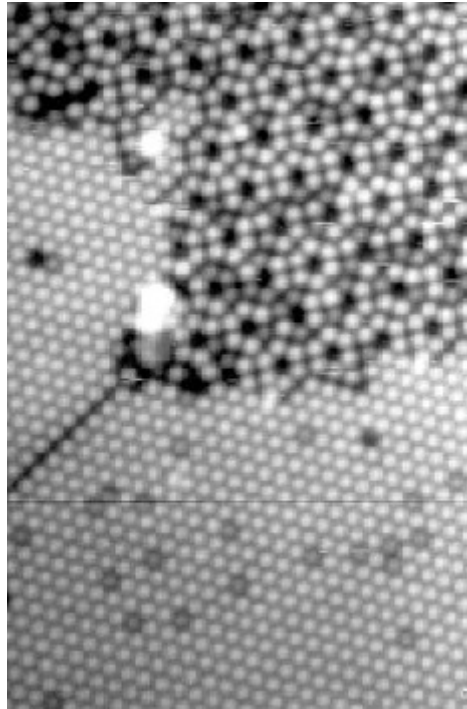


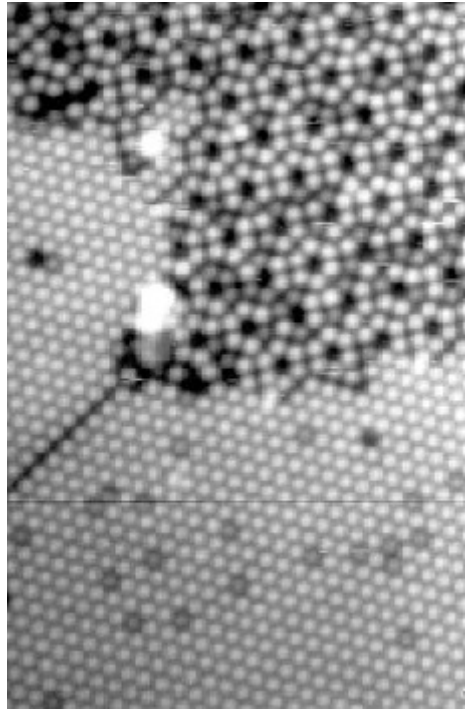
Lösta exempel och gamla tentor i Materialfysik för E, IF1602

M. Göthelid
Materialfysik, KTH-Electrum, Kista
(3/8 2010)



Lösa exempel och gamla tanter i Materialfysik för E, IF1602

M. Göthelid
Materialfysik, KTH-Electrum, Kista
(3/8 2010)



Innehållsförteckning (problemnummer inom parentes)

Fotoelektriska effekten (1-2)

Comptonspridning (3-5)

deBroglie och elektrondiffraktion (6)

Kvantmekanik (7-14)

Atomfysik med Bohrs modell, väteatomen, kvanttal, atomspektra (15-27)

Molekyler med kemisk bindning, vibrationer och rotationer (28-35)

Kärnfysik (36-46)

Kristallstruktur, reciproka gittret och röntgendiffraktion (47-59)

Frielektronmodellen (60-70)

Gittervibrationer, fononer och termiska egenskaper (71-76)

Elektroner i periodisk potential, nästan fria elektronmodellen (77-82)

Halvledare (83-90)

Exemplen i denna samling är till viss del egenkomponerade men till största delen hämtade från kursböckerna "Physics for Scientists and Engineers" av Serway & Beichner, "Solid State Physics" av J.R. Hook & H.E. Hall, "Introductory Solid State Physics" av H.P. Myers, "The Solid State" av H.M. Rosenberg, "100 lösta problem i Fasta Tillståndets Fysik" av Östen Rapp, samt tentatal funna på "webben" från olika kurser runt vårt land. Tal märkta med (T) är tal från tentor givna i den här kursen. Som avslutning har jag bifogat 8 gamla tentor.

Värdefulla insikter om min egen begränsade förmåga att presentera korrekta lösningar har under åren framförts av kursens övningsassistenter: Mats Blomqvist, Sören Kahl, Petrus Sundgren, Anneli Önsten, Birger Emmoth, Pål Palmgren. Tack för det.

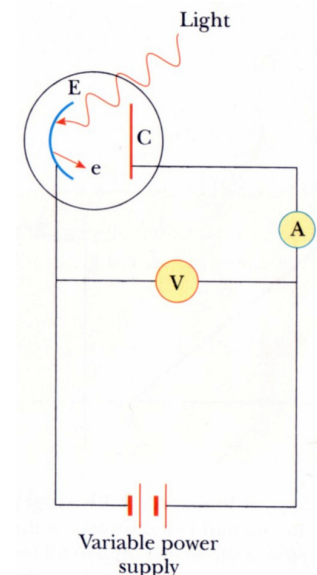
Mats Göthelid, 2010-08-03

Fotoelektriska effekten (1-2)

Figuren till höger visar uppställningen för ett fotoelektriskt experiment.

- 445 nm ljus faller mot en yta, stopp-potentialen är då 70 % av vad den är då ljuset har våglängden 410 nm. Bestäm med hjälp av tabellen vilket material ytan är gjord av.

Metall	Utträdesarbete (ϕ , eV)
Cs	1.90
K	2.23
Ag	4.73
W	4.58

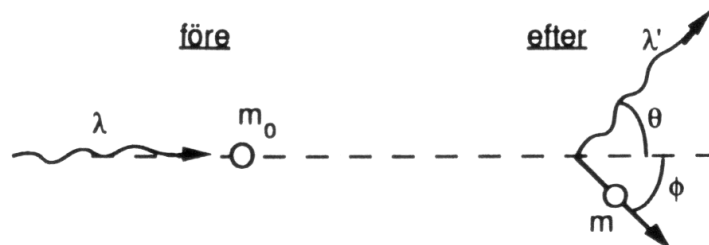


- Tabellen visar data från ett fotoelektriskt experiment. Bestäm Plancks konstant och ytans utträdesarbete.

λ (nm)	f (10^{14} Hz)	$K_{\max}$ (eV)
588	5.10	0.67
505	5.94	0.98
445	6.74	1.35
399	7.52	1.63

Comptonspridning (3-5)

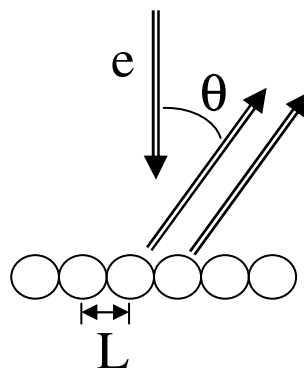
- Röntgenstrålar med energin 300 keV Comptonsprids mot en elektron i vila, och ändrar riktning med $\theta = 37^\circ$.
 - bestäm Comptonskiftet
 - beräkna fotonens energi efter kollisionen (hf')
 - beräkna elektronens kinetiska energi efter kollisionen (K_e)
- (T) En foton Comptonsprids enligt figuren mot en fri partikel med massan m_0 som före kollisionen befinner sig i vila. Det kan inträffa att vinklarna ϕ och θ får samma värde. Visa utgående från konserveringslagar för energi och rörelsemängd att detta värde måste vara mindre än 60° .



- (T) En 300 keV gammastråle Comptonsprids mot en fri elektron, i vila. Beräkna elektronens maximala kinetiska energi efter kollisionen

Elektrondiffraktion (6)

6. 54 eV elektroner infaller vinkelrätt mot en yta och sprids från en nickel-kristall enligt figur. Vid vinkeln $\theta = 50^\circ$ observeras det första intensitets-maximat. Bestäm atomavståndet L .



Kvantmekanik (7-14)

7. Man bestämmer en elektrons position i en atom med 0.050 nm precision. Vad är den minsta osäkerheten i elektronens fart?
8. En rubinlaser sänder ut ljus med våglängden 694.3 nm. Antag att man vill skapa ljus med samma våglängd genom en övergång mellan två nivåer, $n=1$ och $n=2$, i en endimensionell potentialgrop. Bestäm gropens bredd.
9. En partikel i en oändligt djup potentialgrop beskrivs av vågfunktionen:

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \quad 0 < x < L$$
$$\psi_2(x) = 0 \quad \text{för övrigt}$$

- a) Bestäm väntevärdet av x .
- b) Bestäm sannolikheten att partikeln är mellan $x = 0.49 L$ och $x = 0.51 L$.
- c) Bestäm sannolikheten att partikeln är mellan $x = 0.24 L$ och $x = 0.26 L$.
- d) Ge argument för att resultaten från a – c inte är motstridiga.
10. (T) Defekter i material kan fungera som absorptionscentra för ljus. En elektron är instängd i en defekt, här modellerad av en 2.90 eV djup endimensionell kvantgrop, med bredden 1 nm. Elektronen befinner sej i grundtillståndet (energin bestämmer ni från den oändligt djupa gropen)
- a) Vilken är den minsta energi som krävs för att fotoexcitera elektronen ur gropen?
- b) Ligger detta ljus i det synliga området?
- c) Vad får det för inverkan på materialets optiska egenskaper?
11. En elektron med energin $K = 5$ eV rör sig i positiv x -led mot en potentialbarriär ($U = 10$ eV) som är 0.2 nm bred.
- a) Vad är sannolikheten att elektronen tunnlar igenom?
- b) Vad är sannolikheten att elektronen reflekteras?

12. I ett tunneltmikroskop hålls en skarp metallspets mycket nära en yta, på avståndet L . Då en spänning, V_T , läggs på uppstår en tunnelström mellan prov och spets. Beräkna kvoten mellan tunnelströmmarna då $L = 0.500 \text{ nm}$ och $L = 0.515 \text{ nm}$. Låt $C = 10.0 \text{ nm}^{-1}$.
13. En elektron med energin $E = 2U$ träffar en potentialbarriär U . Beräkna andelen elektroner som reflekteras vid gränsskiktet.
14. (T) En elektron är fångad i en kristalldefekt som kan beskrivas av en en-dimensionell potentialgrop. Gropens bredd är 0.3 nm och dess djup är 40 eV . Elektronen kan i sitt grundtillstånd inte tunnla ut ur defekten, men om den exciteras till ett högre tillstånd är tunnlingssannolikheten inte längre noll.
- a) Hur många bundna tillstånd finns i brunnen? Beräkna elektronens energinivåer E_n utifrån antagandet att potentialgropen är oändligt djup.
- b) Vad är tunnlingssannolikheten för det översta bundna tillståndet om barriären är 0.3 nm bred?

