

Problem 1. Hur stor är magnetkristallin anisotropi i järn uttryckt i eV per atom?

Lösning:

$$n_{Fe} = \frac{\rho_{Fe}}{M_{Fe}} \times N_A = \frac{7,87 \cdot 10^6}{55,8} \times 6,02 \cdot 10^{23} = 8,49 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}.$$

$$K_1 = 4,8 \cdot 10^4 \text{ J/m}^3 = 5,6 \cdot 10^{-25} \text{ J/atom} = 3,5 \cdot 10^{-6} \text{ eV/atom}.$$

Alternativ med två atomer per bcc cell: $K_1 = \frac{48 \cdot 10^4 \times a^3 / 2}{e} = 4,8 \cdot 10^4 \frac{(286,6 \cdot 10^{-12})^3}{2 \times 1,6 \cdot 10^{-19}} = 3,5 \cdot 10^{-6} \text{ eV/atom}.$

1

Problem 2. Standardmetoden för att mäta fonondispersionskurvor har varit inelastisk neutronspridning. Men genom utveckling av synkrotronstrålningskällor har det de senaste åren blivit möjligt att mäta fononer med inelastisk röntgenspridning. Fördelen är att det räcker med mycket mindre kristaller, till exempel sådana som rymmer i ett diamanstöd.

Här följer figurer med data på argon under hög tryck producerade av Ocelli *et al.* på strålrör ID16 på ESRF i Grenoble [Phys. Rev. B **63**, 224306 (2001)].

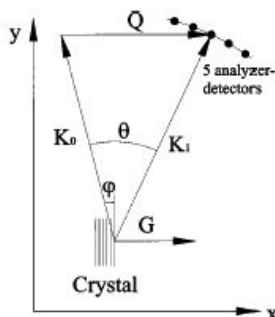


FIG. 1. Schematic view of the experimental setup.

För att få monokromatiserad strålning med energi 17794 eV, användes Si(999) reflektionen. Hur stor är vinkeln 2θ ?

Lösning: $2\theta = 2 \arcsin \frac{\lambda}{2d} = 2 \arcsin \frac{12398,5/17794}{2 \times 5,431/(9\sqrt{3})} = 2 \arcsin \frac{0,69678}{0,69680} = 2 \times 89,60^\circ = 179,20^\circ.$

1

Man skannar i energi genom att variera temperaturen på monokromator eller analysator-kristallen. Hur stor ska temperaturskillnaden mellan monokromator och analysator vara för att mäta energiändringar på 10 meV?

Lösning:

Termiska utvidgningskoefficienten för kisel ges som $\alpha = 2,56 \cdot 10^6 \text{ K}^{-1}$. Eftersom det är nästan vinkelrätt infall har vi att $\alpha \times \Delta T = \frac{\Delta E}{E}$ så att $\Delta T = \frac{0,010/17794}{2,56 \cdot 10^{-6}} = 0,22 \text{ K}.$

1

Hur stor rörelsemängd har en foton med $h\nu = 17794 \text{ eV}$? Hur stor är dess k -vektor?

Lösning: $p = \frac{h\nu}{c} = 17794 \frac{e}{c} = 9,51 \cdot 10^{-24} \text{ kg.m/s};$
 $k = \frac{E}{c} = \frac{p}{\hbar} = 9,02 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1} = 9,02 \text{ \AA}^{-1}.$

1

fortsättning nästa sida...

Problem 3. Figur 1 visar experimentets geometri. Man väljar vinklar så att \vec{Q} ligger ungefär parallellt med [100] rikningen, dvs $\theta \approx 2\phi$.

