

DUGGA i Fasta tillståndets fysik för F3

Tid: 11 februari 2010 kl 10:00-11:45

Lokaler: FL 63, FL73, FL64, FB

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

1. Högtemperatursupraleedande kristaller består bla av kopparoxid (CuO_2) lager som visas i Fig. 1 nedan. Anta att avståndet mellan kopparatomerna (svarta kulorna) är a .

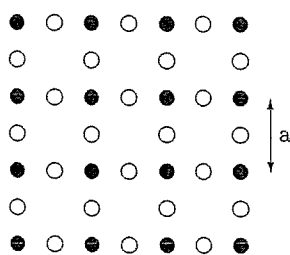


Fig. 1

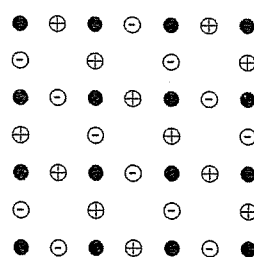


Fig. 2

- a) Rita 2D Bravais-gittret för ett enkelt CuO_2 lager och ange möjliga primitiva translationsvektorer \mathbf{a} och \mathbf{b} som spänner en primitiv 2D cell. (0.5p)
- b) Rita enhetscellen och bestäm basen. (0.5p)
- c) I LaCuO_4 har man upptäckt (se J. H. Bednorz och K. A. Müller, Z. Physik B 64, 189 (1986)) att atomerna inom ett CuO_2 lager ej ligger i ett plan. Istället är syreatomerna förskjutna ur kristallplanet ($+$ =ovanför och $-$ = under planet) på ett alternerande sätt (se Fig. 2.) Bestäm 2D Bravais-gittret och basen för denna kristall. (0.5p).
- d) Rita det reciproka gittret för båda fallen. (0.5p)
2. Natrium-metall har en rymdcentrerad kubisk struktur. Kristallens volym är V . Beräkna intensiteten för diffrakterad strålning från kristallen utifrån följande val av gitter och bas:
- a) Kubiskt gitter med gitterparameter a och 2 atomer i basen,
- b) Primitivt romboedriskt gitter med en atom i basen.
- Visa att spridningsamplituden är lika i båda fallen. Antag att spridningstyrkan f är konstant och oberoende av (hkl) . (2p)

3. En kristall bestående av endimensionella atomkedjor (gitterparameter $a=2,7\text{\AA}$) med alternerande Pt och Cl joner visar ett bandgap på 9 THz mellan de akustiska och optiska fonongrenarna vid Brillouinzonkanten.

Beräkna:

- a) elastiska konstanten C mellan Pt och Cl atomer (i enheter eV/\AA^2) (2p).
 b) ljudhastigheten för akustiska vågor (2p).

$$(M_{\text{Pt}}=195 \text{ amu}, M_{\text{Cl}}=35,5 \text{ amu}, 1\text{amu}=1,6710^{-27}\text{kg}, 1\text{eV}=1,610^{-19}\text{J}).$$

4. En endimensionell kristall består av likadana atomer, atommassa $M=12\text{amu}$, och har gitterparameter $a=1\text{\AA}$. Växelverkan mellan atomerna i kristallen har lång räckvidd dvs utöver de närmaste atomgrannarna måste vi ta hänsyn till växelverkan mellan näst närmaste och nästnäst närmaste grannarna. Växelverkan mellan närmaste grannatomer karakteriseras av en elastisk konstant $C_1=5 \text{ eV/\AA}^2$, den mellan näst närmaste grannar $C_2=-1\text{eV/\AA}^2$ och den mellan nästnäst närmaste grannar $C_3= 0.5\text{eV/\AA}^2$. Beräkna ljudhastigheten i kristallen. (2p)

5. Totala lägesenergin i en NaCl kristall, med $N \text{ Na}^+$ och Cl^- joner, som funktion av deras avstånd r , kan beskrivas med följande ekvation:

$$U_{\text{Total}} = N\left(-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\alpha e^2}{r} + \frac{C}{r^{12}}\right).$$

Första termen i ekvationen kommer från den attraktiva/repulsiva Coulomb potentialen, $\alpha=1.7476$ är Madelungkonstanten för NaCl kristallen och r är avståndet mellan närmaste Na^+ och Cl^- joner. Nästa term i ekvationen kommer från den korta repulsiva växelverkan mellan närmaste grannjoner (Pauli repulsion).

