1. (a) (10) $(4\pi/a)^3/4 = 16\pi^3/a^3 = 2(2\pi/a)^3$

(b) Debye model : phonon normal mode의 acoustic branch를 선형 ($\omega = vK$) 분산을 가진 normal mode로 모델링 (5)

Einstein model : phonon normal mode의 optical branch를 K에 무관한 독립적인 ($\omega = \omega_0$) 단일 simple harmonic oscillator로 모델링 (5)

(c) (10) $\boldsymbol{K}_s - \mathrm{K}_i = \boldsymbol{G}$ ($\boldsymbol{K}_i$: 입사빔 wavevector, $\boldsymbol{K}_s$: 산란빔 wavevector, $\boldsymbol{G}$: reciprocal lattice (translational) vector)

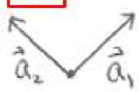
2. (a) (1) fcc lattice (5), (2) Si 원자 2개 (5)

(b) (1) fcc lattice (5) (2) Ga 원자 1개, As 원자 1개 (5)

3.

(a) 10

40

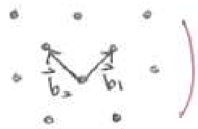


$\vec{a}_1 = (\sqrt{2}a, 0) = \sqrt{2}a(1,0)$, $\vec{a}_2 = (0, \sqrt{2}a) = \sqrt{2}a(0,1)$

r_A = A 원자 좌표 = $(0,0)$

r_B = B 원자 좌표 $= \frac{1}{2}\vec{a}_1 + \frac{1}{2}\vec{a}_2 = \left(\frac{a}{\sqrt{2}}, \frac{a}{\sqrt{2}}\right)$ 각 5점

(b) 10



5점

$|\vec{b}_1| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_1|} = \frac{\sqrt{2}\pi}{a}$

$|\vec{b}_2| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_2|} = \frac{\sqrt{2}\pi}{a}$ 5점

(c) 10

$\vec{G} = v_1\vec{b}_1 + v_2\vec{b}_2 = \frac{\sqrt{2}\pi}{a}(v_1, v_2)$ (v_1, v_2 : integers)

$\vec{b}_1 = \frac{\sqrt{2}\pi}{a}(1,0)$, $\vec{b}_2 = \frac{\sqrt{2}\pi}{a}(0,1)$ 5점

$$S_G = \sum_j f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j}$$

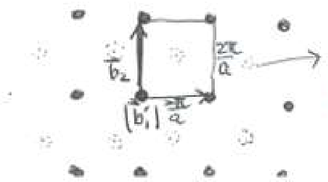
$$= f_A + f_B e^{-i\left\{\frac{a}{\sqrt{2}}(1,1)\cdot\frac{\sqrt{2}\pi}{a}(v_1, v_2)\right\}}$$

$$= f_A + f_B e^{-i\pi(v_1+v_2)}$$ 5점

(d) $f_A = f_B = f$ 일때 (A와 B가 같은 원소 원자)

10

$S_G = f\left(1 + e^{-i\pi(v_1+v_2)}\right) = 0$ if $v_1 + v_2$ = odd integers (홀수)



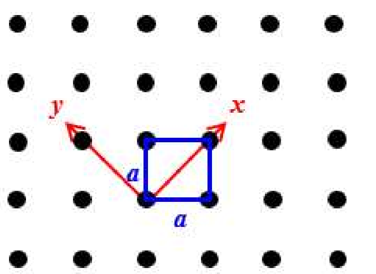
$S_G = 0$ 인 $\vec{G}$

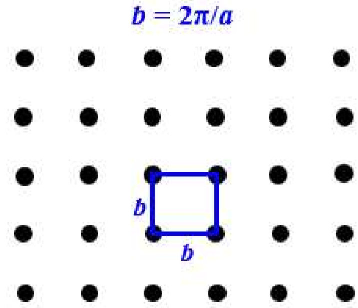
그림 5점

$|\vec{b}_1'| = |\vec{b}_2'| = \frac{2\pi}{a}$

5점

(e)





$a_1 = (1/\sqrt{2}, -1/\sqrt{2}) = (1/\sqrt{2})(1, -1)$
$a_2 = (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}) = (1/\sqrt{2})(1, 1)$

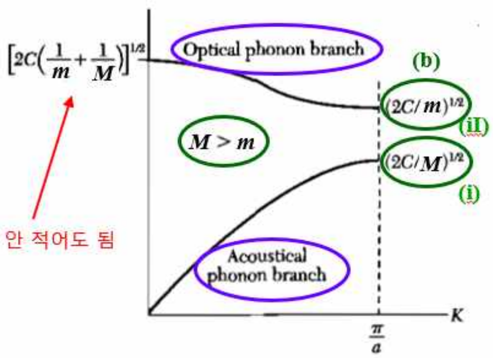
$b_1 = (2\pi/a)(1/\sqrt{2}, -1/\sqrt{2}) = (\sqrt{2}\pi/a)(1, -1)$
$b_2 = (2\pi/a)(1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}) = (\sqrt{2}\pi/a)(1, 1)$