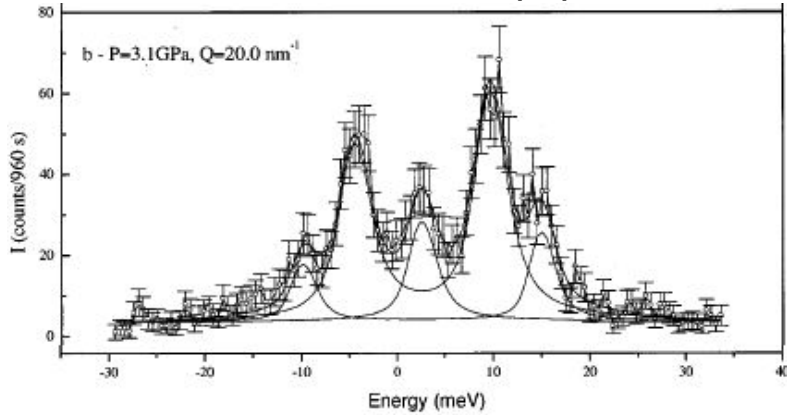


FIG. 2. Raw spectra obtained on ID 16 at the ESRF : the upper spectrum corresponds to a fixed momentum transfer belonging to the first Brillouin zone; one can distinguish on it the Stokes and anti-Stokes peaks coming from longitudinal phonons. The middle spectrum corresponds to a fixed momentum transfer in the second Brillouin zone; four peaks can be seen and correspond to longitudinal and transverse phonons.

Figur 2 visar data. Den elastiska peaken ligger på $\Delta E = 0$. Röntgenfotonerna kan ge energi till fononerna (Stokes-linjerna vid $\Delta E > 0$), eller ta upp energi från de många fononerna som finns vid rumstemperatur (anti-Stokes linjerna vid $\Delta E < 0$). (Jag klippte bort Fig. 2a och 2c; kvar är *the middle spectrum*.)

Hur stor är vinkeln mellan den inkommande och den analyserade röntgenstrålen?

Lösning:

Likbenig triangel: $\theta = 2\phi = 2 \arcsin \frac{Q/2}{K} = 2 \arcsin \frac{10,0}{90,2} = 12,7^\circ$.

1

Problem 4. Figur 3 visar en sammanställning av mätresultaten. Vilken reducerad vågvektor motsvarar spektrum i Fig. 2?

Lösning: $Q - \frac{2\pi}{a} = 20,0 - 2 \times = -6,0 \text{ nm}^{-1}$ och på grund av symmetri även $+6,0 \text{ nm}^{-1}$ (det stämmer också med energierna).

1

Hur stor är ljudhastigheten i argon vid 3,1 GPa?

Lösning:

Den longitudinella grenen fittas med en sinusfunktion $E_{\text{fonon}} = E_{ZB} \sin \frac{ka}{2}$. Lutningen $\frac{dE}{dk}$ vid $k \approx 0$ är alltså $aE_{ZB}/2$. Med $k_{ZB} = \pi/a = 13,0 \text{ nm}^{-1}$ och $E_{ZB} = 17,3 \text{ meV}$ får vi $\frac{dE}{dk} = \frac{\pi E_{ZB}}{2k_{ZB}} = \frac{27,2}{13,0} = 2,09 \text{ meV nm}$. För att få ljudhastigheten delar vi med \hbar i eV s och det blir $2,09 \cdot 10^{-12} / 6,58 \cdot 10^{-16} = 3,18 \text{ km/s}$. (Artikeln säger $3250 \pm 50 \text{ m/s}$.)

1

Hur stor är Debye-temperaturen ungefär?

Lösning: $k_B \theta_D \approx 15 \text{ meV}$; $\theta_D \approx 200 \text{ K}$.

1

Hur stor är specifika värmen under de här experimentella förhållanden?

Lösning: $T \gg \theta_D \Rightarrow C_V = 3R \approx 25 \text{ J/mol}$.

