

DUGGA i FFY011-Fasta tillståndets fysik för F3 och KF3

Tid: 9 februari 2012 kl 10:00-11:45

Lokaler: FL73, FL74, HA1

Igor Zoric (0708 30 47 25) och Mats Granath

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

1. Figuren nedan (se Fig. 1) visar en 2D kristall (gitterparameter $a=4,75 \text{ \AA}$) som består av atomer A (öppna cirklar) och B (fyllda cirklar). Atomära formfaktorer (=spridningstyrka) för dessa atomer, f_A och f_B , anses kända. Monokromatisk källa för röntgenstrålning, våglängd $\lambda=1,5 \text{ \AA}$, samt detektor för den spridda strålningen är placerade i xz planet (dvs vågvektorerna \mathbf{k}_i samt \mathbf{k}_f har bara x och z komponenter). Strålningen infaller 45° relativt ytans normal.
 - a) Identifiera och rita Bravaisgittret och basen för kristallen (1p).
 - b) Ange primitiva gittertranslationsvektorer \mathbf{a} och \mathbf{b} som spänner enhetscellen samt basvektorer (1p).
 - c) Bestäm den kemiska formeln för ämnet (dvs A_xB_y) (1p).
 - d) Beräkna primitiva translationsvektorer i reciproka rummet och rita det reciproka gittret (1p).
 - e) Beräkna spridningsvinklar för alla Bragg's intensitetsmaxima (använd gärna Laue diffraktionsvillkor) (2p).
 - f) Beräkna intensiteten hos minst en diffrakterad stråle I_{hk} i ett strukturbestämningsexperiment (1p).

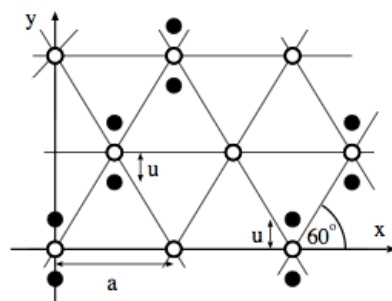
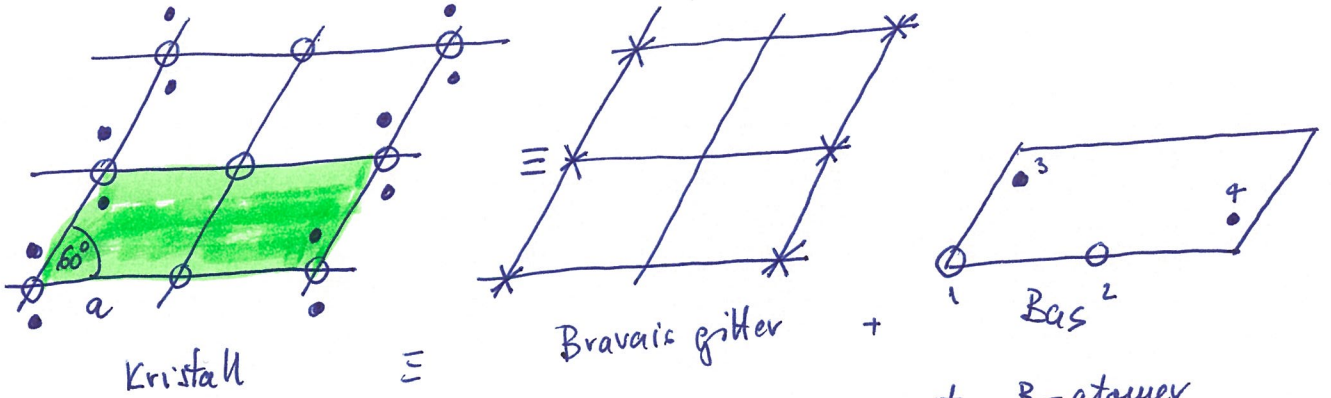


Fig. 1. Tvådimensionell kristall som består av två typer av atomer och har gitterparameter a ligger i xy planet.

2. Betrakta longitudinella gittersvängningar i aluminium (fcc, $a=4,05\text{\AA}$, $M_{\text{Al}}=27\text{ amu}$, $1\text{ amu}=1,6\cdot 10^{-27}\text{ kg}$) i $[111]$ -riktningen. En endimensionell modell (linjär kedja) med interatomäravståndet b lika med avståndet mellan $[111]$ -planskaror kan användas. Tag hänsyn endast till växelverkan mellan närmsta grannar och antag att kraftkonstanten $C=28\text{ N/m}$.
- a) Beräkna ljudhastigheten i denna riktning, utgående från dispersionsrelationen för 1D atomkedja (2p).
- b) Beräkna den maximala svängningsfrekvensen för Al atomer. Kan dessa svängningar exciteras termiskt vid rumstemperatur? (1p).

