

TENTAMEN I FASTA TILLSTÅNDETS FYSIK F3/KF3 – FFY011

Tid: 2011-08-22 kl. 14.00

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 +30 % av duggapoängen. Gränserna är: $10p \leq 3 < 14p$, $14p \leq 4 < 17p$, $5 \geq 17p$. Granskningen: 7/9 kl 10-12 i F5002.

Examinator:

Jari Kinaret

tel: 3668, 0706 45 72 68

Igor Zoric

tel: 3371, 0708 30 47 25

- 1) En fotonstråle (våglängden $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$) diffrakterar från (110) planskaran i en Fe-kristall (bcc). Braggdiffraktionsvinkeln för den diffrakterade strålen är 22° .
 - a) Beräkna gitterparametern för bcc Fe. (3p)
 - b) Beräkna den maximala våglängden för infallande fotoner som kan användas för kristallstrukturbestämningen? (1p)

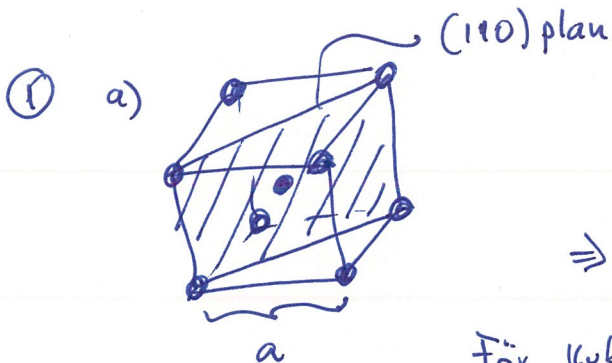
- 2) En **tvådimensionell** (2D) kristall består av Al-atomer med ett periodiskt mönster som motsvarar (100) plan i en ytcentrerad kubisk kristall (fcc). Gitterparameter för fcc-kristallen är 4 \AA . Anta att fonondispersionsrelationen i 2D Al-kristallen kan beskrivas med Debye-approximationen ($\omega = vk$).
 - a) Beräkna fononernas tillståndstäthet $D(\omega)$ för det tvådimensionella fasta ämnet. (2p)
 - b) Ljudhastigheten i Al-metall är $v = 5000 \text{ m/s}$. Anta att samma värde för ljudhastigheten gäller också i 2D Al-kristallen. Beräkna Debye-temperaturen för ett 2D Al-monolager. (2p)

- 3) Betrakta samma 2D kristall av Al-atomer som i uppgift 2. Anta att varje Al-atom bidrar med 3 st elektroner till frielektrongasen i det 2D fasta ämnet.
 - a) Beräkna Fermienergin (i eV) vid $T = 0^\circ \text{K}$ för det fasta ämnet. (2p)
 - b) Beräkna elektronernas medelenergi vid $T = 0^\circ \text{K}$ för det fasta ämnet. (1p)
 - c) Hur stor är sannolikheten att ett elektroniskt tillstånd som ligger $0,05 \text{ eV}$ över Fermienergin är besatt vid $T = 300^\circ \text{K}$ ($k_B T = 0,25 \text{ eV}$)? (1p)

4. a) Vad är Blochs teorem, och vad har det för betydelse för fasta tillståndets fysik? (2p)
- b) Definiera begreppet kvasimoment eller gittermoment – varför är det ett praktiskt användbart begrepp, och vad är dess relation med rörelsemängd? (2p)
5. a) Pauli paramagnetism uppstår på grund av en energiskillnad mellan spinn upp och spinn ner tillstånden för ledningselektroner vid ett externt magnetfält, $\epsilon_o(k) = (\hbar k)^2/(2m) - 2\mu_B B \sigma_z$ där $\sigma_z = \pm 1/2$. Beräkna magnetiseringen $M(B)$ och Pauli-susceptibiliteten $\chi_p = \mu_0 dM/dB$ av en frielektrongas som en funktion av magnetfältet B vid $T = 0$ då varje elektron bidrar till magnetiseringen med magnetisk moment $2\mu_B \sigma_z$. (2p)
- b) En samling av N atomer, som var och en har rörelsemängdkvanttal $m_j = \pm 1/2$, magnetisk moment $\mu = -2m_j \mu_B$ och magnetisk energi $U = -B\mu$, befinner sig i ett magnetfält B . Beräkna jämviktsmagnetiseringen M och susceptibiliteten χ som funktion av temperatur T och magnetfält B . (1p)
- c) Varför skiljer lågtemperaturgränsen av susceptibiliteten i del (b) från resultatet i del (a)? (1p)

Lycka till!
Igor och Jari

Lösningar



Bragg: $\lambda = 2d \sin \theta$ ($n=1$)

$\Rightarrow d_{110} = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{1.54}{2 \cdot \sin 22^\circ} = \underline{2.06 \text{ \AA}}$

