

## TENTAMEN I FASTA TILLSTÅNDETS FYSIK F3/KF3 – FFY011

**Tid:** 2009-08-27-fm

**Lokal:** VV – salar

**Hjälpmedel:** Matematiska tabeller, Physics Handbook, TEFYMA, bifogad formelsamling, typgodkänd räknare eller annan räknare i fickformat dock utan inlagd text eller ekvationer av intresse för tentamen. Däremot är det OK att i räknarens minne ha värden på naturkonstanter som Plancks konstant och elektronmassan. Kursbetyget är baserat på summan av tentamenspoängen +30 % av duggapoängen. Gränserna är:  $9p < 3 < 14p$ ,  $14p \leq 4 < 17p$ ,  $5 \geq 17p$ . Granskningen: 10.9. kl 13-15 i T4034 (Fysik Glasburen).

**Examinator:** Igor Zoric                      tel: 3371, 0708 30 47 25  
Jari Kinaret                                      tel: 3668, 0706 45 72 68

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:

Miller index, hkl	$\Theta$ (grader)
101	14,32
110	15,91
112	24,30
211	27,30

Beräkna gitterparametrarna  $a$  och  $c$  för tetragonala fasen av PbO (4p).

2. Figuren nedan visar dispersionsrelationer för fononer i olika riktningar i Brillouin-zonen för kristallinkrypton vid 10 K, tagen från neutronspridningsexperiment av J. Skalyo, Y. Endoh och G. Shirane (Phys. Rev. B9, 1797, 1974). Vid 10 K har Krypton FCC-struktur med gitterparametern  $a = 5,7\text{\AA}$ . Parameter  $\zeta$  i figuren är en reducerad vågvektor där 1 motsvarar avståndet till Brillouin-zonkanten i (100) riktningen.
- a) Vid vilken temperatur kan man tillämpa Dulong-Petits lag för värmekapaciteten för kristallin krypton (1p)?
- b) Hur stor är värmekapaciteten för Kr då (i J/molK)? (1p)
- c) Panelen till vänster i figuren visar dispersionsrelationen i (100)-riktningen i Brillouin-zonen. Punkten "X" motsvarar Brillouin-zonkanten med  $\zeta=1$ , dvs,  $k=(2\pi/a)(1, 0, 0)$ . Uppskatta ljudhastigheten för longitudinella ljudvågor (i m/s) i denna riktning (1p).
- d) Finns det optiska fonongrenar i detta system som ej visas i figuren? Motivera ditt svar (1p).

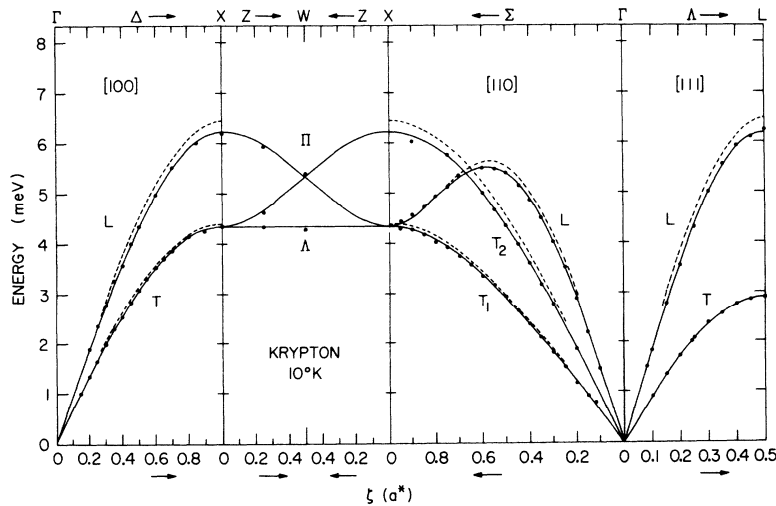
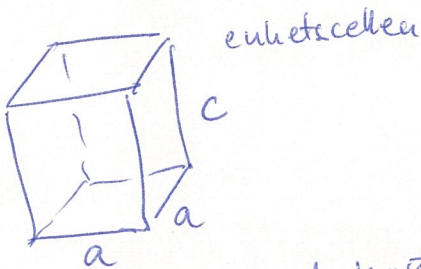


FIG. 3. Phonon dispersion of krypton at 10°K.  $\xi$  is the reduced wave vector. The solid line is a three-nearest-neighbor general force-constant fit to the data and the dashed line is a theoretical calculation by Barker *et al.* (Ref. 8).