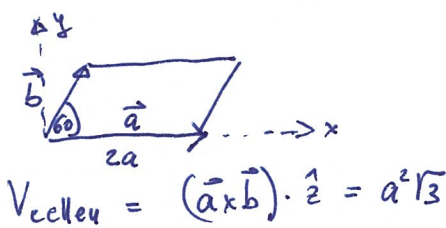
Lycka till Igor

1a) Kristall \equiv gitter + bas



Kristall \equiv Bravais gitter + Bas
 Bas \Rightarrow 4 atomer; 2st A-atomer + 2st B-atomer

1b) Primitiva gittertranslationsvektorer + basvektorer



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

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

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

$$\vec{R}_1 = (0, 0, 0)$$

$$\vec{R}_2 = (a, 0, 0)$$

$$\vec{R}_3 = \left(\frac{1}{2}a, \frac{a\sqrt{3}}{2}, 0\right)$$

$$\vec{R}_4 = (2a, 0, 0)$$

bas vektorer

1c) Kemisk formel

B atomer i cellen = 2
 # A atomer i cellen = ~~1+1~~ 1+1 = 2
 $A_x B_y = \text{~~AB}~~ \text{~~AB}~~ \text{~~AB}~~ \text{~~AB}~~ } A_2 B_2$

1d) Primitiva translationsvektorer i reciproka rummet:

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a^2\sqrt{3}} (\vec{b} \times \hat{z}) = \frac{2\pi}{a^2\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2}a\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{y}\right) \times \hat{z} = \frac{2\pi}{a} \left(\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y}\right)$$

$$\vec{B} = \frac{2\pi}{a^2\sqrt{3}} (\hat{z} \times \vec{a}) = \frac{2\pi}{a^2\sqrt{3}} (\hat{z} \times za\hat{x}) = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \hat{y}$$

Test $\vec{a} \cdot \vec{A} = 2\pi$ $\vec{b} \cdot \vec{B} = 2\pi$ $\vec{G}_{hkl} = h\vec{A} + k\vec{B}$

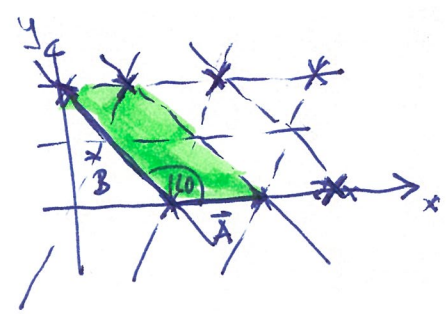
Reciproka gitter:

$$|\vec{A}| = \frac{2\pi}{a} \sqrt{1 + \frac{1}{3}} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{\frac{4}{3}} = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}$$

$$|\vec{B}| = 2 \cdot \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}$$

$$\cos \angle(\vec{A}, \vec{B}) = \frac{\vec{A} \cdot \vec{B}}{|\vec{A}| |\vec{B}|} = -\frac{1}{2} \Rightarrow \angle(\vec{A}, \vec{B}) = 120^\circ$$

+ Stavare



1e

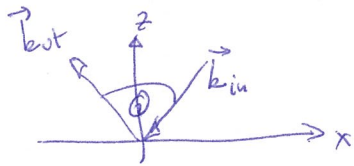
Lane diffraktionsvillkor

2

2D:

$$\vec{k}_{out} - \vec{k}_{in} = \vec{G}_{hk} \quad (1)$$

$$k_{out} = k_{in} \quad (2)$$



$$\vec{k}_{in} = (-k \cos 45, 0, -k \sin 45)$$

$$\vec{k}_{out} = (k_{out}^x, 0, k_{out}^z)$$

från (1) $\Rightarrow k_{out}^x - k_{in}^x = G_{hk}^x \quad (3)$

(4)

men $\vec{G}_{hk} = h \frac{\pi}{a} \left(\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{y} \right) + k \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \hat{z}$

$$\Rightarrow G_{hk}^y = 0 = -h \frac{\pi}{a} \frac{1}{\sqrt{3}} + k \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} = 0 \Rightarrow k = \frac{h}{4}$$

\vec{G}_{hk} som ser diffraktion = $\vec{G}_{h \frac{h}{4}} = \frac{h\pi}{a} \hat{x} \quad h = 4, 8, 12, \dots$

Brygg vinklar θ ?

