Problem 1. Vad är enligt Hunds reglar grundtillståndet av de följande fria joner? Använd spektroskopisk notation. Till exempel, i Eu^{2+} $(4f^7)$ skulle rätt svar vara $^8S_{7/2}$. Ge kvanttal för banrörelsemängdsmoment, spinn och total rörelsemängdmoment.

a) V^{3+} $3d^2$ (1p)

Lösning: 1

Enligt Hunds första regel är spin maximal. Med två elektroner i fem orbitaler tillåter Pauli-principen twä parallela spins: $S = 2 \times 1/2 = 1$ och multipliciteten $2S + 1 = 3$, ett triplet-tillstånd alltså.

Enligt Hunds andra regel ska L maximaliseras. För $3d$-orbitalerna gäller $l = 2$, så att $m_l = -2$ resp $m_l = -1$ och $L = |\Sigma m_l| = 3$, ett F-tillstånd.

Eftersom skalen är mindre än halvt fylld, blir den totale rörelsemängsmoment $J = |L - S| = 3 - 1 = 2$.

Rätt svar är alltså $^3F_2$.

b) Pu^{2+} $5f^6$ (1p)

Lösning: 1

På samma sätt: $S = 6 \times 1/2 = 3$, $2S + 1 = 7$, $L = 3 + 2 + 1 + 0 - 1 - 2 = 3$, $J = |3 - 3| = 0$. Svar $^7F_0$.

Problem 2. Dispersionsrelationen av longitudinella fononer på ett visst rektangulärt gitter är given av

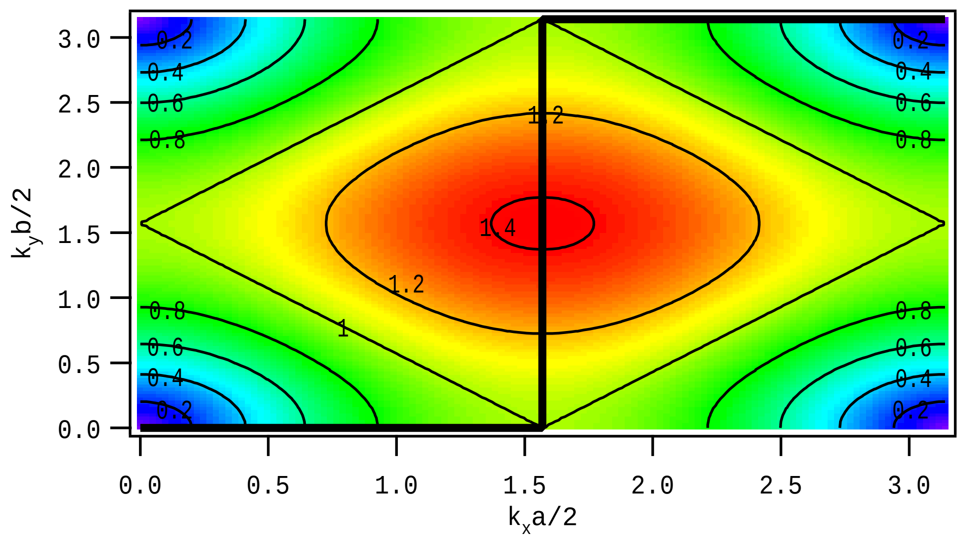
$$\omega^2 = \frac{4C}{M}\ (\sin^2 \frac{k_x a}{2} + \sin^2 \frac{k_y b}{2}),$$

där a och b är gitterparametrarna.

a) Rita dispersionen från punkten $(k_x, k_y) = (0,0)$ till $(\pi/a, 0)$, från $(\pi/a, 0)$ till $(\pi/a, 2\pi/b)$ och till slut från $(\pi/a, 2\pi/b)$ till $(2\pi/a, 2\pi/b)$. (2p)

2

Lösning:
En enkel graf med tre sektioner räcker som svar, men figuren nedan visar värden för ω i enheter $\sqrt{4C/M}$ i det 2-dimensionella k-rummet och vägen från $(0,0)$ till $(2\pi/a, 2\pi/b)$ som en tjock linje.



b) Hur stor är ljudhastigheten i riktningen $k_x = k_y$? (2p)

2

Lösning:
Ljud har våglängder mycket större än gitterkonstanten, så att $\sin ka \approx ka$. Med $k_x = k_y = k/\sqrt{2}$ har vi

$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{M}\ \left(\sin^2 \frac{ka}{2\sqrt{2}} + \sin^2 \frac{kb}{2\sqrt{2}}\right)} \approx \sqrt{\frac{4C}{M}\left(\frac{k^2a^2}{8} + \frac{k^2a^2}{8}\right)} = k\sqrt{\frac{C}{2M}(a^2+b^2)}.$$

Ljudhastigheten är $\omega/k = \sqrt{\frac{C}{2M}(a^2+b^2)}$.