Atomfysik: kvanttal, atomspektra, Bohrs atommodell (15-27)

15. En väteatom är i sitt första exciterade tillstånd, $n = 2$. Beräkna med hjälp av Bohrs atommodell:
- | | |
|------------------------------------|---------------------------------|
| a) orbitalens radie r_n | b) elektronens rörelsemängd |
| c) elektronens rörelsemängdsmoment | d) elektronens kinetiska energi |
| e) den totala energin | f) den potentiella energin |
16. Vilket n är associerat med 94.96 nm spektrallinjen i Lymans väteserie? Kan denna våglängd associeras med Paschen eller Brackett serierna?
17. En heliumatom joniseras till en heliumjon (He^+). Beräkna den längsta våglängden i jonens Lymanserie, Balmerserie och Paschen serie.
18. En litiumatom dubbeljoniseras till en Li-jon (Li^{2+}). Beräkna den längsta våglängden i jonens Lyman, Balmer och Paschen serier.
19. Två väteatomer kolliderar och har efter kollisionen $K = 0$. Strax efter kollisionen emitterar de varsin foton med våglängd 121.6 nm . Vilken hastighet hade elektronerna före kollisionen?
20. En foton, med $hf = 2.28 \text{ eV}$, absorberas av en väteatom.
- a) Vilket är det minsta n för vilket atomen joniseras?
- b) Vad är den fotoemitterade elektronens fart?

21. Grundtillståndet för en elektron i väte ges av $\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$
- Visa att ψ är normerad.
 - Vad är sannolikheten att hitta elektronen mellan $r_1 = a_0/2$ och $r_2 = 3a_0/2$?
22. En väteatom är i sitt femte exciterade tillstånd. Beräkna det maximala rörelsemängdsmomentet för elektronen efter emission av en 1090 nm foton.
23. I ett elektronspinnresonansexperiment (ESR) placeras ett prov med oparade elektroner i ett magnetfält B. Antag att det endast finns en elektron och två energitillstånd, för $m_s = \pm 1/2$. I ESR absorberas en foton om elektronen byter spinnriktning från upp till ned. Vilken fotonenergi krävs för att spinnflippa en elektron i $B = 0.35 \text{ T}$?
24. (T) En järnyta belyses med Al K_α röntgenstrålning och fotoelektroner emitteras från järnet.
- Beräkna Al K_α röntgenfotonernas energi och våglängd.
 - Beräkna den maximala kinetiska energin hos fotoelektronerna från järnprovet.
 - Beräkna den kinetiska energin för fotoemitterade Fe 2p elektroner vars bindningsenergi är 707 eV.
25. (T) Uppskatta energierna för Ni K_α och Ni L_α röntgenemissionslinjerna.
26. (T) Ett kopparprov bestrålas med fotoner med energin 1256.0 eV och elektroner fotoemitteras. Koppars innerskalsnivåer har bindningsenergier enligt diagram.
- | Elektronskal | bindningsenergi (eV) |
|--------------|----------------------|
| 3d | 5.0 |
| 3p | 76.0 |
| 3s | 123.0 |
| 2p | 943.0 |
| 2s | 1097.0 |
- Beräkna den kinetiska energin för Cu 2p elektroner.
 - Den fotoemitterade 2p-elektronen lämnar en vakans som fylls av en M-elektron ($n=3$) och röntgenfotoner emitteras. Vilka röntgenenergier observeras? (3p)
27. (T) Om elektronen i en väteatom ersätts av en taon, som har samma laddning som elektronen men är 3490 gånger tyngre, minskar atomens dimensioner så att taonen tillbringar en del av sin tid inne i kärnan (protonen). Beräkna sannolikheten att taonen i sitt grundtillstånd befinner sig inne i kärnan givet att protonens radie är 10^{-6} nm . Vågfunktionen för väteatomen i grundtillståndet är $\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$

Molekyler: kemisk bindning, rotationer och vibrationer (28-35)

28. KCl är en joniskt bunden molekyl. Elektronaffiniteten för Cl är 3.6 eV, dvs. man tjänar 3.6 eV på att jonisera Cl till Cl⁻. För att reaktionen $K + Cl \Rightarrow K^+ + Cl^-$ skall ske måste 0.7 eV tillföras. Vad är kaliums jonisationsenergi?
29. Räkna ut den potentiella energin för en jon i en NaCl-kristall. Bortse från det repulsiva bidraget.
30. (T) Växelverkansenergin mellan två atomer i en molekyl ges av uttrycket $U(r) = \frac{B}{r^{10}} - \frac{C}{r^2}$
Jämviktsavståndet är 3 Å och separationsenergin är 4 eV
(a) Räkna ut konstanterna B och C.
(b) För att separera atomerna fordras en kraft, F(r). Vid vilket avstånd, r, är denna kraft maximal?
31. a) Beräkna tröghetsmomentet I för en NaCl-molekyl runt dess masscentrum. Atomerna ligger 0.28 nm från varandra.
b) Beräkna den emitterade våglängden då molekylen går från ett tillstånd J=2 till J=1.
32. Kraftkonstanten för en vibrerande HCl-molekyl är k = 480 N/m. Vad är energiskillnaden mellan grundtillståndet och det första exciterade vibrationstillståndet?
33. (T) En syremolekyl binder svagt till en Pt-yta vid låg temperatur. När ytan värms dissocierar molekylen (dvs. bindningen mellan syreatomerna bryts) och de två syreatomerna binder istället starkt till platinaytans atomer. För att bestämma vid vilken temperatur detta sker studeras ytan med vibrationsspektroskopi, där man bestrålar ytan med lågenergetiska elektroner och studerar dessas energiförluster. Beräkna energiförlusterna när en O-O vibration (k = 1177 N/m) respektive en Pt - O vibration (k = 1350 N/m) exciteras.
34. (T) En syreatom binder till en PtSn-legering, där både Sn och Pt atomer finns på ytan. Man kan med vibrationsspektroskopi bestämma om syret binder till Pt eller Sn. Man bestrålar ytan med lågenergetiska elektroner och studerar dessas energiförluster. Beräkna energiförlusterna då en Sn-O vibration (k = 1450 N/m) respektive en Pt - O vibration (k = 1350 N/m) exciteras.
35. (T) En diatomär molekyl (X₂) med bindningsavståndet r = 1.12 Å vibrerar (v = 0) och roterar (J = 10). Den exciteras till en högre vibrationsnivå och ändrar samtidigt sitt rotationstillstånd genom att absorbera ljus av våglängderna λ₁ = 4.52 μm och λ₂ = 4.69 μm. Vilken är molekylen?

Kärnfysik (36-46)

36. Använd ekvation 44.3 för att beräkna bindningsenergin för ${}^{56}_{26}\text{Fe}$.
37. Ett radioaktivt prov har en aktivitet på 10.0 mCi. Efter 4 timmar är aktiviteten 8 mCi.
- Vad är sönderfallskonstanten och halveringstiden?
 - Hur många atomer fanns från början?
 - Vad är aktiviteten efter 30 timmar?
38. (T) Ett 5000 Curie starkt ${}^{60}\text{Co}$ preparat för medicinskt bruk är inneslutet i en blybehållare. ${}^{60}\text{Co}$ β^- -sönderfaller till en exciterad nivå i ${}^{60}\text{Ni}$, nedan betecknad ${}^{60}\text{Ni}^*$. ${}^{60}\text{Ni}^*$ deexciterar genom att sända ut två fotoner (γ) med energierna $\gamma_1=1.1732$ MeV och $\gamma_2=1.3325$ MeV.
- Den totala sönderfallsreaktionen kan då skrivas: $\text{Co}^{60} \rightarrow \text{Ni}^{60} + \gamma_1 + \gamma_2 + e^- + \bar{\nu}$
- Beräkna Q-värdet för sönderfallsprocessen.
 - Beräkna den största kinetiska energin, K_{max} , hos e^- partikeln.
 - Hur stor effekt upptas av blybehållaren om alla γ och e^- absorberas? Antag att medelenergin för e^- -partikeln är halva K_{max} .
39. (T) Den radioaktiva isotopen ${}^{13}\text{B}$ kan skapas genom reaktionen ${}^{13}\text{C}(n,p){}^{13}\text{B}$. Q-värdet för reaktionen är -12.65 MeV. De skapade ${}^{13}\text{B}$ kärnorna sönderfaller genom betasönderfall tillbaka till ${}^{13}\text{C}$ med en halveringstid på 17 ms.
- Ange sönderfallsreaktionen.
 - Vilken är den maximala energi som de emitterade betapartiklarna kan erhålla?
40. (T) För att åstadkomma fission i våra lättvattenreaktorer använder man infångning av termiska neutroner på ${}^{235}\text{U}$. Därvid tillföres den bildade kärnan en energi som är större än den aktiveringsenergi som behövs för att åstadkomma prompt inducerad fission. I naturen finns också den tunga isotopen ${}^{232}\text{Th}$ som dock ej kan fungera som bränsle i våra lättvattenreaktorer.
- Beräkna en undre gräns på aktiveringsenergin för ${}^{233}\text{Th}$. $M({}^{233}\text{Th}) = 233.041577$ u
 - Genom neutroninfångning på ${}^{232}\text{Th}$ kan isotopen ${}^{233}\text{U}$ skapas. Hur?
 - Beräkna om ${}^{233}\text{U}$ kan vara ett lämpligt kärnbränsle då du bl.a. vet att aktiveringsenergin för ${}^{234}\text{U}$ är 6.5 MeV?
41. (T) Nukliden ${}^{50}\text{V}$ finns i naturen (0.25% av V-förekomsten) men är radioaktiv med en halveringstid på ca 1.5×10^{17} år. Undersök tänkbar(a) sönderfallsväg(ar) för ${}^{50}\text{V}$ samt ange motsvarande Q-värde(n). Motivera! [$M({}^{46}\text{Sc}) = 45.955174$ u]
42. a) Hur mycket energi frigörs i reaktionen ${}_0^1n + {}_{92}^{235}\text{U} \rightarrow {}_{56}^{141}\text{Ba} + {}_{36}^{92}\text{Kr} + 3({}_0^1n)$?
- b) Hur stor del av systemets initialmassa har avgivits?

