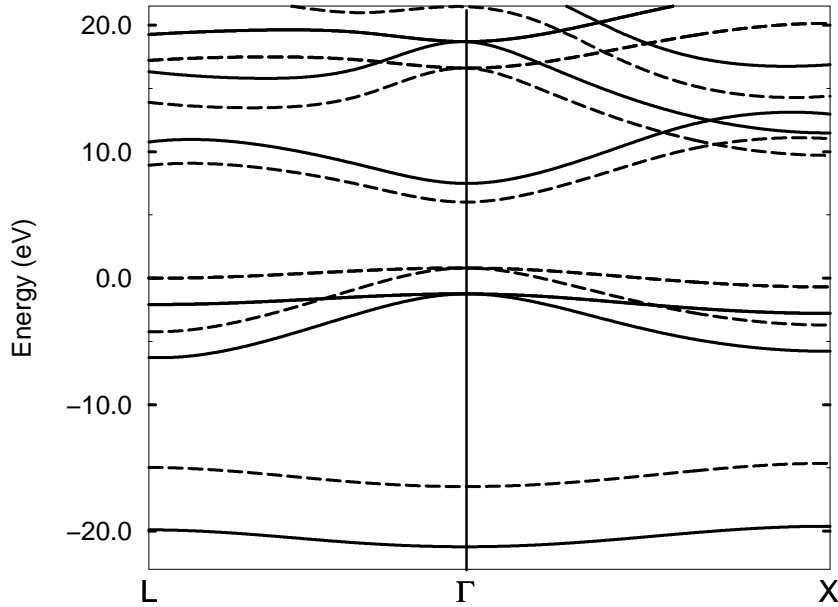


Problem 1. Local-Density-Approximationen (LDA) är den mest framgångsrika metoden för att räkna ut bandstrukturer av olika material. Ett problem är dock att beräknade värden för bandgapet av halvledare brukar vara mindre än de experimentella värden.

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: 8,9 eV, enligt artikeln.

1

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

Lösning: fcc -gitter: $k_L = \sqrt{3}\pi/a = 1,29 \text{ \AA}^{-1}$; $k_X = 2\pi/a = 1,49 \text{ \AA}^{-1}$.

1

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

Lösning: $E(k = \frac{k_X}{4}) \approx 2eV$; $m^* = \frac{\hbar^2 k^2}{2E} = 2,4 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 0,25m_e$

1

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

Lösning: $d\epsilon/dk = \frac{12,8-7,0}{1,29} = 4,5 \text{ eV\AA}$;

$v_g = \hbar^{-1} d\epsilon/dk = 1,6 \cdot 10^{-19} \times 4,5 \cdot 10^{-10} / 1,05 \cdot 10^{-34} = 6,8 \cdot 10^5 \text{ m/s}$

1

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

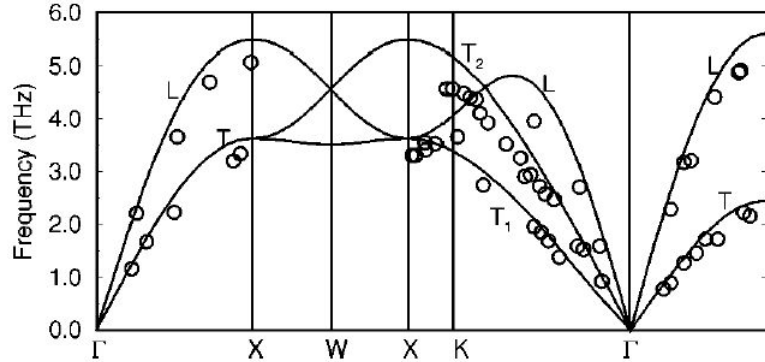


FIG. 2. Calculated phonon dispersion curves at the lattice parameter corresponding to static equilibrium. Experimental neutron-scattering data (Ref. 25) are denoted by circles. T and L represent transverse modes and longitudinal modes, respectively.

