

## TENTAMEN I FASTA TILLSTÅNDETS FYSIK F3/KF3 – FFY011

**Tid:** 2013-01-16 kl. 14.00

**Lokal:** M- salar

**Hjälpmedel:** 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.

Kursbetyget är baserat på summan av tentamenspoängen +40 % av duggapoängen. Gränserna är:  $10p \leq 3 < 14p$ ,  $14p \leq 4 < 17p$ ,  $5 \geq 17p$ . Granskning: 1/2 kl 12-13 i F5002.

**Examinatorer:**

**Igor Zoric**

**tel: 3371, 0708 30 47 25**

**Mats Granath**

**tel: 031 786 9026, 0766 229026**

### Uppgift 1

Figuren nedan visar en 2D-kristall.

- Identifiera och rita Bravais-gittret och basen (2p).
- I figuren visas tre stycken vektorpar (1,2,3). Vilket par kan vara primitiva gittertranslationsvektorer (1p)?
- Hur många atomer finns per enhetscell (1p)?

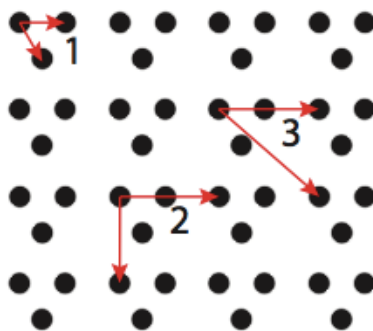


Fig. 1. En 2D-kristall

### Uppgift 2

Ett okänt material har centrerad tetragonal struktur där den konventionella enhetscellen spänns av 3 stycken primitiva vektorer:  $(a, 0, 0)$ ,  $(0, a, 0)$ ,  $(0, 0, c)$  där  $c = 3a/2$  och basen består av 2 likadana atomer med koordinaterna:  $(0, 0, 0)$ ,  $(a/2, a/2, c/2)$ . Gitterparametern  $a=4.2\text{\AA}$ .

- Beräkna primitiva vektorer för det reciproka gittret (1p)

- b) I ett Debye-Scherrer diffraktionsexperiment används röntgenstrålning med våglängden  $\lambda=1.5\text{\AA}$ . Beräkna spridningsvinklar för de fyra första diffraktionsringarna (3p)

### Uppgift 3

Kristallin argon har fcc-struktur. Antag att växelverkan mellan Ar-atomerna kan beskrivas via Lennard-Jones potentialen som agerar **bara** mellan närmaste grannar i kristallen:

$$U(r) = -4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} \right]$$

där  $r$  är avståndet mellan närmaste grannarna och  $\epsilon=0.0104\text{eV}$  och  $\sigma=3.40\text{\AA}$  för Ar.

- a) Hur många närmaste grannar har varje atom i en fcc-kristall? Hur stort är avståndet mellan närmaste grannarna uttryckt i enheter av gitterparametern  $a$  för en konventionell fcc-enhetscell (1p)?
- b) Beräkna kohesiv energi per atom ( $E/N$ ) samt gitterparameter  $a$  för en makroskopisk Ar-kristall som består av  $N (\approx 10^{23})$  Ar-atomer och jämför dina resultat med de experimentella värdena för kristallin Ar:  $a \approx 5.3\text{\AA}$  och  $E/N = -0.08 \text{ eV/atom}$ . Diskutera dina resultat. (3p)

## Uppgift 4

Natrium har en resistivitet vid rumstemperatur  $\rho = 4.75\mu\Omega cm$  och en täthet  $n = 948kg/m^3$ .

- Beräkna Fermihastigheten givet att man kan använda den fria elektronmodellen för ledningselektronerna. (1p)
- Beräkna den medelfria vägen  $\ell = v_F\tau$ , där  $\tau$  är kollisionstiden. (1p)
- Antag att 10% av natrium atomerna ersätts med magnesium och att detta inte ändrar kristallstruktur och gitterkonstanter, men att magnesium atomerna verkar som orenheter i materialet vilket minskar den medelfria vägen med 10%. Hur ändras resistiviteten? (2p)

## Uppgift 5

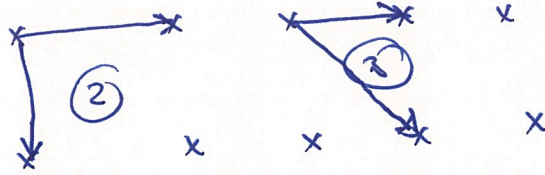
En endimensionell kristall har gitterkonstant  $a$ . Ledningselektronerna kan approximeras som fria elektroner med massa  $m_e$  i en svag periodisk potential  $U(x) = u_0 \cos(2\pi x/a)$  där  $u_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}$ .

