TENTAMEN I FASTA TILLSTÅNDETS FYSIK F3/KF3 – FFY011

Tid: **2013-01-16 kl. 14.00**
Lokal: **M- salar**

Hjälpmedel: Physics Handbook, egen formelsamling på ett A4-blad (fram- och baksidan), 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≤3<14p, 14p≤4<17p, 5≥17p. Granskning: 1/2 kl 12-13 i F5002.

Examinatorer:

Igor Zoric **tel: 3371, 0708 30 47 25**
Mats Granath **tel: 031 786 9026, 0766 229026**

Uppgift 1

Figuren nedan visar en 2D-kristall.

a) Identifiera och rita Bravais-gittret och basen (2p).

b) I figuren visas tre stycken vektorpar (1,2,3). Vilket par kan vara primitiva gittertranslationsvektorer (1p)?

c) Hur många atomer finns per enhetscell (1p)?

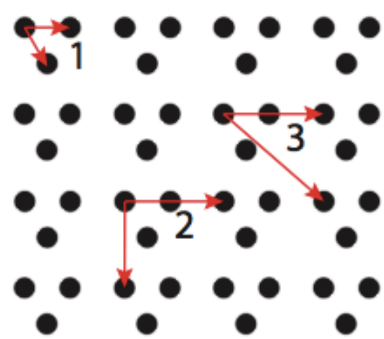


Fig. 1. En 2D-kristall

Uppgift 2

Ett okänt material har centrerad tetragonal struktur där den konventionella enhetscellen spänns av 3 stycken primitiva vektorer: (a, 0, 0), (0, a, 0), (0, 0, c) där c = 3a/2 och basen består av 2 likadana atomer med koordinaterna: (0, 0, 0), (a/2, a/2, c/2). Gitterparametern a=4.2Å.

a) Beräkna primitiva vektorer för det reciproka gittret (1p)

b) I ett Debye-Scherrer diffraktionsexperiment används röntgenstrålning med våglängden λ=1.5Å. Beräkna spridningsvinklar för de fyra första diffraktionsringarna (3p)

Uppgift 3

Kristallin argon har fcc-struktur. Antag att växelverkan mellan Ar-atomerna kan beskrivas via Lennard-Jones potentialen som agerar **bara** mellan närmaste grannar i kristallen:

$$U(r) = -4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}\right]$$

där r är avståndet mellan närmaste grannarna och ε=0.0104eV och σ=3.40Å för Ar.

a) Hur många närmaste grannar har varje atom i en fcc-kristall? Hur stort är avståndet mellan närmaste grannarna uttryckt i enheter av gitterparametern a för en konventionell fcc-enhetscell (1p)?

b) Beräkna kohesiv energi per atom (E/N) samt gitterparameter a för en makroskopisk Ar-kristall som består av N ($\approx 10^{23}$) Ar-atomer och jämför dina resultat med de experimentella värdena för kristallin Ar: a ≈ 5.3Å och E/N=–0.08 eV/atom. Diskutera dina resultat. (3p)

Uppgift 4

Natrium har en resistivitet vid rumstemperatur $\rho = 4.75\mu\Omega cm$ och en täthet $n = 948kg/m^3$.

a) Beräkna Fermihastigheten givet att man kan använda den fria elektronmodellen för ledningselektronerna. (1p)

b) Beräkna den medelfria vägen $\ell = v_F\tau$, där τ är kollisionstiden. (1p)

c) Antag att 10% av natrium atomerna ersätts med magnesium och att detta inte ändrar kristallstruktur och gitterkonstanter, men att magnesium atomerna verkar som orenheter i materialet vilket minskar den medelfria vägen med 10%. Hur ändras resistiviteten? (2p)

Uppgift 5

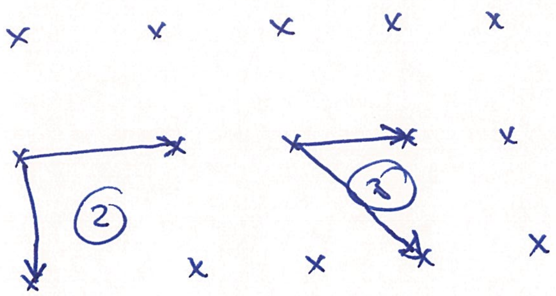
En endimensionell kristall har gitterkonstant a. Ledningselektronerna kan approximeras som fria elektroner med massa m_e i en svag periodisk potential $U(x) = u_0 \cos(2\pi x/a)$ där $u_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}$.

