

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

**Tid:** 2011-03-18 förmiddag

**Lokal:** VV salar

**Hjälpmedel:** Hjälpmedel: Physics Handbook, bifogad formelsamling, typgodkänd räknare eller annan räknare i fickformat dock utan inprogrammerad text eller ekvationer av intresse för tentan.

Kursbetyget är baserat på summan av tentamenspoängen +40 % av duggapoängen. Gränserna är:  $10p \leq 3 < 14p$ ,  $14p \leq 4 < 17p$ ,  $5 \geq 17p$ . Granskningen: 31/3 kl 13-14 i F5036.

**Examinator:**

**Jari Kinaret**

**tel: 3668, 0706 45 72 68**

**Igor Zoric**

**tel: 3371, 0708 30 47 25**

- 1) En elektronstråle med energin 60 eV infaller vinkelrätt mot en enkristall av Fe (bcc,  $a = 2.87 \text{ \AA}$ ) skuren så att dess yta är parallell med de tätpackade planen, dvs parallell med (110). Beräkna vinkeln mellan ytans normalriktning och de diffrakterade strålar som bildar minsta och näst minsta vinkeln med normalen. Gör så här:
  - a) Rita upp atomernas position i ett (110) plan. (1p)
  - b) Rita upp eller ange på annat sätt aktuellt reciprokt gitter. (1p)
  - c) Beräkna de efterfrågade vinklarna. (2p)
  
- 2) Densiteten samt ljudhastigheten (för longitudinella fononer) i kristallin Si är  $2530 \text{ kg/m}^3$  respektive  $8400 \text{ m/s}$ .
  - a) Beräkna Debye-temperaturen för Si. (0.5p)
  - b) Uppskatta de longitudinella fononernas bidrag till värmekapacitiviteten per volymenhet av kristallin Si vid  $T \gg T_{\text{Debye}}$  (1p)
  - c) Beräkna antalet fononer per volymenhet som är termiskt exciterade i Si vid temperaturen  $T \gg T_{\text{Debye}}$ . (1,5p)
  - d) Uppskatta fononernas friamedelväglängd ( $\lambda$ ) i Si vid  $T \gg T_{\text{Debye}}$ . Antag att tvärsnittet för fonon-fonon spridningsprocesser  $\sigma \approx a^2$ , där  $a^3$  är medelvolymen,  $v_0$ , som upptas av en Si-atom i kristallen. (0.5p)
  - e) Beräkna värmeledningsförmågan i Si vid  $T \gg T_{\text{Debye}}$  och jämför ditt resultat med det experimentella värdet  $\kappa = 1.8 \text{ W/mK}$  vid 300K. (0.5p)

- 3) En kristall bestående av en endimensionell atomkedja (en atom i basen, gitterparameter  $a$  är känd) visas i Fig. 1 nedan. Antag att varje atom bidrar med  $m$  ledningselektroner.

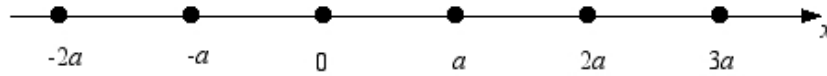


Fig. 1 En dimensionell atomkedja

- a) Beräkna primitiva translationsvektorer för detta Bravais-gitter. Identifiera Wigner-Seitz cellen i reella rummet samt 1:a Brillouin-zonen i det reciproka rummet. (0.5p)
- b) Antag att jonerna i gittret skapar en SVAG periodisk potential. Skissa bandstrukturen för ämnet i ett reducerat zonschema genom att visa två band med lägsta energin. Analysera för vilka värden på  $m$  som systemet är en metall respektive en isolator. (1p)
- c) Antag att jonerna i kristallen genomgår en förskjutning ( $\delta x$ ) som visas i figuren nedan (sk Peierls distorsion-se Fig. 2). Beskriv den nya kristallstrukturen. Ange primitiva translationsvektorer, samt identifiera Wigner-Seitz cellen i reella rummet. Hur ser det reciproka gittret ut nu? Identifiera translationsvektorer i reciproka rummet samt 1:a Brillouin-zonen. (0.5p)