- Beräkna (approximativt) storleken på gapet mellan lägsta och näst lägsta bandet. (2p)
- Förklara varför gapet mellan banden i denna modell blir successivt mindre för högre band. (2p)

Lycka till!  
Igor och Mats

① a) x x x x x

gitter

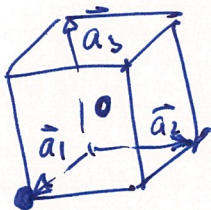


••• ≡ bas

b) ② eller ③

c) 3 st.

2)



a)

$$\vec{a}_1 = a(100)$$

$$\vec{a}_2 = a(010)$$

$$\vec{a}_3 = a(00\frac{3}{2})$$

Primitiva vektorer för reciproka gittret:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\sqrt{3}}{a}(100)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\sqrt{3}}{a}(010)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{4\sqrt{3}}{3a}(001) = \frac{2\sqrt{3}}{a}$$

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 = \frac{2\sqrt{3}}{a}(h, k, \frac{3l}{2})$$

Basen: (000) och  $(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{3a}{4})$ .

Basens struktur faktor:

$$S_{hkl} = \sum_{j=1}^2 f e^{+i\vec{e}_j \cdot \vec{R}_j} = 1 + e^{i2\sqrt{3}(\frac{h}{2} + \frac{h}{2} + \frac{l}{2})} = 1 + e^{i\sqrt{3}(h+k+l)}$$

$S = 0$  om  $n_1 + n_2 + n_3 \equiv$  ojämnt tal  
 $S \neq 0$  om  $n_1 + n_2 + n_3 \equiv$  jämnt tal

Kortaste  $\vec{G}_{hkl}$  med  $h+k+l \equiv$  jämnt tal

(2)

$$\left. \begin{matrix} 101 \\ 011 \end{matrix} \right\} \Rightarrow |\vec{G}| = \frac{2\pi}{a} \sqrt{\frac{13}{3}} = 1.8 \text{ \AA}^{-1} \quad (1)$$

$$002 \Rightarrow |\vec{G}| = \frac{2\pi}{a} \cdot 2 = 1.99 \text{ \AA}^{-1} \quad (2)$$

$$110 \Rightarrow |\vec{G}| = \frac{2\pi}{a} \sqrt{2} = 2.11 \text{ \AA}^{-1} \quad (3)$$

~~111~~  

$$112 \Rightarrow |\vec{G}| = \frac{2\pi}{a} \sqrt{1+1+\frac{16}{9}} = 2.9 \text{ \AA}^{-1} \quad (4)$$

Läge:

$$\sin \frac{\theta}{2} = \frac{|\vec{G}|}{2} \cdot \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{|\vec{G}| \lambda}{4\pi}$$

$$\Rightarrow \begin{aligned} \theta_1 &= 24.81^\circ \\ \theta_2 &= 27.48^\circ \\ \theta_3 &= 29.18^\circ \\ \theta_4 &= 40.50^\circ \end{aligned}$$

(3)

a) FCC struktur  $\Rightarrow$  12 st närmaste grannar.

$$\text{ng. avstånd} = r = \sqrt{2} \cdot \frac{1}{2} a = \frac{a}{\sqrt{2}}$$

$$\text{b) } \frac{E}{N} = \frac{1}{2} \cdot 12 V = 6V$$

$$\text{minimera } \frac{E}{N} \Rightarrow \frac{dE/N}{dr} = 0 \Rightarrow r_{\min}$$

$$x = \left(\frac{r}{r_0}\right)^6 \Rightarrow U = -4\varepsilon(x - x^2)$$

$$\frac{dU}{dx} = -4\varepsilon(1-2x) \Rightarrow x_{\min} = \frac{1}{2} \Rightarrow r_{\min} = r_0 \cdot 2^{1/6} = 3.81 \text{ \AA}$$

