DUGGA i FFY011-Fasta tillståndets fysik för F3 och KF3
Tid: 10 februari 2011 kl 10:00-11:45
Lokaler: FL72, FL73, FL74, HB3
Igor Zoric (0708 30 47 25) och Jari Kinaret

Hjälpmedel: Kursbok (Kittel, Introduction to Solid State Physics), Physics Handbook, föreläsningsanteckningar, miniräknare och ingen mobil. Lösningar finns på kursens hemsidan efter kl 15.

1. En NaCl kristall bestående av en endimensionell atomkedja (gitterparameter a=5,64 Å) med alternerande Na^+ och Cl^- joner visas i Fig. 1 nedan. Atomära formfaktorer (=spridningstyrka) för Na^+ och Cl^- jonerna, f_{Na} och f_{Cl}, anses kända. Monokromatisk Röntgenstrålning, våglängd λ=2,4 Å, infaller **vinkelrätt** mot atomkedjan. En detektor för den spridda strålningen finns i planet som definieras av **k**-vektorn för den infallande strålningen och atomkedjan.

Beräkna:

a) Alla spridningsvinklar (=vinklar mellan detektorn och atomkedjan) som ger upphov till Braggdiffraktion. (1,5p)

b) Intensiteten hos alla diffrakterade strålar. (1,5p)

c) Elastiska konstanten C (i eV/Å^2) mellan Na och Cl-joner (som inom den harmoniska approximationen symboliserar bindningar i kristallen), om högsta energin för optiska fononer i kristallen är 30 meV. (0,5p)

d) Nu ersätter vi den infallande Röntgenstrålningen med neutroner. Beräkna minsta energi hos en infallande neutron som räcker för att excitera vilken fonon som helst inom Brillouinzonen. (1,5p)

(M_{Na}=22 amu, M_{Cl}=35,5 amu, 1amu=$1{,}6710^{-27}$kg, 1eV=$1{,}610^{-19}$J).

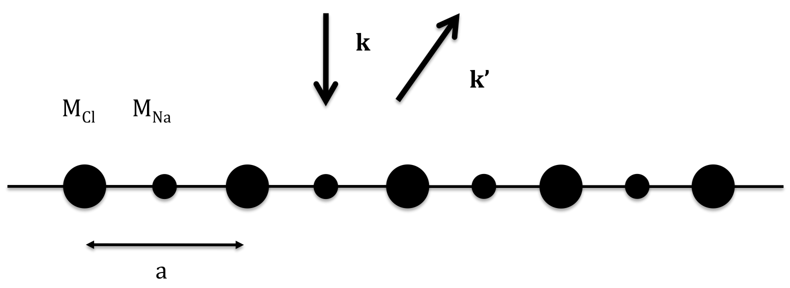


Fig. 1. Endimensionell NaCl kristall med två joner i basen och gitterparameter a.

2. Figuren nedan (se Fig. 2) visar ”honungskaka” strukturen typisk för en 2D grafenkristall.

a) Identifiera och rita Bravaisgittret och basen för ett enskilt grafenlager om avståndet mellan två C-atomer som är närmaste grannar är d=1.4Å. OBS: **basen får innehålla högst två atomer** (1p).

b) Ange primitiva gittertranslationsvektorer **a** och **b** som spänner enhetscellen samt basvektorer (1p).

c) Beräkna translationsvektorer i reciproka rummet och rita det reciproka gittret. (1p).

d) Beräkna intensiteterna hos diffrakterade strålar I_{hk} i ett strukturbestämningsexperiment. Antag att spridningsfaktorn *f* för C-atomer är känd (1p).

e) En ljudvåg i grafenkristallen kan beskrivas med ekvationen:

$$\vec{u}_k = \vec{u}_k(t) \cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{mn}}$$

där

$$\vec{r}_{mn} = m\vec{a} + n\vec{b}$$

är en translationsvektor i reella rummet och m och n är två heltal medan vektor **k** är vågvektorn för ljudvågen. Visa att två olika ljudvågor med vågvektorerna **k** och **k’** som skiljer sig med en reciprokgittervektor **G** (dvs **k’**=**k**+**G**) beskriver samma atomära rörelse i kristallen, dvs **k**-vektorer som ligger inom 1:a BZ representerar alla vågor. (1p)