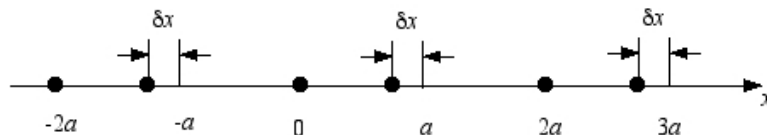


Fig. 2 Peierls distorsion i en dimensionell atomkedja

- d) Skissa bandstrukturen i ett reducerat zonschema för den deformerade kristallen. Analysera fallet då  $m=1$ . Är systemet en metall eller en isolator? (2p)
- 4) Grafen är ett tvådimensionellt material med en ovanlig bandstruktur: valens- och ledningsbanden separeras in av ett energigap utan de möts i sex punkter i första Brillouin-zonen. Nära dessa så kallade K-punkter är dispersionsrelationen konisk, dvs.  $E_{\pm}(\mathbf{k}) \approx \pm\gamma|\mathbf{k}-\mathbf{K}|$  för  $\mathbf{k} \approx \mathbf{K}$ . Det övre tecknet

gäller för ledningsbandet och det nedre tecknet för valensbandet; energins nollnivå är valt så att valensbandmaximat och ledningsbandminimat båda har energin noll.

- a) I ett rent grafenprov är Fermienergin  $E_F = 0$ , dvs. mellan valens- och ledningsbanden. Beräkna Fermi-hastigheten (1p).
- b) Beräkna den effektiva bandmassan för elektroner i grafen nära Fermienergin (1p).
- c) Beräkna tillståndstätheten för elektroner i grafen för energier nära  $E_F$  (1p).
- d) Beräkna koncentrationen av termiskt exciterade elektroner på ledningsbandet i grafen som en funktion av temperatur vid låga temperatur (1p).

5) Förklara följande begrepp (1p var):

- a) Frustration i ett magnetiskt system
- b) Coulomb blockad
- c) Abrikosov flödesgitter
- d) elektrostatisk avskärmning

Möjligen användbara formler:  $\int_0^{\infty} \frac{dx}{1+e^x} = \ln 2, \int_0^{\infty} \frac{x dx}{1+e^x} = \frac{\pi^2}{12}, \int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{1+e^x} = \frac{3}{2} \zeta(3) \approx 1.80$

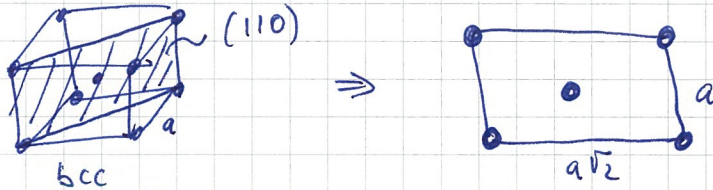
Lycka till!  
Igor och Jari

Lösningar  
kursen 110318

①  $E = 60 \text{ eV}$  ser  $k_{in} = 3.97 \text{ \AA}^{-1}$

Obs: lågenergi elektroner diffrakteras på ytskiktet!

a) Atomernas läge i (110) plan:

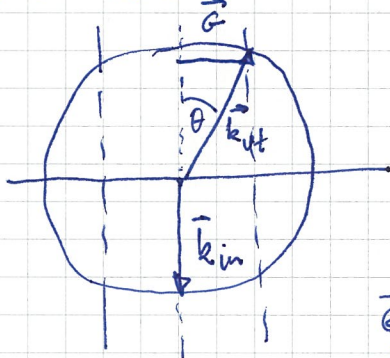


(110) plan: gitter:  $\vec{a} = a\sqrt{2} (1,0) = 4.06 (1,0) \text{ \AA}$   
 $\vec{b} = a (1,0) = 2.87 (1,0) \text{ \AA}$