$$\cos \theta = \frac{\vec{k}_{in} \cdot \vec{k}_{out}}{|\vec{k}_{in}| |\vec{k}_{out}|} = \frac{\vec{k}_{in} \cdot \vec{k}_{out}}{k^2} = \frac{k_{in}^x k_{out}^x + k_{in}^z k_{out}^z}{k^2}$$

Från (2) $\Rightarrow k_{out}^x = k_{in}^x + \frac{h\pi}{a} = -k \cos 45 + \frac{h\pi}{a}$

Från $k^2 = k_{out}^{x^2} + k_{out}^{z^2} \Rightarrow k_{out}^z = \sqrt{k^2 - k_{out}^{x^2}} = \sqrt{k^2 - \left(-k \cos 45 + \frac{h\pi}{a}\right)^2}$

$$\cos \theta = \frac{(-k \cos 45) \left(-k \cos 45 + \frac{h\pi}{a}\right) + (-k \sin 45) \cdot \sqrt{k^2 - \left(-k \cos 45 + \frac{h\pi}{a}\right)^2}}{k^2}$$

$$h = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{1.5} = 4.188 \text{ \AA}^{-1}$$

$$\frac{\pi}{a} = \frac{\pi}{4.75} = 0.661 \text{ \AA}^{-1}$$

$h = 4 \Rightarrow \theta_1 = 130.60^\circ$
 $h = 8 \Rightarrow \theta_2 = 169.1^\circ$
 $h = 12 \Rightarrow$ finns ej.

finns ej i reflektioner

Intensitet:

$$I_{hk} \approx |S|^2$$

$$+ i \vec{E}_{h,1/4} \cdot \vec{P}_j \rightarrow \text{basvektorer}$$

$$S_{hk} = \sum_{j \text{ atomer i basen}} f_j e^{i \frac{4\pi}{a} \vec{x} \cdot \vec{r}_j}$$

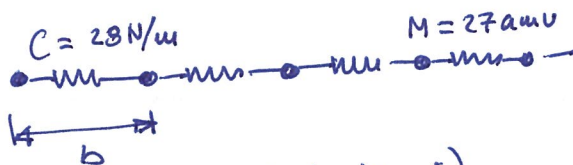
$$S_{41} = f_A e^{i \frac{4\pi}{a} \vec{x} \cdot (0,0,0)} + f_A e^{i \frac{4\pi}{a} \vec{x} \cdot (a,0,0)} + f_B e^{i \frac{4\pi}{a} \vec{x} \cdot (\frac{1}{2}a, \frac{a\sqrt{3}}{2}, 0)} + f_B e^{i \frac{4\pi}{a} \vec{x} \cdot (2a, 0, 0)}$$

$$S_{41} = f_A \cdot 1 + f_A e^{i4\pi} + f_B e^{i2\pi} + f_B e^{i8\pi} = 2f_A + 2f_B$$

$$I_{41} \approx |2f_A + 2f_B|^2$$

2a) [111] plan skovov $\Rightarrow d_{111} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} = \frac{a}{\sqrt{3}} = \frac{4.05}{\sqrt{3}}$

$$\Rightarrow b = \frac{4.05}{\sqrt{3}} = 2.34 \text{ \AA}$$



Disp. relation (see Kittel Kap 4)

$$\omega^2 = \frac{4}{M} C \sin^2 \frac{kb}{2}$$

Ljdvågor: $k \rightarrow 0 \Rightarrow \omega^2 \approx \frac{4C}{M} \frac{k^2 b^2}{4} \Rightarrow \omega = \sqrt{\frac{Cb^2}{M}} \cdot k$

$$v = \frac{d\omega}{dk} = \sqrt{\frac{Cb^2}{M}}$$

$$C = 28 \text{ N/m}, M = 27 \cdot 1.6 \cdot 10^{-27} \text{ kg}, b = 2.34 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$\Rightarrow v = 5850 \text{ m/s}$$

2b) $\omega_{max} (kb = \pi) = \sqrt{\frac{4C}{M}} = 5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$

$$\Rightarrow hf_{max} = \hbar \omega_{max} = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1} = 5.25 \cdot 10^{-21} \text{ J} = \frac{5.25 \cdot 10^{-21} \text{ J}}{1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J/eV}} \approx 33 \text{ meV}$$

$$k_B T \text{ vid } T = 300 \text{ K} \approx 25 \text{ meV}$$

$\hbar \omega_{max} = 33 \text{ meV}$, $k_B T = 25 \text{ meV} \Rightarrow$ försumbar försumbar försumbar ex. c.