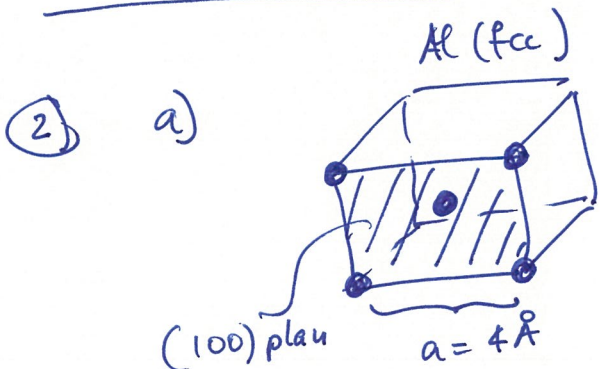
För kubiska system gäller:

$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \Rightarrow d_{110} = \frac{a}{\sqrt{1^2+1^2+0}} = \frac{a}{\sqrt{2}}$

$\Rightarrow a = d_{110} \cdot \sqrt{2} = 2.06 \cdot \sqrt{2} = \underline{2.91 \text{ \AA}}$

b) om $\lambda < 2a$ ingen diffraction

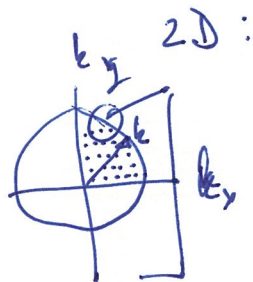
$\Rightarrow \lambda_{\max} = 2a$



\Rightarrow 2D system \equiv



där $\begin{cases} \bar{u}k^2 \equiv \text{cirkelarea med radie } k \\ L^2 \equiv \text{area på 2D gitteret} \end{cases}$



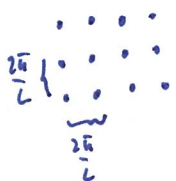
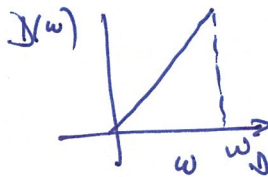
$N(k) = \frac{\bar{u}k^2}{(\frac{2\pi}{L})^2}$

$\Rightarrow N(k) = \frac{L^2 k^2}{4\pi}$

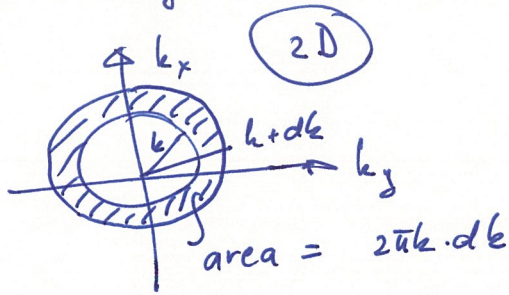
men vi har $\omega = v \cdot k$ då får vi

$N(\omega) = \frac{L^2 \omega^2}{4\pi v^2}$

$D(\omega) = \underbrace{2}_{L+T \text{ moden}} \cdot \frac{dN}{d\omega} = \underline{\underline{\frac{L^2 \omega}{\pi v^2}}}$



Alt. lösning ä la kittel:



$$D(\omega) d\omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int d^d k$$

"shell"

$d = 2$ för 2D system

$$\Rightarrow D(\omega) d\omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \cdot 2\pi k \cdot dk$$

men $\omega = v k$

$$\Rightarrow D(\omega) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \cdot 2\pi \frac{\omega}{v} \cdot \frac{d\omega}{d\omega} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \cdot 2\pi \frac{\omega}{v} \frac{1}{v} = \frac{L^2 \omega}{2\pi v^2}$$

~~men~~ pga att i 2D vi har 1T + 1L mode där är

$$D(\omega) = 2 \cdot \frac{L^2 \omega}{2\pi v^2} = \frac{L^2 \omega}{\pi v^2} \quad \text{ samma resultat}$$

b) $k_B \theta_D = \frac{1}{2} \omega_D \Rightarrow \theta_D = \frac{\frac{1}{2} \omega_D}{k_B}$

$\omega_D = ?$

Debye app. $\Rightarrow \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega = 2 \cdot N$

från 2a) $\Rightarrow D(\omega) = \frac{L^2 \omega}{\pi v^2} \Rightarrow$

$$\frac{L^2 \omega_D^2}{4\pi v^2} = N \Rightarrow \omega_D^2 = 4\pi v^2 \left(\frac{N}{L}\right)^2$$

$$\omega_D = \left[4\pi v^2 \left(\frac{N}{L^2}\right) \right]^{1/2}$$

för 2D system vi har \Rightarrow 2 atomer/cell $\Rightarrow \frac{N}{L^2} = \frac{2}{16 \text{ \AA}^2}$



$$\Rightarrow \omega_D = 6.3 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$$

$$\theta_D = \frac{\frac{1}{2} \omega_D}{k_B} = \underline{\underline{470^\circ \text{ K}}}$$

