

TENTAMEN I FASTA TILLSTÅNDETS FYSIK F3/KF3 – FFY011 och FYP330-GU

Tid: 2013-03-12 kl. 14.00

Lokal: VV- 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: $10p \leq 3 < 14p$, $14p \leq 4 < 17p$, $5 \geq 17p$. Granskning: 28/3 kl 12-13 i F5002.

lärare:

Igor Zoric

tel: 3371, 0708 30 47 25

Mats Granath

Bo Hellsing

tel: 0702 240925

Uppgift 1

Röntgenstrålningen (våglängden $\lambda=3,2\text{\AA}$) infaller i [100]-riktningen på en ytcentrerad kubisk kristall och man observerar dess första diffraktionsmaximum i [122]-riktningen.

Beräkna gitterparametern för kristallen. (4p)

Uppgift 2

En endimensionell jonisk kristall består av en kedja av $2N$ joner ($N \gg 1$) med alternerande laddningar (+q, -q) (se Fig. 1). Utöver Coulombväxelverkan finns en repulsiv växelverkan, A/R^n , som agerar bara mellan närmsta grannar (R är avståndet mellan närmsta grannjonerna). (Obs: A, q, och n anses vara kända).

a) Beräkna avståndet R_0 mellan närmsta grannar när kristallen befinner sig i jämvikt.

(2)

b) Beräkna den kohesiva energin för kristallen. (2)

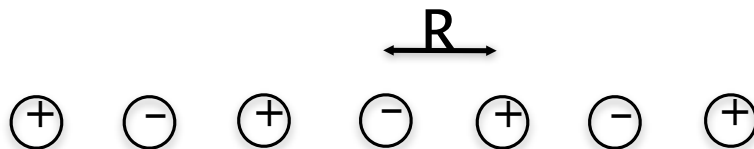


Fig. 1 Endimensionell kristall som består av alternerande joner

Uppgift 3

En halvledare har ett ledningsband med energi $E_c + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{0.2m_e}$. Betrakta en elektron i ledningsbandet som vid tiden $t = 0$ har vågtal $\vec{k} = 0.1 \text{Å}^{-1} \hat{x}$ och påverkas av ett magnetfält $\vec{B} = 0.1T \hat{z}$.

- Beskriv (i ord eller bild) hur elektronen rör sig. (1p)
- Hur lång är periodtiden? (1p)
- Vad är hastigheten vid tiden $t = 0$? (1p)
- Hur lång är banan i reella rummet? (1p)

Uppgift 4

Grafen har ett två-dimensionellt hexagonalt gitter med en bas bestående av två kolatomer. Respektive atom i basen kan identifieras med ett subgitter som vi kan kalla A och B. Låt oss välja gittervektorer $\vec{a}_1 = a(\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{x} + \frac{1}{2}\hat{y})$ och $\vec{a}_2 = a(\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{x} - \frac{1}{2}\hat{y})$, och basen $\vec{0}$ och $\frac{a}{\sqrt{3}}\hat{x}$, där a är gitterparametern.

- Rita några enhetsceller av kristallen där atomer i subgitter A respektive B är markerade. (1p)
- Ta fram reciproka gittervektorer och rita första Brillouin-zonen. (1p)
- Antag att bandstrukturen beskrivs av en tight-binding model med endast överlapp mellan vågfunktioner på närmaste grannatomer, d.v.s. mellan atomer på subgitter A och subgitter B. (Bortse från det konstanta energibidraget från överlappet av en vågfunktion med sig själv.)

Antag också att Fermienergin är $\epsilon_F = 0$ och visa att Fermiytan bara består av ett diskret antal punkter i första Brillouin-zonen och identifiera dessa punkter. (2p)

Tips: leta efter värden på $\vec{k} = (k_x, k_y)$ sådana att $\epsilon_{\vec{k}} = 0$ utan att nödvändigtvis räkna ut det fullständiga uttrycket för $\epsilon_{\vec{k}}$.