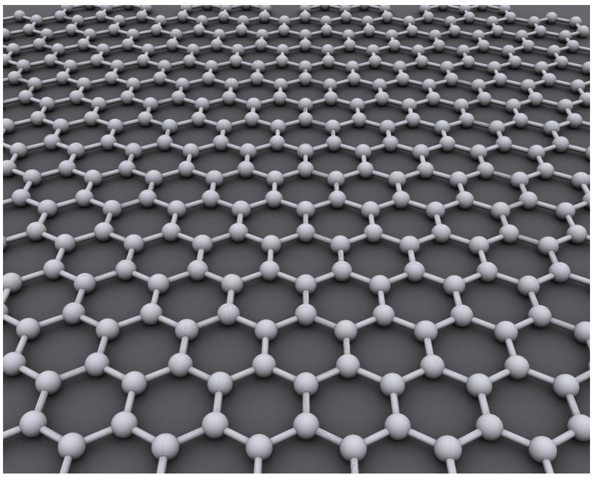


Fig. 2. 2D kristallstruktur för grafen (http://en.wikipedia.org/wiki/Graphene)

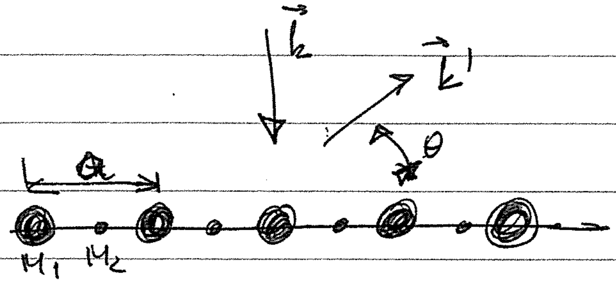
Lycka till Igor och Jari

Dugga 110210

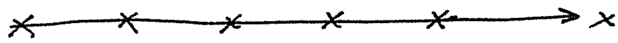
Lösningar:

1 a)

Kristall:



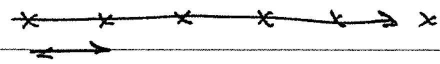
Kristall = gitter + bas

gitter: 

bas: 

basvektorer $\vec r_1 = \vec r_{Cl} = 0$

$r_2 = r_{Na} = \frac{1}{2} a \hat{x}$

Reciproka gittret: 

Transl. vektorer i rec. rummet: $\vec G_h = h \cdot \frac{2\pi}{a} \hat{x}$ $\quad h = 0, 1, 2, 3$

Diffraktion:

Laue villkor: $\vec{\Delta k} = \vec G$

$$\vec k - \vec k' = h \cdot \frac{2\pi}{a} \hat{x}$$

multiplicera med $\hat{x}$ $\Rightarrow$

$$(\vec k - \vec k') \cdot \hat{x} = h \cdot \frac{2\pi}{a} \hat{x} \cdot \hat{x}$$

men $\vec k \cdot \hat{x} = 0$ pga $\vec k \perp \hat{x}$

$$-\vec k' \cdot \hat{x} = h \cdot \frac{2\pi}{a}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \cos\theta = h \cdot \frac{2\pi}{a}$$

$$\boxed{h \cdot \lambda = a \cos\theta}$$

$h = 0 \Rightarrow \cos\theta_0 = 0 \Rightarrow \theta_0 = \frac{\pi}{2} \Rightarrow \underline{\theta_0 = 90^\circ}$

$h = 1 \Rightarrow \cos\theta_1 = \frac{2.4}{5.64} = 0.43 \Rightarrow \underline{\theta_1 = 64{,}82^\circ}$

$h = 2 \Rightarrow \cos\theta_2 = \frac{4.8}{5.64} = 0.85 \Rightarrow \underline{\theta_2 = 31.67^\circ}$

1b $F = N\cdot S\cdot GS$ ②

om $\Delta\vec{k} = \vec{G} \Rightarrow GS = 1$ och

$F = N\cdot S$

där $S = \sum_{\text{atomer i basen}} f_j e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_j}$

Vi har: $\vec{G} = h\cdot\frac{2\pi}{a}\hat{x}$, $\vec{r}_{Cl} = 0$ och $\vec{r}_{Na} = \frac{1}{2}a\hat{x} \Rightarrow$

