

DUGGA i FFY011-Fasta tillståndets fysik för F3 och KF3

Tid: 14 februari 2013 kl 10:00-11:45

Lokaler: VV salar

Igor Zoric (772 3371, 0708 30 47 25)

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

1. Diffractionsexperiment med röntgenstrålning visar att i en natriumhydrid kristall (NaH) är Na-atomerna arrangerade inom en ytcentrerad kubisk struktur. Atomlägena för H-atomerna i kristallen gick inte att bestämma exakt från dessa diffractionsexperiment. Man fick indikationer på att H-atomerna är förskjutna från Na-atomernas läge med  $a(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  alternativt  $a(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ , vilket resulterar i en ZnS- (zinkblend) respektive en NaCl- (natriumklorid) struktur. För att bestämma de exakta atomlägena för H-atomerna i kristallen använder man neutroner som infallande strålning och observerar att Braggdiffractionstoppen med index (111) har mycket starkare intensitet än (200) Braggtoppen.
  - a) Beräkna basens strukturfaktor,  $S_{hkl}$ , för neutrodiffraction med antagandena att NaH har i) NaCl-struktur och ii) ZnS-struktur. (4p)
  - b) Baserat på dessa resultat bestäm vilken strukturmodell som är rätt för NaH-ämnet. (2p)
  - c) Förklara varför det är svårt att ta reda på H-atomernas läge i basen i ett diffractionsexperiment med röntgenstrålning. (1p)

Neutronspridningsformfaktorer  $f_{Na}$  och  $f_H$  för Na respektive H-kärnor är  $0.363 \times 10^5 \text{ nm}$  och  $-0,374 \times 10^5 \text{ nm}$ . (Obs  $f_H$  har negativt värde pga resonansspridning)
  
2. Ett fast ämne har kubisk kristallstruktur med en atom i basen. Gitterparametern  $a=3\text{Å}$  och ljudhastigheten i ämnet är  $v=1000\text{m/s}$ . Du siktar på att göra experiment där du mäter värmekapacitiveteten i ditt ämne inom den så kallade "kvantregimen", dvs temperaturområdet där bara den akustiska vågen (fonon) som har den lägsta energin ovanför grundtillståndet är exciterad. Den lägsta temperatur du kan åstadkomma i din experimentella utrustning är 4 K. Hur stort skall ditt prov vara för att du ska kunna genomföra ett sådant experiment? Hur många atomer består provet av? (3)
 

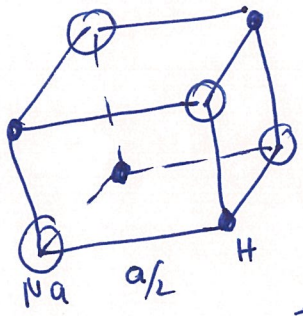
Obs: Tänk på att tillåtna vågtal för vibrationsvågor i kristallen är diskreta och beror på provets dimensioner. Leta efter det minsta vågtalet som ger vibrationsvågen med den lägsta energin i kristallen. Tänk på att vågen skall exciteras termiskt.

Lycka till! Igor



a) NaCl struktur

(se kittel s 13 + 14)



Na:  $(000) (\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0) (\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}) (0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$   
 H:  $(\frac{1}{2} 0 0) (0 \frac{1}{2} 0) (0 0 \frac{1}{2}) (\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$

$$S_{hkl} = \sum_{j=1}^8 f_j e^{-i \vec{G}_{hkl} \cdot \vec{R}_j} \Rightarrow \sum_j f_j e^{-i 2\pi (hx_j + ky_j + lz_j)}$$

$$S_{hkl} = f_{Na} \left( 1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)} \right) + f_H \left( e^{-i\pi h} + e^{-i\pi k} + e^{-i\pi l} + e^{-i\pi(h+k+l)} \right)$$

$S_{111} = 4f_{Na} - 4f_H$  men  $-f_H \approx f_{Na} \Rightarrow S_{111} \approx 8f_{Na}$   
 $S_{200} = 4f_{Na} + 4f_H$   $S_{200} \approx 0$

$\Rightarrow I_{111} \propto |S_{111}|^2 = 64 f_{Na}^2 \Rightarrow \underline{I_{111}} \gg I_{200}$   
 $I_{200} \propto |S_{200}|^2 \approx 0$

ZnS struktur (se s. 17 + 18 i kittel.)