43. Gammastrålning absorberas av fast materia och strålningsintensiteten avtar med den tillryggalagda sträckan x i ett material enligt: $I = I_0 e^{-\mu x}$. μ är materialets absorptionskoefficient, som beror på gammastrålarnas energi. För bly (Pb) och 0.400 MeV γ är $\mu = 1.59 \text{ cm}^{-1}$.

- Bestäm halvtjockleken.
- Vilken tjocklek krävs för att strålintensiteten reduceras till en tiotusendedel?

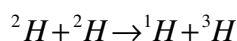
44. (T) Kärnan ^{76}Se kan skapas genom betasönderfall både från ^{76}As och ^{76}Br . I vilket av dessa sönderfall fås den högsta energin hos betapartikeln?

$$m(^{76}\text{Se}) = 75.919207 \text{ u}$$

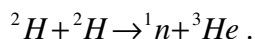
$$m(^{76}\text{As}) = 75.922393 \text{ u}$$

$$m(^{76}\text{Br}) = 75.924180 \text{ u}$$

45. (T) Våren 1989 orsakade två amerikanska vetenskapsmän stor uppståndelse då de rapporterade att de åstadkommit ”kall” fusion vid ett elektrolysexperiment. Man slår samman två deuteriumkärnor ^2H till antingen väte + tritium eller en neutron + ^3He enligt:



och



Antag att båda dessa vägar är lika sannolika. Hur många kärnreaktioner per sekund krävs för att utveckla 1 W?

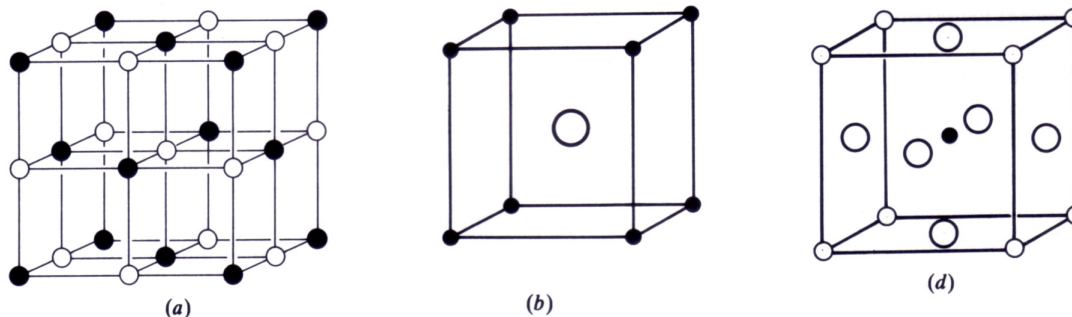
46. (T) I en behållare innesluts en viss mängd av ett radioaktivt preparat. Preparatet α -sönderfaller till en stabil isotop. Man mäter effektutvecklingen som efter 80 dygn sjunkit till 14 W. Under de 80 dygnen har 1.0 mg helium bildats, när man mäter efter mycket lång tid har det bildats 3.0 mg helium och effekten har sjunkit till nästan noll.

- Hur mycket energi avges vid varje sönderfall?
- Hur stor effekt utvecklades vid försökets början?

Kristallstruktur, reciproka gittret och röntgendiffraktion (47-59)

47. Antag att atomerna i ett gitter är hårda sfärer. Beräkna packningstätheten i sc, bcc, fcc. Vad är atomradierna i de olika strukturerna, givet att kubens sida är a ?

48. Bestäm gitter och bas för strukturerna a, b och d i figuren. a) NaCl, b) CsCl, och d) BaTiO₃.



49. En gitterstruktur beskrivs av basvektorer $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, och $\mathbf{c}$. Ett plan i strukturen skär axlarna vid $2\mathbf{a}$, $-\mathbf{b}$ och $\mathbf{c}$. Bestäm planets Millerindex.

50. Visa att det direkta bcc gittrets reciproka gitter har fcc-form.

51. (T) Vid ett Debye-Scherrer experiment (våglängd 1.54 Å) observerades reflexer i följande vinklar; 28.78°, 33.77°, 51.83°, 67.21° och 74.35°.

- Bestäm kristallstruktur och gitterparameter.
- Beräkna den atomära packningstätheten för de plan som ger upphov till den första av de ovan angivna vinklarna.

52. (T) Vid ett Debye-Scherrer experiment (våglängd 1.50 Å) observerades reflexer i följande vinklar; 21.68°, 31.51°, 39.80°, 47.66°, 55.73°, 64.86°, 77.90°.

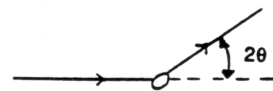
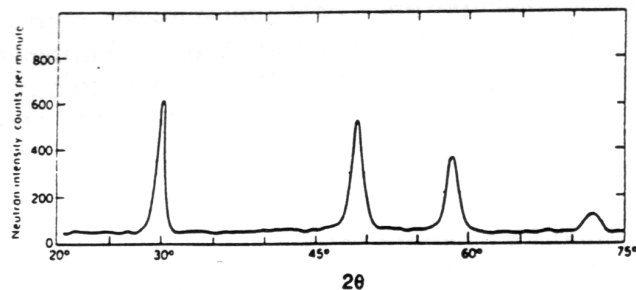
- Bestäm kristallstruktur och gitterparameter.
- Beräkna den atomära packningstätheten för de plan som ger upphov till den första av de ovan angivna vinklarna.

53. En alkalihlid studeras i ett Debye-Scherrer experiment (Cu K α), och följande Braggvinklar uppmäts: 10.83°, 15.39°, 18.99°, 22.07° och 24.84°.

Beräkna:

- gitterparametern.
- Millerindex för de plan som ger upphov till de observerade diffraktionsvinklarna.
- Millerindex för de plan som ger upphov till den största tillåtna Braggvinkeln.
- Identifiera alkalihaliden.

54. Vid 300 K har Al fcc struktur med $a = 3.90 \text{ \AA}$. Dess linjära termiska expansionskoefficient är 0.000025 K^{-1} . Med hur stor vinkel ändras (111) reflexen i ett Debye-Scherrer experiment om kristallen värms från 300 K till 600 K? $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$.
55. (T) Beräkna de två minsta spridningsvinklarna för CsCl och CsI i ett röntgendiffraktionsexperiment med Cu K_{α} strålning ($\lambda = 1.54 \text{ \AA}$). CsCl och CsI är jonkristaller med enkel kubiskt gitter med basen Cl^- jon (eller I^- jon) i (0,0,0) och Cs^+ jon i (1/2, 1/2, 1/2). För CsCl är gitterkonstanten $4.12 \text{ \AA}$ och för CsI $4.57 \text{ \AA}$. Med spridningsvinkeln menas vinkeln mellan den inkommande och den utgående röntgenstrålen (dvs. dubbla Braggvinkeln).
56. Figuren visar intensiteten som funktion av spridningsvinkeln (dubbla Braggvinkeln) för neutroner diffrakterade från ett diamantprov i pulverform (gitterkonstant $3.57 \text{ \AA}$). De minsta spridningsvinklarna är 30° , 49° , 58° och 72° .



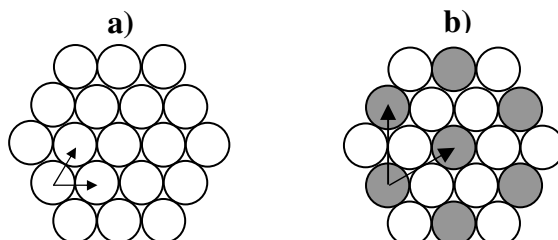
- a) Vid vilken spridningsvinkel kan nästa reflex förväntas komma?
- b) Med hur mycket (i procent) kan man minska neutronernas hastighet om det fortfarande skall vara möjligt att observera 4 Braggreflexer? Antag att man kan mäta spridningsvinklar upp till 180° .
- c) Om man skulle göra samma experiment med fotoner, vilken energi skulle dessa ha för att ge samma spridningsvinklar som i figuren ovan?
57. Räkna ut strukturfaktorn för fcc.
58. Man vill bestämma andelen Ge i en $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -legering med röntgendiffraktion med Cu K_{α} strålning ($\lambda = 1.540 \text{ \AA}$). Antag att gitterparametern varierar linjärt med koncentrationen, och att kristallstrukturen är densamma för legeringen som för de rena elementen. Följande Braggvinklar (i grader) uppmättes: 14.125 , 23.485 , 27.859 och 34.304 . Hur stor andel Ge finns i legeringen? Gitterparametrarna är $5.43 \text{ \AA}$ för Si och $5.66 \text{ \AA}$ för Ge.

Tillåtna reflexer för kubiska strukturer ges i figuren nedan.

$h^2 + l^2 + k^2$	0	1	2	3	4	5	6	•	8	9	10	11	12	13	14	•	16	17	18	19	20	21	22	•	24
sc																									
bcc																									
fcc																									
diamond cubic																									

59. (T) Platina är en mycket viktig metall inom katalys. Man kan modifiera katalysatorns egenskaper genom att tillsätta små mängder av andra metaller. På så vis kan man ev. styra en reaktion mot önskad produkt. Utgående från en Pt(111) yta kan man skapa så kallade ytlegeringar där man byter ut t.ex. en tredjedel av ytans platinaatomer mot tenn, se figur. Ytans periodicitet ändras då och de basvektorer som beskriver ytan ändras också. För att kontrollera ytans periodicitet och symmetri använder man ofta lågenergielektrondiffraktion (LEED).

