

## **Midtsemestereksamen FYS3410**

10.03.2010

Varighet: 3 timer

Ingen forhåndsforberedte hjelpemidler er tillatt på eksamen. Ingen bøker er tillatt med unntak av standard formelsamlinger. Kalkulator er tillatt.

Denne eksamen måler nivået på studentenes forståelse av tre fundamentale introduksjonsemner i faststoffysikk, emnene er undervist i forelesninger/seminarer i FYS3410 og er i overensstemmelse med pensum gitt av utvalgte kapitler i Kittels bok. Alle eksaminasjonsspørsmål er organisert innenfor følgende tre emner

1. Periodisk gitter og røntgenstråling
2. Gittervibrasjoner og fononer
3. Fri elektron Fermi gass

Hvert emne inneholder spørsmål av ulik kompleksitet, fullt svar av hvert emne gir 1/3 av total poengsum.

## FYS3410 Topic 1: Krystallgitter og røntgendiffraksjon

1.1 Bestem Millerindeksene til planene i Fig.1.

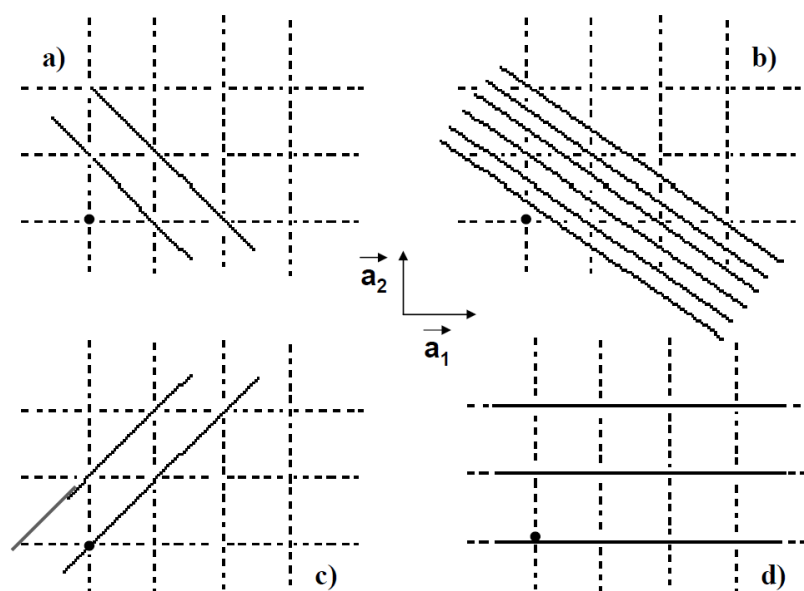


Fig.1. Tredimensjonalt gitter (prikkede linjer) med basisvektorer  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$ ,  $\vec{a}_3$ , ulike familier av plan er tegnet inn. Vektor  $\vec{a}_3$  står normalt på papirplaner, og er rettet mot leseren. Lengden på alle basisvektorer er  $a$ . Origo er markert med en svart prikk på alle figurer.

1.2 Lag en tegning der du representerer resiproke gitterpunkter som korresponderer til familiene av plan i Fig.1. For å gjøre tegningen kvantitativt mer korrekt kan følgende relasjon

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

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

1.3 Vi ser nå mer spesifikt på gittervektoren  $\vec{G}$  som korresponderer med familien av plan i Fig.1d. Vis at røntgenbølger med  $\vec{k}$ -vektorer mindre enn  $1/2\vec{G}$  ikke gir diffraksjon fra disse planene. Bearbeidelse av Laue likningen  $\Delta\vec{k} = \vec{G}$  til formen  $2\vec{k} \cdot \vec{G} = \vec{G} \cdot \vec{G}$  samt benyttelse av Bragg-plan kan være nyttig. Er det andre plan tilgjengelig der  $\vec{k}$ -vektorer mindre enn  $1/2\vec{G}$  kan diffraktere? Generaliser til konseptet med Brillouin soner.

1.4 En refleksjon fra (111) planene til en kubisk krystall ble observert ved en vinkel  $\theta = 11.2^\circ$  ved bruk av Cu K $\alpha$  stråling ( $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ ). Finn sidelengden i enhetscella. Hvilke faktorer begrenser antall resiproke gitterpunkter som blir observert i diffraksjonseksperimenter. List opp og kom med korte forklaringer. Husk Bragg,  $n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$

## FYS3410 Topic 2: Vibrasjoner og fononer

**2.1** Anta et atom (med masse  $m$ ) per primitive celle i et lineært  $N$  atomig gitter med gitterparameter  $a$  og elastisitetskonstant  $c$ . Dersom vi kun tar hensyn til nærmeste nabovekselvirkninger er dispersjonsrelasjonen gitt ved  $\omega^2 = \frac{4c}{m} \sin^2 \frac{ka}{2}$ . Analyser og skisser dispersjonsrelasjonen i første Brillouinsone.

**2.2** Anvend periodiske (Born-von Karman) grensebetingelser for gitteret introdusert i oppgave

2.1 og vis at tettheten av moder(tilstander) er gitt ved  $D(\omega) = \frac{2N}{\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}}$  der  $\omega_0^2 = \frac{4c}{m}$ .

Benytt grafen din fra 2.1 for å korrelere intervallet  $\Delta k$  fra Born – van Karman behandlingen av elastiske bølger med  $\Delta \omega$  intervallet. Du kan få bruk for identiteten:  $\cos(\arcsin x) = \sqrt{1 - x^2}$ .