Na:  $(000) (\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0) (\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}) (0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$   
 H:  $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}) (\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}) (\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}) (\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4})$

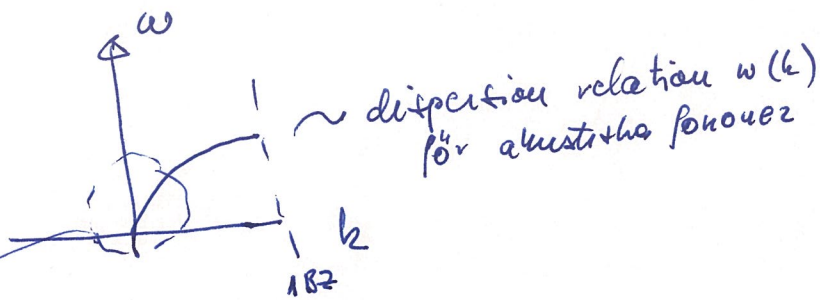
$$S_{hkl} = \sum_j f_j e^{-i \vec{G}_{hkl} \cdot \vec{R}_j} = f_{Na} \left( 1 + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(k+l)} \right) + f_H \left( e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(h+3k+l)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(3h+k+l)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(3h+3k+l)} \right)$$

$\Rightarrow S_{111} = 4f_{Na} - 3if_H \Rightarrow I_{111} \propto |S_{111}|^2 \propto S \cdot S^* = (4f_{Na})^2 + (3f_H)^2 = 25 f_{Na}^2$   
 $S_{200} = 4f_{Na} - 4f_H \approx 8f_{Na} \Rightarrow I_{200} \approx 64 f_{Na}^2$

$\Rightarrow$  NaCl struktur är rätt pga  $I_{111} \gg I_{200}$

②

②



$k \in (0 \rightarrow \pi/L - \text{kantur})$

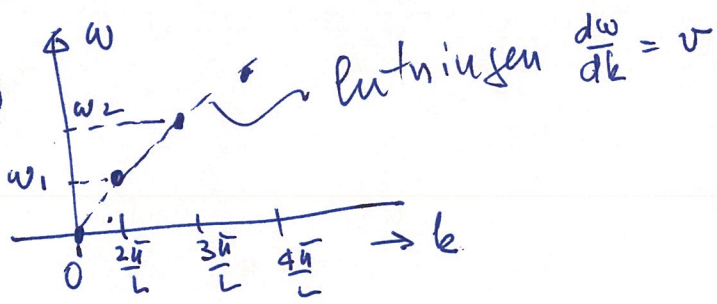
$k$  diskret ;

lägst  $k$ -värdet  $= k_{\min} = \frac{2\pi}{L}$

$k = n \cdot \frac{2\pi}{L}$  där

$L \equiv$  provets dimension

$n = 0, 1, 2, \dots$



$$\hbar \omega_1 = \hbar v k_{\min} = \hbar v \cdot \frac{2\pi}{L}$$

$$\hbar k_B T = \hbar v \frac{2\pi}{L}$$

$$L = \frac{\hbar v \cdot 2\pi}{k_B T} = \frac{1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 1000 \text{ m/s} \cdot 2\pi}{1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/k} \cdot 4 \text{ K}} = 1.2 \cdot 10^{-8} \text{ m} = \underline{120 \text{ \AA}}$$

Svar: Provet skall vara ca  $L \times L \times L = (120 \text{ \AA})^3$   
 Antalet atomer  $\approx \left(\frac{L}{a}\right)^3 = (90)^3 = 64000$