8 FYSM300 Materials physics I, Materiaalifysiikka I, Midterm 1, Välikoe 1 18.3.2011

Four hours of time, answer all questions. Neljä tuntia aikaa, vastaa kaikkiin kysymyksiin. Kysymykset suomeksi englanninkielisten perässä! Kysymyksiin saa vastata englanniksi tai suomeksi.

8.1

Explain briefly:
(a) Draw the conventional unit cell of a fcc lattice. Why is it a common crystal structure in nature?
(b) Why is there a peak in phonon thermal conductivity as a function of temperature?
(c) How does a covalent bond form? Also explain what is the bonding and antibonding orbital.
(d) What is the difference between a Bravais and a non-Bravais lattice?
(e) What is a phonon and how can you prove its existence experimentally?
(f) Why are X-rays a good way to probe structural properties materials? Give at least two reasons.

8.2

Essay: Experimental determination of crystal structure: principles and different techniques

8.3

(a) Let's consider the hexagonal 2D Bravais lattice with a lattice constant a. What are its primitive translation vectors, what is the general vector describing all lattice points, what is the area of the primitive unit cell? Make a drawing of the Wigner-Seitz unit cell (lattice point at the origin)
(b) Derive the reciprocal lattice vectors of the hexagonal 2D lattice, draw the primitive vectors and also draw the first Brillouin zone. What type of lattice is the reciprocal lattice?
(c) Why is hexagonal 2D lattice important, even when one considers 3D lattices?

8.4

(a) Derive the expression for the phonon density of states $g_P(\omega)$ for acoustic phonons in the Debye approximation, i.e. when all the three acoustic branches have linear dispersion relations $\omega_i(\mathbf{k})$ ($\omega_L = c_L k$, $\omega_{T1} = \omega_{T2} = c_T k$). You could use the definition

$$g_P(\omega)d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3}\int_{\omega}^{\omega+d\omega} d\mathbf{k}. \tag{14}$$

(b) Derive the expression for the heat capacity of acoustic phonons in the low temperature limit ($k_B T << \hbar\omega_D$), where ω_D is the Debye-frequency determined by the condition that it is the maximum frequency for the modes:

$$3N = \int_0^{\omega_D} g_P(\omega)d\omega = \frac{V}{(2\pi^2)}\left(\frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3}\right)\int_0^{\omega_D} \omega^2 d\omega, \tag{15}$$

where N is the number of atoms. Remember that the heat capacity C_V can be calculated from $C_V = \partial U(\omega, T)/\partial T$, and that the interal energy $U(\omega, T)$ is

$$U(T) = \int_0^{\omega_D} g_P(\omega)\epsilon(\omega, T)d\omega, \tag{16}$$

where $\epsilon(\omega, T) = \hbar\omega(\langle n \rangle + 1/2)$ is the thermal energy of a harmonic oscillator with thermal Bose-Einstein occupation number $\langle n \rangle = 1/[\exp(\hbar\omega/(k_B T)) - 1]$. You may need to know that

$$\int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}. \tag{17}$$

8.5

Selitä lyhyesti:
(a) Piirrä fcc hilan tavallinen yksikkökoppi (conventional unit cell). Miksi se on yleinen hilarakenne luonnossa?
(b) Miksi fononien lämmönjohtuvuudessa on maksimi lämpötilan funktiona?
(c) Miten kovalenttinen sidos syntyy? Selitä myös mitä ovat sitova ja hajottava orbitaali.
(d) Mikä on Bravais ja ei-Bravaishilan välinen ero?
(e) Mikä on fononi, ja miten voit kokeellisesti todistaa sen olemassaolon?
(f) Miksi röntgensäteillä on hyvä tutkia materiaalien rakennetta? Anna ainakin kaksi syytä.

8.6

Essee: Kiderakenteiden kokeellinen määrittäminen: periaatteet ja erilaiset tekniikat

8.7

(a) Tarkastellaan heksagonaalista 2D Bravais-hilaa, jolla on hilavakio a. Mitkä ovat sen primitiiviset siirtovektorit, mikä on yleinen vektori joka kuvaa kaikki hilapisteet ja mikä on yksikkökopin ala? Piirrä Wigner-Seitz yksikkökoppi (hilapiste origossa)
(b) Laske heksagonaalisen 2D hilan käänteishilavektorit, piirrä primitiivivektorit sekä ensimmäinen Brillouinin vyöhyke. Mikä hilatyyppi käänteishila on?
(c) Miksi heksagonaalinen 2D hila on tärkeä jopa 3D hilojen tapauksessa?

8.8

(a) Johda lauseke akustisten fononien tilatiheydelle $g_P(\omega)$ Debye-approximaatiossa, eli kun kaikilla akustisilla moodelilla on lineaarinen dispersiorelaatio $\omega_i(\mathbf{k})$ ($\omega_L = c_L k$, $\omega_{T1} = \omega_{T2} = c_T k$). Voit käyttää esim. määritelmää

$$g_P(\omega)d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_\omega^{\omega+d\omega} d\mathbf{k}. \tag{18}$$

(b) Johda lauseke akustisten fononien lämpökapasiteetille matalissa lämpötiloissa ($k_B T << \hbar\omega_D$, missä ω_D on Debye-taajuus, joka määritellään moodien suurimpana taajuutena:

$$3N = \int_0^{\omega_D} g_P(\omega)d\omega = \frac{V}{(2\pi^2)} \left(\frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3} \right) \int_0^{\omega_D} \omega^2 d\omega, \tag{19}$$

missä N on atomien määrä. Muista että lämpökapasiteetin C_V voi laskea $C_V = \partial U(\omega, T)/\partial T$, ja että sisäenergia $U(\omega, T)$ on

$$U(T) = \int_0^{\omega_D} g_P(\omega)\epsilon(\omega, T)d\omega, \tag{20}$$

missä $\epsilon(\omega, T) = \hbar\omega(\langle n \rangle + 1/2)$ on harmonisen oskillaattorin terminen energia ja $\langle n \rangle = 1/[\exp(\hbar\omega/(k_B T)) - 1]$ on Bose-Einstein miehitysluku. Voit myös tarvita tietoa $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}$.