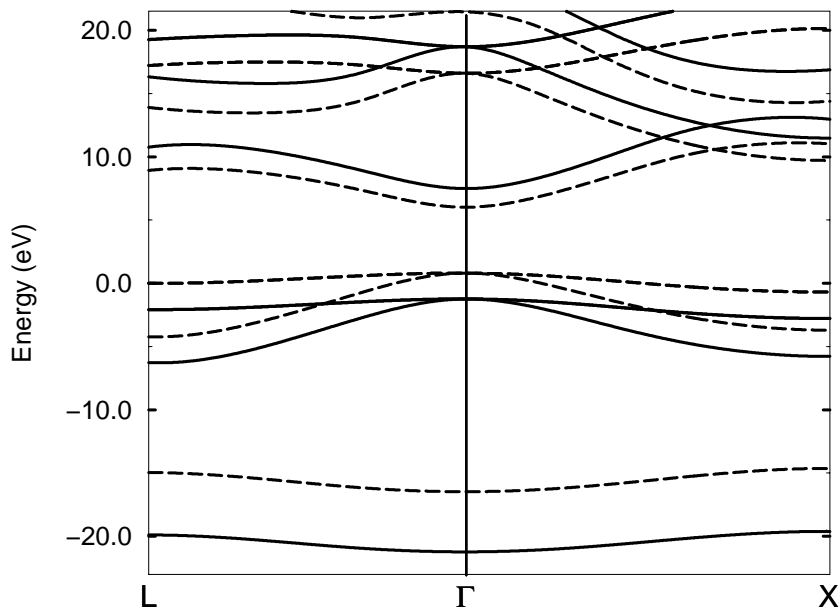


Problem 1. Local-Density-Approximationen (LDA) är den mest framgångsrika metoden för att räkna ut bandstrukturer av olika material. Ett problem är dock att beräknade värden för bandgapet av halvledare brukar vara mindre än de experimentella värden.

Nyligen har Cappellini *et al.* gjort nya beräkningar på magnesiumoxid med GW-metoden som tar mer hänsyn till skillnaden mellan elektroner och hål. Resultatet visas i figuren. Γ ligger vid Brillouinzonens center, L ligger vid zongränsen i $\langle 111 \rangle$ -riktningar och X ligger vid zongränsen i $\langle 100 \rangle$ riktningar. MgO kristalliserar i NaCl-strukturen med gitterparameter 4,211 Å.



Figur 1: Computed bands of cubic MgO at the theoretical lattice parameter. Solid lines: GW bands. Dashed lines: LDA bands. The LDA valence bands at L arbitrarily set to zero.

Hur stor är bandgapet enligt GW-beräkningen? (1p)

Lösning:

Hur stor är vägvektorn vid L ? Vid X ? (1p)

Lösning:

Hur stor är de negativa laddningbärarnas effektiva massa? (1p)

Lösning:

Hur stor är gruppshastigheten för en elektron i lägste ledningsbandet med en vägvektor halvvägs L ? (1p)

Lösning:

Problem 2. Xie *et al* ger följande beräkning av fononerna i silver [Phys. Rev. B 59, 965 (1999)].

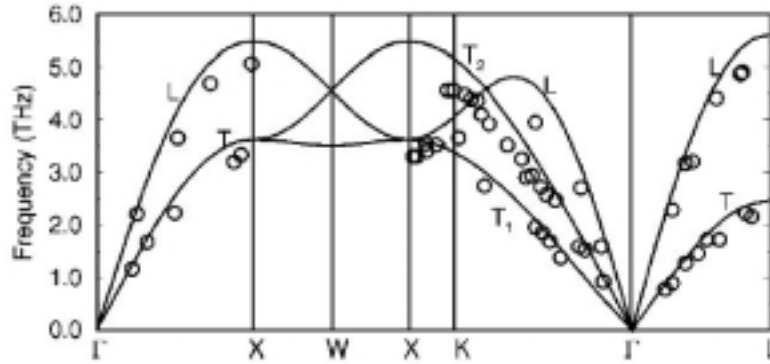


FIG. 2. Calculated phonon dispersion curves at the lattice parameter corresponding to static equilibrium. Experimental neutron-scattering data (Ref. 25) are denoted by circles. *T* and *L* represent transverse modes and longitudinal modes, respectively.

Slå upp silvrets Debye-temperatur i Kittel. Vilken frekvens motsvarar det? (1p)

Lösning:

Hur stor är silvrets värmekapacitet vid rumstemperatur? (1p)

Lösning:

Hur stor är ljudhastigheten i $\langle 111 \rangle$ -riktningar? (1p)

Lösning:

Hur stor är den största *k*-vektorn en fonon kan ha i silver? (1p)

Lösning:

Varför har fononer en nedre gräns på våglängden? En sådan gräns finns ju inte för fotoner och elektroner i silver. (1p)

Lösning:

Problem 3. Bariumtitanat BaTiO_3 kristalliserar i en struktur där Ba-atomerna sitter på kubens hörn, Ti-atomerna i kubens mitt och O-atomerna mitt på kubens sidor.

Vilket Bravais-gitter har BaTiO_3 ? (1p)

Lösning:

Vad är en lämplig bas för den här kristallstrukturen? (1p)

Lösning:

Hur stor är förhållandet mellan de första fyra Bragg-reflektionernas intensiteter? (De atomära formfaktorerna ges som $f_{\text{Ba}} = 7f_{\text{O}}$ och $f_{\text{Ti}} = 3f_{\text{O}}$.) (1p)

Lösning:

Problem 4. Beräkna koncentrationen av elektroner och hål i en p -halvledare om konduktiviteten $\sigma = 10 (\Omega\text{m})^{-1}$, mobiliteterna är $\mu_h = 0,2 \text{ m}^2/\text{Vs}$ och $\mu_e = 0,4 \text{ m}^2/\text{Vs}$ och de intrinsiska laddningsbärarnas koncentration $n_i = 2,2 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$. (2p)

Lösning:

TENTAMEN

Institution: MSI, Fysik

Examinator: Pieter Kuiper

Datum: 9 juni 2001

Tid:

Plats:

Kurskod: FyC703

Kurs/provmoment: Fasta Tillståndets Fysik II

Hjälpmedel: linjal, räknedosa, Kittel, fem sidor egna anteckningar

Namn:
Adress:
.....
Personnummer: <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> - <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/>

Skriv helst svaren på tentan. Skriv ditt namn på tillägsblad.

Den här tentan har 4 problem.

Lycka till!

	1	2	3	4	Summa	Betyg
Inlämnad						
Poäng						

Uppvisat legitimation:	Ja <input type="checkbox"/>	Nej <input type="checkbox"/>
Uppvisat kårlegitimation:	Ja <input type="checkbox"/>	Nej <input type="checkbox"/>
Tid för inlämning:	Tentavaktens signatur:	