Tentamen i Fasta tillståndets fysik, ffy011

Tid och plats: torsdag 16/1, 2014, kl. 08.30-12.30 i M salar.
Examinatorer:
Mats Granath, 7869026, 0723087160, mats.granath@physics.gu.se
Maths Karlsson, 7728038, 0723526106, maths.karlsson@chalmers.se
Hjälpmedel: Beta, 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.
Bedömning: Kursbetyget är baserat på summan av tentamenspoängen +40 % av duggapoängen. Gränserna är: 10p$\leq$3<14p, 14p$\leq$4<17p, 5$\geq$17p.
Rättningsgranskning: Torsdag 6/2, kl 11.45-12.30, rum S3010, Soliden våning 3.

Uppgift 1

Perovskitstrukturerade material, ABO_3 (A och B är katjoner och O är syre), uppvisar en mängd olika egenskaper beroende på bland annat atomslagen A och B. Ett av de mest kända perovskitmaterialen är $BaZrO_3$, vilket har en kubisk struktur med gitterparameter a (se figur).

a) Beskriv strukturen för $BaZrO_3$ med gitter + bas. (1p)

b) Vad är koordinationstalen för Ba, Zr, och O? (1p)

c) Då Y^{3+}-joner substitueras med Zr^{4+}-joner i $BaZrO_3$ bildas det O-vakanser i strukturen, som sedan kan fyllas med -OH grupper då man behandlar (annealar) provet i en varm och fuktig atmosfär. Ett (001)-plan i strukturen för den protonledande perovskiten $BaZr_{0.9}Y_{0.1}O_3H_{0.1}$ visas i figuren. Protonen (H^+) är här kovalent bunden till syreatomen O(1), men känner av en svag växelverkan med näst-närmsta syre O(2). Vad kallas bindningstypen (illustrerad som streckad linje)? (1p)

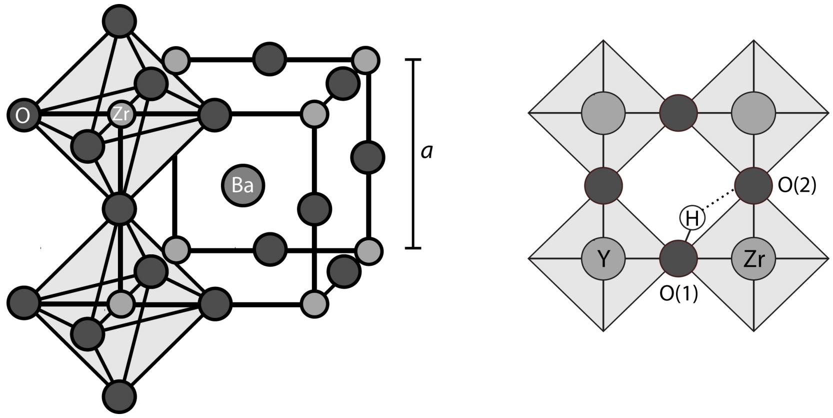
d) Vid hög temperatur kan protonen diffundera mellan olika O-atomer, varvid materialet blir protonledande på en makroskopisk längdskala. Protondiffusion kan studeras med inelastisk neutronspridning - men varför inte med inelastisk röntgenspridning? (1p)

Uppgift 2

Lågenergielektroner (E = 100 eV) faller in ortogonalt mot (100)-ytan i en enkristall av aluminium. För aluminium gäller: FCC, gitterkonstant a = 4,05 Å.

a) Beräkna vinkeln mellan normalen och de diffrakterade strålarna. (3p)

b) Vilken är den minsta elektronenergi som kan ge upphov till diffraktion? (1p)



Uppgift 3

Antag att vi kan beskriva en metall i fria elektronmodellen. Fermienergin ϵ_F är 10eV.

a) Beräkna elektrontätheten. (2p)

b) Vid vilken frekvens av infallande ljus blir metallen genomskinlig? (2p)