Uppgift 5

Betrakta en en-dimensionell ferromagnet bestående av N spinn- $\frac{1}{2}$ med gitterparameter a och växelverkansenergi J . Excitationerna från grundtillståndet är magnoner med energi (relativt grundtillsåndet) $\epsilon_k = J(1 - \cos ka)$. Eftersom en magnon svarar mot ett tillstånd med lägre magnetisering kan man skriva magnetiseringen enligt $M = 2\mu_B(N/2 - \sum_k n_k)$, där n_k är det termiska väntevärdet av antalet magnoner i tillstånd k .

a) Det finns ett teorem (Mermin-Wagner) som säger att ett ferromagnetiskt tillstånd inte är möjligt i en dimension vid ändlig temperatur ($T \neq 0$). Bekräfta detta påstående genom att visa att antalet magnoner för den en-dimensionella ferromagneten divergerar. (2p)

Tips:

1. Magnoner är (på samma sätt som fononer) bosoner.
2. Antag låg temperatur, $k_B T \ll \pi/a$, för att förenkla dispersionen, ϵ_k .

b) Vad säger motsvarande räkning i 2D respektive 3D? (1p)

b) Betrakta fononer istället för magnoner. Vad kan det säga om stabiliteten hos en en-dimensionell atomkedja? (1p)

Lycka till!
Igor och Mats

1) $\vec{k} = k(1,0,0)$ där $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, $\lambda = 3.2 \text{ \AA}$
 $\vec{k}' = \frac{1}{3}k(1,2,2)$

(Difraktion är en elastisk process $\Rightarrow |\vec{k}| = |\vec{k}'|$)

$$|\vec{k}'| = \frac{1}{3}k\sqrt{1^2+2^2+2^2} = \frac{1}{3}k \cdot 3 = k = |\vec{k}| \checkmark$$

Läge diffraktions villkör:

$$\vec{\Delta k} = \vec{G}_{hkl}$$

$$|\vec{k}| = |\vec{k}'|$$

Strategi: Räkna $\vec{\Delta k} = \vec{k}' - \vec{k}$. Tag fram \vec{G}_{hkl} för fcc gitter.

$$\vec{\Delta k} = \vec{k}' - \vec{k} = \frac{1}{3}k(1,2,2) - k(1,0,0) = \frac{2}{3}k(-1,1,1)$$

Nu skall vi hitta \vec{G}_{hkl} (kortaste \Rightarrow först max) som är lika med $\vec{\Delta k}$

fcc: Primitiva trans. vektorer för rekt gitter:

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z}) = \frac{1}{2}a(0,1,1)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{z}) = \frac{1}{2}a(1,0,1)$$

$$\vec{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y}) = \frac{1}{2}a(1,1,0)$$

se kittel, s 37 ekr. 54.

Primitiva trans. vektorer för reciprokt gitter:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) = \frac{2\pi}{a}(-1,1,1)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) = \frac{2\pi}{a}(1,-1,1)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) = \frac{2\pi}{a}(1,1,-1)$$

se kittel, s 38, ekr. 56

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

vi ser att $\vec{G}_{100} = \vec{b}_1 = \vec{\Delta k}$ dvs

$$\vec{\Delta k} = \vec{b}_1$$

$$\frac{2}{3}k(-1,1,1) = \frac{2\pi}{a}(-1,1,1)$$

$$\frac{2}{3}k = \frac{2\pi}{a}$$

$$\frac{2}{3} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{a} \Rightarrow a = \frac{3\lambda}{2} = \underline{\underline{4.8 \text{ \AA}}}$$

