Háskóli Íslands Haust 2018

Raunvísindadeild

Eðlisfræði

Eðlisfræði þéttefnis I

Miðsvetrar próf

7. Nóvember 2018 kl. 10:50 - 12:20

1. **Miller vísar – Miller indices** (20)

   Finna skal Miller vísa fyrir eftirfarandi plön:

   (a) plan sem er samsíða bæði $\mathbf{a}_1$ og $\mathbf{a}_3$,

   (b) plan sem inniheldur punktana $3\mathbf{a}_1$, $2\mathbf{a}_2$, og $1/2(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)$,

   (c) plan sem inniheldur tenings teningsbrún og sker hinar tvær teningsbrúnir sama tenings í miðpunkti þeirra, fyrir einfalda teningsgrind.

(a) Plan sem er samsíða bæði $\underline{a}_1$ og $\underline{a}_3$ er $(0,1,0)$

(b) Plan sem inniheldur punktana $3\underline{a}_1$, $2\underline{a}_2$ og $\frac{1}{2}(\underline{a}_1 + \underline{a}_2 + \underline{a}_3)$. Finnum skurðpunkt við $\underline{a}_3$ ásinn. Skurðpunktur við $\underline{a}_1$ er 3 og við $\underline{a}_2$ er 2. Ritum

$$\alpha \underline{a}_1 + \beta \underline{a}_2 + \gamma a_3 = \delta$$

sem inniheldur punktana

Find the Miller indices for the following planes:

(a) a plane parallel to both $\mathbf{a}_1$ and $\mathbf{a}_3$,

(b) the plane containing the points $3\mathbf{a}_1$, $2\mathbf{a}_2$, and $1/2(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)$,

(c) a plane that contains a cube edge and cuts two other cube edges of the same cube at their midpoints, in a simple cubic lattice.

$\underline{a}_1 = \underline{a}_3 = 0$, $a_1 = 3 \Rightarrow 3\alpha = \delta \Rightarrow \delta = 3\alpha$

$\underline{a}_1 = \underline{a}_3 = 0$, $a_2 = 2 \Rightarrow 2\beta = \delta \Rightarrow \beta = \frac{3}{2}\alpha$

$\frac{1}{2}(\alpha + \beta + \gamma) = \delta \Rightarrow \gamma = 7/2\,\alpha$

þannig að

$$a_1 + \frac{3}{2}a_2 + \frac{7}{2}a_3 = 3$$

er jafna plansins. Nú sker $\underline{a}_3$ við $a_1 = a_2 = 0$ þ.a. $a_3 = 6/7$

þ.a. skurðpunktar eru

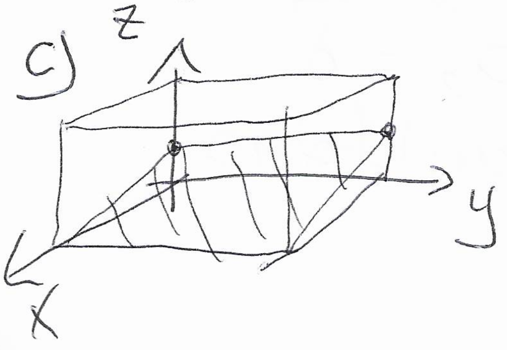
$3,\ 2,\ 6/7$

og umhverfa

$1/3,\ 1/2,\ 7/6$

og Miller vísir því $(2,3,7)$

c)



skurðpunktar $1, \infty, 1/2$

umhverfa $1\ 0\ 2$

Miller vísir $(1\,0\,2)$

2. **Ferhyrnd grind – Tetragonal lattice** (15)

Einsatóma efni kristallast í ferhyrnda formgerð. Einingagrindinni má lýsa með frumvigrum grindar $(a, 0, 0)$, $(0, a, 0)$, $(0, 0, c)$ þar sem $c = 3a/2$ og a grunnurinn samanstendur af tveimur frumeindum með hnitin $(0,\ 0,\ 0)$ og $(a/2, a/2, c/2)$. Grindarfastinn er $a = 4.2$ Å.

(a) Reikna skal mestu fyllingu fyrir þessa grind.