Uppgift 4

En elementär beräkning av dielektricitetsfunktionen $\epsilon(\omega)$ för en metall ges av en klassisk model för elektronens förskjutning från jämvikt x: en laddad partikel med laddning $-e$ och massa m accelereras av elektriskt fält $E = E_0 e^{-i\omega t}$ och bromsas av en kraft $-\gamma m\dot{x}$.

a) Beräkna elektriska susceptibiliteten $\chi(\omega)$ som ges via polarizationen $P = \epsilon_0 \chi E$ där $P = np$, med $p = -ex$ elektriska dipolmomentet för en elektron och n elektrontätheten. (2p)

b) Skriv ner uttrycket för dielekriticitetsfunktionen $\epsilon(\omega) = \epsilon_0(1+\chi)$ och visa att i gränsen stora ω (i förhållande till dämpningen) fås det förenklade uttrycket $\epsilon \approx \epsilon_0(1-\omega_p^2/\omega^2)$ (1p)

c) Strömmen ges av $j = -ne\dot{x}$. Skriv ner uttrycket för (komplexa) konduktiviteten $\sigma(\omega)$. Visa att i gränsen $\omega \to 0$ fås uttrycket för Drudekonduktiviteten. (1p)

Uppgift 5

Antag ett två-dimensionellt kvadratiskt gitter med en atom (en orbital) per enhetscell och gitterkonstant a.

a) I en "tight-binding" model som endast innhåller överlap, amplitud $-t$ (med $t > 0$), mellan närmaste grann-orbitaler visa att bandets dispersion ges av $\epsilon(k_x, k_y) = -2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$ (2p)

b) Skissa fermiytorna för tre olika fyllnadsgrader av bandet: 1) nästan tomt, 2) halvfullt, 3) nästan fullt. (1p)

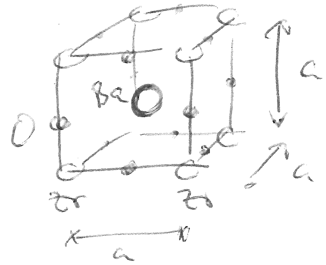
c) Vid halvfyllnad är fermiytan instabil om det finns en liten repulsiv växelverkan. I stället för en metal fås en isolator med antiferromagnetisk ordning.

Vågvektorn $\vec{Q}$ för den antiferromagnetiska ordningen är sådan att den kopplar ett helt segment av fermiytan till ett annat. Vad är $\vec{Q}$? Skissa antiferromagneten i reella gittret genom att rita riktningar på elektronens spinn. (1p)

Lycka till!
Maths och Mats

UPPGIFT 1

Perovskitstruktur ABO_3 (typ $BaZrO_3$)



a) Struktur = gitter + bas

Enkel kubiskt

Ba: $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
Zr: (000)
O: $(\frac{1}{2}00)(0\frac{1}{2}0)(00\frac{1}{2})$

b) Koordinatstal = # närmste grannar

Ba: 12
Zr: 6
O: 2

c) Vätebindning

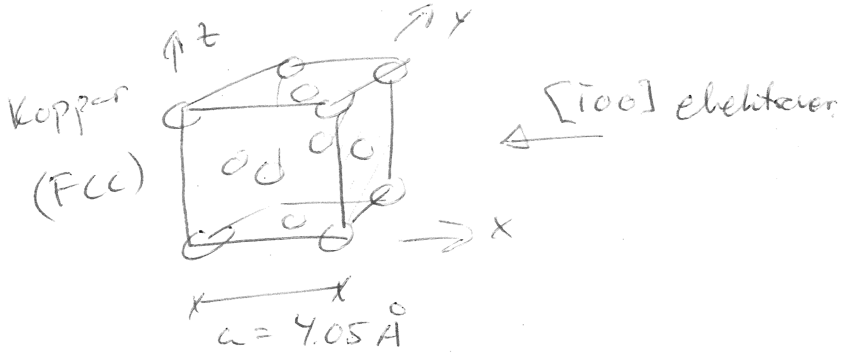
d) Röntgenljus (fotoner) sprider mot elektroner, Spridningsamplituden ökar med antalet elektroner kring atomen. En proton (H^+) har ingen elektron ⇒ svag/ingen spridning

Neutroner växelverkar med atomers kärnor. Spridningen mot H-kärnor är osedvanligt stark.

