

# Eðlisfræði þéttfnis I

## Lokapróf

11. Desember 2014 kl. 09:00 - 12:00

Leyfileg hjálpargögn eru skriffæri, vasareiknir og eintak af kennslubókinni: Harald Ibach and Hans Luth, *Solid-State Physics: An Introduction to Principles of Materials Science*, 4th ed., Springer-Verlag, 2009

### 1. X-ray diffraction (8)

Gefið er að kopar skotmark geisli frá sér röntgenlínu af bylgjulengd  $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ .

(a) Ef gefið er að Bragg hornið fyrir speglun frá (111) planinu í Al er  $19.2^\circ$ , þá skal reikna fjarlægðina á milli þessara plana. Ál er fcc.

(b) Þekkt er að eðlismassi áls sé  $2.7 \text{ g/cm}^3$  og atómmassi 27.0. Avogadro talan er  $N_A = 6.0222 \times 10^{23} \text{ mole}^{-1}$ . Finna skal grindarfasta áls.

A Cu target emits an X-ray line of wavelength  $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ .

(a) Given the Bragg angle for reflection from the (111) planes in Al is  $19.2^\circ$ , compute the interplanar distance for these planes. Recall the aluminum has an fcc structure.

(b) Knowing that the density and atomic weight of Al are, respectively,  $2.7 \text{ g/cm}^3$  and 27.0, and the value of the Avogadro's number is  $N_A = 6.0222 \times 10^{23} \text{ mole}^{-1}$ . Calculate the lattice constant for Al.

## 2. Structure determination (16)

Tilraunamenn hafa myndað ofurleiðara sem vinnur við stofuhita, og þú heldur að strúkturinn sé einfaldur teningur með grindarfasta 6.0 Å. Tilraunamennirnir hafa Debye-Scherrer röntgenmyndavél sem notar duftsýni með 1.5 Å röntgengeisla. Reikna skal hornstöður  $\varphi$  fyrstu 3 tvístrunarhringjanna.

(a) Dragið upp mynd sem lýsir tvístrunarsambandinu sem tengir  $\mathbf{G}$  (nykurgrindarvigurinn),  $\mathbf{k}$  (bylgjuvigur innkomandi röntgengeisla), og  $\mathbf{k}'$  (bylgjuvigur eftir tvístrun röntgengeislans).

(b) Nota skal myndina í lið (a) til að leiða út sambandið á milli  $|\mathbf{G}|$ ,  $|\mathbf{k}|$ , og dreifingarhornsins  $\varphi$ .

(c) Rita jöfnu fyrir  $|\mathbf{G}|$ .

(d) Nota skal niðurstöðurnar úr liðum (a) - (c) til að reikna hornstöður  $\varphi$  þriggja fyrstu tvístrunarhringjanna. Niðurstaðan á að vera töluleg, en láttu öll flóknari föll, hornaföll, kvaðratrætur o.s.frv. standa.

Experimentalists have created a room-temperature superconductor, and you (a theorist) think its structure is simple cubic with a 6.0 Å lattice constant. The experimentalists have a powder Debye-Scherrer camera with a 1.5 Å X-ray source. Calculate the angular positions  $\varphi$  of the first 3 diffraction rings.

(a) Draw a picture that illustrates the diffraction condition relating  $\mathbf{G}$  (a reciprocal lattice vector),  $\mathbf{k}$  (the wave vector of the incident X-ray), and  $\mathbf{k}'$  (the wave vector of the scattered X-ray).

(b) Use the picture in part (a) to derive a relationship between  $|\mathbf{G}|$ ,  $|\mathbf{k}|$ , and the scattering angle  $\varphi$ .

(c) Write a symbolic expression for  $|\mathbf{G}|$ .

(d) Use the results of parts (a)-(c) to calculate the angular positions  $\varphi$  of the first 3 diffraction rings. Your answer should be numeric, but please leave any non-trivial trigonometric functions, square roots, etc. unevaluated.