4. (a) $U(R) = 4\epsilon\left[\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6}\right]$, 또는 $U(R) = A/R^{12} - B/R^{6}$ (10)

(b) 인력: van der Waals interaction (spontaneous fluctuation에 의한 induced dipole-dipole interaction) (5)

척력: Pauli exclusion principle (5)

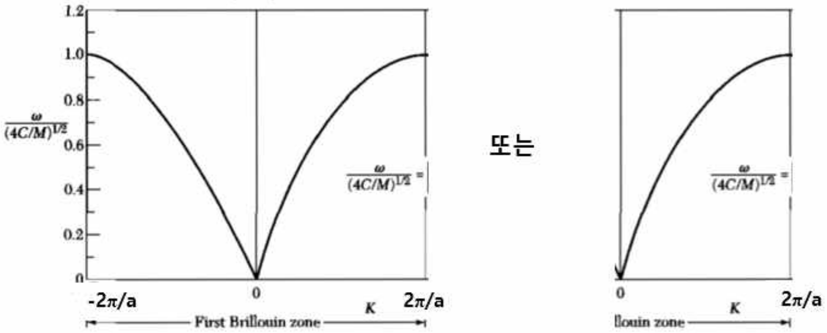
5.



(a) branch 그림 (5점) : π/a 틀리면 1점 감점
branch 명칭 (5점) : 하나 틀리면 2점 감점
(b) 진동수 값 (5점) : $M < m$의 경우로 썼을 때는 위, 아래 값을 바꿔야 함.
: 하나 틀리면 2점 감점

운동: 가장 가까운 같은 종류의 원자들이 서로 반대 방향으로 같은 변위만큼 움직일 때, 그 사이에 있는 다른 원자가 만드는 단순 조화 진동 (SHO)
(i) 질량 m이 out-of-phase로 진동할 때 그 사이에서 M이 진동 (→ normal mode @ acoustic branch)
: $v_{s-1} = v_s$, u_s의 SHO (u_{s-1}과 u_s는 무관)
(ii) 질량 M과 m이 역할이 바뀐 SHO
: : $u_{s-1} = u_s$, v_s의 SHO (v_{s-1}과 v_s는 무관)

(c) 아래 그림 branch 그림 (5점) : 2π/a 틀리면 3점 감점, 진동수 값 틀리면 2점 감점



6.

(a) $\boxed{10}$

$$\langle E(\omega)\rangle \overset{\langle n(\omega)\rangle \hbar\omega}{=} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT}-1}$$

5점

· $E = n\hbar\omega$

(· Planck distribution 5점
$\langle n\rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1}$ 을 이용)

(b) 온도가 낮을 때, 결합력이 약한 (진동수가 낮은) 방향으로의 진동이 대부분 여기되므로 각 층 전체가 층에 수직 방향으로 움직이는 진동이므로 1차원 진동 (5).

(i) $D(\omega) = dN(\omega)/d\omega = (dN(K)/dK)(dK/d\omega)$ = constant (에너지 또는 진동수에 무관) (5)

(1차원이므로 $dN \propto dK$, Debye model에 따라 $\omega \propto K$)

(ii)

$\boxed{10}$ $U(T) = k\int \langle E(\omega)\rangle D(\omega)\, d\omega \sim \int \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT}-1}$ (상수) $d\omega$

($\hbar\omega/kT = x$ 로 치환하면) 식만 쓰면 5점

$U(T) \sim$ (T와 무관 적분계산 값) $\cdot T^2$

$\therefore C_T = \frac{dU}{dT} \sim T$ 5점

※ 간단한 argument : 온도가 충분히 낮으면 $\hbar\omega \sim kT$ 정도의 ($\sim \hbar v K$) acoustic phonon 만 excited (같은 확률로) 대략

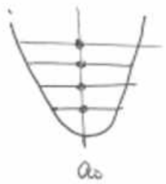
$\rightarrow \Delta U \sim K \cdot T \sim T^2$

($\because \omega \sim K \sim T$)

$C_T = \frac{\Delta U}{\Delta T} = \frac{dU}{dT} \sim T$

7.

$\boxed{20}$ (a) $\langle x\rangle = \langle a_0\rangle$: constant

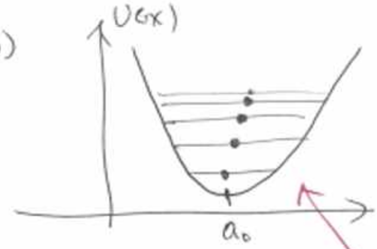


No !

$\boxed{10}$

그림이나 설명 없으면 -5점

(b)



$\langle x\rangle \sim T$

$U(x) = U(a_0) + \frac{1}{2}k(x-a_0)^2 - C(x-a_0)^3$

$(c>0)$

$\boxed{10}$

하나라도 없으면 -5점