b) Rec. gitter: stavar  $\vec{A} = \frac{2\pi}{4.06} (1,0) = 1.55 (1,0) \text{ \AA}^{-1}$   
 $\vec{B} = \frac{2\pi}{2.87} (0,1) = 2.19 (0,1) \text{ \AA}^{-1}$   
 $\vec{G}_{hk} = h\vec{A} + k\vec{B}$

c) Strukturfaktor:  $S_{hk} = f \sum_{\text{atomer i basen}} e^{-i \vec{G}_{hk} \cdot \vec{R}_i}$   
 $S_{hk} = f (1 + e^{-i\pi(h+k)}) = \begin{cases} 0 & \text{om } h+k \text{ udda tal} \\ 2 & \text{om } h+k \text{ jämnt tal} \end{cases}$

Exakt konstruktion:



$\sin \theta = \frac{G_{hk}}{k_{in}}$  pga  $k_{in} = k_{out}$

Kolla kortaste  $G_{hk}$  som ger  $S \neq 0$

$G_{11}$  och  $G_{20}$  är sådana.

$\vec{G}_{11} = \vec{A} + \vec{B} = 1.55 (1,0) + 2.19 (0,1) \text{ \AA}^{-1}$   
 $\vec{G}_{20} = 2\vec{A} = 3.1 (0,1) \text{ \AA}^{-1}$

$\Rightarrow G_{11} = 2.68 \text{ \AA}^{-1}$   
 $G_{20} = 3.1 \text{ \AA}^{-1}$   
 $\Rightarrow \sin \theta_1 = \frac{G_{11}}{k_{in}} = 0.68 \Rightarrow \theta_1 = 42.5^\circ$   
 $\Rightarrow \sin \theta_2 = \frac{G_{20}}{k_{in}} = 0.78 \Rightarrow \theta_2 = 51.34^\circ$



2

$$a) \quad \rho = 2530 \text{ kg/m}^3$$

$$m_{\text{Si}} = 28 \text{ amu} = 28 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$n = \frac{N}{V} = \frac{\rho}{28 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27}} = 5.44 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$$

$$n = \frac{1}{v_0} \Rightarrow v_0 = 18.4 \text{ \AA}^3$$

$$T_{\text{Debye}} = \Theta = \frac{\hbar v}{k_B} (6n^2)^{1/3} = \underline{9470 \text{ K}}$$

bara löy. Founer b)

$$C_v = 3 N k_B \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

$$\text{för } T \gg \Theta \Rightarrow \text{i.e. } x \ll 1 \Rightarrow \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \approx \int_0^{x_D} x^2 dx = \frac{x_D^3}{3} = \frac{1}{3} \left(\frac{\Theta}{T}\right)^3$$

$$x_D = \frac{\Theta}{T}$$

$$x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}$$

$$\text{för } \Theta \ll T \Rightarrow C_v = 3 N k_B \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \cdot \left(\frac{\Theta}{T}\right)^3 \cdot \frac{1}{3} = N k_B$$

$$C_v = \cancel{N k_B} N k_B \quad \text{där } N = \text{antalet Si atomer i provet}$$

c) ~~Antal~~ Founer:

$$N = \int d\omega D(\omega) \langle n(\omega) \rangle$$

vi använder Debye app.

$$N = \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{V \omega^2}{2\pi^2 v^3} \cdot \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \quad \text{där}$$

$$N = \frac{V}{2\pi^2 v^3} \left(\frac{1}{\beta \hbar}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{dx x^2}{e^x - 1} \quad \text{där}$$

$$x = \beta \hbar \omega$$

$$x_D = \beta \hbar \omega_D = \frac{\Theta}{T}$$

$$T \gg \Theta \quad N \approx \frac{V}{2\pi^2 v^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \int_0^{x_D} x dx = \frac{V}{2\pi^2 v^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \cdot \frac{x_D^2}{2}$$

$$N = \frac{V}{2\pi^2 v^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \frac{1}{2} \left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 = \left(\frac{k_B}{\hbar v} (6n^2 N)^{1/3} T\right)^3 \cdot 3N \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{\Theta}{T}\right)^2$$

$$N = \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \cdot 3N \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 = \frac{3}{2} N \frac{T}{\Theta}$$