1

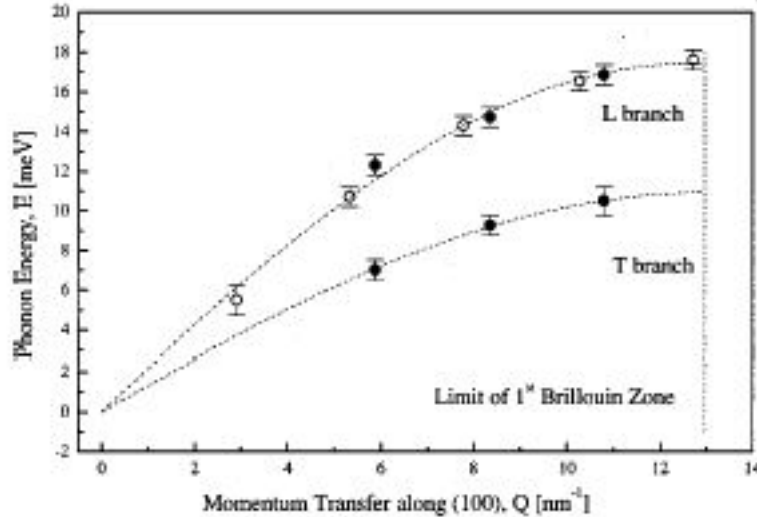
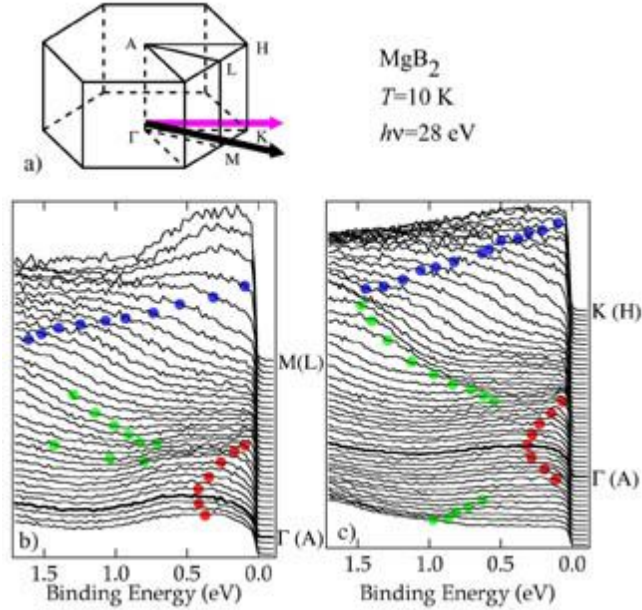
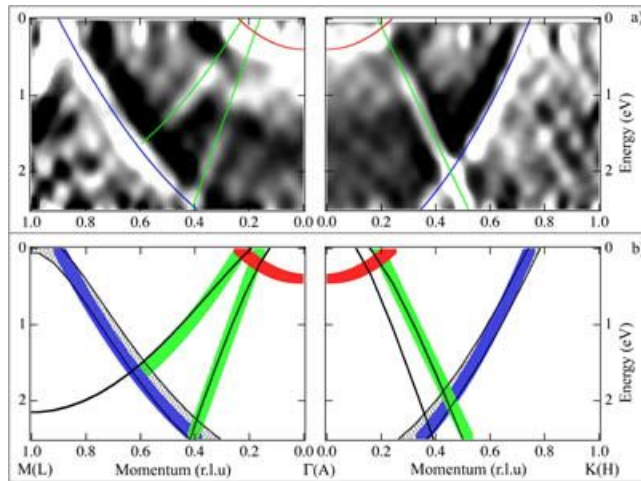


FIG. 3. Phonon dispersion curve of Ar along the (100) direction at 3.1 GPa. The symbols are \circ : IXS longitudinal data obtained in the first Brillouin zone, \bullet : IXS longitudinal and transverse data obtained in the second Brillouin zone and reduced in the first Brillouin zone, - - -: sinus fit to IXS data.

Problem 5. Teoretiska bandstrukturberäkningar och elektrondispersionskurvor kan testas experimentellt genom jämförelse med vinkelupplöst fotoemission. Man låter monokratiskt UV-ljus falla på en enkristall. Genom fotoelektrisk effekt får elektronen tillräckligt hög kinetisk energi för att lämna materialet. Det handlar om en vertikal övergång som lämnar kristallimpulsen oförändrad, eftersom fotonen har försumbar rörelsemängd.



a) Brillouin zone of MgB_2 , with the speculated trajectories of our measurements through the zone shown in purple and black. For the details, see the text. b) Selected energy distribution curves (EDCs) taken along the $\Gamma(\text{A})$ - $\text{M}(\text{L})$ direction (purple line). The $\text{B } 2p_z$ band is marked in blue and the $\text{B } 2p_{x,y}$ is marked in green. Red dots denote a probable surface state. c) Selected EDCs along the $\Gamma(\text{A})$ - $\text{K}(\text{H})$ direction.



a) Second-derivative plots of the EDCs taken along the cuts shown in Figure 1. Data was smoothed in both energy and momentum before taking the second derivative. Colored lines are experimentally measured band dispersions as determined by eye, with the color coding consistent with Figures 1b and 1c. b) Comparison of experiment and theory. Experimentally determined dispersions are shown in color, and theoretically predicted dispersions shown in black. The width of the theoretical lines represents the projection of k_z values from 0 to 0.14π .

