

Dit tentamen bestaat uit vier (4) opgaves. Schrijf je naam op alle bladen die je inlevert, en nummer ze. Het totaal aantal te behalen punten is 80, het aantal voor de individuele onderdelen is aangegeven. Enige natuurkonstanten zijn aan het eind gegeven.

1. Vrije elektronen (5+5+5+5= 20) (40 min.)
  - a. Gegeven een gas van  $N$  vrije elektronen met massa  $m_e$  in een volume  $V$ . Laat zien dat de toestandsdichtheid  $g(\epsilon)$  (het aantal electron toestanden in het energie-interval tussen  $\epsilon$  en  $\epsilon+d\epsilon$ ) gegeven wordt door  $g(\epsilon) = V/(2\pi^2\hbar^3) (2m_e)^{3/2} \epsilon^{1/2}$ .
  - b. Geef een uitdrukking voor  $N$  in termen van  $g(\epsilon)$ . Gebruik deze om te laten zien dat bij  $T=0$  de Fermi energie  $\epsilon_F$  gegeven wordt door  $\epsilon_F = \hbar^2/(2m_e) (3\pi^2N/V)^{2/3}$ .
  - c. Bij eindige temperatuur  $T$  wordt de waarschijnlijkheid voor het bezet zijn van een toestand bij energie  $\epsilon$  gegeven door de Fermi-Dirac verdeling  $f(\epsilon,T)$ . Definieer hiermee  $n(\epsilon,T)$ , het aantal bezette toestanden bij  $\epsilon,T$ . Teken grafieken van  $f(\epsilon,T)$  en  $n(\epsilon,T)$  als functie van  $\epsilon$  voor  $T = 0$  en voor een eindige (lage) temperatuur  $T$ . Laat zien dat bij eindige  $T$  het energie-interval van bezette toestanden boven  $\epsilon_F$  in benadering gegeven wordt door  $2k_B T$ . De totale energie van het systeem is  $E(T)$ . Laat zien dat  $E(T) - E(0) \sim \frac{1}{2} g(\epsilon)(k_B T)^2$
  - d. Met wat voor een meting is het mogelijk om de toestandsdichtheid bij het fermi niveau van een materiaal te bepalen?

2. Structuur, diffractie (5+5+5+5 = 20) (40 min)

Mengsels van Cu en Au kristalliseren in een fcc structuur. Bij bepaalde verhoudingen, zoals  $\text{Cu}_3\text{Au}$ , kan zowel een ongeordende structuur (alle atomen op willekeurige posities van het fcc rooster), als een geordende structuur (Au op (0,0,0), Cu op de face-centered punten) bestaan.

- a. Teken de kubische eenheidscel van het fcc rooster en de fcc atoomposities. Noem de ribbe van de kubus  $a_0$ . Geef het aantal atomen in deze eenheidscel. Leg uit dat dit geen 'primitieve' eenheidscel is. De primitieve cel kan gedefinieerd worden met drie translatievectoren  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ . Neem  $\mathbf{a}_1 = a_0/2 (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y)$ ,  $\mathbf{a}_2 = a_0/2 (\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)$ ,  $\mathbf{a}_3 = a_0/2 (\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_x)$ . Zet deze vectoren in de tekening. Geef het aantal atomen in deze primitieve cel.

De reciproke-rooster eenheidsvectoren  $\mathbf{g}_i$  zijn  $\mathbf{g}_1 = 2\pi (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) / [\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)]$  etc.

- b. Bereken de reciproke eenheidsvectoren voor het fcc rooster, en laat door inspectie zien dat deze een body-centered kubisch (bcc) rooster opbouwen; dat wil zeggen, laat voor de bcc roosterpunten zien dat ze te construeren zijn via de gevonden  $\mathbf{g}_i$ 's.
- c. Het fcc rooster kan ook beschouwd worden als een simpel kubisch rooster met een basis. Geef aan wat de basisatomen dan zijn. Bereken voor alle reflecties  $hkl$  de structuurfactor  $S = \sum f_j \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_j)$ , met  $j$  de index van de basisatomen,  $f_j$  hun verstrooiingsfactor,  $\mathbf{r}_j$  hun positie en de som over alle atomen in de basis. Laat zien dat dit tot hetzelfde reciproke rooster leidt als bij (b).

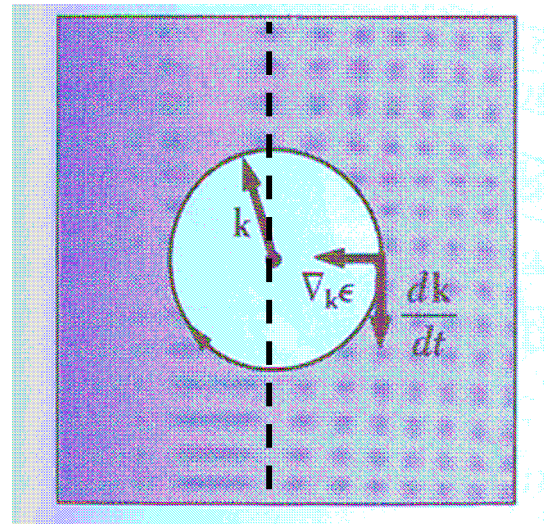
- d. De waarden van  $f_{\text{Cu}}$  en  $f_{\text{Au}}$  zijn verschillend door de verschillende kernlading van Cu en Au. Ga na wat de verschillen zijn tussen de diffractiepatronen van de geordende en de ongeordende fase van  $\text{Cu}_3\text{Au}$ . Zeg zowel iets over het optreden van diffractiemaxima als hun intensiteit.