Skisser  $D(\omega) = \frac{2N}{\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}}$  funksjonen og illustrer hvordan  $D(\omega)$  ville endret seg dersom det var to atomer med ulik masse i hver primitive celle?

**2.3** Hvilken tilstandstetthet benyttet Einstein i sin modell for varmekapasitet? Sammenlign – kvalitativt – den karakteristiske frekvensen ( $\omega_E$ ) benyttet av Einstein med en skisse av  $D(\omega)$  fra oppgave 2.2. Einstein temperaturen er gitt ved  $\Theta_E = \hbar \omega_E / k_B$ , hvor  $k_B$  er Boltzmanns konstant. Gjør et grovt estimat av  $\Theta_E$  (størrelsesordenestimat er akseptabelt). Lydhastigheten ( $\sim 5 \times 10^3$  m/s) og gitterkonstant for vanlige krystaller  $a = 3 \times 10^{-8}$  cm, kan benyttes i estimatet av  $\Theta_E$ . Hvordan endrer  $\Theta_E$  ved endringer i massetetthet og elastiske egenskaper til materialet. Vi vet at ved tilstrekkelig lave temperaturer befinner alle fononmoder seg i grunntilstanden. Hvordan endrer fononokkupasjonen seg ved en liten økning i temperaturen i Einstein modellen? Når du svarer på det siste spørsmålet kan det være nyttig å sammenligne  $\hbar \omega_E$  med  $k_B T$  samt å tenke på okkupasjonssannsynligheter ved en gitt temperatur.

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

**2.4** Den termiske ledningskoeffisienten  $\kappa$  er gitt ved  $\kappa = \frac{1}{3} C_V \Lambda$ , hvor  $C_V$  er varmekapasiteten og  $\Lambda$  er midlere fri veilengde for fononer. Hvordan er temperaturavhengigheten til  $C_V$ ,  $\Lambda$ , og  $\kappa$  i lav/høy temperaturgrensetilfellene, fyll inn i Tabell I. Lag et plot som illustrerer temperaturavhengigheten til  $\kappa$ .

Table I

|        | $C_V$ | $\Lambda$ | $\kappa$ |
|--------|-------|-----------|----------|
| low T  |       |           |          |
| high T |       |           |          |

### FYS3410 Topic 3: Fri elektron Fermi gass

**3.1** Fri elektron elektrongassen (FEFG) er beskrevet ved en fri elektronorbital modell (ikke vekselvirkninger), der tettheten av tilstander er utledet fra Schrödinger likningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$
 der bølgefunksjonen er den for frie partikler

$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$  med (Born – von Karman) grensebetingelser i tre dimensjoner (e.g. i  $x$ -retningen er  $\psi(x+L, y, z) = \psi(x, y, z)$  der  $L$  lengden til kvantiseringsvolumet). Antall elektroner i systemet er  $N$ , utled uttrykk for Fermi energien ( $\varepsilon_F$ ), størrelsen på bølgevektoren ( $k_F$ ) ved Fermi flaten, og tilstandstettheten ( $D(\varepsilon)$ ), anta at elektronsystemet er i grunntilstanden. Du kan benytte  $\exp(ix) = \cos x + i \sin x$  når du skal finne de tillatte verdier for  $k$ . Husk at  $m$  er hvilemassen til elektronet.

**3.2** Skisser tilstandstettheten  $D(\varepsilon)$ , du fant for FEFG i grunntilstanden fra oppgave 3.1. Ta hensyn til Fermi-Dirac fordelingen for fermioner

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

tilstandstettheten endrer seg med økende temperatur. Hvordan forstår du størrelsen  $\mu$  (det kjemiske potensialet)? Hva er det kjemiske potensialet ved  $T = 0$ ?

**3.3** Klassisk statistisk mekanikk predikerer at en gass av fri 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 diskutert i 3.1 og 3.2, burde det elektroniske bidraget til varmekapasiteten bli  $\frac{3}{2}k_B N$ , som for atomene i en enatomig gass. Regn ut  $\frac{3}{2}k_B N$  for et mol partikler som en referanse. Eksperimenter viser at det elektroniske bidraget til

varmekapasiteten er av størrelsesorden 0.01 av den klassiske  $\frac{3}{2}k_B N$  verdien. Benytt grafen du fant i 3.2 til å gjøre et estimat av total elektronisk termisk energi og den korresponderende varmekapasiteten i FEFG modellen. Viktig: Unngå komplisert integrasjon av produktet  $D(\varepsilon) \cdot f(\varepsilon, \mu, T)$  – gjør et estimat! Ved hjelp av dette estimatet, finn det elektroniske bidraget til varmekapasiteten i Kalium ved romtemperatur  $T = 300K$  (Kalium har elektronkonsentrasjon  $1.4 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ). Det kan være nyttig å introdusere Fermitemperaturen  $T_F = \varepsilon_F / k_B$ .

$$\begin{aligned} \hbar &= 6.58 \times 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s} & k_B &= 8.61 \times 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{K}^{-1} & m &= 9.1 \times 10^{-31} \text{ Kg} \\ N_A &= 6.02 \times 10^{23} \text{ mole}^{-1} & 1 \text{ eV} &= 1.6 \times 10^{-19} \text{ J} \end{aligned}$$