

DUGGA i Fasta tillståndets fysik för F3
 Tid: 9 februari 2004 kl 15:15-17:00
 Lokaler: FL10, FL71, FL72, FL73, FL74

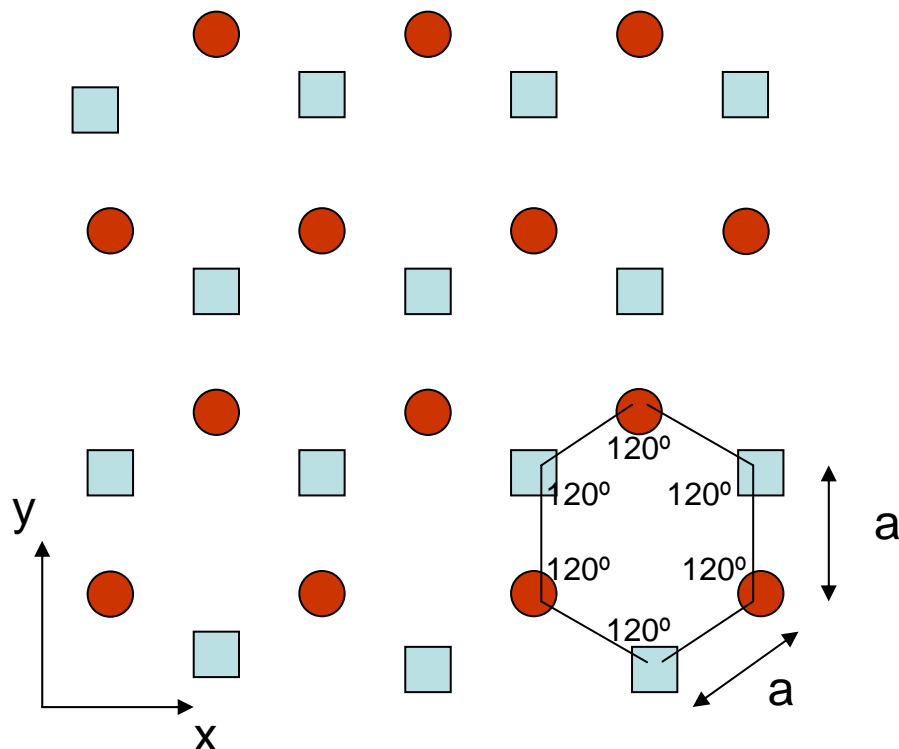
Hjälpmedel: Matematiska tabeller, Physics Handbook, TEFYMA, bifogad formelsamling, typgodkänd räknare eller annan räknare i fickformat dock utan inprogrammerad text eller ekvationer av intresse för tentamen. Däremot är det i sin ordning att i räknarens minne ha lagt värden på naturkonstanter som t ex Plancks konstant och elektronmassan.

Examinator: Mats Jonson (772 3188)

1. (0,5p) Strukturerna fcc och hcp är så kallade tätpackade strukturer. Ange först atomernas relativa positioner i de tätpackade planen och beskriv sedan skillnaden i hur atomerna (tänkta som klot) är packade i fcc respektive hcp-strukturen.

Svar: I tätpackade plan bildar förbindelselinjerna mellan atomerna ett mönster av liksidiga trianglar. Närliggande plan är förskjutna så att ett mönster ABCABC... bildas för fcc och ABABAB... för hcp (jfr boken)

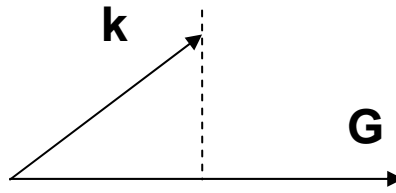
2. (0,5p) Beskriv nedanstående tvådimensionella mönster med gitter och bas (ange translationsvektorer och basvektorer).



Svar: Liksidigt triangulärt gitter. Som kan beskrivas med t ex: Gitter $\mathbf{a}=a(\sqrt{3},0)$, $\mathbf{b}=a(\sqrt{3},3/2)$ Bas: t. ex. punkter i (0,0) fyrkanter i $a(0,1)$.

3. (0,5p) Förklara vad som menas med Brillouinzonplan. Figur och kort text räcker som svar.

Svar: Brillouinzonplan i k-rummet definieras av att \mathbf{k} satisfierar $\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = G^2/2$ där \mathbf{G} är en reciprok gittervektor.



4. (0,5p) Ett gitterplan i ett enkelt kubiskt gitter med gitterparametern $a=3 \text{ \AA}$ skär x-axeln i punkten $x=3a$, y-axeln i punkten $y=2a$ och z-axeln i punkten $z=2a$. Beräkna avståndet från detta plan till närliggande plan med samma Millerindex.

Svar: Planet skär axlarna i $(3,2,2)$, invertera: $(1/3, 1/2, 1/2)$. Multiplikation med 6 ger Millerindex (233) . För kubiska gitter gäller att $d_{hkl} = a/\sqrt{h^2+k^2+l^2}$ dvs $d_{233} = a/\sqrt{2^2+3^2+3^2} = a/\sqrt{22} \sim 0,6 \text{ \AA}$.

5. (0,5p) Uppskatta medelavståndet vid rumstemperatur mellan två vakanser i aluminium. Al har fcc-struktur med gitterparametern $4,05 \text{ \AA}$. Du får själv välja värde på den eller de storheter som bestämmer vakanstätheten.

