Dugga i Fasta tillståndets fysik (FFY012/FYP330)

Tid: 13:00-15:00, 2022-02-14

Examinator: Eva Olsson (3247)

Lärare vid tentamen:

Frågorna 1 och 2, Eva Olsson (031 772 3247)

Fråga 3 och 4, Mattias Thuvander (073 143 3709)

Hjälpmedel: Beta, Physics Handbook, penna, sudd, passare, linjal, typgodkänd räknare eller annan räknare i fickformat utan inprogrammerad text/ekvationer relevant för duggan och ett egenproducerat handskrivet A4 (dubbelsidigt) med valfritt innehåll.

Bedömning: Max 50p. 40% av duggapoängen kan tillgodoräknas till påföljande tentor under år 2022. Rättningsgranskning samtidigt som granskning av ordinarie tenta.

Skriv tydligt och motivera dina svar.
Lycka till!

---

1. Antag att Du har en tetragonal struktur med kantlängderna a, b och c och där b=a och c=3a, där a=0.38 nm. Basen består av atomerna A placerade i (0,0,0) och B i (1/2,1/2,1/2). A och B är olika grundämnen och A har större diameter än B. *(Observera att uppgifterna kan lösas utan att de tidigare deluppgifterna har lösts.)*

   a. Rita en schematisk skiss av enhetscellen med basvektorer och markera (023)-planet samt lista de ekvivalenta planen. (5p)

   b. Rita ett av planen med högst packningstäthet, ange Miller index och markera vilka atomer (A och/eller B) som sitter i planet. Antag att atomerna i planet tangerar varandra längs den atomtätaste riktningen. Beräkna packningstätheten för planet uttryckt i atomer per nm^2. (5p)

2. Antag att Du tar upp ett diffraktogram från ett material som består av en kristallstruktur med ett gitter som har en kubisk enhetscell. Kantlängden är 4.08 Å och Du använder röntgenstrålning med våglängden 0.71 Å.
   (Observera att uppgifterna kan lösas utan att de tidigare deluppgifterna har lösts.)

   a. Beräkna Braggvinklarna om atomerna i enhetscellens bas består av en silveratom och tre guldatomer. Silveratomen är placerad i (0,0,0). Guldatomerna är placerade i (½, ½, 0), (½,0, ½) och (0, ½,½). Ange alla Braggvinklar, och tillhörande Miller index, upp till 25° där Du erhåller intensitet. (8p)

   b. Ta fram uttrycket för strukturfaktorn för den kubiska enhetscellen för ett material som består av 25% atomprocent silveratomer och 75% guldatomer och där atomerna är slumpvis placerade i positionerna (0,0,0), (½, ½, 0), (½,0, ½) och (0, ½,½) uttryckt i formfaktorerna för guld, f_{Ag}, och silver, f_{Au}. Ange villkoret på Millerindex hkl för att erhålla diffraktion. (7p)

3. I ett experiment med låg-energi-elektron-diffraktion (LEED) träffar elektronstrålen en (110) yta i nickel (Ni) under vinkelrätt infall. Ni är FCC med gitterparameter 3.52 Å. För vilka energier (i eV) fås exakt två diffrakterade strålar? Antag att bakåtspridda strålar kan ses för hela intervallet 0-90˚ (relativt ytans normal). (10 p)

4.

   a. Betrakta koppar-guld, CuAu, som en en-dimensionell kedja med varannan Cu och varannan Au atom där interaktionen mellan grannar kan beskrivas med en fjäder med fjäderkonstant 82 N/m, och med gitterparameter 2.0 Å. Bestäm den lägsta vinkelfrekvensen för optiska gittersvängningar. (5 p)

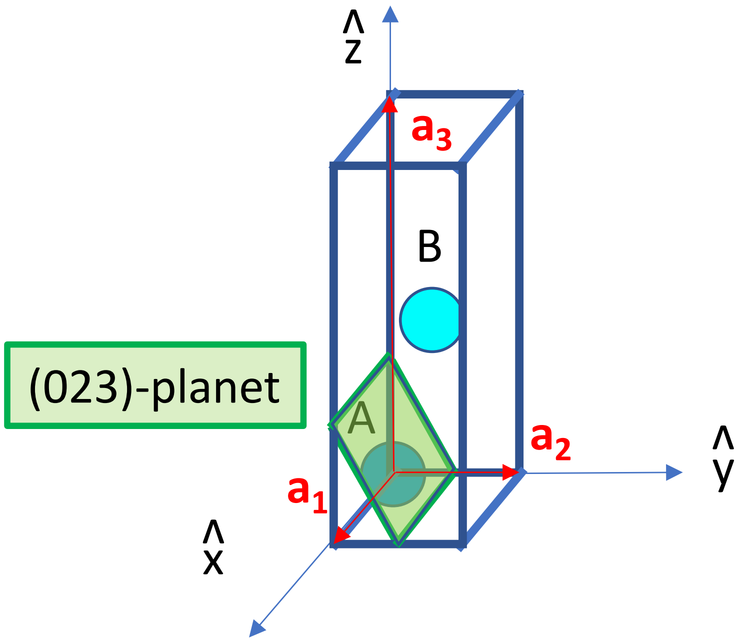
   b. Einstein-temperaturen för zink (Zn) är 205 K. Vilken/vilka energier (i eV) har fononer i Einstein-modellen för värmekapacitivitet? (3 p)