Här skall ni beräkna LEED-mönstret från de två ytorna med givna basvektorer enligt figur. Vektorernas längd är $2.77 \text{ \AA}$ i a). Ledtråd: LEED-mönstret är det samma som det tvådimensionella reciproka mönstret för ytan.



Frielektronmodellen (60-70)

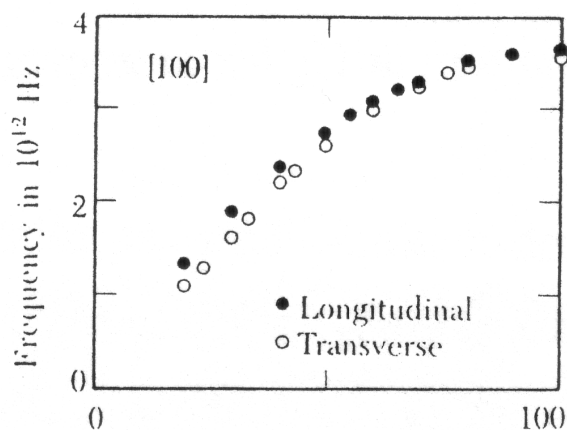
60. Beräkna Fermienergi och Fermihastighet för Cu. Utgå från $g(\epsilon)$ för att beräkna det genomsnittliga energiavståndet mellan tillstånd nära Ferminivån i $1 \text{ cm}^3 \text{ Cu}$.
61. Uppskatta andelen elektroner som deltar i elektrisk ledning i en metall.
62. Hallkoefficienten för flytande Al är $-3.9 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3/\text{C}$. Vid 77 K är relaxationstiden $6.5 \cdot 10^{-14} \text{ s}$. Uppskatta elektrisk och termisk ledningsförmåga för Al vid 77 K .
63. (T) Beräkna tillståndstätheten för en endimensionell frielektronmetall.

64. (T) En tvåvärd frielektronliknande metall med Debyetemperaturen 150 K har bcc-struktur med gitterparameter 4.0 Å.
- (a) Beräkna Ferminivån i materialet.
 - (b) Beräkna elektronernas bidrag till värmekapaciteten vid 300 K för en mol av materialet.
65. (T) För aluminium som är en frielektronliknande metall med kristallstrukturen fcc och gitterkonstant 4.04 Å, gäller att utträdesarbetet är 4.2 eV.
- a) Beräkna avståndet mellan centrum på två närmsta grannatomer.
 - b) Beräkna ett numeriskt värde på Fermienergin, utgående från frielektronmodellen, där varje atom bidrar med 3 elektroner till elektrongasen.
 - c) Vilken är den maximala våglängd elektromagnetisk strålning kan ha för att fotoemittera elektroner från Al?
66. (T) Litium kristalliserar i bcc-struktur med närmsta granneavståndet 3.02 Å.
- (a) Beräkna Fermienergin och Fermivågektorn.
 - (b) Beräkna, utgående från frielektronmodellen, valenselektronernas medelenergi.
67. (T) En koppartråd är 24 cm lång och har en tvärsnittsarea som är 1 mm². Vid 0.5 A ström genom tråden uppmättes en 2.3 mV spänning mellan ändarna.
- a) Beräkna relaxationstiden τ .
 - b) Beräkna drifthastigheten v .
 - c) Beräkna den medelfria väglängden λ .
68. a) Beräkna elektronernas fria medelväglängd i koppar vid rumstemperatur i frielektronmodellen. Antag att varje Cu-atom ger en elektron till ledningsbandet. Cu kristalliserar i fcc med gitterparameter 3.61 Å. Givet $\rho = 1.70 \cdot 10^{-8} \Omega\text{m}$, $\epsilon_F = 7.04 \text{ eV}$.
- b) Vid tillsatts av 1% As ökar resistiviteten till $7 \cdot 10^{-8} \Omega\text{m}$. Vad är den genomsnittligt tillryggalagda sträckan mellan kollisioner mot föroreningsatomer?
69. Beräkna elektronernas fria medelväglängd i beryllium (Be) om resistiviteten vid rumstemperatur är $4.0 \cdot 10^{-8} \Omega\text{m}$, atomtätheten är $1.21 \cdot 10^{29} \text{ m}^{-3}$ och valenstalet (fria elektroner per atom) är 2.
70. a) Hur stort elektriskt fält behövs för att förskjuta Fermiytan δk i koppar, som motsvarar 1% av Fermivågektorn. Använd relaxationstiden $\tau = 2 \cdot 10^{-14} \text{ s}$, $E_F = 7.04 \text{ eV}$, $\sigma = 5.9 \cdot 10^7 (\Omega\text{m})^{-1}$.
- b) Hur stor är strömtätheten vid detta fält?

Gittervibrationer, fononer och termiska egenskaper (71-76)

71. Beräkna en longitudinell fonons gruppshastighet i $[100]$ riktningen i en enkelt kubisk kristall med gitterparametern $5.0 \text{ \AA}$ med hjälp av dispersionskurvan nedan.

- a) i en punkt ungefär mitt på den linjära delen
- b) vid den högsta punkten på kurvan



Dispersionsrelationer $\omega(k)$ för akustiska fononer, uppmätta längs $[100]$ riktningen i en kristall. Högra ändan av k -axeln anger Brillouinzongränsen.

72. a) Beräkna maximala energin för en fonon i natrium, beräkna även dess vågvektor.
b) Beräkna vågvektor och energi för en elektron vid Fermiytan i natrium.
c) Antag att elektronen och fononen ovan kolliderar. Kan elektronens energi ändras kraftigt? Kan elektronens vågvektor ändras väsentligt?

Antag att ljudhastigheten är 1000 m/s , gitterparametern är $4.23 \text{ \AA}$ och strukturen är bcc.

73. (T) I ett experiment erhöles följande värden på den specifika värmekapaciteten C .

T (K)	C (J /kmol K)
0.5	1.38
1.0	5.00
1.5	13.1
2.0	28
2.5	52
3.0	87
3.5	136

- a) Beräkna Debyetemperaturen (θ_D).
- b) Beräkna specifika värmekapaciteten vid 200 K .

74. (T) Vid vilken temperatur har en mol monovalent koppar och en mol trivalent aluminium samma värmekapacitet ? De tabellerade siffervärden kan möjligen vara till hjälp.

Al	$E_F = 11.58 \text{ eV}$	$N = 3N_A$	$\theta_D = 428 \text{ K}$
Cu	$E_F = 7.00 \text{ eV}$	$N = N_A$	$\theta_D = 345 \text{ K}$

75. Vid ett experiment uppmättes värden på värmekapaciteten enligt lilla tabellen.

Identifiera materialet och bestäm dess Debytemperatur.

T(K)	C (mJ/mol K)
0.5	1.775
1.0	5.200
2.0	23.600
2.5	41.875
3.0	68.400
4.0	152.800
5.0	290.00

$\gamma(\text{mJ/mol K}^2)$ för några olika metaller			
Na	1.38	Ti	3.35
K	2.08	V	9.26
Mg	1.3	Cr	1.4
Al	1.35	Mn	9.2
Pb	2.98	Fe	4.98
Cu	0.7	Co	4.73
Ag	0.65	Ni	7.0
Au	0.73	Pt	7.0

76. (T) Vilken värmekapacitet (i J/mol·K) har diamant och Cu vid $T = 4 \text{ K}$, $T = 30 \text{ K}$ och $T = 400 \text{ K}$? Debytemperaturen för Cu är 343 K och för diamant är den 2230 K.

Elektroner i periodisk potential, nästan fria elektronmodellen (77-82)

77. En endimensionell kristall har gitterparametern a . Elektronenergin $\epsilon(k)$ ges av uttrycket:

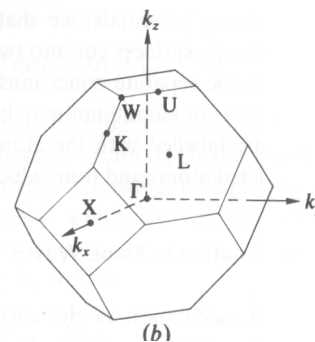
$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right)$$

a) Skissa bandet i första Brillouinzonen. Verifiera att elektronhastigheten $= 0$ vid bandets botten och vid zongränsen.

b) Bestäm effektiva massan, m^* vid botten och toppen av bandet.

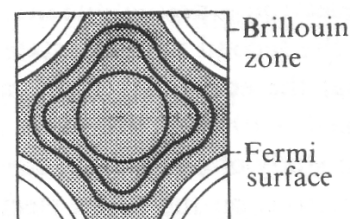
78. Beräkna tillståndstätheten $g(\epsilon)$ för en linjär atomkedja med dispersionsrelationen $\epsilon(k) = A - B \cos ka$.

79. Vilket är det minsta energigapet vid Brillouinzongränsen för att en divalent fcc-metall ska ha den första Brillouinzonen helt fylld? Ge numeriska värden för Ca med gitter-parametern 5.58 Å. Den första Brillouinzonen visas i figur =>



80. En legering av X och Y har sammansättningen XY och är linjär. Den förekommer i två former, dels en oordnad struktur där varje gitterplats upptas av X eller Y med samma sannolikhet, och i en ordnad form där varannan atom är X och varannan är Y. Om den oordnade formen har en dispersionsrelation enligt $\varepsilon(k) = A - B \cos ka$, hur ser den ordnade legerings dispersionsrelation ut?
81. En hypotetisk monovalent metall har enkel kubisk struktur med gitterparametern a. Använd frielekronteorin för att beräkna Fermisfärens radie. Beräkna det kortaste avståndet mellan Fermisfären och Brillouinzonen. Får hela sfären plats i första Brillouinzonen?

82. Fermiytan för en tvådimensionell metall snuddar Brillouinzonen som i figuren. Hur förändras elektronfördelningen i ett pålagt elektriskt fält i x-led. Hur påverkar Fermiytans form dem elektriska ledningsförmågan?