(2)

$$a) \quad E = 2N \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^j \frac{q^2}{R \cdot j} + 2N \frac{A}{R^n}$$

$$E = 2N \left\{ -\frac{q^2}{R} \underbrace{\left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots\right)}_{\ln 2} \right\} + 2N \frac{A}{R^n}$$

ve killel §. 64

$$E = 2N \left\{ -\frac{q^2}{R} \ln 2 + \frac{A}{R^n} \right\}$$

i) γ määrätään $E = \min \Rightarrow \frac{\partial E}{\partial R} = 0 \Rightarrow R_0$

$$\frac{\partial E}{\partial R} = 2N \left\{ \frac{q^2}{R^2} \ln 2 - n \frac{A}{R^{n+1}} \right\} = 0 \Rightarrow R_0 = \underline{\underline{\left(\frac{nA}{q^2 \ln 2} \right)^{\frac{1}{n-1}}}}$$

$$b) \quad E_{\min} = E(R_0) = 2N \left\{ -q^2 \ln 2 \left(\frac{q^2 \ln 2}{nA} \right)^{\frac{1}{n-1}} - A \left(\frac{q^2 \ln 2}{nA} \right)^{\frac{n}{n-1}} \right\}$$

$$E_{\min} = E(R_0) = - \underline{\underline{2N \ln 2 \cdot q^2 \frac{1}{R_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)}}$$

(2)

Uppg. 3



$$E_c = \frac{\hbar^2 k^2}{0.2 m_e} \Rightarrow m^* = 0.1 m_e$$

a) Elektronen rör sig en cirkel i x-y planet

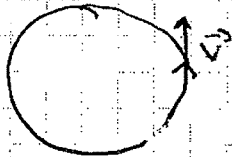
b) Vinkelfrekvensen är $\omega_c = \frac{eB}{m^*} = 1.76 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$

$$\Rightarrow \text{periodtid } \boxed{T = \frac{2\pi}{\omega_c} = 3.57 \cdot 10^{-11} \text{ s}}$$

c) $\vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}}{m^*} = 1.15 \cdot 10^5 \text{ m/s}$

d) Beloppet på hastigheten $|\vec{v}| = v$ är konstant

\Rightarrow längden på banan

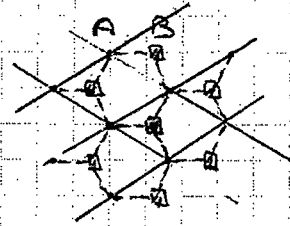
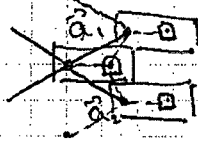


$$\boxed{L = Tv = 4.12 \cdot 10^6 \text{ m}}$$

Uppg 4

$$\vec{a}_1 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{x} + \frac{1}{2} \hat{y} \right) \quad \vec{a}_2 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{x} - \frac{1}{2} \hat{y} \right)$$

a)



D = pricker

B = fyrkenter

b) reciprokt gitter: \vec{b}_1, \vec{b}_2 :

$$\vec{b}_1 \cdot \vec{a}_2 = 0$$

$$\vec{b}_2 \cdot \vec{a}_1 = 0$$

ansatz:

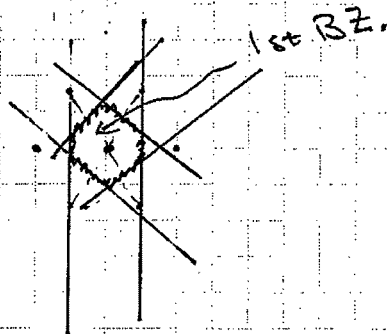
$$\vec{b}_1 \cdot \vec{a}_1 = 2\pi$$

$$\vec{b}_2 \cdot \vec{a}_2 = 2\pi$$

$$\vec{b}_1 = b \left(\frac{1}{2} \hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{y} \right) \Rightarrow \vec{b}_1 \cdot \vec{a}_2 = 0$$

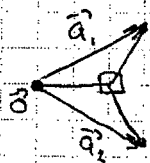
$$2\pi = \vec{b}_1 \cdot \vec{a}_1 = b \cdot \frac{\sqrt{3}}{2} a \Rightarrow b = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \Rightarrow \vec{b}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{1}{2} \hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{y} \right)$$