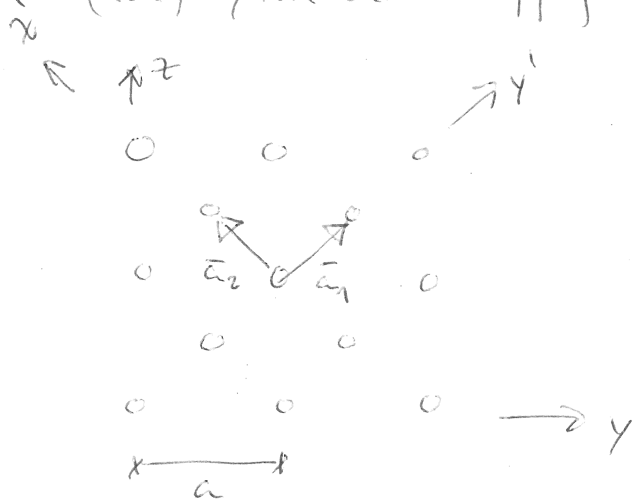
UPPGIFT 2

Lågenergidiffraktion (LEED)

$E = 100\ eV \Rightarrow$ litet inträngningsdjup $\Leftrightarrow$ Diffraktion i 2D



(100)-ytan sedd uppifrån.



STRUKTUR

Kvadratiskt gitter med basvektorer

$$\begin{cases} \bar{a}_1 = \frac{a}{\sqrt{2}}\hat{y}' \\ \bar{a}_2 = \frac{a}{\sqrt{2}}\hat{z}' \end{cases}$$

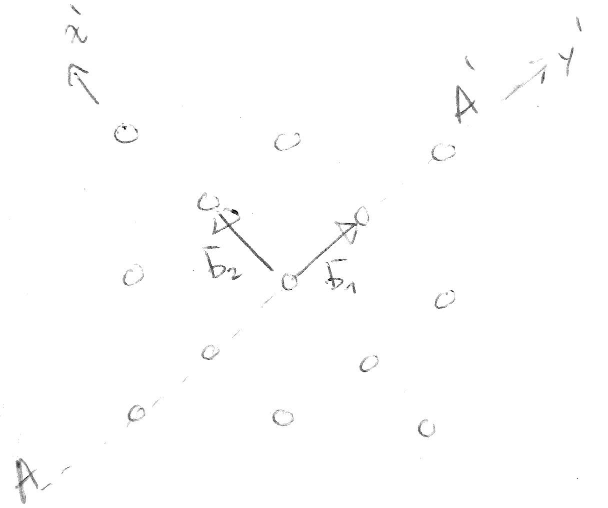
$$\bar{a}_3 \rightarrow \infty\, \hat{x}$$

$\Rightarrow$ Reciprokt gitter med

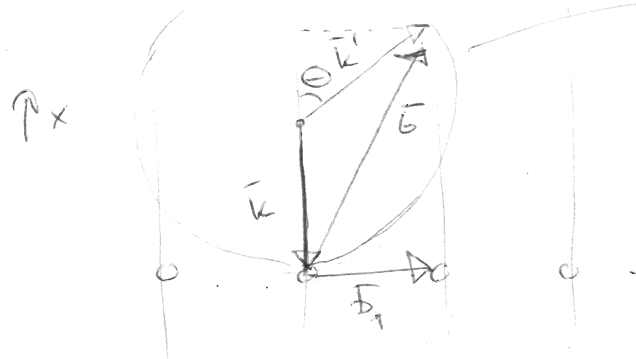
$$\begin{cases} \bar{b}_1 = \frac{2\pi\sqrt{2}}{a}\hat{y}' \\ \bar{b}_2 = \frac{2\pi\sqrt{2}}{a}\hat{z}' \end{cases}$$

$$\bar{b}_3 \rightarrow 0\, \hat{x}$$

Dvs. reciproka staver i x-riktningen



Betrakta ett snitt kring AA', dvs vik upp gittret kring AA'-axeln.