Halvledare (83-98)

83. (T) Betrakta egenledande kisel vid rumstemperatur ($T=300$ K). Elektronmobiliteten är $0.13 \text{ m}^2/\text{Vs}$ och ledningsförmågan är $4.1 \cdot 10^{-4} (\Omega\text{m})^{-1}$. Koncentrationen av elektroner i ledningsbandet är $1.4 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$.
- Beräkna hålens mobilitet
 - Materialet dopas så att $N_D = 7.0 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$. Vad blir konduktiviteten om alla donatorer antas joniserade?
84. (T) Vid 300 K har ett högre Ge prov resistiviteten $3.9 \Omega\text{m}$. Beräkna bandgapet, då elektronernas mobilitet är $0.38 \text{ m}^2/\text{Vs}$ och hålens mobilitet är $0.18 \text{ m}^2/\text{Vs}$.
85. Det är känt att halvledare fungerar olika bra vid olika temperaturer. Jämför den elektriska ledningsförmågan för en n-dopad kiselkristall en varm sommardag då $T=300$ K med en kall vinterdag då $T = 250$ K. $N_D = 2 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$. $\epsilon = 11.7$ för kisel.
- Beräkna jonisationsenergin för en dopatom i kisel.
 - Beräkna förhållandet mellan konduktiviteten vid 250 K och vid 300 K. Antag att endast dopatomernas elektroner bidrar och att $\mu = E_G - E_D$.

86. (T) Vid rumstemperatur (300 K) är elektronmobiliteten i Ge $0.39 \text{ m}^2/\text{Vs}$ och hålmobiliteten $0.19 \text{ m}^2/\text{Vs}$. Den intrinsiska laddningsbärarkoncentrationen $n_i = 2.0 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$. Materialet skall dopas så att konduktiviteten blir så liten som möjligt. Du kan välja mellan fosfor och aluminium. Vilket skall du välja, och vilket koncentration skall du dopa med?
87. (T) Bestäm Fermi-nivå och konduktivitet i odopat GaAs vid 300 K.
88. (T) Ett kiselprov är dopat så att laddningsbärarkoncentrationen från de joniserade dopatomerna är mycket större än det intrinsiska bidraget, $n_i = 1.4 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$.
- Bestäm laddningsbärartyp, laddningsbärarkoncentration samt resistivitet om Hallkoefficienten är $-8.7 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{C}$.
 - Vad är temperaturen om vi vet att dopkoncentrationen är $1.8 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$ och dopnivån ligger 50 meV från bandkanten.
89. (T) III-V halvledare används inom optoelektroniken. Dessa kristalliserar i så kallad zinkblendestruktur, som är ett fcc-gitter med två atomer i basen. Genom att blanda t.ex. GaAs och InAs kan bandgap och gitterparameter varieras beroende på sammansättningen. Ni har i uppgift att konstruera en halvledarlaser av $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$, sådan att den emitterar ljus med våglängden $1.24 \mu\text{m}$.
- Antag att bandgapet och gitterparametern varierar linjärt med x .
- Bestäm x så att önskat bandgap erhålles.
 - Vid vilken Braggvinkel observeras den första reflexen från ditt material i ett röntgendiffraktionsexperiment med röntgenvåglängden 1.54 Å ? Tillåtna reflexer är $h^2 + k^2 + l^2 = 3, 4, 8 \dots$
90. En halvledare med direkt bandgap belyses med ljus med fotonenergi $hf > \epsilon_G$, så att elektron-hålpar skapas. Bestäm uttryck för elektronens och hålets kinetiska energier och vågvektorer. Beräkna numeriska värden för GaAs med bandgap 1.4 eV och fotonenergi 1.6 eV .
91. Ett Si-prov är renat tills det bara har 10^{18} donatorer per m^3 . Under vilken temperatur är provet extrinsiskt? $E_G = 1.1 \text{ eV}$, $n_i(300\text{K}) = 2 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$. (H&H 5.2)
92. InSb har en dielektricitetskonstant $\epsilon_r = 17$ och en effektiv elektronmassa $m_e^* = 0.015 m_e$. Beräkna: (H&H 5.3)
- En donators jonsationsenergi
 - Banradien på grundtillståndet (för dopatomen)
 - Vid vilken donatorkoncentration börjar dopatomernas bantadier att överlappa?

93. Bestäm jonisationsenergin för As-dopatomer i Ge med hjälp av figuren (H&H 5.4)

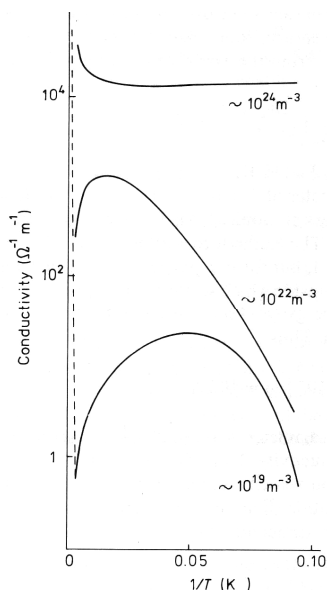


Fig. 5.9 Temperature dependence of the conductivity of three samples of germanium containing arsenic donor impurities with the approximate concentrations indicated. (Reproduced with permission from P. P. Debye and E. M. Conwell, *Phys. Rev.* **93**, 693 (1954))

94. Beräkna Hall-koefficienten för Na och för intrinsiskt InSb vid 300 K. Na har bcc struktur med $a = 4.28 \text{ \AA}$. InSb har $E_G = 0.15 \text{ eV}$, $m_e^* = 0.014 m_e$, $m_h^* = 0.18 m_e$.

Uppskatta Hallspänningen för ett prov med bredden 5mm, tjockleken 1 mm när en 100mA ström passerar i ett magnetfält på 0.1T. Antag $N_A = N_D$. (H&H 5.5)

95. Du studerar pn-övergångar av Si och Ge. Antag att potentialen i utarmningsområdena

bestäms av ekv. 6.7 och utarmningsområdets bredd ges av ekv. 6.9. Beräkna $\frac{x}{w_n + w_p}$, där x

är avståndet till den punkt från utarmningsområdets kant där majoritetsladdningsbärarkoncentrationerna sjunkit till 50%. (H&H 6.1)

96. Kapacitansen hos en pn-övergång används tillsammans med en 100 μH induktans för att skapa en resonanskrets. Beräkna ändringen i resonansfrekvens när spänning över pn-övergången varieras från -1V till -10V. Låt $N_A = N_D = 10^{22} \text{ m}^{-3}$, $T = 300\text{K}$, $\epsilon_r = 12$, $n_i = 2 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$ och övergångens area = 10^{-6} m^2 . (H&H 6.2)

97. Beräkna $\phi(x)$ och utarmningsområdets tjocklek för en "graded" pn-övergång.

Dopkoncentrationen varierar enligt $N_D - N_A = kx$ i hela utarmningsområdet. (H&H 6.3)

98. 5 μA flyter genom en backspänd (0.15 V) pn-övergång vid 300 K. Beräkna strömmen när samma övergång framspänns med samma spänning. (H&H 6.4)

Några halvledarparamterar

	$E_G \text{ (eV)}$	$a \text{ (\AA)}$	$\mu_e \text{ (m}^2/\text{Vs)}$	$\mu_h \text{ (m}^2/\text{Vs)}$	$m_e^* (m_e)$	$m_h^* (m_e)$	ϵ
Si	1.12	5.43	0.13	0.048	0.43	0.54	11.7
Ge	0.67	5.66	0.38	0.18	0.12	0.32	16
GaAs	1.42	5.65	0.85	0.045	0.07	0.68	13.2
InAs	0.36	6.058	30	0.045	0.026	0.4	14.6

Lösningar

Fotoelektriska effekten (1-2)

- 1) En foton absorberas av ytan och en elektron fotoemitteras med den kinetiska energin K

enligt: $K = hf - \phi = \frac{hc}{\lambda} - \phi$.

Elektronen bromsas av kollektorns potential ΔV . Elektronens energi minskas då med $e\Delta V$. Den potential som helt stoppar flödet av elektroner kallas stopp potential, ΔV_s .

$$e\Delta V_s = K = \frac{hc}{\lambda} - \phi \Rightarrow \phi = \frac{hc}{\lambda} - e\Delta V_s$$

(1) Med $\lambda = 445 \text{ nm} \Rightarrow hc/\lambda = 2.79 \text{ eV}$. Stopp potential = $0.70 \Delta V_s$

(2) Med $\lambda = 410 \text{ nm} \Rightarrow hc/\lambda = 3.03 \text{ eV}$. Stopp potential = ΔV_s

$$(1) = (2) \Rightarrow 2.79 - 0.70e\Delta V_s = 3.03 - \Delta V_s \Rightarrow \Delta V_s = 0.80V$$

$$\phi = 3.03 - 0.80 = 2.23 \text{ eV}$$

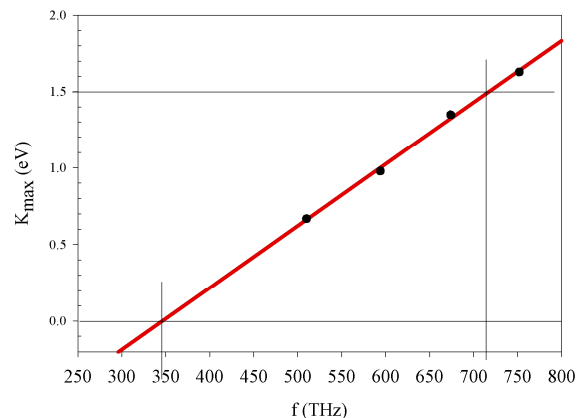
Svar: Metallen är kalium.