(b) Finna skal frumvigra nykurgrindar.

(c) Duftsýni þessa efnis er greint með Röntgengreiningu með Debye-Scherrer aðferðinni. Bylgjulengd Röntgengeislanna er 1.5 Å. Reikna skal horn fyrstu fjögurra bylgjubeygju hringanna.

(a) Radíar atómkúlna

$r \le \frac{a}{2}$ (eftir x-ás)

$$r < \sqrt{\left(\frac{a}{4}\right)^2 + \left(\frac{a}{4}\right)^2 + \frac{9a^2}{64}} = \frac{a}{8}\sqrt{17}$$

svo

$$r_{max} = \frac{a}{2}$$

og

$$f = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{a}{2}\right)^3}{\frac{3}{2}a^3} = \frac{16}{9}\pi\frac{1}{8} = \frac{2}{9}\pi = 69.8\%$$

(b)

$$\frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}, \quad \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}, \quad \frac{4\pi}{3a}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

A hypothetical monoatomic substance crystallizes in a centered tetragonal structure. The con- ventional unit cell can described by primitive vectors $(a, 0, 0)$, $(0, a, 0)$, $(0, 0, c)$ with $c = 3a/2$ and a basis consisting of two atoms at positions (0, 0, 0) and $(a/2, a/2, c/2)$. The lattice constant is $a = 4.2$ Å.

(a) Calculate the maximum space filling for this lattice.

(b) Find the primitive vectors of the reciprocal lattice.

(c) A powder specimen of the substance is analyzed by X-ray diffraction using the Debye-Scherrer method. The wavelength of the X-rays is 1.5 Å. Calculate the angles of the first four diffraction rings.

(c)

$$\underline{q} = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ 2n_3/3 \end{pmatrix}, \quad \underline{V}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{V}_2 = \cancel{\frac{4\pi}{4}}\begin{pmatrix} a/2 \\ a/2 \\ 3a/4 \end{pmatrix}$$

svo

$$F = 1 + e^{i2\pi\left(\frac{n_1}{2} + \frac{n_2}{2} + \frac{n_3}{2}\right)}$$

$$= 1 + e^{i\pi(n_1 + n_2 + n_3)}$$

svo eyðins ef

$n_1 + n_2 + n_3$ er oddatala

101
011

$$|q| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{1+\left(\frac{2}{3}\right)^2} = \frac{2\pi}{a}\frac{\sqrt{13}}{3} = 1.80\ \text{Å}^{-1}$$

002

$$|q| = \frac{2\pi}{a}\cdot\frac{4}{3} = 1.99\ \text{Å}^{-1}$$

110

$$|q| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2} = 2.11\ \text{Å}^{-1}$$

200
020

$$|q| = \frac{2\pi}{a}2\cancel{\sqrt{1+1+\frac{16}{9}} = \frac{2\pi}{a}\frac{\sqrt{24}}{3} = 2.90\ \text{Å}^{-1}}$$

112

$$|q| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{1+1+\frac{16}{9}} = \frac{2\pi}{a}\frac{\sqrt{24}}{3} = 2.9\ \text{Å}^{-1}$$

$q = 2k_0 \sin\frac{\theta}{2}$ εδώ $\sin\frac{\theta}{2} = \frac{q}{2k_0} = \frac{q\lambda}{2\,2\pi}$

24.81°

29.18°

27.48°

40.5°

3. **Varmarýmd vegna hljóðeinda – Phonon heat capacity** (20)

(a) Gera skal ráð fyrir rafsvara kristalli sem samanstendur af lögum frumeinda, þar sem tengsl milli laga er stíf þannig að færsla frumeindanna er takmörkuð á plani lagsisns. Sýna skal að varmarýmd vegna hljóðeinda í Debye nálguninni við lág hitastig er í réttu hlutfalli við T^2.

(b) Gerum nú ráð fyrir, eins og oft er í lagskiptri formgerð, að aðliggjandi lög eru mjög veikt tengd hvert öðru. Hvaða hegðan myndirðu vænta fyrir varmarýmd hljóðeinda þegar hitistigið stefnir í mjög lítil gildi ?