   c. Debye-temperaturen för Zn är 237 K. Vilken/vilka energier (i eV) har fononer i Debye-modellen för värmekapacitivitet? (3 p)

   d. Betrakta ett kvadratiskt gitter i två dimensioner med gitterparameter a. Ange ett uttryck för tillståndstätheten $g(w)$ (alltså i två dimensioner) för en kvadratisk kristall med längd L, för en gren. Antag en linjär dispersionsrelation $w=vk$, där w är vinkelfrekvensen, v är hastigheten och k är vågtalet. (4 p)

(Observera att uppgifterna kan lösas utan att de tidigare deluppgifterna har lösts.)

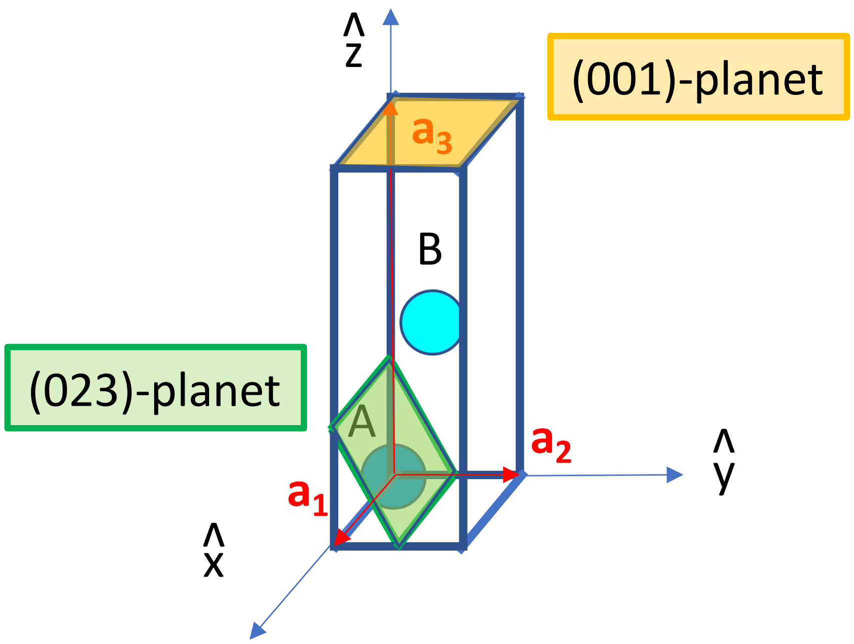
Uppgift 1a



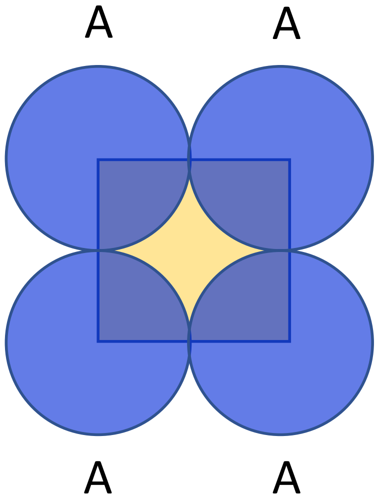
(023)-planet får vi genom att markera punkterna där planet skär y-axeln i ½ $\mathbf{a_2}$ och z-axeln i 1/3$\mathbf{a_3}$. Planet går parallellt med x-axeln eftersom inversen av 0 är oändligheten.

De ekvivalenta planskarorna är (023), (0-23), (02-3), (0-2-3), (203), (-203), (20-3) och (-20-3).

Uppgift 1b



(001)-planet är ett av de mest tätpackade planen.



I (001)-planet ryms 1 A-atom i kvadraten med kantlängden a= 0.38 nm. Planets packningstäthet är $1/(0.38)^2$ atomer per nm^2= 6.9 atomer per nm^2.
Svar: 6.9 nm^{-2}.