3. Fermi oppervlakken, transport (5+5+5+5= 20) (40 min.)

In de tight binding benadering wordt de energie van het electron  $\epsilon_k$  gegeven door de overlapintegralen tussen electrongolffuncties op nabuuratomen :  $\epsilon_k = -\gamma \sum_i \exp(-ik \cdot r_i)$ , met  $\gamma$  een overlap-energie en  $r_i$  de positie van de naburen.

- a. Laat zien dat voor een vierkant rooster met zijden  $a_0$  de energie-dispersierelatie gegeven wordt door  $\epsilon_k = -2\gamma(\cos k_x a_0 + \cos k_y a_0)$ .
- b. Definieer de effectieve electron massa  $m_{\text{eff}}$ . Bereken  $m_{\text{eff}}$  bij de top, in het midden, en aan de bodem van de band. Als de band bijna vol is kunnen de lege toestanden beschouwd worden als gaten die het transport verzorgen. Wat is de massa van deze gaten, en waarom.

Een materiaal met een vierkant rooster heeft meerdere electronen per atoom. In het plaatje hiernaast is het donkergrijze gebied het gevulde deel van een vierkante Brillouin zone.



- c. Schets het bandenplaatje (E versus k) in de doorsnede aangegeven door de stippelijijn, geef aan wat de gevulde en ongevulde toestanden zijn, en vermeld waarden langs de assen.
- d. Welke meetbare consequentie heeft dit afwijkende fermi oppervlak (ten opzichte van een fermi bol met de gevulde toestanden binnen in) voor het transport? Uit welke meting zou dit blijken?

4. Fononen en toestandsdichtheden (5+5+5+5 = 20) (40 min)

Een lineaire keten van N atomen wordt gemodelleerd als massa's  $M$ , verbonden door veren met veerconstanten  $K$ . De afstand tussen de atomen is  $a_0$ , de totale lengte van de keten  $L$ , de uitwijking van atoom  $n$  vanuit zijn evenwichtspositie heet  $u_n$ .

- a. Stel de bewegingsvergelijking voor het systeem op en laat zien dat de dispersierelatie voor de roostertrillingen wordt gegeven door  $\omega^2 M = 4K \sin^2(ka_0 / 2)$ , met  $\omega$  de frequentie en  $k$  het golfgetal. Schets de dispersierelatie. Geef de mogelijke  $k$ -waarden voor het systeem onder gebruik making van *periodieke* randvoorwaarden, ofwel onder de voorwaarde  $u_n = u_{n+N}$ .

- b. Het aantal modes  $dn$  in een bepaald bereik van golfgetallen of frequenties wordt gedefinieerd door  $dn = \rho(k)dk = g(\omega)d\omega$ . Geef de uitdrukking voor  $\rho(k)$  (de modedichtheid in de  $k$ -ruimte) en daarmee die voor  $g(\omega)$  (de toestandsdichtheid in frequentieruimte). Schets  $g(\omega)$ , en geef duidelijk waarden op de verschillende assen aan.
- c. Door een normal mode als een (quantummechanische) oscillator op te vatten ontstaat een set energieën  $\varepsilon_i = (n + 1/2)\hbar\omega$ , met  $n$  het aantal fononen. Geef de uitdrukking voor  $n$  bij eindige temperatuur  $T$ . Geef vervolgens de uitdrukking voor de totale energie  $E$  van het fononsysteem (dus alle mogelijke frequenties  $\omega$ ) bij eindige  $T$ .
- d. Omdat  $E$  vaak moeilijk te bepalen is wordt gebruik gemaakt van de Debije frequentie  $\omega_D$ . Hierbij wordt aangenomen dat er geen dispersie is tot een maximale frequentie  $\omega_D$ , maar dat geldt  $\omega = v_s k$ , met  $v_s$  de geluidssnelheid. Bepaal  $v_s$  (in de limiet  $k \ll a_0$ ), geef aan hoe  $\omega_D$  gekozen moet worden, en bepaal  $\omega_D$ .

-----THE END -----

Constants :

electron charge $e$	$1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$	electron mass $m$	$9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Planck's constant $h$	$6.63 \times 10^{-34} \text{ J s}$	vacuum permeability $\mu_0$	$4\pi \times 10^{-7} \text{ NA}^{-2}$

Onderdelen	4 + 4 + 4 + 4	= 16
Punten	20 + 20 + 20 + 20	= 80
Tijd	40 40 40 40	= 160