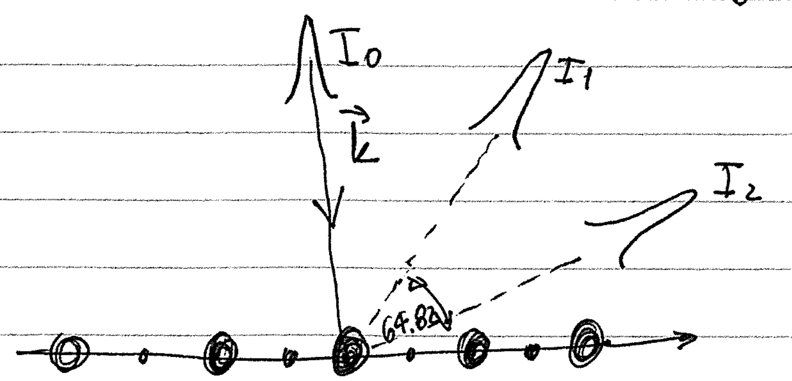
$$F = N\cdot\left(f_{Cl}\,e^{i\vec{G}\cdot\vec{0}} + f_{Na}\,e^{ih\frac{2\pi}{a}\hat{x}\cdot\frac{1}{2}a\hat{x}}\right)$$

$$F = N\left(f_{Cl} + f_{Na}e^{ih\pi}\right) \text{ där } h = 0, 1, 2, \dots$$

om $h=0 \Rightarrow F_0 = N(f_{Cl}+f_{Na}) \Rightarrow I_0 = N^2(f_{Na}+f_{Cl})^2$

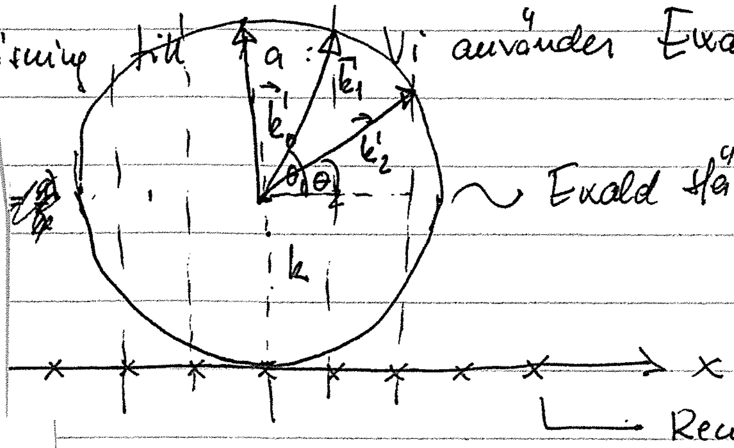
$h=1 \Rightarrow F_1 = N(f_{Cl}-f_{Na}) \Rightarrow I_1 = N^2(f_{Cl}-f_{Na})^2$

$h=2 \Rightarrow F_2 = N(f_{Cl}+f_{Na}) \Rightarrow I_2 = N^2(f_{Cl}+f_{Na})^2$



Vi har symmetrisk fördelning av diff. maxima till vänster.

Alternativ lösning till: Vi använder Ewald konstruktion



~ Ewald sfären $r = k = \frac{2\pi}{\lambda}$

Reciproka gittret

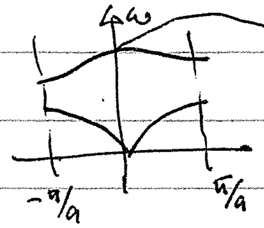
$\cos\theta_0 = \pi/2$ $\qquad g_p = \frac{2\pi}{a}$

$$\cos\theta_1 = \frac{\frac{2\pi}{a}}{k} = \frac{2\pi/a}{2\pi/\lambda} = \frac{\lambda}{a}$$

$$\cos\theta_2 = \frac{2\cdot 2\pi/a}{k} = \frac{2\cdot\frac{2\pi}{a}}{2\pi/\lambda} = \frac{2\lambda}{a}$$

} samma som tidigare

1c) Dispersion relation för kristallen med 2 atomer i basen:



$$\hbar\omega^{optisk}_{max} = \hbar\omega^{0}_{max}(k=0) = \hbar\omega_{max}$$

Kolla kittel

$$\hbar\omega^{0}_{max}(k=0) = \hbar\sqrt{\frac{2C(M_1+M_2)}{M_1\cdot M_2}}$$

$$\Rightarrow \quad C = \frac{(\hbar\omega_{max})^2}{\hbar^2}\,\frac{M_1\cdot M_2}{2(M_1+M_2)} = \underline{\underline{1{,}5\ eV\,Å^{-2}}}$$