Ewaldcirkel med radie $|\bar{k}| = |\bar{k}'|$

Diffraktionsvillkor $\bar{k}' = \bar{k} + \bar{G}$, Dvs diffraktion då cirkeln skär en reciprok gitterpunkt

$$\bar{b}_1 = \frac{2\pi\sqrt{2}}{a}\hat{y}' \Rightarrow |\bar{b}_1| = \frac{2\pi\sqrt{2}}{a}$$

Enligt figur: $\sin\Theta = \dfrac{|\bar{b}_1|}{|\bar{k}|}$

$$\frac{\hbar^2|k|^2}{2m} = E = 100\ \text{meV} \Rightarrow |\bar{k}| = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = 5.13\ \text{Å}^{-1}$$

$$|\bar{b}_1| = \frac{2\pi\sqrt{2}}{a} = 2.19\ \text{Å}^{-1}$$

a) $\Rightarrow \sin\Theta = \left(\frac{2.19}{5.13}\right) \Rightarrow \underline{\underline{\Theta = 25.3^\circ}}$

b) Minsta elektronenergi som kan ge diffraktion?

$$E_{min} = \frac{\hbar^2|k_{min}|^2}{2m}$$

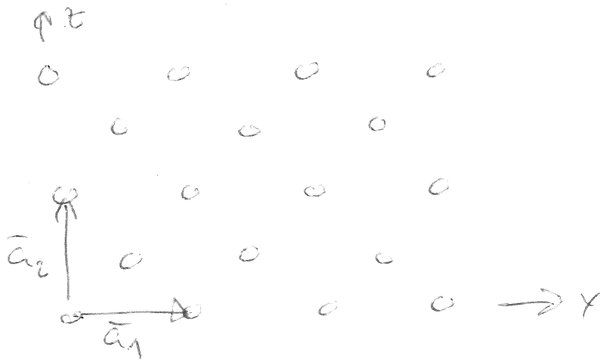
Gränsfallet för diffraktion ges av $|\bar{k}_{min}| = |\bar{b}_1| = 2.19\ \text{Å}^{-1}$

$$\Rightarrow E_{min} = \frac{\hbar^2}{2m}\cdot\left(2.19\ \text{Å}^{-1}\right)^2 = \underline{\underline{18.26\ \text{eV}}}$$

Uppgift 2

Alternativ lösning

Reellt gitter



Kvadratiskt gitter med gitterparameter a

$$\begin{cases} \bar{a}_1 = a\hat{y} \\ \bar{a}_2 = a\hat{z} \\ \bar{a}_3 \to \infty\,\hat{x} \end{cases}$$

+ Bas $(0,0)$, $(\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2})$

Reciprokt gitter

$$\begin{cases} \bar{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{y} \\ \bar{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{z} \\ \bar{b}_3 \to 0\,\hat{x} \end{cases}$$

Reciproka translationsvektor

$$\bar{G}_{kl} = k\cdot\bar{b}_1 + l\cdot\bar{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\left(k\cdot\hat{y} + l\cdot\hat{z}\right)$$

