

UNIVERSITETET I TRONDHEIM
NORGES TEKNISKE HØGSKOLE
INSTITUTT FOR FYSIKK

Faglig kontakt under eksamen:
Navn: Johannes Bremer
Tlf. 3582/3586

EKSAMEN I FAG 74530 STRUKTUR OG EGENSKAPER FOR KRYSTALLER

Torsdag 6. juni, 1991

Tid: kl. 0900 - 1300

Tillatte hjelpemidler: Godkjent lommekalkulator tillatt.
Ingen trykte eller håndskrevne hjelpemidler tillatt.

Oppgave 1.

Romtemperaturer-modifikasjonen til SiO_2 er kjent som α -kvarts. Mineralen krystalliserer i en struktur som uttrykt med full internasjonal notasjon har romgruppen $P3_121$.

- Forklar kort virkemåten for rotasjonsaksene n og n_t .
- Kan en-krystaller av α -kvarts være ferroelektriske? Diskutér.
- Hvorfor vil dette mineralet være i stand til å dreie polarisasjonsplanet for en elektromagnetisk, plan bølge? Skriv ned romgruppesymbolet for den kvarts-strukturen som har motsatt chiralitet av α -kvarts, og som følgelig dreier polarisasjonsplanet i motsatt retning.
- Gyrasjonstensen for optisk aktive materialer har elementene g_{ij} . Forklar kort hvordan kjennskap til disse koeffisientene kan brukes til å regne ut hvor mange grader pr. lengdeenhet polarisasjonsplanet dreies. Vis at inversjonssymmetri i enhetscellen forbyr all optisk aktivitet.

- e) En kvartskrystall har form av en prismeformet plate. Hvordan skal c-aksen orienteres for at polarisasjonsplanet til en innfallende plan bølge ikke skal dreies? Gyrasjonskoeffisienter for α -kvarts: $g_{11} = g_{22} = \mp 5.82 \cdot 10^{-5}$,
 $g_{33} = \pm 12.96 \cdot 10^{-5}$.

Oppgave 2.

Figur 1 viser en skisse av enhetscellen for halvledermaterialet $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ som har romgruppen P4/mmm. I tabell 1 er atomtyper, Wyckoff-symboler samt fraksjonskoordinater i z-retningen gjengitt.

- a) Regn ut $\text{Cu}_c\text{-O}_z$ og $\text{Cu}_p\text{-O}_z$ avstandene. Bruk krystallografiske argumenter og forklar hvorfor strukturen er kjennetegnet av kopperoksydplan som alle ligger parallelle med ab-planet. Den interne $\text{Cu}_p\text{-O}_p$ avstanden i planene er 1.95 Å.
- b) Ved oksydasjon av $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ kan vi få dannet supralederen $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ som krystalliserer i romgruppen Pmmm. Forklar kort undergruppebegrepet i krystallografi. Hva menes med at Pmmm er en maksimal ikke-isomorf t-undergruppe av P4/mmm?
- c) I det følgende skal det antas at kopperoksydplanene ikke endres ved oksydasjonen. Bidraget fra planene til konduktivitetstensoren er således lik σ_p i både $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ og $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Påvis ved hjelp av figur 2 og krystallografiske data gjengitt i tabell 2 at $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ i tillegg til de opprinnelige kopperoksyd-planene er utstyrt med karakteristiske kopperoksyd-kjeder som alle går i b-retningen.
- d) Begge de to ovennevnte kuprat-forbindelsene er sterkt anisotrope. I det følgende skal det antas at ledningsevnen ved romtemperatur er dominert av konduktivitetene σ_k og σ_p langs henholdsvis kjederetningen og planene. Konduktiviteten σ_c i c-retningen er mye mindre enn både σ_k og σ_p . Skriv opp den diagonaliserte, biaksiale konduktivitets-tensoren for $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$.
- e) En serie eksperimenter på $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ utført ved romtemperatur gir

$$\sigma = \begin{bmatrix} 2.45 & -0.85 & 0.0 \\ -0.85 & 2.45 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.06 \end{bmatrix} \cdot 10^3 (\Omega\text{cm})^{-1}$$

for konduktivitets-tensoren. Finn σ_k og σ_p .

Oppgave 3.

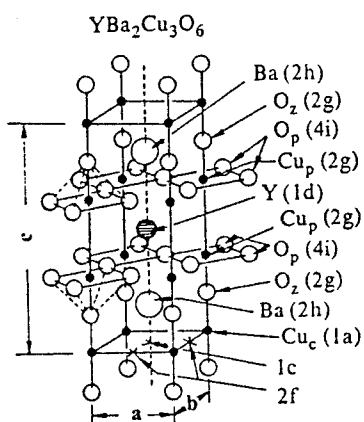
Svar på to av de tre nedenstående spørsmålene.

- a) Den lineære piezo-elektriske effekten kan skrives som

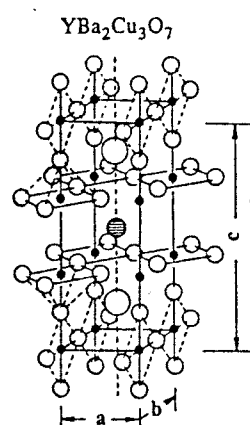
$$\varepsilon_{jk} = d_{ijk} E_i$$

Generaliser dette uttrykket slik at tøyningstensoren istedetfor å avhenge av feltkomponentene E_i også avhenger av feltkomponent-produktene $E_i E_j$.

- b) Vis diagrammatisk symmetrielementer samt generelle, ekvivalente posisjoner for romgruppen $C_{mm}2$. Hvorfor må denne romgruppen være symmorf?
- c) Lag et (enkelt) mønster med flategruppe-symmetri pgg. Det fulle symbolet for denne flategruppen er pgg2. Hva menes med at pg-operasjonene er gruppegeneratorer?



Figur 1



Figur 2

Tabell 1

YBa ₂ Cu ₃ O ₆ P4/mmm(D _{4h} ¹⁷)		
At.	Pos.	z
Cu _c	1a	0
Y	1d	½
Cu _p	2g	0.361
O _p	4i	0.379
Ba	2h	0.192
O _z	2g	0.154
--	2f	0
--	1c	0

a=b=3.866Å
c=11.882Å

Tabell 2

YBa ₂ Cu ₃ O ₇ Pmmm(D _{2h} ¹)		
At.	Pos.	z
Cu _c	1a	0
Y	1h	½
Cu _p	2q	0.355
O _p	2r	0.378
O _p	2s	0.378
Ba	2t	0.184
O _z	2q	0.159
O _c	1e	0

a=3.818Å
b=3.884Å
c=11.683Å