

Midtsemestereksamen FYS3410

28.03.2011

Varighet: 3 timer

Ingen forhåndsforberedte hjelpemidler er tillatt under eksaminasjonen.

Ingen bøker unntatt standard formelsamlinger.

Kalkulator er tillatt.

Denne eksamen skal måle studentenes oppnådde forståelse i tre fundamentale emner i faste stoffers fysikk som har vært gjennomgått i forelesninger/seminarer i faget FYS3410 og er i henhold til pensum gitt ved utvalgte kapitler i Kittel's bok.

Alle eksamensspørsmål er organisert innen følgende emner:

1. Periodisk gitter og røtgendiffraksjon
2. Vibrasjoner og fononer
3. Fri elektron Fermi gass

Hvert emne inneholder spørsmål av varierende kompleksitet, og en fullstendig besvarelse av hvert emne gir 1/3 av den totale poengsum.

FYS3410 Emne 1: Krystallgitter og røntgendiffraksjon

1.1 Vi ser på planene i den trikliniske krystallen i Fig.1. Finn de ulike planenes millerindekser.

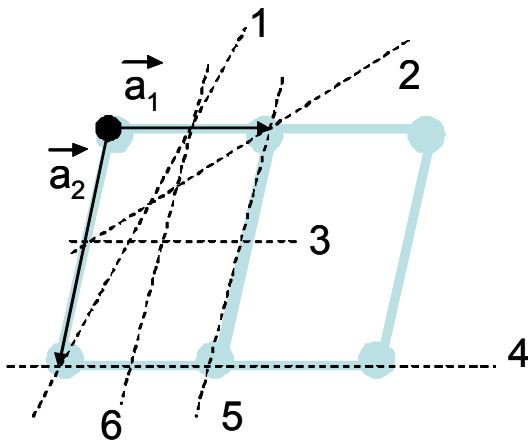


Fig.1. Tre dimensjonalt gitter (tykke grå linjer) med basisvektorer \vec{a}_1 , \vec{a}_2 , \vec{a}_3 . Plan er inntegnet (merket med nummer). Vektor \vec{a}_3 er rettet mot leseren. Origo er markert med en mørk flekk.

1.2 Lag en figur der du tegner inn de resiproke gitterpunktene som korresponderer med planene i Fig.1. Figuren skal tegnes i resiprokt rom.

For å gjøre figuren mer kvantitativ opplyses det om at en resiprok gittervektor er gitt ved

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{d_{hkl}} \vec{n}_{hkl}, \text{ der } \vec{n}_{hkl} \text{ står normalt på et } hkl\text{-plan og } d_{hkl} \text{ er avstanden mellom } hkl\text{-planene.}$$

1.3 Ta for deg den resiproke vektoren \vec{G} gitt ved (010) planene in figuren du laget i 1.2 og en planbølge i røntgenområdet gitt ved bølgevektoren \vec{k} . Vis at diffraksjon ikke er mulig for $k_G < 1/2|\vec{G}|$ her er k_G en projeksjon av \vec{k} i \vec{G} retningen. Hint: Benytt Laue likningen

$$\Delta\vec{k} = \vec{G} \text{ på formen } 2\vec{k} \cdot \vec{G} = \vec{G} \cdot \vec{G} \text{ og tegn Bragg-planet der det kutter vektoren } \vec{G}.$$

Generaliser argumentet til resten av de resiproke gitterpunktene nærmest origo og introduser Brillouin sone konseptet i samme figur.

1.4 Et diffraksjonseksperiment (der en benytter bølgelengden $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$) blir utført på en kubisk krystall (gitterparameter $a = 5 \text{ \AA}$) som vist i Fig.2 i resiprokt rom. Er noen Bragg betingelse ($\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$) oppfylt i Fig.2? Forklar ved hjelp av Ewald sfæren. I tillegg, forklar generelt hva som begrenser deteksjon av plan med høyere indekser i et diffraksjonseksperiment, og finn ut om diffraksjon fra (444) planene kan detekteres gitt det eksperimentelle oppsettet i Fig.2.

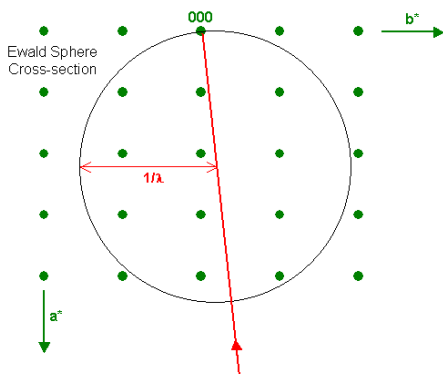


Fig.2. Skematisk framstilling av et diffraksjonseksperiment. Noter at $d_{hkl} = a/\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}$ i en kubisk krystall.

FYS3410 Topic 2: Vibrasjoner og fononer

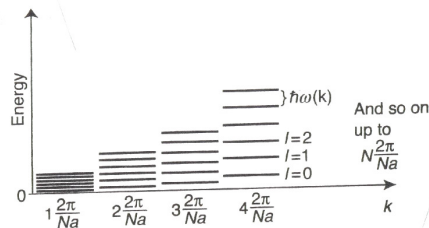
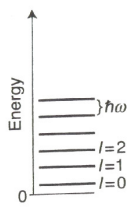
2.1 Anta et atom med masse m per primitive celle i et lineært gitter av N atomer med en gitterparameter a og en elastisitetskonstant c . Ved å kun ta hensyn til nærmeste

nabovekselvirkninger, finner vi dispersjonsrelasjonen $\omega^2 = \frac{4c}{m} \sin^2 \frac{ka}{2}$. Skisser og analyser

dispersjonsrelasjonen og gruppehastigheten (v_g) i første Brillouin sone (for eksempel undersøk grensen for lange bølgelengder, størrelsen på ω og v_g i sentrum og ved grensene av Brillouin sona, etc). Illustrer – kvalitativt – i skissen hvordan dispersjonsrelasjonen vil endre seg dersom vi antar en basis av to ulike atomer (med ulik masse) i hver primitive celle.