3. Jämför Drudes, Sommerfelds och Blochs modeller för elektroner i fasta material. Vilka experimentella resultat kan, eller kan inte, förklaras med de olika modellerna? (4p)
  
4. a) Beräkna elektron- och hålkoncentrationer  $n$  och  $p$  i en halvledare med paraboliska lednings- och valensband  $E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$  och  $E(k) = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}$ , och visa att produkten  $np$  är oberoende av kemisk potential så länge  $E_v \ll \mu \ll E_c$ . (3p)
- b) förklara hur elektron- och hålkoncentrationerna i en halvledare påverkas av kemisk dopning. (1p)
  
5. En ferromagnet kan beskrivas med en parvis växelverkan  $U = -2 J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$  mellan spinnen  $\mathbf{S}_1$  och  $\mathbf{S}_2$  hos närliggande joner 1 och 2.
  - a) Härled sambandet mellan växelverkan  $J$  och den kritiska temperaturen  $T_c$  under vilken materialet har ett spontant magnetiskt moment. (3p)
  - b) Vad är det fysikaliska ursprunget av växelverkan  $J$ ? Hur kan man se att den inte kan uppstå från en klassisk växelverkan  $\sim (1/r^3) \mu_0 \mu_1 \mu_2$  mellan två atomära dipolmagneter med magnetiska moment  $\mu_1$  och  $\mu_2$ ? (1p)

Lycka till  
Igor och Jari

1) tetragonal struktur



För en tetragonal kristall Bragg's lag ser:

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

För (110) reflexen ( $l=0$ ) försvinner sista termen och vi får

$$a = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \sin 15.91 = \underline{\underline{3.97 \text{ \AA}}}$$

För att erhålla  $c$  håller vi på (101) reflexen:

$$c^2 = \left( \frac{4 \sin^2 14.32}{\lambda^2} - \frac{1}{a^2} \right)^{-1} = \underline{\underline{5.02 \text{ \AA}^2}}$$

2) a) Från figuren ser vi att max. fononenergi är 6 meV  
~~da~~  $\Rightarrow$  om temperaturen är sådan att  $k_B T > 6 \text{ meV}$   
 då är alla fononer termiskt exciterade:

$$k_B T > 6 \text{ meV} \Rightarrow \underline{\underline{T \geq 45 \text{ K}}} \text{ då gäller Dulong-Petit}$$

b) uolar  $C_p = 3N_A k_B = 3R = 24.9 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$

c) Ljshastigheten (vid  $k \rightarrow 0$ ) uppskattas till 126 m/s  

$$v = \frac{d\omega}{dk} = \underline{\underline{126 \text{ m/s}}}$$

d) Nej. FCC strukturer har en atom per primitiv cell  
 $\Rightarrow$  inga optiska fononer.

4. Paraboliska band, kombinationer och Bloch-modeller för elektroner i fasta material. Vilka experimentella resultat kan, eller kan inte, förklaras med de olika modellerna? (6p)

2

Svar

Drude: klassisk modell baserat på kollisioner mellan rörliga elektroner och statistiska spridningscentra. Förklarar t.ex. Ohms lag  $j \sim E$  och sambandet mellan elektrontäthet och ledningsförmåga; ger ungefär rätt värde för Wiedemann-Franz kvoten mellan elektrisk och termisk ledningsförmåga.

Sommerfeld: semiklassisk modell som kombinerar kvantstatistik (elektroner är fermioner) med klassisk dynamik. Förklarar varför Drude-värdet för elektronernas värmekapacitet är två storleksordningar fel, och ger sambandet  $C \sim T$

Bloch: kvantmekanisk beskrivning av elektroner och deras växelverkan med joner. Förklarar förekomsten av elektronband samt varför vissa material är metaller och andra isolatorer. Kan inte förklara fenomen som är anknutna till växelverkan mellan elektroner som supraledning.