Uppgift 2a

Braggvinklarna ges av Braggs lag $2d_{hkl} \sin\Theta = n\lambda$ där n = 1.
$d_{hkl} = a/ (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$ där a = 4.08 Å .
λ = 0.71 Å enligt uppgiften.
Alla hkl är tillåtna. Detta ger Braggvinklarna

{hkl}	Θ
100	4.99°
110	7.07°
111	8.67°
200	10.0°
210	11.2°
211	12.3°
220	14.2°
221, 300	15.1°
310	16.0°
311	16.8°
222	17.5°
320	18.3°
321	19.7°
400	20.4°
322, 410	21.0°
330, 411	21.7°
331	22.3°
421	23.5°
332	24.1°
422	25.2°

Uppgift 2b

Strukturfaktorn S_{hkl} :
En kubisk struktur med 25 atomprocent Ag-atomer och 75 atomprocent guldatomer slumpvis fördelade på de givna positionerna ger

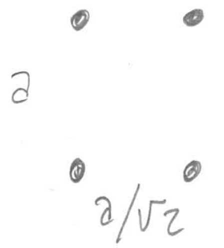
(0.25Ag + 0.75 Au) i (0, 0, 0), (½, ½, 0), (½, 0, ½) och (0, ½, ½),

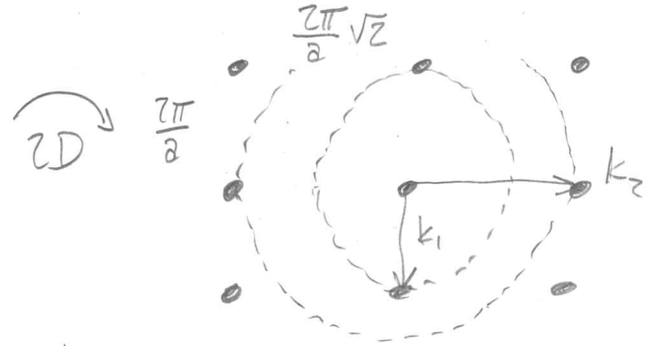
$f = 0.25 f_{Ag} + 0.75 f_{Au}$

$S_{hkl} = \sum_{j=1}^{4} f_j \, e^{-i\boldsymbol{\pi G}\,\boldsymbol{r}_j} = f + f e^{-i\pi(h+k)} + f e^{-i\pi(h+l)} + f e^{-i\pi(k+l)}$

som är 4 f om hkl alla är jämna tal eller alla udda tal, dvs diffraction erhålles
0 om hkl en blandning av udda och jämna tal

③ (110) reellt i fcc   Reciprokt





Vi vill att $|\vec{k}|$ är mellan $\frac{2\pi}{a}$ och $\sqrt{2}\cdot\frac{2\pi}{a}$.

$$k_1 = \frac{2\pi}{a} \rightarrow k_1 = \frac{2\pi}{\lambda_1} = \frac{2\pi}{a} \rightarrow \lambda_1 = a$$

$$k_2 = \sqrt{2}\cdot\frac{2\pi}{a} \rightarrow k_2 = \frac{2\pi}{\lambda_2} = \sqrt{2}\cdot\frac{2\pi}{a} \rightarrow \lambda_2 = \frac{a}{\sqrt{2}}$$

$$E_1(eV) = \frac{1{,}50}{(\lambda(nm))^2} = \frac{1{,}50}{a^2} = \frac{1{,}50}{0{,}352^2} = 12\ eV$$

$$E_2(eV) = \frac{1{,}50}{a^2}\cdot 2 = 24\ eV$$

Svar: För $12\ eV < E < 24\ eV$ fås exakt
två strålar.

4) a) Lägsta ω_{opt} fås på BZ-gränsen, och ges av $\omega_{opt} = \sqrt{\frac{2\gamma}{M_2}}$ med M_2 för den lätta.

$M_2 = M_{Cu} \approx 63{,}5\,u = 1{,}06 \cdot 10^{-25}$ kg

$\omega_{opt} = (2 \cdot 82 / 1{,}06 \cdot 10^{-25})^{1/2} = \underline{3{,}9 \cdot 10^{13}\ s^{-1}}$

b) $E_E = \Theta_E k_B = 8{,}62 \cdot 10^{-5} \cdot 205 = \underline{17{,}7\ meV}$

c) $E_D = \Theta_D k_B = 8{,}62 \cdot 10^{-5} \cdot 237 = 20{,}4\ meV$

Så fononenergierna är $\underline{0 - 20{,}4\ meV}$

d) $g(\omega) = g(k)\frac{d^2k}{d\omega} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \cdot 2\pi k \frac{dk}{d\omega} = \frac{L^2}{2\pi}\frac{k}{v} =$

$= \underline{\underline{\frac{L^2}{2\pi}\frac{\omega}{v^2}}}$