Problem 6. Vid övergången från kristallen till vakuum minskar kinetisk energi med utträdesarbetet (≈ 5 eV). Elektronens k -vektor ändras också, men endast komponenten vinkelrätt på ytan k_{\perp} . Komponenterna parallellt med ytan k_{\parallel} förblir oförändrad. I två-dimensionella kristaller är tolkningen relativt enkel.

Nyligen har metoden kunnat tillämpas på små enkristaller av MgB_2 , ett material var supraledande $T_c = 40$ K upptäcktes för drygt ett år sedan. Kristallstrukturen är hexagonal: $a = 3,083$ Å, $c = 3,52$ Å. Man använde en fotonenergi på $h\nu = 28$ eV. (Uchiyama *et al.* preprint arXiv:cond-mat/0111152 9 Nov 2001)

Elektroner från linjen Γ -A mäter man med detektorn vinkelrätt övenför ytan. Hur stor är energin av de snabbaste elektronerna som detekteras? Hur stor är deras k_z ?

Lösning: $E_{kin} = hf - W = 28 - 5 = 23$ eV; $k = k_z = \frac{2mE}{\hbar} = 2,46$ Å $^{-1}$.

1

Hur stor är k_x för elektroner från M?

Lösning: $k_x = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} = 1,18$ Å $^{-1}$.

1

Vilken vinkel med normalen ska detektorn ha för att få in elektroner från M-L?

Lösning:

Elektronerna har fortfarande $k_{\parallel} = 1,18$ Å $^{-1}$ och för de snabbaste har den totala vägvektorn blivit $k = 2,46$ Å $^{-1}$. Vinkeln med normalen är alltså $\arcsin \frac{1,18}{2,46} = 28^\circ$.

1

Uppskatta effektiv massa för den blåa dispersionskurvan.

Lösning:

Om man extrapolerar de blåa kurvorna till Γ , hamnar man på ungefär 3,0 eV bindningsenergi. Kurvorna korsar Fermi-nivå kring $0,75 k_K = \pi/a = 1,02$ Å $^{-1}$ och kring $0,9 k_M = 1,06$ Å $^{-1}$. Denna bands Fermi-yta är alltså nästan sfärisk och man kan ta $k_F \approx 1,04$ Å $^{-1}$. Med en fri-elektronliknande dispersion får man

1

$$m^* = \frac{\hbar^2 k^2}{2E} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-34} \times 1,04 \cdot 10^{10})^2}{2 \times 3,0 \times 1,60 \cdot 10^{-19}} = 1,24 \cdot 10^{-30} \text{ kg} = 1,4 m_e$$

Problem 7. Beräkna koncentrationen av elektroner och hål i en p -halvledare om konduktiviteten $\sigma = 10$ (Ωm) $^{-1}$, mobiliteterna är $\mu_h = 0,2$ m 2 /Vs och $\mu_e = 0,4$ m 2 /Vs och de intrinsiska laddningsbärarnas koncentration $n_i = 2,2 \times 10^{19}$ m $^{-3}$. (2p)

Lösning:

Första approximation: anta att $p \gg n$ så att $\sigma = pe\mu_p$. Då är $p = \sigma/(e\mu_p) = 3,1 \cdot 10^{20}$ m $^{-3}$ och $n = n_i^2/p = 1,56 \cdot 10^{18}$ m $^{-3}$; antagandet stämmer.

2

Mera allmänt: $\sigma = pe\mu_p + ne\mu_n = pe\mu_p + \frac{n_i^2}{p} e\mu_n$

$$\sigma p = p^2 e\mu_p + n_i^2 e\mu_n$$

$$1,6 \cdot 10^{-19} \times 0,2 p^2 - 10 p + 2,2^2 \cdot 10^{19} \times 1,6 \times 0,4 = 0$$

$$0,32 \cdot 10^{-19} p^2 - 10 p + 3,01 \cdot 10^{19} = 0$$

$$p = \frac{10 + \sqrt{10^2 - 3,96}}{2 \times 0,32 \cdot 10^{-19}} = 3,1 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3} \text{ (+-lösningen ty } p\text{-halvdare)}$$

$$n = n_i^2/p = 1,56 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3}$$

Mycket mer jobb, samma resultat med given noggrannhet.