Beräkna konstanten C (i ev/\AA^{12}) om man känner gitterkonstanten för NaCl, $a=5.63\text{\AA}$.
 ($e=1.610^{-19}\text{C}$, $1\text{eV}=1.610^{-19}\text{J}$ ($4\pi\epsilon_0)^{-1}=9 \cdot 10^9\text{Nm}^2\text{C}^{-2}$). (2p)

Formelsamling vid dugga i fasta tillståndets fysik, F3/KF- februari 2010

Struktur och diffraktion

$$\text{Gitter } \mathbf{R} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$$

$$\text{Bas } \mathbf{r}_j = x_j\mathbf{a} + y_j\mathbf{b} + z_j\mathbf{c}$$

$$\text{Cellvolym } |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}|$$

$$\text{Rec.gittret } \mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}$$

$$\mathbf{A} = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}; \mathbf{B} = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}; \mathbf{C} = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}$$

$$\mathbf{G}_{hkl} \perp (hkl); \quad d_{hkl} = \frac{2\pi}{G_{hkl}}$$

För kubiska kristaller gäller:

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

$$\text{Diff. villkor: } \Delta \mathbf{k} = \mathbf{G}_{hkl} \quad ; \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{G}_{hkl} = \frac{1}{2} G_{hkl}^2 \quad ; \quad 2d_{hkl} \sin \Theta_{hkl} = \lambda$$

$$\text{Basens strukturfaktor : } S = \sum_j f_j \exp(-i\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j)$$

Table 2 Characteristics of cubic lattices^a

	Simple	Body-centered	Face-centered
Volume, conventional cell	a^3	a^3	a^3
Lattice points per cell	1	2	4
Volume, primitive cell	a^3	$\frac{1}{2}a^3$	$\frac{1}{4}a^3$
Lattice points per unit volume	$1/a^3$	$2/a^3$	$4/a^3$
Number of nearest neighbors	6	8	12
Nearest-neighbor distance	a	$3^{1/2} a/2 = 0.866a$	$a/2^{1/2} = 0.707a$
Number of second neighbors	12	6	6
Second neighbor distance	$2^{1/2}a$	a	a
<u>Packing fraction^a</u>	$\frac{1}{6}\pi$ =0.524	$\frac{1}{8}\pi\sqrt{3}$ =0.680	$\frac{1}{6}\pi\sqrt{2}$ =0.740

^aThe packing fraction is the maximum proportion of the available volume that can be filled with hard spheres.

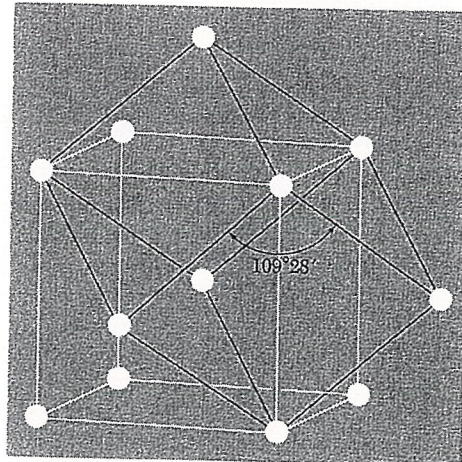


Figure 9 Body-centered cubic lattice, showing a primitive cell. The primitive cell shown is a rhombohedron of edge $\frac{1}{2}\sqrt{3} a$, and the angle between adjacent edges is $109^\circ 28'$.