$$U_{\min} = U(x = \frac{1}{2}) = -\varepsilon$$

$$\left(\frac{E}{N}\right)_{\min} = -6\varepsilon = 0.0624 \text{ eV/atom}$$

$$a = \sqrt{2} r_{\min} = \underline{5.39 \text{ \AA}}$$

Uppgift 4

$$a) v_F = \frac{h}{m_e} \left( \frac{3\pi^2 n}{V} \right)^{1/3}$$

Natrium har en ledningselectron/atom,

$$\text{tatheten } \tilde{n} = n_e = \frac{\rho}{V} = \frac{948 \text{ kg/m}^3}{23 \cdot 4 \text{ kg}} = 2.48 \cdot 10^{28}$$

$$\Rightarrow v_F = 1.04 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

$$b) \text{ resistiviteten ges av } \rho^{-1} = \sigma = \frac{n_e e^2 \tau}{m_e}$$

$$\Rightarrow \tau = \frac{m_e}{n_e e^2 \rho} = 3.01 \cdot 10^{-14} \text{ s}$$

$$\Rightarrow \lambda = v_F \tau = 3.14 \cdot 10^{-8} \text{ m}$$

vilket verkar vara en rimlig siffra, storleksordningen 100 enhetsceller,

$$c) \text{ Mg har } 2e^-/\text{atom} \Rightarrow \text{ökning av } n_e \text{ med } 10\% \Rightarrow n_e \rightarrow n_e' = 1.1 n_e$$

$$\Rightarrow v_F \rightarrow v_F' = (1.1)^{1/3} v_F$$

$$\lambda \rightarrow \lambda' = 0.9 \lambda$$

$$\tau \rightarrow \tau' = \frac{\lambda'}{v_F'} = (1.1)^{1/3} 0.9 \frac{\lambda}{v_F}$$

$$\rho^{-1} = \frac{n_e e^2 \tau}{m_e} \rightarrow (\rho^{-1})' = \frac{n_e' e^2 \tau'}{m_e} = 1.1 (1.1)^{1/3} 0.9 \rho^{-1}$$

$$\rho \rightarrow \rho' = (1.1)^{2/3} 0.9 \rho$$

$$\rho' = \frac{\rho}{1.05} = 0.95 \rho$$

resistiviteten ~~minskar~~ med  $5\%$  ökar

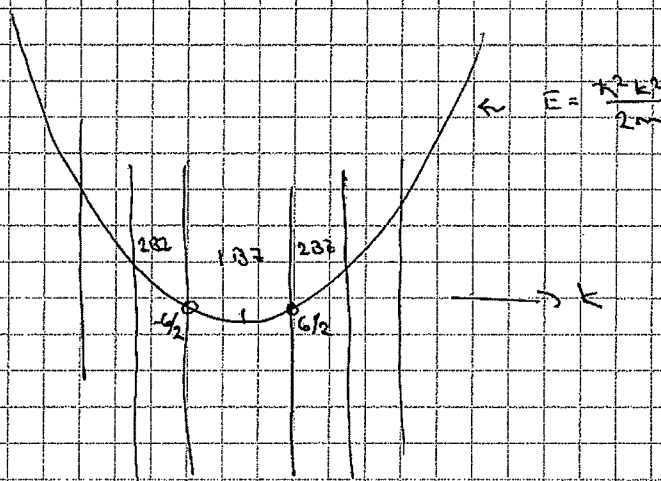
## Uppgift 5

$$U(x) = U_0 \cos\left(2\pi \frac{x}{a}\right) = \frac{1}{2} U_0 \left( e^{i \frac{2\pi}{a} x} + e^{-i \frac{2\pi}{a} x} \right)$$

$$= \frac{1}{2} U_0 \left( e^{iGx} + e^{-iGx} \right)$$

där  $G = \frac{2\pi}{a}$  är reciproka gittervektorn

Utgå från frielektronmodellen



eftersom  $\frac{\hbar^2}{2m a^2} \ll U_0$  och är potentialen  
svag, vilket innebär att den "bara"  
påverkar degenererade tillstånd

a) På randen av 1st BZ. fås sekulärmatris

$$\begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m a^2} & \frac{1}{2} U_0 \\ \frac{1}{2} U_0 & \frac{\hbar^2 (k-G)^2}{2m a^2} \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m a^2} \pm \frac{1}{2} U_0$$

$$\boxed{\text{Bandgapet: } U_0}$$

b) Potentialen ~~påverkar~~ kopplar inte tillstånd  
direkt i högre BZ. (eftersom den bara sprider med  $\pm G$ )

Kopplingen sker alltså via tillstånd med  
andra energier och blir av storleksordning  $\left(\frac{U_0}{\hbar^2/m a^2}\right) U_0$   
gapet för BZ.  $\sim$