Problem 3. Xie *et al* ger följande beräkning av fononerna i silver [Phys. Rev. B **59**, 965 (1999)].

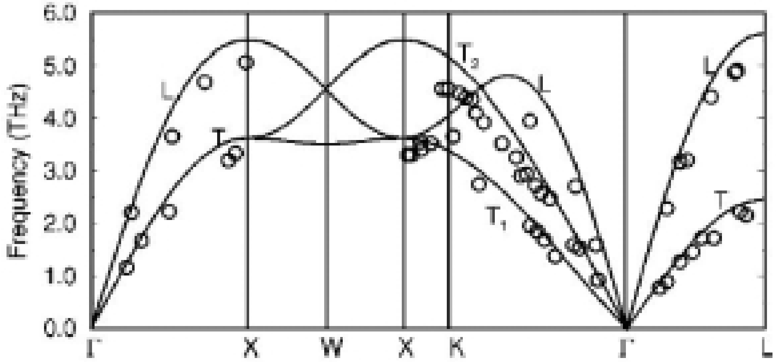


FIG. 2. Calculated phonon dispersion curves at the lattice parameter corresponding to static equilibrium. Experimental neutron-scattering data (Ref. 25) are denoted by circles. *T* and *L* represent transverse modes and longitudinal modes, respectively.

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

Lösning: $\theta_D = 225$ K motsvarar $f_D = 4{,}6$ THz. $\boxed{1}$

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

Lösning: RT $> \theta_D$, alltså $C_V \approx 3R \approx 25$ J/(mol K). $\boxed{1}$

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

Lösning: $\boxed{1}$
$k_L = \sqrt{3}\pi/4{,}09 = 1{,}33$ Å^{-1}, extrapolation av den longitudinella grenen ger $\omega = 2\pi \times 9.10^{12}$ s^{-1}, så att $v = \omega/k = 2\pi\ 9.10^{12}/1{,}33.10^{10} = 4$ km/s.

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

Lösning: Den ligger på Brillouinzonens hörn (W-punkten) där $k = \sqrt{5}\pi/a$. $\boxed{1}$

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

Lösning: $\boxed{1}$
Fononens amplitud är atomernas utvikelse från deras jämviktspositioner. Mellan atomerna har fononens amplitud ingen fysikalisk betydelse (i motsats till fallen med fotoner och elektroner).

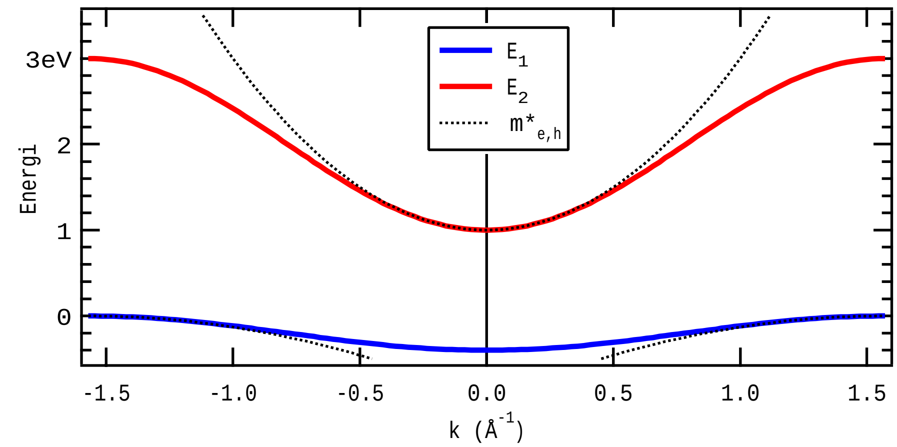
Problem 4. En viss en-dimensionell struktur med periodicitet $a = 2$ Å har en bandstruktur med följande dispersionsrelationer:

$$E_1(k) = -W\ (1 + \cos ka) \quad \text{och} \quad E_2(k) = E_g + D\ (1 - \cos ka)$$

där $D = 1$ eV, $W = 0{,}2$ eV och $E_g = 1$ eV.