1d) Optisk fonon med $\hbar\omega_{max}$ har $k=0$

i <u>inelastisk</u> neutron spridnings exp. gäller

energi bevaringen $\quad \frac{p_i^2}{2m} - \frac{p_f^2}{2m} = \hbar\omega_{max} \quad$ där $m \equiv$ neutron massa

rörelsemängd bev. $\quad p_i - p_f = (G+k)\hbar = \hbar\frac{2\pi l}{a} + 0 \quad l = 0,1,2\ldots$

i.e.

$$\frac{p_i^2}{2m} - \frac{p_f^2}{2m} = \hbar\omega_f$$

$$p_i - p_f = \frac{l\cdot h}{2a} \qquad l = 1,2,3\ldots \quad h = \text{Planck konstant.}$$

Vi har system med 2 ekv. där vi söker p_i

Lösningen är

$$p_i = \frac{lh}{2a} + \frac{\hbar\omega_{max}\cdot m\cdot a}{lh}$$

Vi söker minimum för $p_i(l)$

$$\frac{dp_i}{dl} = 0 = \frac{h}{2a} - \frac{\hbar\omega_{max}\, m a}{l^2 h} = 0 \Rightarrow l^2 = \frac{\hbar\omega_{max}\, m\cdot 2a^2}{h^2}$$

Om vi använder $\hbar\omega_{max} = 30\ meV = 30\cdot 10^{-3}\cdot 1.6\cdot 10^{-19}\ J$

$m = 1.6\cdot 10^{-27}\ kg$

$a = 5.64\cdot 10^{-10}\ m$

$h = 6.6\cdot 10^{-34}\ J$

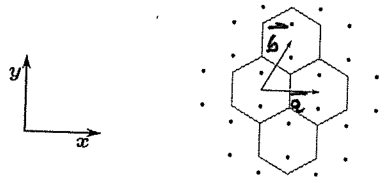
$\Rightarrow \quad n = 3.3 \Rightarrow n = 3$

För $n = 3 \Rightarrow E_i = \frac{p_i^2}{2m} = \underline{\underline{30.51\ meV}}$

2a kristall = bas + gitter

gitter = trigonal Bravais

basen ≡ 2 atomer



2b $\vec a = d\sqrt{3}\,(1,0)$ $\vec b = d\sqrt{3}\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$

$\vec r_1 = \left(0, \frac{d}{2}\right)$

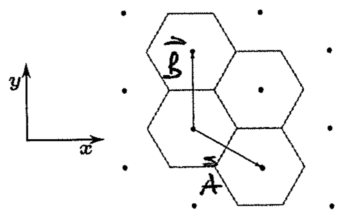
$\vec r_2 = \left(0, -d/2\right) = -\vec r_1$

2c Reciproka gitter vektorer $\vec A, \vec B$ fås från

$\vec A \cdot \vec a = 2\pi$ $\vec B \cdot \vec b = 2\pi$

$\Rightarrow \vec A = \frac{4\pi}{3d}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right), \quad \vec B = \frac{4\pi}{3d}(0,1)$

$\vec G_{hk} = h\vec A + k\vec B$



2d $F_{hk} = NS = \sum_{j=1}^{2} f_j e^{i\vec G\cdot\vec r_j} = N\left(f e^{i\vec G\cdot\vec r_1} + f e^{i\vec G\cdot\vec r_2}\right)$

men $\vec r_1 = -\vec r_2$ $F_{hk} = Nf\left(e^{i\vec G\cdot\vec r_1} + e^{-i\vec G\cdot\vec r_1}\right) = Nf \cdot 2\cos\vec G\cdot\vec r_1$

$\vec G = h\vec A + k\vec B$ $h, k \in \mathbb{Z}$

$\vec r_1 = \left(0, \frac{d}{2}\right)$

$\vec G \cdot \vec r_1 = \frac{\pi}{3}(2h-k)$

$I_{hk} = |F|^2 = N^2 f^2 \cdot 4\cos^2\left[\frac{\pi}{3}(2h-k)\right]$

2e $\quad k' = \vec{k} + \vec{G}$

$$e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_{mn}} = e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}_{mn}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{mn}} \cdot e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_{mn}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{mn}}$$

men $e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_{mn}} = 1$

$\Rightarrow e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_{mn}}$ och $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{mn}}$ representerar samma vågrörelse