### 3. Debye temperature (18)

Þú hefur einnar atóma teningsgrind með grindarfasta  $a = 3 \text{ \AA}$  og hljóðhraða  $c = 10^3 \text{ m/s}$ .

(a) Hvert er Debye hitastigið,  $\Theta$  ? (Gefðu tölugildi í gráðum.)

(b) Segjum að þú ætlir að gera tilraun með varmarýmd grindarinnar á bili sem er full skammtað (þ. e. jafnvel hljóðhættirnir eru "frostir út"). Tækin sem þú hefur geta farið niður að hitastigi fljótandi helíns (4 K). Hve lítið þarf sýnið að vera ? Gefa skal svarið í fjölda atóma. Uppástunga: Fyrir endanlegt sýni eru leyfðir bylgjuvigrar strjálir. Þú ert að leita að minnsta, bylgjuvigrum sem er ekki núll, sem gefur lágsta örvaða orkustig kristallsins. Tengdu þessa orku við varmaorku til að leysa þetta dæmi.

You have a monatomic cubic lattice of lattice spacing  $a = 3 \text{ \AA}$  and sound velocity  $c = 10^3 \text{ m/s}$ .

(a) What is the Debye temperature,  $\Theta$  ? (Provide a numerical value in degrees.)

(b) Say you want to do a lattice heat-capacity experiment in the fully quantum- mechanical regime (i. e. even the acoustic modes have "frozen out"). Your apparatus is capable of reaching liquid-helium temperature (4K). How small does your sample have to be ? Give the answer in atoms. Hint: Recall that for a finite sample, the allowed wavevectors are discrete. You are looking for the smallest, non-zero wavevector, as this will give you the lowest energy excitation of the crystal. Relate this energy to the thermal energy to solve the problem.

#### 4. Drude model frequency dependence (8)

Nota skal jöfnuna

$$m \left( \frac{dv_D}{dt} + \frac{v_D}{\tau} \right) = -e\mathcal{E}$$

fyrir rekhraða rafeindar  $v_D$  til að sýna að leiðnin við horn tíðnina  $\omega$  er

$$\sigma(\omega) = \sigma(0) \left( \frac{1 + j\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2} \right)$$

þar sem  $\sigma(0) = ne^2\tau/m$ .

Use the equation

$$m \left( \frac{dv_D}{dt} + \frac{v_D}{\tau} \right) = -e\mathcal{E}$$

for the electron drift velocity  $v_D$  to show that the conductivity at frequency  $\omega$  is

$$\sigma(\omega) = \sigma(0) \left( \frac{1 + j\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2} \right)$$

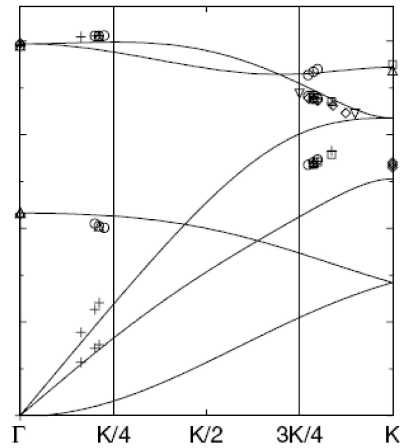
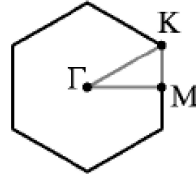
where  $\sigma(0) = ne^2\tau/m$ .

### 5. Debye frequency (12)

Einatóma, tenings grind með grindarfasta  $a$ . Hljóðhraðinn fyrir langsum og þversum hljóðeindir er nánast sá sami,  $c_T = c_L = c$ , og einsleitur, og hæsta tíðni hljóðeinda er  $\omega^*$ . Hver er Debye tíðnin? Er hún háð  $\omega^*$ ?

A monatomic, cubic material has lattice spacing of  $a$ . The sound velocity for longitudinal and transverse phonons is approximately equal,  $c_T = c_L = c$ , is isotropic, and the highest phonon frequency is  $\omega^*$ . What is the Debye frequency? Does it depend on  $\omega^*$ ?