- 2) Vi vet att $K_{\max} = hf - \phi$. Plotta därför $K_{\max}$ mot f. Lutningen ger så h. Linjen skär f-axeln där $K_{\max} = 0$ och $hf = \phi$.

$$h = \frac{\Delta K_{\max}}{\Delta f} = \frac{1.5 \text{ eV}}{368 \text{ THz}} =$$

$$4.076 \cdot 10^{-15} \text{ eVs} = 6.558 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$K_{\max} = 0 \text{ då } f = 345.3 \text{ THz} \Rightarrow \phi = 1.41 \text{ eV}.$$



Comptonspridning (3-5)

- 3) Vi utgår från:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

$$\frac{h}{m_e c} = 0.00243 \text{ nm}$$

a) $\Delta\lambda = 489 \text{ fm}$

b) $hf' = \frac{hc}{\lambda'} = hc \left(\frac{1}{\lambda + \Delta\lambda} \right) = \frac{hc}{4.63 \cdot 10^{-12} \text{ m}} = 268.3 \text{ keV}$

c) Energin bevaras i kollisionen, dvs., $hf = hf' + K_e \Rightarrow K_e = hf - hf' = 31.7 \text{ keV}$

- 4) Energins och rörelsemängdens bevarande ger ekvationerna.

$$p_x \quad \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} \cos \theta + \gamma m_0 v \cos \phi \quad p_y \quad 0 = \frac{h}{\lambda'} \sin \theta - \gamma m_0 v \sin \phi$$

$\theta = \phi$ ger ekvationen i y-led: $0 = \sin \theta (\frac{h}{\lambda'} - \gamma m_0 v)$ som har två lösningar:

$$1) \theta = 0 \quad \text{och} \quad 2) \frac{h}{\lambda'} = \gamma m_0 v$$

1) ger en vinkel $< 60^\circ$. Inför därför lösning 2) i ekvationen för p_x , vi får då:

$$\frac{h}{\lambda} = \cos \theta (\frac{h}{\lambda'} + \gamma m_0 v) = \cos \theta \frac{2h}{\lambda'}$$

Vilket tillsammans med Comptonskiftets ekvation $\lambda' - \lambda = \lambda_c (1 - \cos \theta)$ ger

$$\cos \theta = \frac{\lambda + \lambda_c}{2\lambda + \lambda_c}.$$

För små $\lambda \ll \lambda_c$ är lösningen $\theta \sim 0$, för stora $\lambda \gg \lambda_c$ är högerledet ~ 0.5 vilket ger $\theta = 60^\circ$, dvs. det finns inga lösningar för $\theta > 60^\circ$, vsv.

- 5) Fotonen kolliderar med en elektron. Energin skall bevaras, dvs. fotonens energiförlust är densamma som elektronens energivinst. Enligt Compton ändras fotonens våglängd

$$\lambda' - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) \text{ där } \lambda' \text{ är våglängden efter kollision och } \lambda \text{ är före. Elektronen får}$$

maximal kinetisk energi när fotonens energiförluster är maximala dvs. spridningsvinkel = $180^\circ \Rightarrow E' \text{ (foton)} = 138 \text{ keV}$ och $K_{\max} = 162 \text{ keV}$.

Elektrondiffraktion (6)

- 6) Elektronvågen sprids mot ytan vars atomer fungerar som källor sfäriska vågor. Dessa interfererar och konstruktiv interferens fås då våglängdsskillnaden $\delta = L \sin \theta = n\lambda$. Vi söker första maximum, dvs. $n = 1$. Elektronernas de Broglie-våglängd

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = 0.167 \text{ nm} \Rightarrow L = \frac{\lambda}{\sin \theta} = 2.18 \text{ Å} = 0.218 \text{ nm}$$

Kvantmekanik (7-14)

- 7) En av Heisenbergs osäkerhetsrelationer säger $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}$. Här är $\Delta x = 0.050 \text{ nm}$. Δp_x

$$= m \Delta v_x \Rightarrow \Delta v_x \geq \frac{h}{4\pi m \Delta x} = 1158 \text{ km/s}$$

- 8) Energinivåerna för en elektron i en oändlig låda ges av $E_n = (\frac{h^2}{8mL^2})n^2$. Ljus sänds ut då elektronen faller från E_2 till E_1 . Ljusets energi $hf = hc/\lambda = E_2 - E_1$.

$$E_2 - E_1 = (\frac{h^2}{8mL^2})(4-1) \Rightarrow L^2 = \frac{3h^2\lambda}{8mhc} = \frac{3h\lambda}{8mc} \Rightarrow L = 0.795nm$$

- 9) a) Väntevärdet av x ges av

$$\langle x \rangle = \int_0^L \psi_2(x)x\psi_2(x)dx = \frac{2}{L} \int_0^L x \sin^2(\frac{2\pi x}{L})dx = \{14.348iSchaumMathHandbook\} =$$

$$\frac{2}{L} \left[\frac{x^2}{4} - \frac{x \sin(\frac{4\pi x}{L})}{8\pi/L} - \frac{\cos(\frac{4\pi x}{L})}{32\pi^2/L^2} \right] = \frac{2}{L} \left[\frac{L^2}{4} - \frac{L^2 \sin 4\pi}{8\pi} - \frac{L^2 \cos 4\pi}{32\pi^2} + \frac{L^2}{32\pi^2} \right] = \frac{L}{2}$$

- b) Sannolikheten att finna partikeln mellan två punkter ges av integralen

$$P(x) = \int_{0.49L}^{0.51L} \psi_2(x)\psi_2(x)dx = \frac{2}{L} \int_{0.49L}^{0.51L} \sin^2(\frac{2\pi x}{L})dx = \{Schaum : 14.437\} =$$

$$\frac{2}{L} \left[\frac{x}{2} - \frac{\sin(\frac{4\pi x}{L})}{8\pi/L} \right]_{0.49L}^{0.51L} = \frac{2}{L} \left(\frac{(0.51-0.49)L}{2} - \frac{\sin(4\pi 0.51) - \sin(4\pi 0.49)}{8\pi/L} \right) =$$

$$0.02 - 0.199.. \approx 5 * 10^{-5}$$

- c) som i b)

$$P(x) = \int_{0.24L}^{0.26L} \psi_2(x)\psi_2(x)dx = \frac{2}{L} \int_{0.24L}^{0.26L} \sin^2(\frac{2\pi x}{L})dx = \frac{2}{L} \left[\frac{x}{2} - \frac{\sin(\frac{4\pi x}{L})}{8\pi/L} \right]_{0.24L}^{0.26L} = 0.04$$

- 10) Elektronen lyfts från grundnivån i kvantgropen ut ur gropen, upp till 2.90 eV ovanför gropens botten. Den minsta energi som krävs då är skillnaden mellan grundnivån och 2.90 eV. Räkna ut energinivån i brunnen enligt sid 1332 i Serway. ($E_1 = 0.376$ eV).

a) Fotonenergin blir då $2.90 - 0.38 = 2.52$ eV

b) $\lambda = hc/E = 492$ nm. Synligt ligger mellan 400 och 700 nm, dvs. 492 nm är synligt.

c) Materialet absorberar ljus med kortare våglängd än 492 nm.

11) Den infallande vågen transmittas och reflekteras, $T + R = 1$. För små T gäller enligt ekv.

41.20 & 41.21 att: $T \approx e^{-2CL}$ där $C = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$. Här blir $2CL = 4.58$ vilket ger $T = 0.0103$ och $R = 0.9897$

12) Tunnelströmmen $I_T \sim T$.

$$T \approx e^{-2CL} \Rightarrow T_1(0.500) \approx e^{-2 \cdot 10 \cdot 0.5} = e^{-10} \text{ och } T_2(0.515) \approx e^{-2 \cdot 10 \cdot 0.515} = e^{-10.3}.$$

$T_1/T_2 = 1.35$. Dvs. en förändring av avståndet mellan yta och spets med 15 pm ger en förändring i strömmen på 35%.

13) Från föreläsning 3 vet vi (alternativt visar er övningsassistent hur det ligger till) att reflektansen för en elektron med energi E som träffar en potentialbarriär U ges av

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \text{ där } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ och } k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar} \text{ är vågtalen i de olika områdena.}$$

$$\text{Med } E = 2U \text{ fås } R = \frac{2m/\hbar^2 (\sqrt{2U} - \sqrt{U})^2}{2m/\hbar^2 (\sqrt{2U} + \sqrt{U})^2} = \frac{(\sqrt{2} - 1)^2}{(\sqrt{2} + 1)^2} = 0.0294$$

14) a) Energinivåerna i en oändligt djup grop ges av $E_n = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)n^2 = 4.18 \cdot n^2 \text{ (eV)}$.

Våra energinivåer blir då $E_1 = 4.18 \text{ eV}$, $E_2 = 16.73 \text{ eV}$, $E_3 = 37.65 \text{ eV}$, $E_4 = 66.9 \text{ eV}$. Tillstånd 1 till 3 har lägre energi än 40 eV och är bundna. Svaret är sålunda 3.

b) Tunnlingssannolikheten T ges av uttrycket $T \approx e^{-2CL}$. L är barriärens tjocklek och

$$C = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}. \text{ Med } L = 0.3 \text{ nm, } U = 40 \text{ eV och } E = 37.65 \text{ eV är } T = 0.9 \text{ \%}.$$

Atomfysik: kvanttal, atomspektra, Bohrs atommodell (15-27)

15) a) Radien för den innersta elektronbanan ges av Bohrradien $a_0 = 0.0529 \text{ nm}$. Övriga elektronbanradier ges av $r_n = n^2 a_0$. Här är $n = 2$ och radien blir då 0.212 nm .

b) Rörelsemängden $m_e v_n = m_e \frac{n\hbar}{m_e r_n} = \frac{\hbar}{na_0} = 9.97 \cdot 10^{-25} \text{ kgm/s}$

c) Rörelsemängdsmoment $m_e v_n r_n = n\hbar = 2.11 \cdot 10^{-34} \text{ kgm}^2/\text{s}$

d) Kinetisk energi $K_n = \frac{k_e e^2}{2r_n} = \frac{k_e e^2}{2n^2 a_0} = \frac{13.606}{n^2} = 3.40 \text{ eV}$

e) Total energi $E_n = \frac{-13.606}{n^2} = -3.40 \text{ eV}$

f) Potentiell energi $E = K + U \Rightarrow U = E - K = -3.40 - 3.40 = -6.80 \text{ eV}$

16) Generellt gäller det att ljusvåglängden från en atomär övergång mellan nivåerna n och m

ges av: $\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$, där Rydbergs konstant $R_H = 1.09737 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

Lymanserien $m = 1$

Balmerserien $m = 2$

Paschenserien $m = 3$

Brackettserien $m = 4$

a) Vi söker n för givet $m = 1$ och $\lambda = 94.96 \text{ nm}$.