a) Beräkna (approximativt) storleken på gapet mellan lägsta och näst lägsta bandet. (2p)

b) Förklara varför gapet mellan banden i denna modell blir successivt mindre för högre band. (2p)

Lycka till!
Igor och Mats

① a)



gitter

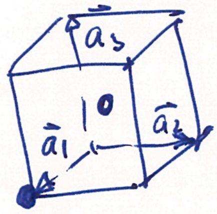
$\equiv$ bas

b) ② eller ③

c) 3 st.

---

2)



a)
$$\vec{a}_1 = a(100)$$
$$\vec{a}_2 = a(010)$$
$$\vec{a}_3 = a(00\tfrac{3}{2})$$

Primitiva vektorer för reciproka gittret:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(100)$$
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(010)$$
$$\vec{b}_3 = \frac{4\pi}{3a}(001) = \cancel{\frac{2\pi}{a}}$$
$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\left(h, k, \frac{2l}{3}\right)$$

Basen: (000) och $\left(\frac{a}{2}\,\frac{a}{2}\,\frac{3a}{4}\right)$.

Basens struktur faktor:
$$S_{hkl} = \sum_{j=1}^{2} f e^{+i\vec{G}\cdot\vec{R}_j} = 1 + e^{i2\pi\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)} = 1 + e^{i\pi(h+k+l)}$$

$S = 0$ om $n_1 + n_2 + n_3 \equiv$ ojämnt tal

$S \neq 0$ om $n_1 + n_2 + n_3 \equiv$ jämnt tal

Kortaste $\vec{G}_{hkl}$ med $h+k+l \equiv$ jämnt tal (2)

$$\left.\begin{matrix}101\\011\end{matrix}\right\} \Rightarrow |\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{\frac{13}{3}} = 1.8\,\mathring{A}^{-1} \quad (1)$$

$$002 \Rightarrow |\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}\frac{4}{3} = 1.99\,\mathring{A}^{-1} \quad (2)$$

$$110 \Rightarrow |G| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2} = 2.11\,\mathring{A}^{-1} \quad (3)$$

$$\cancel{200}$$
$$112 \Rightarrow |\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{1+1+\frac{16}{9}} = 2.9\,\mathring{A}^{-1} \quad (4)$$

Laue:

$$\sin\frac{\theta}{2} = \frac{|\vec{G}|}{2}\cdot\frac{\lambda}{2\pi} = \frac{|\vec{G}|\lambda}{4\pi}$$

$$\Rightarrow \quad \theta_1 = 24.81^\circ$$
$$\theta_2 = 27.48^\circ$$
$$\theta_3 = 29.18^\circ$$
$$\theta_4 = 40.50^\circ$$

(3) a) FCC struktur $\Rightarrow$ 12 st närmaste grannar.

ng. avstånd $= r = \sqrt{2}\cdot\frac{1}{2}a = \frac{a}{\sqrt{2}}$

b) $\frac{E}{N} = \frac{1}{2}\cdot 12\,U = 6U$

minimera $\frac{E}{N} \Rightarrow \frac{dE/N}{dr} = 0 \Rightarrow r_{min}$

$$x = \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \Rightarrow U = -4\varepsilon(x - x^2)$$

$$\frac{dU}{dx} = -4\varepsilon(1-2x) \Rightarrow x_{min} = \frac{1}{2} \Rightarrow r_{min} = \sigma\cdot 2^{1/6} = 3.81\,\mathring{A}$$

$$U_{min} = U\left(x = \tfrac{1}{2}\right) = -\varepsilon$$

$$\left(E/N\right)_{min} = -6\varepsilon = 0.0624 \text{ eV/atom}$$

$$a = \sqrt{2}\,r_{min} = \underline{5.39\,\mathring{A}}$$

Tenta FFY011, 20180116

Uppgift 4

a) $v_F = \frac{\hbar}{m_e}\left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{1/3}$