a) Skissa bandstrukturen i den första Brillouinzonen. (1p)

Lösning: 1

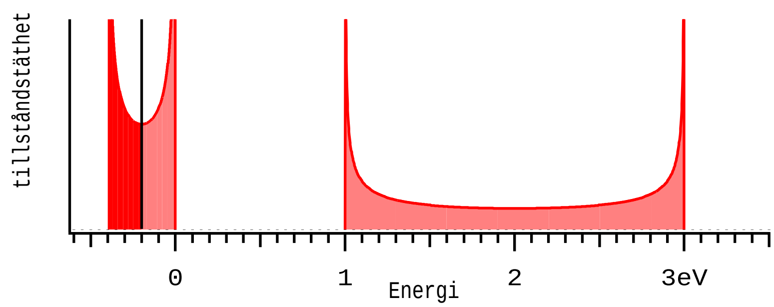


b) Om det finns två elektroner per enhetscell, har vi här vid $T = 0$ en isolator med direkt gap, med indirekt gap, eller är det en metall? Motivera. (1p)

Lösning: Isolator med indirekt gap; N k-värden håller $2N$ elektroner valensbandet. 1

c) Skissa tillståndstätheten som funktion av energin. Ange Fermi-nivåns läge om det finns en elektron per enhetscell. (1p)

Lösning: 1



d) Antag att det här är en isolator med $E_F \approx E_g/2$. Hur stor är effektiva massan av elektroner och hål i de här banden? (1p)

Lösning: 1

Ledningsbandet har dispersionsrelation $E_2(k) = E_g + D\ (1 - \cos ka)$. Eftersom för $k \ll \pi/a$ gäller att $\cos ka \approx 1 - \frac{k^2a^2}{2}$, har vi frånsett från en konstant term

$$E_2(k) \approx D\frac{k^2a^2}{2} = \frac{\hbar^2k^2}{2m^*},$$

så att

$$m^* = \frac{\hbar^2}{a^2D} = \frac{(1{,}05.10^{-34})^2{}_4}{(2.10^{-10})^2 \times 1{,}6.10^{-19}} = 1{,}735.10^{-30}\ \text{kg} = 1{,}9\ m_e.$$

Hålets massa är fem gånger större.

Problem 5. 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 $f_{\mathrm{Ba}} = 7f_{\mathrm{O}}$ och $f_{\mathrm{Ti}} = 3f_{\mathrm{O}}$.) (1p)

Lösning: 1

$S(100) = e^0 f_{\mathrm{Ba}} + e^{i\pi} f_{\mathrm{Ti}} + (e^0 + 2e^{i\pi} f_{\mathrm{O}}) = f_{\mathrm{Ba}} - f_{\mathrm{Ti}} - f_{\mathrm{O}} = 3f_{\mathrm{O}}$
$S(110) = e^0 f_{\mathrm{Ba}} + e^{i2\pi} f_{\mathrm{Ti}} + (e^{i2\pi} + 2e^{i\pi}) f_{\mathrm{O}} = f_{\mathrm{Ba}} + f_{\mathrm{Ti}} - f_{\mathrm{O}} = 9f_{\mathrm{O}}$
$S(111) = e^0 f_{\mathrm{Ba}} + e^{i3\pi} f_{\mathrm{Ti}} + 3e^{i2\pi} f_{\mathrm{O}} = f_{\mathrm{Ba}} - f_{\mathrm{Ti}} + 3f_{\mathrm{O}} = 7f_{\mathrm{O}}$
$S(200) = e^0 f_{\mathrm{Ba}} + e^{i2\pi} f_{\mathrm{Ti}} + (e^0 + 2e^{i2\pi}) f_{\mathrm{O}} = f_{\mathrm{Ba}} + f_{\mathrm{Ti}} + 3f_{\mathrm{O}} = 13f_{\mathrm{O}}$
Intensiteterna förhåller sig som 9:81:49:169.