Nálgun Debye í 2D

$$\frac{(2\pi)^2 N}{A} = \pi q_D^2 \quad \text{svo} \quad \omega_D = c q_D = c\left(\frac{4\pi^2 N}{A\pi}\right)^{1/2} = c\left(\frac{4\pi N}{A}\right)^{1/2}$$

flatarmál q-rúms í 1^{st}-BZ

flatarmál hrings af radíu q_D

$$g(\omega) = \sum_s \int_0^{q_D} \frac{d\vec{q}^{\,2}}{(2\pi)^2}\, \delta(\omega - cq)$$

setjum $x = c q$, $dx = c_s dq$

$$= \sum_s \int_0^{q_D} \frac{q\,dq\,d\phi}{(2\pi)^2}\, \delta(\omega - x)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_s \int_0^{q_D} d\phi\, \frac{x}{c_s} \frac{dx}{c_s}\, \delta(\omega - x)$$

$$= \frac{2\pi}{(2\pi)^2 c^2} \int_0^{q_D} x\,dx\, \delta(\omega - x) = \begin{cases} \dfrac{\omega}{2\pi c^2} & \omega < \omega_D \\ 0 & \omega > \omega_D \end{cases}$$

(a) Consider a dielectric crystal made of of layers of atoms, with rigid coupling between layers so that the motion of the atoms is restricted to the plane of the layer. Show that the phonon heat capacity in the Debye approximation in the low temperature limit is proportional to T^2.

(b) Suppose instead, as in many layer structures, that the adjacent layers are very weakly bound to each other. What form would you expect the phonon heat capacity to approach at extremely low temperatures ?

$$U = \int_0^{\omega_D} d\omega\, g(\omega)\left(\frac{1}{2} + \langle n \rangle\right)\hbar\omega$$

$$= \int_0^{\omega_D} \frac{\omega}{2\pi c^2} \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} \qquad x = \beta\hbar\omega$$

$$= \frac{1}{\beta\pi c^2}\left(\frac{1}{\beta\hbar}\right)^2 \underbrace{\int_0^{\omega_D} dx \frac{x^2}{e^x-1}}_{\text{fasti ef } \omega_D \gg 1}$$

$$\sim T^3$$

s/o $\quad C_V = \frac{\partial U}{\partial T} \sim T^2$

b) Ef plönin eru veikt tengd eða 1D hreyfing, plönin titra eins og skifar einingar þá er aukið framlag til C_V.

$$U_{total} = U_{plan} + U_{milli\ plana}$$

$$C_V^{total} = C_V^{plan} + C_V^{milliplana}$$

og í (a) sáum við

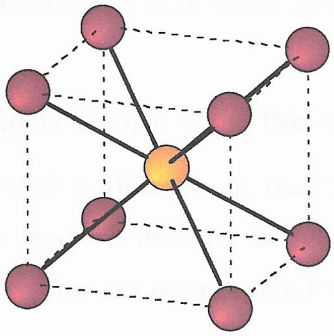
$$C_V^{plan} \sim T^2$$

við lágt T (2D), milliplana er $C_V^{milliplana} \sim T$ svo

$$C_V^{tot} = \alpha T^2 + \gamma T \quad \text{við lág T}$$

Ath að α og γ eru háð styrk víxlverkana, við lág T er γT ráðandi, en γ er lítið.

4. **Form stuðull – Structure factor** (15)



Reikna skal formstuðul CsCl. Gera skal ráð fyrir að $f_{\mathrm{Cs}} = 3f_{\mathrm{Cl}}$. Hvaða speglanir sjást ? Hverjar væntum við að séu sterkar og hverjar veikar vegna áhrifa formstuðulsins ?

Calculate the structure factor for CsCl. Assume that $f_{\mathrm{Cs}} = 3f_{\mathrm{Cl}}$. Which reflections can be observed ? Which of these reflections can be expected to be strong and which can be expected to be weak because of the influence of the structure factor ?