P.S.S $\vec{b}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{1}{2} \hat{x} - \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{y} \right)$



c) Tight-binding

betrakta en B-atom + grannar:



tillstånd med energi = 0 om

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{0}} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} = 0$$

$$1 + e^{ik_x a \frac{\sqrt{3}}{2} + ik_y a} + e^{ik_x a \frac{\sqrt{3}}{2} - ik_y a} = 0$$

$$1 + e^{ik_x a \frac{\sqrt{3}}{2}} 2 \cos \frac{1}{2} k_y a$$

real och
imaginär del

$$\Rightarrow \sin k_x a \frac{\sqrt{3}}{2} \cos \frac{1}{2} k_y a = 0$$

$$1 + 2 \cos k_x a \frac{\sqrt{3}}{2} \cos \frac{1}{2} k_y a = 0$$

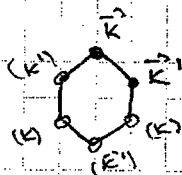
$$\therefore \text{vi behöver } \sin k_x a \frac{\sqrt{3}}{2} = 0 \Rightarrow k_x = \frac{\text{heltal}}{2} \cdot \frac{2}{a\sqrt{3}} \cdot \pi$$

$$k_x = 0 \quad (n=0) \Rightarrow 1 + 2 \cos \frac{k_y a}{2} = 0 \Rightarrow k_y = \frac{4\pi}{3a}$$

$$k_x = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \Rightarrow 1 - 2 \cos \frac{k_y a}{2} = 0 \Rightarrow k_y = \frac{2\pi}{3a}$$

$$2 \text{ p\textit{a}kter: } \vec{k} = \left(0, \frac{4\pi}{3a}\right) \text{ och } \vec{k}' = \left(\frac{2\pi}{a\sqrt{3}}, \frac{2\pi}{3a}\right)$$

På BZ:



(andra punkter är
ekvivalenta med
reciproka gittervektorer)

Uppg. 5

a)

$$n_k = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_k} - 1} \approx \frac{1}{e^{\beta \frac{1}{2} \hbar^2 a^2 k^2} - 1} \quad \text{för } \boxed{\beta \gg \frac{1}{2 \epsilon_F / \hbar^2}}$$

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} &= \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} n_k dk \approx \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta \frac{1}{2} \hbar^2 a^2 k^2} - 1} dk = \\ &= \left[x = \frac{1}{2} \beta \hbar^2 a^2 k^2 \quad dx = \beta \hbar^2 a^2 k dk \right] = \\ &= \frac{L}{2\pi} \frac{2}{\beta \hbar^2 a^2} \cdot \sqrt{\frac{1}{2} \beta \hbar^2 a^2} \int_0^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{x} (e^x - 1)} \rightarrow \infty \\ &\quad \left(\sim N \sqrt{\frac{k_B T}{J}} \right) \end{aligned}$$

$\int_0^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{x} \cdot x} = \frac{1}{x^{3/2}}$
 för små x

u.s.v.

b) i 2D: tillståndstätt \sim konst.

$$\Rightarrow \int_0^{\infty} \frac{dx}{e^x - 1} \rightarrow \ln 0 \quad \text{och är divergent}$$

3D

$$\Rightarrow \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^x - 1} \quad \text{konvergent}$$

2D: något ferromagnetiskt tillstånd för $T \neq 0$

3D: ferromagnetisk ordning OK

c) fononer, dispersion för små energier
 $\epsilon \sim \hbar v k \Rightarrow D(\epsilon) \sim \text{konst.}$

$$\sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \rightarrow \infty \quad \text{logaritmiskt (som 2D)} \quad \text{ovan}$$

\therefore 1D kristall är instabil.

p.g.a divergerande fononantal