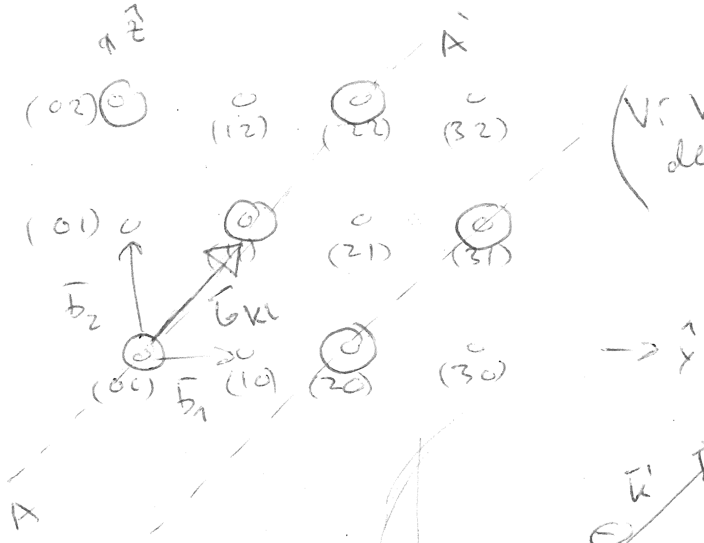
Strukturfaktorn: $$S_{kl} = \sum_{j=1}^{2} f_j\, e^{-i\bar{G}_{kl}\cdot\bar{r}_j}$$

$$\begin{cases} \bar{r}_1 = 0 \\ \bar{r}_2 = \frac{a}{2}\hat{y} + \frac{a}{2}\hat{z} \end{cases}$$

$$\Rightarrow S_{kl} = f\left(1 + e^{-i\pi(k+l)}\right) = \begin{cases} 2f, & k+l = \text{jämnt tal} \\ 0, & k+l = \text{udda} \end{cases}$$

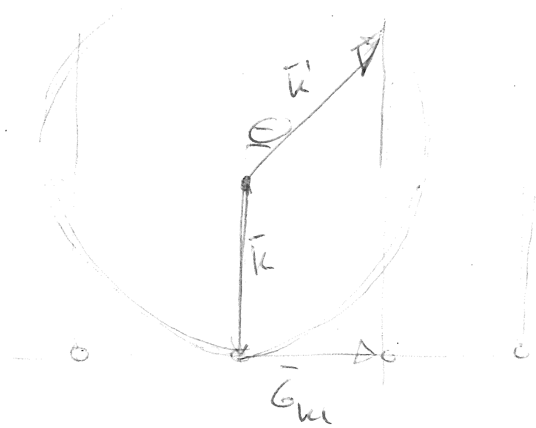
$\Rightarrow$ Diffraktion för $(kl) = (11), (02), (20), (22)$ osv.

Det reciproka gittret ges av:



(Vi känner igen snitten från den andra lösningen)

Vik upp kring AA'



Elastisk spridning $|\bar{k}| = |\bar{k}'|$

Minsta $|\bar{G}_{hk}| = |\bar{G}_{11}| = \frac{2\pi\sqrt{2}}{a}$

$\Rightarrow \sin\theta_{min} = \frac{\bar{G}_{11}}{|\bar{k}|} \Rightarrow \theta_{min} = \frac{2\pi\sqrt{2}/a}{|\bar{k}|}$

$|\bar{k}|$ som ovan; dvs $|\bar{k}| = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = 5.13\ Å^{-1}$

$\Rightarrow \theta_{min} = 25.3°$

③ a) $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{2/3} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$

där n är elektrontätheten

$k_F = \frac{1}{c}\sqrt{\frac{2mc^2 \cdot \varepsilon_F}{\hbar^2}} = 1.6\ \text{Å}^{-1}$

$n = \frac{1}{3\pi^2} k_F^3 = 1.4 \cdot 10^{23}\ \text{cm}^{-3}$

b) dielektricitetsfunktionen (för stora ω):

$\varepsilon_r \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$

ljus kan propagera i metallen

då $\varepsilon_r > 0$, (dvs reellt brytningsindex)