4. a) beräkna elektron- och hålkoncentrationer  $n$  och  $p$  i en halvledare med paraboliska lednings- och valensband  $E(k) = E_c + (\hbar^2 k^2)/(2m_e)$  och  $E(k) = E_v - (\hbar^2 k^2)/(2m_h)$ , och visa att produkten  $np$  är oberoende av kemisk potential så länge  $E_v \ll \mu \ll E_c$ . (4p)  
b) förklara hur elektron- och hålkoncentrationerna i en halvledare påverkas av kemisk dopning. (2p)

Svar: (a)

om  $(\mu - E_v) \gg kT$  och  $(E_c - \mu) \gg kT$ , ges sannolikheten att ett tillstånd med energi  $\epsilon$  är bemannat av en elektron  $\exp(-\beta(\epsilon - \mu))$  och sannolikheten att tillståndet är bemannat av ett hål ges av  $\exp(-\beta(\mu - \epsilon))$ . Tillståndstätheten av ett paraboliskt ledningsband ges av  $D(\epsilon) = (2m/\hbar^2)^{3/2} (1/(2\pi)^2) \sqrt{\epsilon - E_c}$  så att elektrontätheten blir  $n = \int_{E_c}^{\infty} d(\epsilon) D(\epsilon) \exp(-\beta(\epsilon - \mu)) = 2 (2mkT/(2\pi\hbar^2))^{3/2} \exp(\beta(\mu - E_c))$ , med ett motsvarande resultat för hål där  $(\mu - E_v)$  ersätts av  $(E_c - \mu)$ . Multiplikering ger  $np = 4 (kT/(2\pi\hbar^2))^3 (m_e m_h)^{3/2} \exp(-\beta(E_c - E_v))$  vilket är oberoende av  $\mu$ .  
(b) genom att införa atomer som antingen ger elektroner (donatorer) eller binder elektroner (acceptorer) kan elektron- eller hålkoncentrationen kontrolleras. Om t.ex. man inför många donatorer, blir elektrontätheten närmast identisk med donatortätheten  $N_d$ , och man får således  $n = N_d$  och  $p = (np)/n \sim 1/N_d$ . Införandet av extra elektroner eller hål påverkar var inom bandgapet den kemiska potentialen infaller, men produkten  $np$  är oberoende av detta, vilket visades i a-delen.

5. En ferromagnet kan beskrivas med en växelverkan  $U = -2 J S_1 S_2$  mellan spinnen  $S_1$  och  $S_2$  av närliggande joner 1 och 2.

a) Härleda sambandet mellan växelverkningsparametern  $J$  och den kritiska temperaturen  $T_c$  under vilken materialet har en spontan magnetisk moment. (3p)

b) Vad är det fysikaliska ursprunget av växelverkan  $J$ ? Hur kan man se att den inte kan uppstå från en klassisk växelverkan  $-(1/r^3) \mu_0 \mu_1 \mu_2$  mellan två atomära dipolmagneter med magnetiska moment  $\mu_1$  och  $\mu_2$ ?

Svar:

a) Anta att varje atom har magnetisk moment  $S$  och att varje atom växelverkar med  $z$  grannar. Då blir den totala växelverkningsenergin mellan en atom och resten av provet  $-2z J S s$  där  $s$  är spinnets av den atom vars växelverkan vi undersöker. Medelvärde av  $s$  i termisk jämvikt ges av  $\langle s \rangle = ((1/2) \exp(\beta z J S) - (1/2) \exp(-\beta z J S)) / (\exp(\beta z J S) + \exp(-\beta z J S)) = (1/2) \tanh(\beta z J S)$ .

Eftersom alla atomer är identiska, måste vi ha  $\langle s \rangle = S$  vilket ger ekvationen  $S = (1/2) \tanh(\beta z J S)$ . Denna ekvation har alltid en lösning  $S = 0$ , men om  $(1/2) \beta z J > 1$  har den även en nollskild, magnetisk lösning. Motsvarande kritisk temperatur är  $T_c = z J / (2k_B)$   
b) Ursprunget av  $J$  är kvantmekanisk Pauliprincip, som innebär att elektroner med lika spinn är i genomsnitt längre från varandra än elektroner med olika spinn. Detta gör att den elektrostatiska repulsionen mellan elektroner är effektivt spinn-beroende via exchange-energin, vilket resulterar i en koppling av den typen som ges i problemet. Tecknet av  $J$  kan variera från material till material. En klassisk växelverkningsenergi mellan två dipolmagneter med magnetiska moment  $\mu_1$  och  $\mu_2$  ges av  $-\mu_1 \mu_2 \mu_0 / r^3$  där  $\mu_0$  är vakuumpërmeabilitet och  $r$  avståndet mellan dipolerna. En uppskattning för atomära magneter ger  $U \sim 1e-22$  J, vilket motsvarar en kritisk temperatur på 10 K, medan experimentella värden kan uppgå till 1000 K.