Skriv om ekvationen ovan

$$\frac{1}{n^2} = \frac{1}{m^2} - \frac{1}{\lambda R_H} \Rightarrow n^2 = \frac{m^2 \lambda R_H}{\lambda R_H - m^2}. \text{ Med givna värden fås att } n = 5$$

b) Kan given våglängd förekomma i Paschen eller Brackettserierna, dvs. med $m=3$ eller 4 ?

$\lambda R_H = 1.04206$ för givet λ . För $m > 1$ saknas därför reell lösning på ekvationen ovan.

17) För en-elektronatomer gäller att $E_n = \frac{-13.6Z^2}{n^2}$. Skriv om med Rydbergs konstant och E

$$= hc/\lambda \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = Z^2 R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right).$$

För Lymanserien är $n_f=1$, för Balmerserien är $n_f=2$ och för Paschenserien är $n_f=3$.

Den längsta våglängden ges av den minsta energiskillanden, dvs. övergångar där $n_i = n_f+1$.

För He^+ är $Z = 2$ och vi får:

Lyman ($2 \Rightarrow 1$) $\lambda = 30 \text{ nm}$

Balmer ($3 \Rightarrow 2$) $\lambda = 160 \text{ nm}$

Paschen ($4 \Rightarrow 3$) $\lambda = 467 \text{ nm}$

18) För en-elektronatomer gäller att $E_n = \frac{-13.6Z^2}{n^2}$. Skriv om med Rydbergs konstant och E

$$= hc/\lambda \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = Z^2 R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right).$$

För Lymanserien är $n_f=1$, för Balmerserien är $n_f=2$ och för Paschenserien är $n_f=3$.

Den längsta våglängden ges av den minsta energiskillanden, dvs. övergångar där $n_i = n_f+1$.

För Li^+ är $Z = 3$ och vi får:

Lyman ($2 \Rightarrow 1$) $\lambda = 13.5 \text{ nm}$

Balmer ($3 \Rightarrow 2$) $\lambda = 73 \text{ nm}$

Paschen ($4 \Rightarrow 3$) $\lambda = 208 \text{ nm}$

19) Vi antar att atomerna är i sina grundtillstånd före kollisionen.

Deras kinetiska energi är $K_{före} = \frac{mv^2}{2} * 2$, där $m = 1.66 * 10^{-27}$ kg.

Efter kollisionen är $K_{efter} = 0$. $K_{före}$ har absorberats och exciterat atomerna.

Vid de-excitationen emitteras två fotoner ($\lambda = 121.6$ nm) och fotonenergin $E = hf = hc/\lambda$.

Energien bevaras, dvs. $K_{före} = \frac{mv^2}{2} * 2 = 2 \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2hc}{m\lambda}} = 44.4 \text{ km/s}$

20) För att jonisera atomen krävs att elektronen lämnar atomen. Dvs. fotonenergin måste vara större än elektronens bindningsenergi i det aktuella tillståndet. Energien för en nivå ges av

$$E_n = -\frac{13.606}{n^2} \text{ eV}.$$

a) Sätt $E_n = hf = 2.28$ eV och lös ut $n \Rightarrow n = 2.44$. Endast heltal ger tillåtna lösningar $\Rightarrow 3$ är det minsta tillåtna värdet på n .

b) med $n = 3$ är $E_3 = 1.51$ eV. Elektronens kinetiska energi $K = \frac{1}{2} mv^2 = 2.28 - 1.51 = 0.77$ eV. Lös ut $v = 520$ km/s.

21) a) Om ψ är normerad gäller att $\int_0^\infty |\psi(r)|^2 dV = 1$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty |\psi(r)|^2 dV &= \int_0^\infty |\psi(r)|^2 4\pi r^2 dr = \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0} dr = \left\{ \int x^2 e^{ax} dx = \frac{e^{ax}}{a} \left(x^2 - \frac{2x}{a} + \frac{2}{a^2} \right) \right\} = \\ &= \frac{4}{a_0^3} \left[\frac{e^{-2r/a_0}}{-2/a_0} \left(r^2 + ra_0 + \frac{a_0^2}{2} \right) \right]_0^\infty = 1 \end{aligned}$$

dvs. ψ är normerad.

b) Vad är sannolikheten att hitta elektronen mellan $r_1 = a_0/2$ och $r_2 = 3a_0/2$

Beräkna $P(a_0/2 < r < 3a_0/2)$

$$\begin{aligned} P(r) &= \int_{a_0/2}^{3a_0/2} |\psi(r)|^2 dV = \int_{a_0/2}^{3a_0/2} |\psi(r)|^2 4\pi r^2 dr = \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \int_{a_0/2}^{3a_0/2} r^2 e^{-2r/a_0} dr = \{som(a)\} = \\ &= -\frac{2}{a_0^2} \left[\frac{e^{-2r/a_0}}{-2/a_0} \left(r^2 + ra_0 + \frac{a_0^2}{2} \right) \right]_{a_0/2}^{3a_0/2} = -e^{-3} \left(\frac{9}{2} + 3 + 1 \right) + e^{-1} \left(\frac{1}{2} + 2 \right) = 0.497 \end{aligned}$$

22) Fotonen avges efter en övergång mellan två nivåer m och n , vars energier ges av

$$E_n = \frac{-13.606}{n^2}. \text{ Vi vet att } m = 6 \text{ och att fotonens energi } hf = E_m - E_n = hc/\lambda = 1.14 \text{ eV}.$$

$$hf = 1.14 = -13.606\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \Rightarrow A = \frac{1.14}{13.606} = \frac{-n^2 + m^2}{n^2 m^2} \Rightarrow m = 6 \text{ \& } n = 3$$

Dvs. elektronen befinner sej på nivå $n = 3$ efter emission. Det maximala banrörelsemängdsmomentkvanttalet är $n-1$.

$$\text{Banrörelsemängdsmomentet } L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar = \{\ell = 2\} = \sqrt{6}\hbar$$

23) Energin för de olika tillståndet ges av $E_1 = \bar{B} \circ \bar{\mu}$ och $E_2 = -\bar{B} \circ \bar{\mu}$

$$\bar{\mu} = \frac{e\hbar}{2m_e} = \mu_B = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}$$

$$\text{Fotonenergin } hf = E_1 - E_2 = 2\bar{B} \circ \bar{\mu} = 6.468 \cdot 10^{-24} \text{ J} = 40.4 \mu\text{eV}$$

24) a) K_α strålning fås då en elektron faller från L-skalet till en vakans i K-skalet. Fotonens energi $hf = E_L - E_K$. För att räkna ut E_K och E_L använda uttrycken i avsnitt 42.8 i Serway, med $Z = 13$ för Al.

$$E_L = -(Z-1)^2 \frac{13.6}{2^2} \text{ eV} = -489.6 \text{ eV} \text{ och } E_K = -(Z-1)^2 \frac{13.6}{1^2} \text{ eV} = -1958.4 \text{ eV}$$

vilket ger $hf = 1468.8 \text{ eV}$. Från $E=hc/\lambda$ löses $\lambda=hc/E = 8.5 \text{ \AA}$.

$$\text{b) } K_{\max} = hf - \phi = \{\phi = 4.50 \text{ eV, tab. 40.1}\} = 1464.3 \text{ eV}$$

c) Generellt gäller att den kinetiska energin för en elektron ges av:

$$K = hf - \phi - E_B = \{\text{vilket i vårt fall blir}\} = 1468 - 4.5 - 707 = 757.3 \text{ eV}$$

25) K_α strålning avges då en vakans i K-skalet fylls av en elektron från L-skalet och "energivinsten" avges i form av en foton.

Energin kan beräknas som i avsnitt 42.8. För Ni gäller att $Z = 28$. Energin för en elektron i

$$\text{L-skalet med en K-skalsvakans ges av } E_L = -(Z-1)^2 \frac{13.6}{2^2} \text{ eV} = 2478 \text{ eV}$$

för den nivå till vilken den faller (notera att där saknas en elektron)

$$E_K = -(Z-1)^2 \frac{13.6}{1^2} \text{ eV} = 9914 \text{ eV}$$

Fotonenergin för Ni K_α blir då $9914-2478 = 7436 \text{ eV}$.

Samma resonemang för Ni L_α ger: $E_M = -(Z - 9)^2 \frac{13.6}{3^2} \text{ eV} = 545 \text{ eV}$

$$E_L = -(Z - 2)^2 \frac{13.6}{2^2} \text{ eV} = 2298 \text{ eV}$$

Fotonenergin för Ni L_α blir då $2298 - 545 = 1753 \text{ eV}$.

26) a) Den kinetiska energin ges av $K = hf - E_{\text{bind}} - \phi$. ϕ för Cu är $4.70 \text{ eV} \Rightarrow K = 308.3 \text{ eV}$

b) Röntgenenergin ges av energiskillnaden mellan de i övergången inblandade nivåerna. För röntgenemission gäller urvalsregelns $\Delta l = \pm 1$. Till 2p kan därför endast elektroner från 3s och 3d nedfalla och avge röntgenstrålning. De observerade röntgenenergierna är därför 820 eV resp. 938 eV .

27) Sannolikhetstäthetsfunktionen för väte grundtillstånd är $P_{1s}(r) = \left(\frac{4r^2}{a_0^3} \right) e^{-2r/a_0}$. (Serway

42.25). Notera här att $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e k_e e^2}$, dvs. radien beror på massan. För elektronen är $a_0 = 0.529 \text{ Å}$ och för taonen är $a_0 = 0.529/3490 = 15 \text{ fm}$.