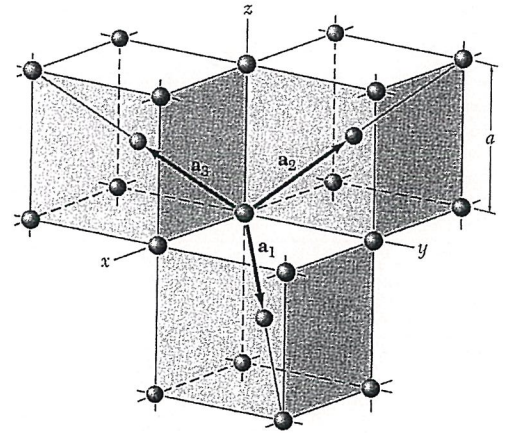


Figure 10 Primitive translation vectors of the body-centered cubic lattice; these vectors connect the lattice point at the origin to lattice points at the body centers. The primitive cell is obtained on completing the rhombohedron. In terms of the cube edge a , the primitive translation vectors are

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) ; & \mathbf{a}_2 &= \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) ; \\ \mathbf{a}_3 &= \frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) . \end{aligned}$$

Here \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} are the Cartesian unit vectors.

The characteristics of the three cubic lattices are summarized in Table 2. A primitive cell of the bcc lattice is shown in Fig. 9, and the primitive translation vectors are shown in Fig. 10. The primitive translation vectors of the fcc lattice are shown in Fig. 11. Primitive cells by definition contain only one lattice point, but the conventional bcc cell contains two lattice points, and the fcc cell contains four lattice points.

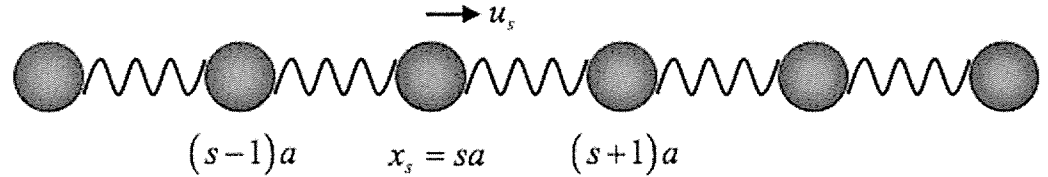
From Kittel: Intro. to Solid State Physics.

Fononer:

1D MODELL med en atom i basen

i) Harmonisk växelverkan mellan närmaste grannar

ii) Atommassa M , fjäderkonstanten C

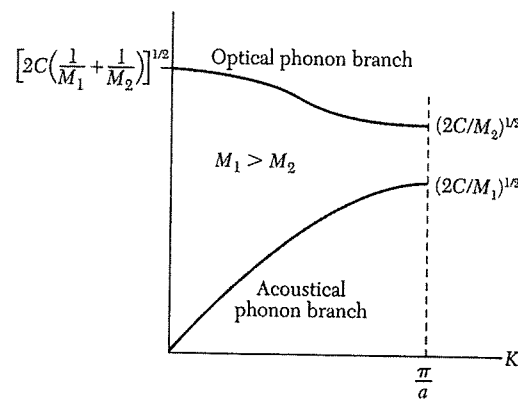


$$M \frac{d^2}{dt^2} u_s = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s)$$

$$u_s(t) = u_0 e^{i(ksa - \omega t)}$$

1D MODELL med två atomer i basen

Dispersionskurvan för optiska och akustiska svängningsmoder



$$\omega_{ak}(k \rightarrow 0) \approx a \frac{\sqrt{C}}{\sqrt{2(M_1 + M_2)}} k$$

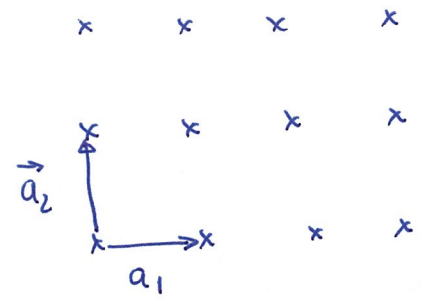
Lösningar till Duggan 100211

1) a)