Port.  $\Rightarrow$

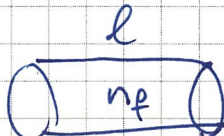


(2) (c)

$$N = \frac{3}{2} N \frac{T}{\theta}$$

$$n_f = \frac{N}{V} = \frac{\frac{3}{2} N}{V} \frac{T}{\theta} = \underline{\underline{\frac{3}{2} n \frac{T}{\theta}}}$$

(d)  $V = a^2 \cdot l$



$$l a^2 n_f = 1$$

$$l = \frac{1}{a^2 n_f} = \frac{1}{a^2 \cdot \frac{3}{2} n \frac{T}{\theta}} = \frac{1}{a^2 \cdot \frac{3}{2}} \frac{1}{a^3 \frac{T}{\theta}}$$

$$l = \frac{2}{3} a \frac{\theta}{T}$$

e)  $\kappa = \frac{1}{3} l v C = \frac{1}{3} \frac{2}{3} a \frac{\theta}{T} v \cdot N k_B$

men  $N = \frac{1}{a^3} = \frac{1}{v_0} \Rightarrow$

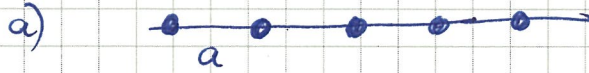
$$\kappa = \frac{1}{3} \frac{2}{3} a \frac{\theta}{T} v \frac{1}{a^3} k_B = \frac{2}{9} \frac{v}{a^2} \frac{\theta}{T} k_B$$

obs  ~~$a^3 = v_0 = 18.4 \text{ Å}^3$~~   $a^3 = v_0 = 18.4 \text{ Å}^3$

$$\kappa_{th} = 0.18 \frac{W}{mK}$$



3



Kristall = gitter + bas = +

primitiv trans. vektor i reella rummet  $\vec{a} = a \hat{x}$

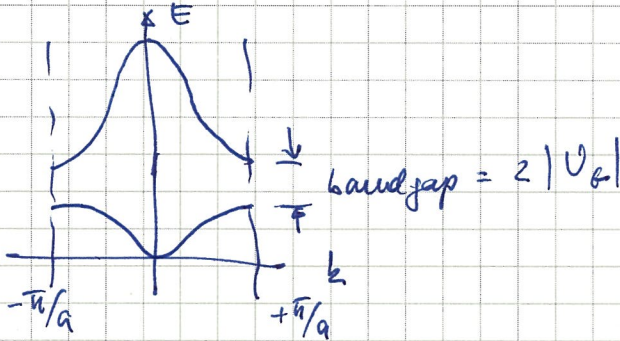
W-S cell :  $-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}$

rec. gittervektorer :  $\vec{b}_h = \frac{2\pi}{a} h \hat{x}$   $h = 1, 2, 3, \dots$

1: BZ :  $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$

1. atom basen

b) Svag periodisk potential  $U$



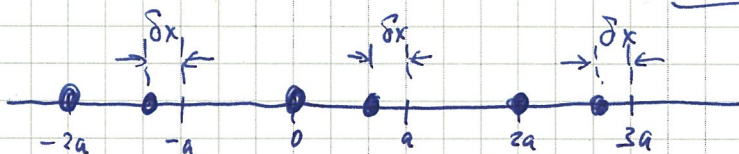
Varga band kan  
akkommodera  $2N$  elektroner  
(2 pga spin) där  $N =$   
antalet atomer i kristallen

om  $m = 2l$  är jämnt tal  $\Rightarrow$  lästa  $l$  band är  
besatta av elektroner och  
högre band är tomma  $\Rightarrow$   
system är ISOLATOR

om  $m = 2l+1$  är udda tal  $\Rightarrow$  lästa  $l$  band fyllas  
med elektroner, band  $l+1$   
är halvfyllt  $\Rightarrow$  system är  
METAL