3 a)

bra at veta $\frac{\hbar^2}{2m_e} = 3.845 \text{ eV \AA}^2$

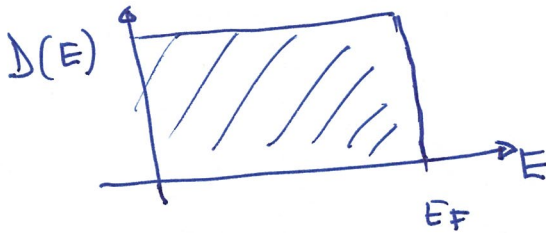
$$N = \int_0^{E_F} D(E) dE$$

$$D(E) = 2 \frac{dN}{dE} = 2 \cdot \frac{dN}{dk} \cdot \frac{dk}{dE}$$

$$i \quad 2D \Rightarrow N(k) = \frac{\pi k^2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} = \frac{L^2 k^2}{4\pi}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \Rightarrow \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m_e}$$

$$D(E) = 2 \cdot \frac{L^2 k}{2\pi} \frac{m_e}{\hbar^2 k} = \frac{L^2 m_e}{\pi \hbar^2} = \text{konst}$$



$$\Rightarrow N = \int_0^{E_F} D(E) dE = \frac{L^2 m_e}{\pi \hbar^2} E_F$$

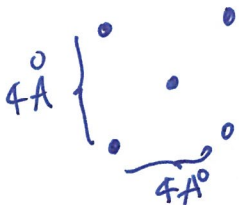
$$E_F = \left(\frac{N}{L^2} \right) \frac{\pi \hbar^2}{m_e}$$

elektron tetet i 2D systemet

$$E_F = n \frac{\pi \hbar^2}{m_e}$$

2 atomer/cell
3 elektroner per atom

$$\Rightarrow n = \frac{3 \cdot 2}{16} = \frac{6 e^-}{16 \text{ \AA}^2}$$



~~$$E_F = \frac{6}{16} \cdot 3.14 \cdot 2 \cdot 3.85 = 4.57 \text{ eV}$$~~

$$E_F = \frac{n \pi \hbar^2}{m_e} = \frac{6}{16} \cdot 3.14 \cdot 2 \cdot 3.85 \text{ eV} = \underline{\underline{9.07 \text{ eV}}}$$

3b) Svaret är enkelt pga att $D(E) = \text{konst.}$

Då måste vara så att $\frac{\langle E \rangle}{n} = \frac{E_F}{2} = \underline{\underline{4.53 \text{ eV}}}$

Formellt:

$$\langle E \rangle = \int_0^{E_F} dE D(E) \cdot E = \frac{E_F^2}{2} \left(\frac{2 m_e}{\hbar^2 \pi} \right) \Rightarrow n/E_F$$

$$\langle E \rangle = \frac{E_F \cdot n}{2} \Rightarrow \underline{\underline{\langle E_F \rangle = \frac{E_F}{2}}}$$

3c) Sannolikheten ges av F-D funktionen:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} = \frac{1}{e^{\frac{0.05}{0.025} + 1}} = \frac{1}{e^2 + 1} \approx \underline{\underline{0.12}}$$



Lösning:

5 a) Densitet av elektroner med spinn $+1/2$ ges av (ty de har energin $-\mu_B B$ när $k = 0$)

$$N_+ = \frac{1}{2} \int_{-\mu_B B}^{\epsilon_F} d\epsilon D(\epsilon + \mu_B B) \approx \frac{1}{2} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon D(\epsilon) + \frac{1}{2} D(\epsilon_F) \mu_B B$$

och motsvarande för elektroner med spinn $-1/2$. Följaktigen ges magnetiseringen av

$$M = N_+ \mu_B - N_- \mu_B = B D(\epsilon_F) \mu_B^2 \text{ och susceptibiliteten av } \chi_P = \mu_0 D(\epsilon_F) \mu_B^2.$$

5 b) Antalet atomer som befinner sig i kvanttillståndet $m_J = +1/2$ och har magnetisk moment $-\mu_B$ är $N_+ = N \exp(-\beta \mu_B B) / [\exp(-\beta \mu_B B) + \exp(\beta \mu_B B)]$ och motsvarande för det andra tillståndet $m_J = -1/2$. Magnetiseringen är då

$$M = N \mu_B [\exp(\beta \mu_B B) - \exp(-\beta \mu_B B)] / [\exp(-\beta \mu_B B) + \exp(\beta \mu_B B)] = N \mu_B \tanh(\beta \mu_B B) \text{ och}$$

susceptibiliteten $\chi = \beta N \mu_0 \mu_B^2 / \cosh^2(\beta \mu_B B)$.

5 c) Vid $T=0$ går susceptibiliteten i del (b) mot noll om B är skilt från noll, och divergerar om $B=0$. Detta eftersom vid $T=0$ pekar alla magnetiska moment i fältets riktning oberoende av fältstyrkan. Detta händer inte i (a)-delen där man har en balans mellan rörelse-energin och magnetisk energi, och ett litet magnetfält bara förorsakar en liten förändring av vilka k -tillstånd som är bemannade.