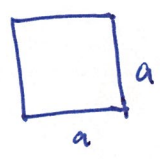
2D kvadratisk Bravais gitter

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

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



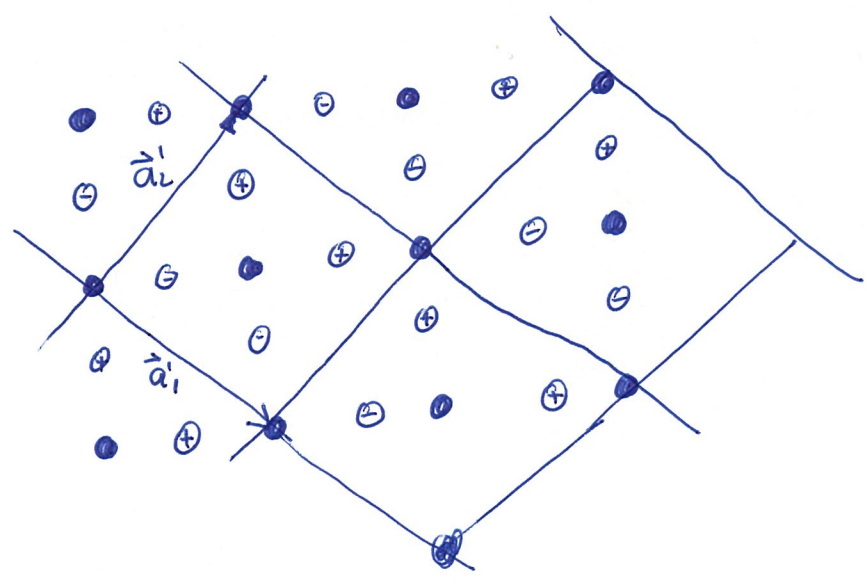
b) enhetscellen \Rightarrow



basen \Rightarrow



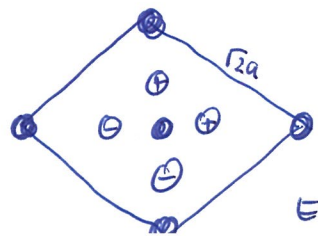
c)



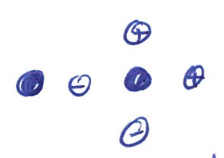
2D Bravais gitter:



Enhetscellen \Rightarrow



Basen:



Enhetscellen innehåller 2st CO2 enheter

a) Rec. gitter till a)



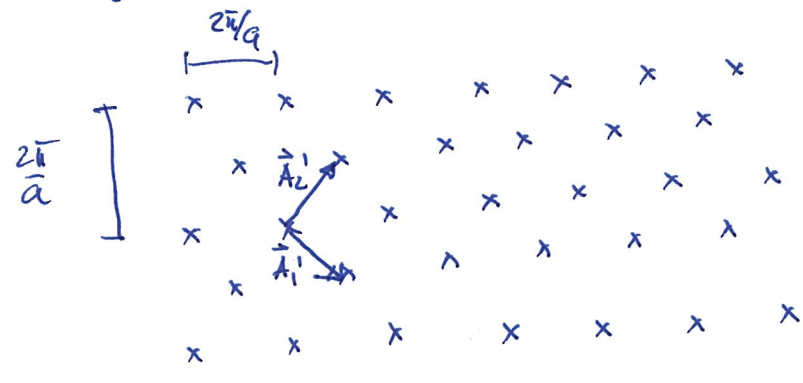
bevis: $\vec{a}_i \cdot \vec{A}_j = 2\pi \delta_{ij}$ $i=j$
 0 $i \neq j$

$\vec{a}_i \in$ direkt gitter
 $\vec{A}_j \in$ rec. gitter

$\vec{a}_1 = a \hat{i}$, $\vec{a}_2 = a \hat{j} \Rightarrow \vec{A}_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{i}$, $\vec{A}_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{j}$

Rec. gitter till b)

$\vec{a}'_1 = a(\hat{i} - \hat{j})$
 $\vec{a}'_2 = a(\hat{i} + \hat{j})$ } $\Rightarrow \vec{A}'_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{i} - \hat{j})$
 $\vec{A}'_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{i} + \hat{j})$