c) Peierls distortion

Kristall : 1D Bravais gitter med tvåatomig bas



Primativ vektor i reella rummet :  $\vec{a} = 2a \hat{x}$

basvektorer :  $\vec{d}_1 = 0$  ,  $\vec{d}_2 = (a - \delta x) \hat{x}$



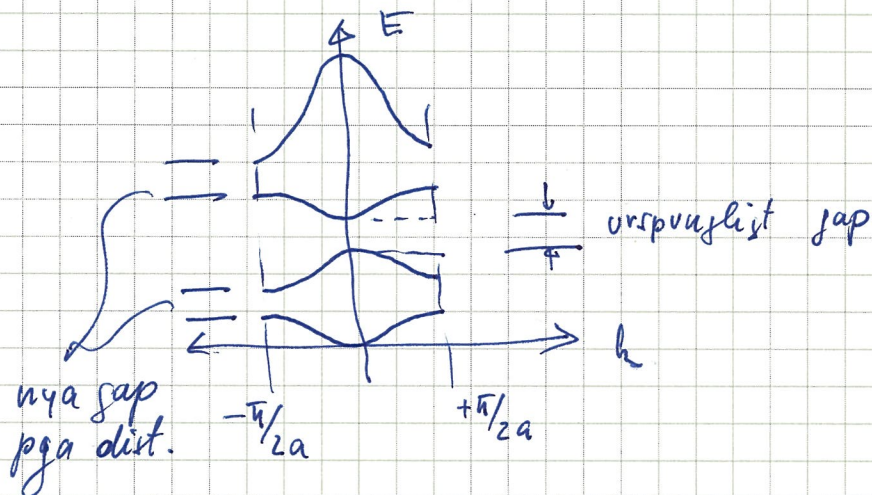
$$W-S \text{ cell} : -a \leq x \leq a$$

$$\text{Rec. gitter} : \vec{G}_h = \frac{2\pi}{2a} \cdot h \hat{x} = \frac{\pi}{a} h \hat{x} \quad h = 1, 2, 3, \dots$$

$$1: \text{BZ} \quad -\frac{\pi}{2a} \leq k \leq \frac{\pi}{2a}$$

OBS: 1: BZ är halverad i relationen till 1: BZ för icke distorderad kristall  $\Rightarrow$  bara halva  $k$ -tillstånd är tillgängliga för elektronen.

Bandstruktur för distorderad kristall:



Varje band kan tag emot  $2 \cdot \frac{N}{2} = \underline{N}$  elektroner pga fördubblingen av f.p.

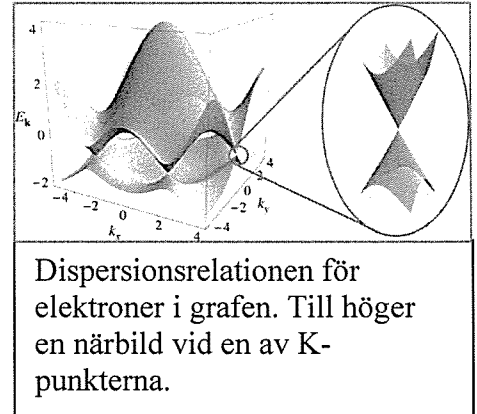
$\Rightarrow m = 1$  elektron/atom  $\Rightarrow N$  elektroner  $\Rightarrow$

lästa band är ~~fullt~~ med elektroner  $\Rightarrow$  system är ISOLATOR i kontrast till icke distorderade kristall där för  $m = 1$  system var METAL.

PS. A. Heeger (Nobel pris för kemi 2000?) var den förste som observerade Peiers dimerisation (isolator  $\rightarrow$  metal övergång i 1D kristaller



- 4) Grafen är ett tvådimensionellt material med en ovanlig bandstruktur: valens- och ledningsbanden separeras in av ett energigap utan de möts i sex punkter vid kanten av den första Brillouinzonen. Nära dessa så kallade K-punkter är dispersionsrelationen konisk, dvs.  $E_{\pm}(\mathbf{k}) \approx \pm\gamma|\mathbf{k}-\mathbf{K}|$  för  $\mathbf{k} \approx \mathbf{K}$ . Det övre tecknet gäller för ledningsbandet och det nedre tecknet för valensbandet; energins nollnivå är valt så att valensbandmaximat och ledningsbandminimat båda har energin noll.