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

Lösning: $\theta_D = 225$ K motsvarar $f_D = 4,6$ THz.

1

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

Lösning: $RT > \theta_D$, alltså $C_V \approx 3R \approx 25$ kJ/mol.

1

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

Lösning:

$k_L = \sqrt{3}\pi/4,09 = 1,33 \text{ \AA}^{-1}$, extrapolation av den longitudinella grenen ger $\omega = 2\pi \times 9 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$, så att $v = \omega/k = 2\pi 9 \cdot 10^{12} / 1,33 \cdot 10^{10} = 4 \text{ km/s}$.

1

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

Lösning: Den ligger på Brillouinzonens hörn (W-punkten) där $k = \sqrt{5}\pi/a$.

1

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

Lösning:

Fononens amplitud är atomernas utvikelse från deras jämviktspositioner. Mellan atomerna har fononens amplitud ingen fysikalisk betydelse (i motsats till fallen med fotoner och elektroner).

1

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: enkel kubisk

1

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

Lösning:

1

| | x | y | z |
|----|-----|-----|-----|
| Ba | 0 | 0 | 0 |
| Ti | 0,5 | 0,5 | 0,5 |
| O | 0,5 | 0,5 | 0 |
| O | 0,5 | 0 | 0,5 |
| O | 0 | 0,5 | 0,5 |

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:

1

$$\begin{aligned}
 S(100) &= e^0 f_{\text{Ba}} + e^{i\pi} f_{\text{Ti}} + (e^0 + 2e^{i\pi} f_{\text{O}}) = f_{\text{Ba}} - f_{\text{Ti}} - f_{\text{O}} = 3f_{\text{O}} \\
 S(110) &= e^0 f_{\text{Ba}} + e^{i2\pi} f_{\text{Ti}} + (e^{i2\pi} + 2e^{i\pi}) f_{\text{O}} = f_{\text{Ba}} + f_{\text{Ti}} - f_{\text{O}} = 9f_{\text{O}} \\
 S(111) &= e^0 f_{\text{Ba}} + e^{i3\pi} f_{\text{Ti}} + 3e^{i2\pi} f_{\text{O}} = f_{\text{Ba}} - f_{\text{Ti}} + 3f_{\text{O}} = 7f_{\text{O}} \\
 S(200) &= e^0 f_{\text{Ba}} + e^{i2\pi} f_{\text{Ti}} + (e^0 + 2e^{i2\pi}) f_{\text{O}} = f_{\text{Ba}} + f_{\text{Ti}} + 3f_{\text{O}} = 13f_{\text{O}}
 \end{aligned}$$

Intensiteterna förhåller sig som 9:81:49:169.

Problem 4. Beräkna koncentrationen av elektroner och hål i en p -halvledare om konduktiviteten $\sigma = 10 \text{ } (\Omega\text{m})^{-1}$, 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:

2

Första approximation: anta att $p \gg n$ så att $\sigma = pe\mu_p$. Då är $p = \sigma/(e\mu_p) = 3,1 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-3}$ och $n = n_i^2/p = 1,56 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3}$; antagandet stämmer.

Mera allmänt: $\sigma = pe\mu_p + ne\mu_n = pe\mu_p + \frac{n_i^2}{p} e\mu_n$

$$\sigma p = p^2 e\mu_p + n_i^2 e\mu_n$$

$$1,6 \cdot 10^{-19} \times 0,2 p^2 - 10 p + 2,2^2 \cdot 10^{19} \times 1,6 \times 0,4 = 0$$

$$0,32 \cdot 10^{-19} p^2 - 10 p + 3,01 \cdot 10^{19} = 0$$

$$p = \frac{10 + \sqrt{10^2 - 3,96}}{2 \times 0,32 \cdot 10^{-19}} = 3,1 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3} \text{ (+-lösningen ty } p\text{-halvdare)}$$

$$n = n_i^2/p = 1,56 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3}$$

Mycket mer jobb, samma resultat med given noggrannhet.