Natrium har en ledningselectron/atom,

tätheten är $n_e = \frac{N}{V} = \frac{948\, kg/m^3}{23 \cdot u\, kg} = 2.48 \cdot 10^{28}$

$\Rightarrow v_F = 1.04 \cdot 10^6\ m/s$

b) resistiviteten ges av $\rho^{-1} = \sigma = \frac{n_e e^2 \tau}{m_e}$

$\Rightarrow \tau = \frac{m_e}{n_e e^2 \rho} = 3.01 \cdot 10^{-14}\ s$

$\Rightarrow l = v_F \tau = 3.14 \cdot 10^{-8}\ m$

vilket verkar vara en rimlig siffra, storleksordningen 100 enhetsceller.

c) Mg har $2e^-$/atom $\Rightarrow$ ökning av n_e med 10 %

$n_e \to n_e' = 1.1 n_e$

$\Rightarrow v_F \to v_F' = (1.1)^{1/3} v_F$

$l \to l' = 0.9\, l$

$\therefore \tau \to \tau' = \frac{l'}{v_F'} = (1.1)^{-1/3}\, 0.9\, l / v_F$

$\rho^{-1} = \frac{n_e e^2 \tau}{m_e} \to (\rho')^{-1} = \frac{n_e' e^2 \tau'}{m_e} = 1.1\,(1.1)^{-1/3}\, 0.9\, \rho^{-1}$

$= (1.1)^{2/3}\, 0.9\, \rho^{-1}$

$\rho' = \rho / \frac{~~1.08~~}{0.95} = \frac{~~0.98~~}{1.05}\, \rho$

resistiviteten ~~minskar~~ ökar med 5 %

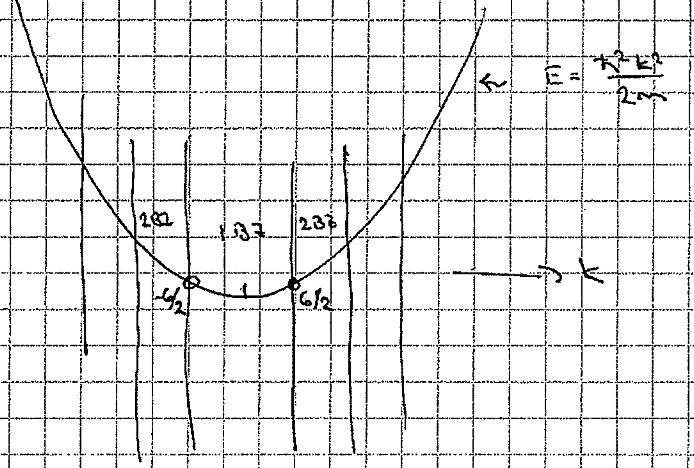
Uppgift 5

$$U(x) = u_0 \cos\left(2\pi \frac{x}{a}\right) = \frac{1}{2} u_0 \left(e^{i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{2\pi}{a}x}\right)$$

$$= \frac{1}{2} u_0 \left(e^{iGx} + e^{-iGx}\right)$$

där $G = \frac{2\pi}{a}$ är reciproka gittervektorn

Utgå från frielektronmodellen



eftersom $\frac{\hbar^2}{ma^2} \gg u_0$ ~~och~~ är potentialen svag, vilket innebär att den "bara" påverkar degenererade tillstånd

a) På randen av 1st BZ. fås sekularmatris

$$\left|\begin{bmatrix} \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} & \frac{1}{2}u_0 \\ \frac{1}{2}u_0 & \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \end{bmatrix}\right| = 0 \Rightarrow E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \pm \frac{1}{2}u_0$$

$$\boxed{\text{bandgapet : } u_0}$$

b) Potentialen ~~kl~~ ~~vadan~~ kopplar inte tillstånd direkt i högre BZ. (eftersom den bara sprider med $\pm G$)

Kopplingen sker alltså via tillstånd med andra energier och gapet blir av storleksordning $\left(\frac{u_0}{\hbar^2/ma^2}\right)^n u_0$ för BZ. n