Svar: $N_{\text{vak}}/N_{\text{at}} \sim \exp(-E_v/k_B T)$. Med $E_v \sim 1 \text{ eV}$, $k_B T \sim 0,025 \text{ eV}$ blir $N_{\text{vak}}/N_{\text{at}} \sim 4 \cdot 10^{-18}$. Det betyder att en kubisk volym som innehåller ca $0,25 \cdot 10^{18}$ atomer i genomsnitt innehåller en vakans. Eftersom en konventionell fcc-enhetscell innehåller fyra atomer skulle en sådan kub ha kantlängden $(0,25 \cdot 10^{18}/4)^{1/3} a \sim 6,3 \cdot 10^5 a$, vilket ger att medelavståndet mellan vakanser är ca $3 \cdot 10^6 \text{ \AA}$ eller $0,3 \text{ mm}$. (Man kan notera att eftersom E_v finns i argumentet till en exponentialfunktion, så har det ringa numerisk betydelse att ta hänsyn till att den konventionella enhetscellen har 4 atomer jämfört med osäkerheten i uppskattningen av E_v)

6.a (0,5p) Kolatomer återfinns ofta som mellanlägesatomer (punktdefekter) i järn och kan förflytta sig mellan olika mellanlägen. Ställ upp (med motivering) ett uttryck som ger en uppskattning av hur många gånger per sekund en kolatom byter plats.

Svar: $f \exp(-E_D/k_B T)$ gånger per sekund. Här är f en vibrationsfrekvens och E_D är en aktiveringsenergi.

6b. (1,0p) Uppskatta hur långt en kolatom i Fe genom diffusion kan förflytta sig på en timme vid rumstemperatur. Uppskatta värden på storheter som behövs för beräkningen med en noggrannhet tillräcklig för att avgöra om svaret är av storleksordningen 1 nm (10^{-9} m), 1 \mu m (10^{-6} m) eller 1 mm (10^{-3} m). Fe har bcc-struktur med gitterparametern $2,87 \text{ \AA}$.

Svar: En kolatom byter plats ca $f \exp(-E_D/k_B T)$ gånger per sekund. Här är $f \sim 10^{14} \text{ s}^{-1}$ en vibrationsfrekvens och $E_D \sim 1 \text{ eV}$ är en aktiveringsenergi, $k_B T \sim 0,025 \text{ eV}$. Dvs antalet "hopp" i diffusionsprocessen under $1 \text{ h} = 3600 \text{ s}$ är ca $3600 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-40)$ eller ca 3. På tre hopp förflyttar sig kolatomen ca $\sqrt{3}$ hopplängder. Hopplängden bör vara något mindre än gitterparametern, säg ca 2 \AA , varför kolatomen har förflyttat sig ca 3 \AA som är av storleksordning 1 nm .

7. (2,0p) För vilken röntgen våglängd kan man erhålla en 311-reflex från en enkristall av Ag om den infallande strålningen är parallell med [100]? Får man även andra reflexer? Ange i så fall index för dessa. Ag har fcc-struktur med gitterparametern 4,09 Å.

Svar: $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + (2\pi/a)(h,k,l) = \pm 2\pi/\lambda (1,0,0) + 2\pi/a (3,1,1)$, Kvadrera! $k'^2 = k^2$ medför att $0 = \pm 2(2\pi/\lambda) (2\pi/a)^3 + (2\pi/a)^2 (3^2 + 1^2 + 1^2)$; $hkl =$ Man får att $\lambda = 6a/11 = 2,33$ Å. Om $hkl = 311$ ser vi att evationen blir densamma oberoende av tecken på k och l. Dvs vi får reflexerna $3\bar{1}\bar{1}$, $3\bar{1}1$, $31\bar{1}$ och 311 ,

8. (2p) En stråle av lågenergetiska elektroner infaller vinkelrätt mot ytan av en Fe-kristall skuren så att dess yta är parallell med (100) plan. Beräkna den minsta energi som krävs för att erhålla diffrakterade strålar orsakade av det översta atomlagret och ange antalet diffrakterade strålar. Som steg på vägen kan Du gärna beskriva den 2-dimensionella strukturen för atomlagret och motsvarande reciproka gitter. Fe har bcc-struktur med gitterparametern 2,87 Å.

Svar: De atomära strukturen i planet kan beskrivas t ex med gittret $\mathbf{r} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b}$ där $\mathbf{a} = a(1,0)$ och $\mathbf{b} = a(0,1)$ där $a =$ gitterparametern i bcc-strukturen.

Det reciproka gittret är stavar, vilka erhålls som skärningarna mellan planskaror vinkelräta mot \mathbf{a} , planavstånd $2\pi/a$, och planskaror vinkelräta mot \mathbf{b} , planavstånd $2\pi/a$. Reciproka gittervektorer: $\mathbf{G}_{hk} = 2\pi/a (h,k)$.

En Ewaldkonstruktion (se boken) visar att $k_{\min} = G_{10}$ vilket ger att $E_{\min} = 3,81 G_{10}^2$ (eV med G i Å^{-1}) = 18,2 eV. Symmetri ger att fyra diffrakterade strålar erhålles (motsvarande G_{hk} med $h=0$, $k=\pm 1$; $h=\pm 1$, $k=0$)