## 6. Dispersion in graphene (14)



Myndin til vinstri hér að ofan sýnir fyrsta Brillouin svæðið í grafit plani. Myndin til hægri sýnir reikninga (og mælingar) á tvístrun hljóðeinda milli punktanna  $\Gamma$  og  $K$  á fyrsta Brillouin svæðinu. Gerum ráð fyrir grafit þynnu – 2D, en sum atóm geta hreyfst í 3D. Þar sem það eru 2 atóm í grunni (honeycomb structure), gerum við almennt ráð fyrir sex háttum: AL (hljóðgrein langsum), ATo (hljóðgrein þversum út úr plani), ATi (hljóðgrein þversum í plani), OL (ljósgrein langsum), OTo (ljósgrein þversum út úr plani), og OTi (ljósgrein þversum í plani).

- Teiknið grindarplan grafíts, og sýnið þær stefnur sem svara til hinna þriggja gerða háttanna. Ekki hafa áhyggjur af grunninum hér.
- Hver hljóðgreinanna hefur lægsta hljóðhraðann?
- Hver hljóðgreinanna hefur hæsta hljóðhraðann?
- Hver ljósgreinanna hefur lægstu orku nærri  $k = 0$ ?
- Hvaða margfeldni er vænst? Merkið alla sex hættina á myndina til hægri hér að ofan. útskýrið hvernig þú veist þetta.

The figure above left shows the first Brillouin zone in a graphite plane. The figure above right shows some calculations (and data) for the phonon dispersion relation between the points  $\Gamma$  and  $K$  in the first Brillouin zone. Consider a graphite sheet—a 2D object, but the atoms are allowed to move in 3D. Because there are 2 atoms in the basis (honeycomb structure), we expect six modes in general: AL (acoustic longitudinal), ATo (acoustic transverse out-of plane), ATi (acoustic transverse in-plane), OL (optical longitudinal), OTo (optical transverse out-of-plane), and OTi (optical transverse in-plane).

- Draw a graphite lattice plane, and indicate directions corresponding to the three types of modes. Don't worry about the basis for this part.
- Which acoustic mode will have the lowest speed of sound?
- Which acoustic mode will have the highest speed of sound?

(d) Which optical mode will have the lowest energy near  $k = 0$  ?

(e) What degeneracies do you expect ? Label all six modes on the above right figure. Explain how you know all this.

## 7. Structure factor of diamond (14)

Kristallastrúktur demants er vel þekktur. Grunnurinn samanstendur af átta atómum ef grindareiningin er tekin sem venjulegur teningur.

(a) Finna skal formstuðul grunnsins  $S$ .

(b) Finna skal núll formstuðullsins  $S$  og sýnið að leyfðar speglanir demants uppfylla  $v_1 + v_2 + v_3 = 4n$ , þegar allir vísar eru jafnir og  $n$  er einhver heil tala eða allir vísar eru oddatölur.

The crystal structure of diamond is well known. The basis consists of eight atoms if the cell is taken as the conventional cube.

(a) Find the structure factor  $S$  of this basis.

(b) Find the zeros of  $S$  and show that the allowed reflections of the diamond structure satisfy  $v_1 + v_2 + v_3 = 4n$ , where all indices are even and  $n$  is any integer, or else all indices are odd.



### 8. Fermi level adjustment in silicon (10)

Kísilsýni við 300 K er íbætt með rafþega íbót af þéttleika  $N_A = 3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Ákvarða íbótarpéttleika rafgjafa íbótar sem bæta verður við þannig að kísillinn verðu  $n$ -leiðandi og Fermi orkustigið sé 0.15 eV neðan við leiðniborðabrún.

A silicon sample at 300 K contains an acceptor impurity concentration of  $N_A = 3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Determine the concentration of donor impurity atoms that must be added so that the silicon is  $n$ -type and the Fermi level is 0.15 eV below the conduction band edge. Virkur ástandspéttleiki leiðniborða kísils er  $N_C = 2.86 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .