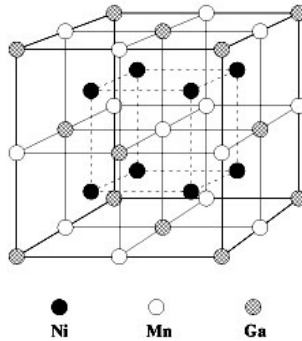


**Problem 1.** Vi har sett minnesmetaller: det förstörda gemet som fick tillbaka sin form i varmt vatten. För några år sedan har man upptäckt magnetiska minnesmetaller, som kan ge töjningar av upp till 5 % som funktion av magnetfält. Dessa material forskas det fortfarande mycket om, och de blir ämnet för den här tentan.

Den viktigaste magnetiska minneslegering är  $\text{Ni}_2\text{MnGa}$ . Det är en Heusler-legering. (Heusler upptäckte år 1903 att en förening av de icke-magnetiska grundämnena koppar, mangan och aluminium var ferromagnetisk.) Över en fasövergångstemperatur har  $\text{Ni}_2\text{MnGa}$  en kubisk kristallstruktur med gitterparameter 5,796 Å. Figuren visar en enhetscell.



Hur stor är ämnets specifika massa?

*Lösning:*

Fyra formelenheten per cell ger  $\frac{4 \times (2 \times 58,69 + 54,94 + 69,72) \times \text{amu}}{a^3} = 8248 \text{ kg/m}^3$  eller  $8,25 \text{ g/cm}^3$ , ett rimligt svar.

1

Vad är ämnets Bravais gitter?

*Lösning:* Det är en *fcc*-struktur.

1

I den här strukturen har mangan ett magnetiskt moment på nästan  $4 \mu_B$ , och moment på nickel är försumbar i jämförelse. Om alla manganatomer har parallella moment, hur stor är då ämnets mättnadsmagnetisering extrapolerad till  $T = 0$ ? (Svar i Tesla)

*Lösning:*

Magnetiskt moment per volymenhet är i en enhetscell  $\frac{\mu}{V} = \frac{4\mu_B}{a^3} = 3,39 \frac{\text{kJ}}{\text{Tm}^3} = 3,39 \cdot 10^5 \text{ A/m}$ ;  $B = \mu_0 \frac{\mu}{V} = 4\pi \cdot 10^{-7} \times 3,4 \cdot 10^5 = 0,43 \text{ T}$ .

1

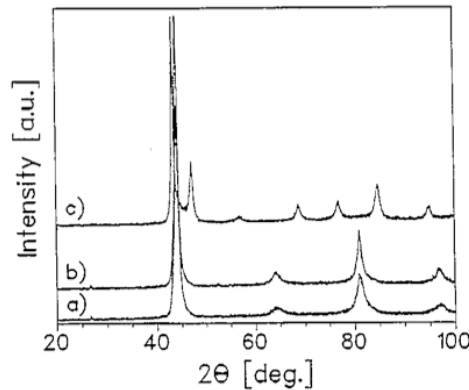


Fig. 1. Diffraction of the samples  $\text{Ni}_{2(1+\delta)}\text{Mn}_{1-2\delta}\text{Ga}$  with (a)  $\delta = 0$  (Ni50), (b)  $\delta = 0.046$  (Ni52) and (c)  $\delta = 0.1$  (Ni55). The presence of a tetragonal phase for the sample Ni55 at room temperature is indicated.

**Problem 2.**

Figuren visar i kurva (a) ett röntgendiffraktionsmönster av  $\text{Ni}_2\text{MnGa}$ . Den största peaken har beteckningen 220.

a) Vad är röntgenstrålningens våglängd?

*Lösning:*

Braggs lag:  $\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta = 2 \frac{5.796}{\sqrt{2^2+2^2}} \sin \frac{45^\circ}{2} = 1,54 \text{ \AA} \text{ (Cu } K_\alpha\text{)}.$

1

I neutroddiffraction av det här ämnet ser man många fler starka peakar. Varför är de svaga i röntgendiffraktion?

*Lösning:*

Mangan, nickel och gallium har ungefär lika många elektroner (25, 28, 31) och för röntgenstrålning skiljer sig deras atomära spridningsfaktorer inte särskilt mycket. Ämnet liknar då i första approximation en bcc-struktur med halva gitteravståndet. Men för neutronstrålning finns det inte en sådan systematik i spridningsfaktorerna, och de skiljer sig mycket.

1

Betrakta ett bcc-gitter med gitterparameter halv så stor som denne legering. Vilka är beteckningarna på de första fyra diffraktionspeakarna?

*Lösning:* I bcc  $h + k + l = 2n$ , alltså 110, 002, 112 och 220.

1

Vid vilka värden av  $2\theta$  ligger dessa peakar (samma röntgenvåglängd som i figuren)?

*Lösning:*

Peaken 110 av ett ämne med halva gitteravståndet sammanfaller med peak 220:  $45^\circ$ . De andra ligger vid  $2\theta = 64^\circ, 81^\circ$  och  $97^\circ$ , som också är starka i figuren..

1

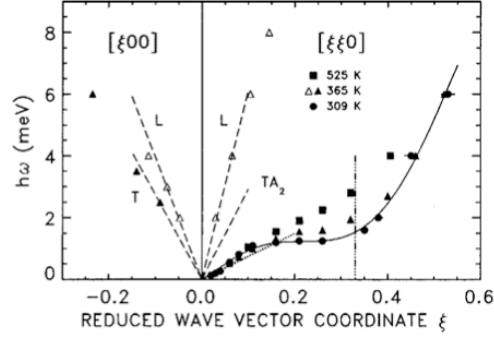


FIG. 1. Low-energy part of the  $(\xi\xi0)$  and  $(\xi00)$  phonon branches. The open symbols represent the longitudinal phonons, the solid ones transverse phonons. The dashed lines are extrapolations of sound velocity results from Refs. 16 and 17, the dotted line that from Ref. 18 for the  $TA_2$  mode.

**Problem 3.**

Figuren visar resultat från försök på  $Ni_2MnGa$  med inelastisk neutronspridning. Vid zongränserna gäller att  $\xi = 1$ .

a) Vad är ljudhastigheten i  $[110]$ -riktningar?

*Lösning:*

Ta den longitudinella grenen i  $[110]$  riktningen. Den går genom  $8 \text{ meV} = \frac{8 \cdot 10^{-3} e}{\hbar} = 1,215 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$  vid  $|\vec{k}| = 0,15 \text{ k}_X = 0,15 \times \frac{3\pi}{2a} \sqrt{2} = 0,173 \text{ \AA}^{-1}$ . Ljudhastigheten är  $v = \frac{\omega}{k} = 7,0 \text{ km/s}$ . Jag har inte kunnat kolla artikelns referenser, men värdet är inte orimligt.

1

Man ser att ett av fonon-grenarnas dispersion är starkt beroende på temperatur. Försök beskriva vad kan komma att hända när fonon-energin försvinnar för en  $k$ -vektor olika noll.

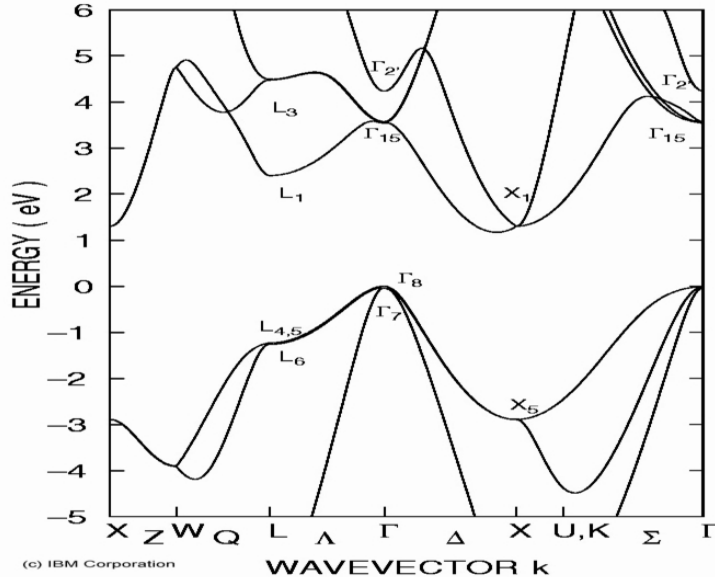
*Lösning:*

Man ser att det inte fononer med  $k \approx k_K/3$  blir väldigt mjuka vid sänkande temperatur. Till slut finns det ingen återdrivande kraft för sådana deformationer. Då sker en fasövergång till en annan struktur, t ex en struktur med tre gånger så lång enhetscell.

(I det här fallet sker övergången från den kubiska austenitiska fasen till en martensitisk fas med mycket *twinning*, tvilingskristaller med  $c$ -axeln i olika riktningar. Ett magnetfält gynnar vissa riktningar, och det gör att ämnet ändrar form i externa magnetfält.)

1

**Problem 4.** Local-Density-Approximationen (LDA) är den mest framgångsrika metoden för att räkna ut bandstrukturer av olika material. Figuren visar resultat för kisel.



Hur stor är bandgapet enligt figuren? (1p)

*Lösning:*  $E_g \approx 1,2 \text{ eV}$ .

1

Är bandgapet direkt eller indirekt? (Ange övergången i figuren.)

*Lösning:* Indirekt.

1

Hur stor är vågvektorn vid  $L$ ? Vid  $X$ ? (1p)

*Lösning:* Kisel är fcc med gitterparameter  $a = 5,431 \text{ \AA}$ ;  $k_L = \sqrt{3}\pi/a = 1,00 \text{ \AA}^{-1}$ ;  $k_X = 2\pi/a = 1,16 \text{ \AA}^{-1}$ .

1

Hur stor är de lätta positiva laddningsbärarnas effektiva massa enligt figuren? (1p)

*Lösning:*

De lätta hålen finns i bandet med störst dispersion.  $E(k = \frac{k_L}{4}) \approx -1,4 \text{ eV}$ ;  $m^* = \frac{\hbar^2 k^2}{2E} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-34} \times 0,25 \cdot 10^{10})^2}{2 \times 1,4 \times 1,6 \cdot 10^{-19}} = 1,55 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 0,17 m_e$ ; litteratuvärde är 0,15.

1

Hur stor är grupphastigheten för en elektron i lägste ledningsbandet med en vågvektor halvvägs  $\Gamma$  och  $L$ ? (1p)

*Lösning:*

$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{(3,9 - 2,0) \times 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,05 \cdot 10^{-34} \times 1,00 \cdot 10^{10}} \approx 290 \text{ km/s}$ .

1