2)

a) Kubiskt gitter, gitterparameter a , 2 atomer i botten
 enhetscellen har volymen $V_c = a^3 \Rightarrow$ inom volymen V finns $N = \frac{V}{V_c}$
 enhetsceller

$$I \propto |N|^2 |GS|^2 |S|^2$$

$$GS = 1 \quad \text{om} \quad \delta h = \vec{G}$$

$$S = 2f \quad \text{eller} \quad 0$$

$$\Rightarrow I \propto 4N^2 f^2 \quad \text{där} \quad N = \frac{V}{a^3}$$

b) primitivt rombbedrivt gitter med volymen $\frac{1}{2}a^3$
 \Rightarrow i volymen V finns $\frac{V}{\frac{1}{2}a^3} = 2 \frac{V}{a^3} = 2N$ ~~celler~~
 primitiva enhetsceller

$$GS = 1, \quad S = f \quad (\text{en atom i botten})$$

$$I \propto |N'|^2 |GS|^2 |S|^2 = (2N)^2 \cdot 1^2 \cdot f^2 = 4N^2 f^2$$

i. e. samma som i a)

3)

a) Bandbredd vid 2θ kanten är

$$\Delta\omega = \sqrt{\frac{2C}{M_{Cl}}} - \sqrt{\frac{2C}{M_{Pt}}} \Rightarrow C = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{I}{M_{Cl}}} - \sqrt{\frac{I}{M_{Pt}}} \right)^2$$

$$C = 7.26 \text{ kg/s}^2 = \frac{7.26 \text{ kg m}^2}{\text{m}^2 \text{ s}^2} = 7.26 \frac{\text{J}}{\text{m}^2} = 0.453 \frac{\text{eV}}{\text{\AA}^2}$$

$$b) \quad v_{ah} = \frac{\omega_{ak}(k \rightarrow 0)}{k} = a \sqrt{\frac{C}{(M_{Pt} + M_{Cl})}}$$

$$v_{ah} = \underline{\underline{832 \text{ m/s}}}$$

4

Rörelse ekv.:

$$M\ddot{u}_S = \underbrace{C_1(u_{S+1} + u_{S-1} - 2u_S)}_{\text{harmonisk kraft mellan ng}} + \underbrace{C_2(u_{S+2} + u_{S-2} - 2u_S)}_{\text{harmon. kraft mellan n.u.s.}} + \underbrace{C_3(u_{S+3} + u_{S-3} - 2u_S)}_{\text{harmon. kraft mellan n.u.u.s.}}$$

Ansatz $u = u_0 e^{i(ka - \omega t)}$ matas in i rörelse ekv. \Rightarrow

$$-M\omega^2 = C_1(e^{ika} + e^{-ika} - 2) + C_2(e^{i2ka} + e^{-i2ka} - 2) + C_3(e^{i3ka} + e^{-i3ka} - 2)$$

$$\omega^2 = \frac{4}{M} \left(C_1 \sin^2 \frac{ka}{2} + C_2 \sin^2 \frac{2ka}{2} + C_3 \sin^2 \frac{3ka}{2} \right)$$

Lydrägor: $v_{ak} = \frac{\omega(k \rightarrow 0)}{k}$

om $k \rightarrow 0 \Rightarrow ka \ll 1 \Rightarrow \sin ka \approx ka$

$$\Rightarrow \omega^2 \approx \frac{4}{M} \left[C_1 \left(\frac{ka}{2}\right)^2 + C_2 \left(\frac{2ka}{2}\right)^2 + C_3 \left(\frac{3ka}{2}\right)^2 \right]$$

$$\omega^2 = \frac{(ka)^2}{M} (C_1 + 4C_2 + 9C_3)$$

$$v_{ak} = \frac{a}{M} \sqrt{C_1 + 4C_2 + 9C_3} = \underline{\underline{6,6 \cdot 10^3 \text{ m/s}}}$$

5)

i jämvikten gäller:

$U_{\text{Total}} = \text{minimum}$ då $r = \frac{a}{2}$ dvs avståndet mellan Na^+ och Cl^- joner i NaCl kristallen

$$\Rightarrow \left. \frac{dU_{\text{Tot}}}{dr} \right|_{r=a/2} = 0$$

$$\Rightarrow \left. \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{de^2}{r^2} - \frac{12C}{r^3} = 0 \right\} \Rightarrow C = \frac{1}{12} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} de^2 \left(\frac{a}{2}\right)^3$$

$$C = 2,95 \cdot 10^{-139} \text{ Jm}^{12} = \underline{\underline{1,85 \cdot 10^5 \text{ eV}\text{\AA}^{12}}}$$