- a) I ett rent grafenprov är Fermienergin  $E_F = 0$ , dvs. mellan valens- och ledningsbanden. Beräkna Fermi-hastigheten (1p).

Lösning:  $\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E = \frac{1}{\hbar} \gamma \left( \frac{(k_x - K_x) \hat{\mathbf{x}} + (k_y - K_y) \hat{\mathbf{y}}}{\sqrt{(k_x - K_x)^2 + (k_y - K_y)^2}} \right)$  så att  $v = \gamma / \hbar$  oberoende av

$\mathbf{k}$  och  $v_F = \gamma / \hbar$ .

- b) Beräkna tillståndstätheten för elektroner i grafen för energier nära  $E_F$  (1p).

(Notera: de 6 sex K punkter där banden möts befinner sig vid hörnen av den hexagonala 1BZ där 3 Brillouinzoner möts. De bidrar alltså med 1/3 var till tillståndstätheten så att den totala tillståndstätheten är  $6 \times (1/3) = 2$  gånger bidraget från en  $\mathbf{K}$ -punkt.)

Lösning: Tillståndstäthet från en K-punkt fås ur  $2 \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} = \frac{k dk}{\pi} = D_1(E) dE$  så att

$$D_1(E) = \frac{k}{\pi} \frac{dk}{dE} = \frac{E}{\pi \gamma} \frac{1}{\gamma} = \frac{E}{\pi \gamma^2}$$

så att den totala tillståndstätheten blir

$$D(E) = \frac{2E}{\pi \gamma^2}.$$

- c) Beräkna koncentrationen av termiskt exciterade elektroner på ledningsbandet i grafen som en funktion av temperatur vid en låg temperatur (1p).

$$\text{Lösning: } n = \int_0^\infty \frac{2E}{\pi\gamma^2} \frac{1}{1+e^{\beta E}} dE = \frac{2(k_B T)^2}{\pi\gamma^2} \int_0^\infty \frac{x dx}{1+e^x} = \frac{\pi}{6} \left( \frac{k_B T}{\gamma} \right)^2$$

d) I ett system av två grafenlager ovanpå varandra (s.k. *bilayer*) ändras dispersionsrelationen nära K-punkterna till formen  $E_{\pm}(\mathbf{k}) \approx \pm\gamma[(\mathbf{k}-\mathbf{K})^2 + q^2]^{1/2}$  där  $q$  är en parameter som beskriver kopplingen mellan grafenlagren. Beräkna den effektiva bandmassan vid K-punkten. Vad blir massan när kopplingen  $q$  går mot noll? (1p)

$$\text{Lösning: } \left( \frac{1}{m} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk_i dk_j} \text{ så att vi får (för ledningsbandet, dvs med '+')} i$$

kartesiska koordinater, där origon är valt att ligga vid  $\mathbf{K}$ -punkten,

$$\frac{1}{m} = \frac{\gamma}{\hbar^2} \frac{1}{(k^2 + q^2)^{1/2}} \begin{pmatrix} k_y^2 + q^2 & -k_x k_y \\ -k_x k_y & k_x^2 + q^2 \end{pmatrix}. \text{ Man kan antingen invertera matrisen}$$

först och sätta sedan in  $\mathbf{k} = 0$ , eller sätta  $\mathbf{k} = 0$  först och invertera sedan; i det

$$\text{senare fallet får man } \frac{1}{m(\mathbf{k} = 0)} = \frac{\gamma}{\hbar^2 q} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ så att den effektiva massstensorn}$$

är diagonal och isotropisk,  $m(\mathbf{k} = 0) = \frac{\hbar^2}{\gamma} q \mathbf{I}$ . När kopplingen går mot noll får

vi  $m(\mathbf{k}=0) = 0$ .