2.2 Vis hvordan kvantisering av vibrasjoner i en periodisk krystall oppstår ved å benytte Born – von Karman grensebetingelser og evaluer de framskritt/begrensninger som ligger i Dulong-Petit, Einstein, og Debye modellene for forklaring av temperaturavhengigheten til varmekapasiteten. Hint: En mulig strategi kan inkludere en illustrasjon i lys av Fig.3.

Energy level diagram for one harmonic oscillator



Energy level diagram for a chain of atoms with one atom per unit cell and a length of N unit cells

Fig.3. Framstilling av kvantiseringen av vibrasjoner (fononer) i periodiske strukturer som kanskje kan benyttes i besvarelsen til problem 2.2. NB: Dulong og Petit benyttet en klassisk tilnæringsmåte og fant at for mange faste stoffer var varmekapasiteten uavhengig av temperatur ($\sim 25 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$) når de målte over romtemperatur.

2.3 Gi en kvalitativ forklaring av T^3 loven til Debye ved å sammenligne andelen okkuperte moder ved en gitt temperatur T med alle modene innenfor Debyes “cut-off” bølgevektor K_D .

2.4 Den termiske konduktivitetskoeffisienten κ er gitt ved $\kappa = \frac{1}{3} C_V \Lambda$, hvor C_V er varmekapasiteten

og Λ midlere fri fononveilengde. Se på temperaturavhengighetene til C_V , Λ , og κ i lav/høy temperatur grensene og fyll Tabell I (anta en ren krystall slik at Λ er inverst proporsjonal til antall fononer gitt ved Planck fordelingen $\langle n \rangle = 1/[\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1]$). Lag en figur som viser temperaturavhengigheten til κ og gjør rede for begrepene “normal” og “umklapp” prosesser.

Tabell I

	C_V	Λ	κ
low T			
high T			

FYS3410 Topic 3: Fri electron Fermi gass

3.1 Fri electron Fermi gass modellen (FEFG) er beskrevet ved en rekke ikke vekselvirkende uavhengige electron orbitaler, hvor tettheten av orbitaler (elektrontilstander) kan utledes ved å

løse Schrödinger likningen $-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ for bølgefunksjonen. En

antar planbølger på formen $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ og anvender periodiske (Born – von Karman)

grensebetingelser i 3 dimensjoner (e.g. i x -retningen $\psi(x+L, y, z) = \psi(x, y, z)$ hvor L er en periode). Anta N fri elektroner i et system i a grunntilstanden. Utled uttrykk for:

Fermienergien (ε_F), størrelsen på bølgevektoren ved Fermiflata (k_F), og tilstandstettheten ($D(\varepsilon)$). Om nødvendig kan du benytte identiteten $\exp(ix) = \cos x + i \sin x$ for å finne tillatte verdier for k . NB: m er hvilemassen til elektronet.

3.2 Skisser tilstandstettheten, $D(\varepsilon)$, for FEFG in grunntilstanden som du fant i oppgave 3.1.

Ta hensyn til Fermi-Dirac distribusjonen av elektroner

$$f(\varepsilon, \mu, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right) + 1}$$
 og gjør en modifikasjon av figuren din som viser hvordan

elektrontilstandstettheten endrer seg ved økende temperatur. Hvordan forstår du μ som er det kjemiske potensialet? For eksempel, hva er det kjemiske potensialet ved $T = 0$?

3.3 Klassisk statistisk mekanikk predikerer at en gass av frie partikler skal ha en

varmekapasitet per partikkel på $\frac{3}{2}k_B$ hvor k_B er Boltzmanns konstant. Dersom N atomer hver gir ett valenselektron til elektrongassen, som i oppgave 3.1 and 3.2, skulle da det elektroniske bidraget til varmekapasiteten være $\frac{3}{2}k_B N$, som for atomer i en enatomig gass. Regn ut

$\frac{3}{2}k_B N$ for et mol som referanse til senere bruk. Eksperimenter forteller oss at det faktiske

elektroniske bidraget til varmekapasiteten er av størrelsesorden 0.01 av den klassiske $\frac{3}{2}k_B N$

verdien. Benytt figuren fra oppgave 3.2 og gjør et estimat for totale termiske kinetiske energien fra elektronene og deretter finn den korresponderende varmekapasiteten for FEFG. Viktig: Unngå den kompliserte integrasjonen over produktet $D(\varepsilon) \cdot f(\varepsilon, \mu, T)$, gjør heller et motivert estimat! Ved å benytte dette estimatet, regn så ut ved romtemperatur $T = 300K$, det elektroniske bidraget til varmekapasiteten i Natrium (elektron tetthet $1.4 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$). NB: det kan lønne seg å innføre størrelsen $T_F = \varepsilon_F / k_B$ kalt Fermi temperaturen.

$$\hbar = 6.58 \times 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s} \quad k_B = 8.61 \times 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{K}^{-1} \quad m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ Kg}$$

$$N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ mole}^{-1} \quad 1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$$