$\Updownarrow$

$\omega \geq \omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{m\varepsilon_0}} = \left[\alpha = \frac{1}{137} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c}\right]$

$= \sqrt{nc^3 \cdot \frac{4\pi\hbar}{mc^2}\alpha}$

$\approx$ ~~1...~~

$\approx \underline{2.1 \cdot 10^{16}\ \text{rad/s}}$

för (vinkelfrekvenser) $\underline{\omega > \omega_p}$

dvs $\sim$ UV

blir metallen genomskinlig

Note, there was an error in the ~~the~~ text, should be $m\gamma\dot{x}$ with γ a rate not, $\cancel{m\dot{x}/\gamma}$ if done according to conventiol meaning of γ

(4). RE. $m\ddot{x} = -m\gamma\dot{x} - eE$

a) $E \sim e^{-i\omega t}$

$\Downarrow$ $x \sim e^{-i\omega t}$

$$-mx(\omega^2 + i\gamma\omega) = -eE_0$$

$$\therefore \quad x = \frac{eE_0}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)}$$

$$P = \frac{-ne^2E_0}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} \Rightarrow \chi(\omega) = \frac{ne^2}{m\varepsilon_0}\left(\frac{1}{-\omega^2 - i\gamma\omega}\right)$$

$$= \frac{\omega_p^2}{-\omega^2 - i\gamma\omega}$$

b)

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0(1 + \chi) =$$

$$= \varepsilon_0\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}\right) \xrightarrow{\omega \gg \gamma} \varepsilon_0\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)$$

c)

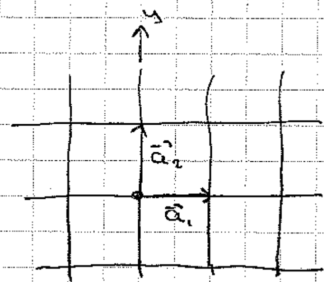
$$j = -ne\dot{x} = \frac{ine^2\omega E_0}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} = \sigma(\omega)E_0$$

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2\omega}{m(\gamma\omega - i\omega^2)}$$

$$\xrightarrow{\omega \to 0} \frac{ne^2}{m\gamma} = \frac{ne^2\tau}{m} \quad \text{dvs Drude}$$

med $\tau = 1/\gamma$ är kollisionstiden.

(5)



$\vec{a}_1 = a\hat{x}$

$\vec{a}_2 = a\hat{y}$

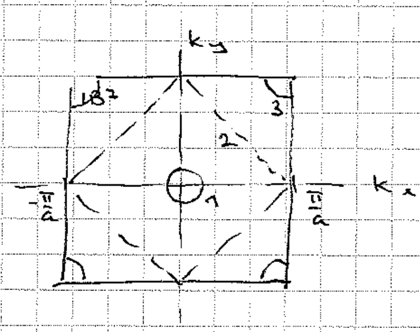
4 grannar

$\vec{k} = (k_x, k_y)$

a) $$\varepsilon_{\vec{k}} = -t\left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2}\right) =$$

$$= -2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$$

b)



1) nästan tomt band

$\varepsilon_F \approx -2t \iff k_x \approx 0$, $k_y \approx 0$

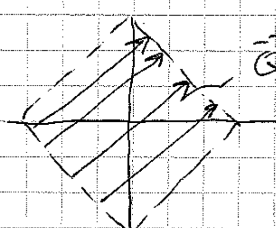
2) halvfyllt

$\varepsilon_F = 0 \quad k_y = \pi - k_x$

3) nästan fullt:

$\varepsilon_F \approx 2t \quad k_x \approx \pi$, $k_y \approx \pi$

c) halvfyllt



$\vec{Q} = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ or equiv. $\left(\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a}\right)$

vågvekt. $\vec{Q} = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ svarar mot en våg med våglängd $\lambda_x = \lambda_y = 2a$

I reella rummet antiferromagnet:

$e^{i\vec{Q}\cdot\vec{R}} = \pm 1$