CsCl grindareining hefur tvö atóm

Cs^+ við $(0,0,0)$

Cl^- við $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$

þ.a.

$$S = f_{Cs} + f_{Cl}\, e^{-j\pi(\nu_1+\nu_2+\nu_3)}$$

$$= f_{Cl}\left[3 + e^{-j\pi(\nu_1+\nu_2+\nu_3)}\right]$$

og allar speglanir sjást. Þær eru veikar ef $\nu_1+\nu_2+\nu_3$ = odda og sterkar þegar $\nu_1+\nu_2+\nu_3$ = slétt.

4. Hljóðhraði og varmaleiðni – Sound velocity and thermal conductivity (30)

Kísill kristallast í demant grind með grindarfasta $a = 5.43$ Å. Debye hitastig Si er $\Theta = 645$ K.

(a) Reikna hljóðhraða í kísli þegar beitt er Debye nálguninni.

(b) Gera skal ráð fyrir það sé ein veila á hver 1000 Si atóm, og að meðalspölur hljóðeindar sé ákvarðaður af tvístrun frá þessum veilum (við lág hitastig), áætlið meðalspöl hljóðeinda. (Tillaga: gera má ráð fyrir að meðalspölur sé meðalfjarlægð milli veilna).

(c) Notið niðurstöður úr (a) og (b) til að reikna varmaleiðni kísils við lág hitastig (sem fall af hitastigi). (Tillaga: notið T^3 lögmál Debye).

(a) Undir Debye nálguninni

$$\Theta = \frac{\hbar v}{k_B}\left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{1/3}$$

svo að

$$v = \frac{k_B\Theta}{\hbar}\left(\frac{V}{6\pi^2 N}\right)^{1/3}$$

Fyrir demantsgrind

$$\frac{N}{V} = \frac{8 \text{ atóm}}{a^3} = \frac{8 \text{ atóm}}{(5.43\times10^{-10}\,\text{m})^3} = 5.0\times10^{28}\,\text{m}^{-3}$$

og

$$v = \frac{k_B\Theta}{\hbar}\left(\frac{V}{6\pi^2 N}\right)^{1/3} = \frac{1.38\times10^{-23}\,\frac{\text{J}}{\text{K}}\,645\,\text{K}}{1.05\times10^{-34}\,\text{Js}}\left(\frac{1}{6\pi^2\times5\times10^{28}\,\text{m}^{-3}}\right)^{1/3}$$

$$= 5.9\times10^{3}\,\text{m/s}$$

(b) Það eru 8 atóm í einingargrind, þ.a. 1000 atóm fylla 125 grindareiningar, þ.e. ein veila er á hverja 125 grindareiningar.

Si crystallizes in the diamond lattice structure with a conventional lattice constant $a = 5.43$ Å. The Debye temperature of Si is $\Theta = 645$ K.

(a) Calculate the sound velocity in Si under the Debye approximation.

(b) Assuming there is one defect per 1000 Si atoms, and the phonon mean free path is determined by scattering from these defective sites (at low temperatures), estimate the phone mean free path. (Hint: the mean free path can be considered as the average distance between the defective sites).

(c) Using the results of (a) and (b), calculate the low temperature thermal conductivity of Si (as a function of temperature). (Hint: use the Debye T^3 law).

Í þremur víddum, mynda 125 grindareiningar tening með hliðarlengd $(125)^{1/3} a = 5a$. Þess vegna er meðal vegalengd milli næstu veilna $5a$. Meðalspölur hljóðeinda við lág hitastig er

$$l \approx 5a \approx 27 \text{ Å}$$

(c) Varmaleiðni $\kappa = \frac{1}{3} C v l$, þar sem v og l hafa verið fundin í (a) og (b) og C er varmarýmd á rúmmálseiningu, sem finna með með T^3 lögmáli Debye.

$$C = \frac{C_v}{V} = \frac{1}{V}\left[234 N k_B \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3\right] = 234 k_B \frac{N}{V}\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3$$

$$= 234 \times 1.38 \times 10^{-23} \times 5 \times 10^{28} \frac{T}{645} = 0.60 T^3$$

svo

$$\kappa = \frac{1}{3} C v l = \frac{1}{3} 0.60 T^3 \cdot 5.9 \times 10^3 \times 27 \times 10^{-10} = 3.2 \times 10^{-6} T^3$$