

1. (12 p) Definiera eller förklara kort följande begrepp:

- a) Första Brillouin-zonen
- b) Kirala nanorör
- c) Egg-dislokation
- d) Laues kriterium för röntgendiffraktion
- e) Nollpunktsenergi
- f) Debye-temperatur

2. (6 p) Defektkoncentrationen  $c$  vid termodynamisk jämvikt är proportionell mot

$$c \propto e^{-(E_f + P\Omega)/k_B T} \quad (1)$$

där  $E_f$  är defektens formationsenergi,  $P$  är trycket och  $\Omega$  volymen per atom. Vid normalt atmosfäriskt tryck är den tryckberoende termen  $P\Omega$  så liten att man inte behöver beakta den. Uppskatta vid hur högt tryck termen börjar få betydelse för en typisk FCC-metall. Du kan anta att  $E_f \sim 1$  eV.

3. (6 p) I notationen för enkla kubiska gitter kan vektorerna i det reciproka gittret skrivas

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{a}(h\mathbf{i} + k\mathbf{j} + l\mathbf{k})$$

Visa att för FCC-gittret beskrivet som ett kubiskt gitter med en bas existerar den reciproka vektorn  $\mathbf{K}$  om och bara om  $h, k, l$  alla är udda eller alla jämna.

4. Hur och varför kan fononer leda värme? Diskutera termisk konduktivitet i formen av analogin med en atomär gas. Vilken typ av spridning möjliggör värmeöverföring?

5. (8 p) En enkel Tersoff-typs potential för atomer vid avståndet  $r$  kan formuleras så att energin per en bindning med längden  $r$  skrivs

$$V_{ij}(r) = De^{-2\alpha r} - 2Db(Z)e^{-\alpha r}$$

där  $b$  beror på atomens koordinationsstal  $Z$  som

$$b(Z) = (1 + a^2(Z - 1)^2)^{-1/4}$$

Bara bindningar till närmaste grannar räknas.

Kisel har gitterkonstanten 5.43 Å och kohesionsenergin 4.63 eV. Lös parametrarna  $D$ ,  $\alpha$  och  $a$  för denna potential så att potentialen beskriver kisel med ett minimum i kohesionsenergin vid korrekt koordinationsstal och ger exakt rätt gitterkonstant och kohesionsenergi.