}$$

$$\cos\theta = \frac{\sqrt{3}/2}{x}$$

$$x = \frac{\sqrt{3}/2}{\cos\theta} = \frac{3}{2\sqrt{2}} \approx 1.06$$

$\frac{3}{2\sqrt{2}}$

137:



d)

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} = \left(3\pi^2 \frac{1}{V_{\text{cell}}}\right)^{1/3} = \frac{(12\pi^2)^{1/3}}{a}$$

$$k_F = \frac{2\pi}{a} \frac{(12\pi^2)^{1/3}}{2\pi} = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{3}{2\pi}\right)^{1/3} \approx 0.78 \frac{2\pi}{a}$$

Fermi