Sannolikheten att hitta taonen mellan $r_1 = 0$ och $r_2 = 10^{-6} \text{ nm}$ ges av integralen av täthetsfunktionen. (Se exempel 42.5 i Serway).

$$P = \int_0^{r_2} P_{1s}(r) dr = \frac{4}{a_0^3} \int_0^{r_2} r^2 e^{-2r/a_0} dr = -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{4r^2}{a_0^2} + \frac{4r}{a_0} + 2 \right) e^{-2r/a_0} \right]_0^{r_2=1 \text{ fm}} = 0.036\%$$

Molekyler: kemisk bindning, rotationer och vibrationer (28-35)

28) Jonisationsenergin (K) + elektronaffiniteten (Cl) = den energi som skall tillföras.
Jonisationsenergin (K) = $0.7 + 3.6 \text{ eV} = 4.3 \text{ eV}$

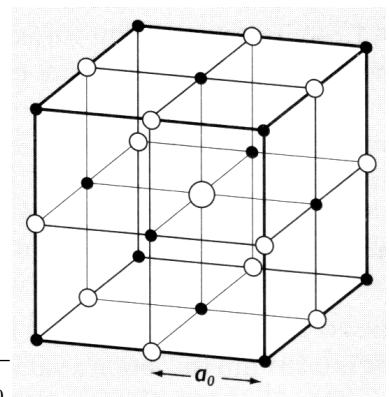
29) Coulombkraften mellan två laddade partiklar ($-e$ och $+e$)

på avståndet R är $F_{\text{Coul}} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} \Rightarrow U_{\text{Coul}} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$.

$$k_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

I en kristall påverkas en jon av en total potential som är summan av bidragen från dess omgivning. Dvs. för en NaCl-kristall enligt figur

$$U_{\text{tot}} = \sum_{j \neq i} \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{ij}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \left(-6 + \frac{12}{\sqrt{2}} - \frac{8}{\sqrt{3}} + \dots \right) = \frac{-\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0}$$



Madelung konstant $\alpha = 1.748$. Med $R_0 = 0.281 \text{ nm}$ får vi $U = 9.05 \text{ eV} = 1.448 \cdot 10^{-18} \text{ J}$.

30) Separationsenergin är den energi som krävs för att bryta molekylen bindning, räknat från potentialens minimum vid $r = r_0$, jämviktsavståndet. Vi vet således att

$$U(r_0) = -4 \text{ eV} = U(r_0) = -4eV = \frac{B}{r_0^{10}} - \frac{C}{r_0^2} \quad (1)$$

Vid jämvikt har $U(r)$ minimum, dvs. $\frac{dU(r)}{dr} = \frac{-10B}{r^{11}} + \frac{2C}{r^3} = 0$

Vilket, med $r = r_0$, ger $5B = r_0^8 C$ (2)

a) Från detta löser vi ut $C = 45 \text{ eV } \text{\AA}^2$ och $B = 59049 \text{ eV } \text{\AA}^{10}$.

b) Maximal kraft $F(r)$ fås då $dF/dr = 0$.

$$F(r) = -\frac{dU(r)}{dr} \Rightarrow \frac{dF(r)}{dr} = \frac{110B}{r^{12}} - \frac{6C}{r^4} = 0$$

Lös ut r : $r^8 = \frac{11}{3} r_0^8 \Rightarrow r = 3.53 \text{\AA}$

31) a) $I = \left(\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\right) r^2 = \mu r^2$ $1 \text{ u} = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$, $m_{\text{Na}} = 23 \text{ u}$, $m_{\text{Cl}} = 35.5 \text{ u}$, $r = 0.28 \text{ nm}$

$\mu = 13.96 \text{ u}$ och $I = 1.8 \cdot 10^{-45} \text{ kgm}^2$.

b) $E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$ Räkna ut energiskillnaden mellan $J = 2$ och $J = 1$.

$$\Delta E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I} (2 \cdot 3 - 1 \cdot 2) = \frac{2\hbar^2}{I} \text{ och våglängden } \lambda = \frac{hc}{\Delta E_{\text{rot}}} = \frac{hc}{2\hbar^2} I = 1.6 \text{ cm}$$

32) Vibrationsenergin ges av $E_{\text{vib}} = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$

I grundtillståndet är $\nu = 0$, i det första exciterade tillståndet är $\nu = 1$.

$$\mu = \left(\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\right) = \frac{1 \cdot 35.5}{1 + 35.5} = 0.97 \text{ u} \quad \Delta E_{\text{vib}} = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \left(1 + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = 0.36 \text{ eV}$$

33) Elektroner som träffar ytan exciterar vibrationer. Elektronens energiförlust är densamma

som energiskillnaden mellan två vibrationsnivåer, dvs. $\Delta E_{\text{vib}} = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$.

Beräkna reducerade massorna för de två kombinationerna: $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$. $\mu_{\text{OO}} = 8 \text{ u}$,

$\mu_{\text{PtO}} = 14.78 \text{ u}$. Med givna k får vi: $\Delta E_{\text{vib}}(\text{O-O}) = 196 \text{ meV}$ och $\Delta E_{\text{vib}}(\text{Pt-O}) = 155 \text{ meV}$

34) Elektroner som träffar ytan exciterar vibrationer. Elektronens energiförlust är densamma

som energiskillnaden mellan två vibrationsnivåer, dvs. $\Delta E_{vib} = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$.

Beräkna reducerade massorna för de två kombinationerna: $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$.

$\mu_{\text{SnO}} = 14.10 \text{ u}$, $\mu_{\text{PtO}} = 14.78 \text{ u}$

Med givna k får vi: $\Delta E_{vib}(\text{Sn-O}) = 164 \text{ meV}$ och $\Delta E_{vib}(\text{Pt-O}) = 155 \text{ meV}$

35) Molekylens totala vibrations och rotationsenergin är $E = (\nu + \frac{1}{2})hf + \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$.

Vibrationskvanttalet $\nu = 0, 1, 2$, etc, och rotationskvanttalet $J = 0, 1, 2$. Molekylens

vibrationsfrekvens $f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ där μ är den reducerade massan och k molekylens

kraftkonstant. I är tröghetsmomentet $I = \mu r^2$, där r är bindningsavståndet och μ återigen är den reducerade massan. Vid övergångar är $\Delta \nu = \pm 1$ och $\Delta J = \pm 1$.

Ändringen i energi vid en övergång blir då (se ekv. 43.13 och 43.14 i Serway)

(1) $\Delta E_1 = hf + \frac{\hbar^2}{I} (J+1)$ med $\Delta J = +1$. $\Delta E_1 = hc/\lambda_1 = 0.275 \text{ eV}$

(2) $\Delta E_2 = hf - \frac{\hbar^2}{I} J$ med $\Delta J = -1$. $\Delta E_2 = hc/\lambda_2 = 0.265 \text{ eV}$

För att bestämma vilken molekylen är räcker det att veta den reducerade massan som vi kan lösa ut från I. Ta (1) - (2) =>

$$\frac{\hbar^2}{I} = \Delta E_1 - \Delta E_2 \Rightarrow I = \frac{(2J+1)\hbar^2}{(\Delta E_1 - \Delta E_2)} = \mu r^2 \Rightarrow \mu = \frac{(2J+1)\hbar^2}{(\Delta E_1 - \Delta E_2)r^2} = 7u$$

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} = \{m_1 = m_2\} = \frac{m_1}{2} \Rightarrow m_1 = 14u \text{ dvs molekylen är } N_2.$$

Kärnfysik (36-41)

36) Ekvationen skrivs $E_b = C_1 A - C_2 A^{2/3} - C_3 \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} - C_4 \frac{(N-Z)^2}{A}$, där

1) **Volymbidrag** ökar linjärt med antalet nukleoner, $C_1 = 15.7 \text{ MeV}$

2) **Ytbidrag**: nukleoner vid ytan har färre närmsta grannar och därför en lägre bindningsenergi. $C_2 = 17.8 \text{ MeV}$.

3) **Coulombrepulsion** mellan de laddade protonerna. Z partiklar växelverkar med Z-1.

Proportionell mot $\frac{1}{r} = \frac{1}{A^{1/3}}$. $C_3 = 0.71 \text{ MeV}$

4) Repulsion mellan neutroner i neutronrika kärnor. $C_4 = 23.6 \text{ MeV}$.

Här är $A = 56$, $Z = 26$ och $N = 30$ vilket ger $E_b = 879.2 - 260.5 - 120.6 - 6.74 = 491.36 \text{ MeV}$

37) a) $R = R_0 e^{-\lambda t} \Rightarrow \lambda = -\frac{1}{t} \ln\left(\frac{R}{R_0}\right)$.

Med $t = 4 \text{ timmar} = 14400 \text{ sekunder}$ fås $\lambda = 1.55 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ och

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = 44730 \text{ sek} = 12.4 \text{ tim}$$

b) 1 Ci $3.7 \cdot 10^{10}$ sönderfall per sekund. $R_0 = N_0 \cdot \lambda \Rightarrow N_0 = 2.39 \cdot 10^{13}$ atomer

c) $R = R_0 e^{-\lambda t}$

$R_0 = 10 \text{ mCi}$, $\lambda = 1.55 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, $t = 108000 \text{ sek} \Rightarrow R(30 \text{ tim}) = 1.9 \text{ mCi}$.

38) a) För ett β^- -sönderfall är $Q = (M_{\text{Co}} - M_{\text{Ni}})c^2 = 2.8252 \text{ MeV}$.

$M_{\text{Co}}^{60} = 59.933820 \text{ u}$ och $M_{\text{Ni}}^{60} = 59.930789 \text{ u}$. (Finns i tabell A3)

b) Q-värdet är energiskillnaden mellan kärnorna i grundtillstånd. Denna energivinst delas broderligt mellan de två γ -strålarna, elektronen och neutrino. De två γ -energierna är givna. Resterande energi delas mellan elektron och neutrino enligt figur 44.14 i Serway. K_{max} för elektronen fås då neutrinons energi är noll (eller nära)

$$K_{\text{max}} = Q - \gamma_1 - \gamma_2 = 0.3195 \text{ MeV}$$

c) Energi per sönderfall = Q. Medelenergin för en elektron är given, $1/2 K_{\text{max}}$, så även neutrinons energi. Alla γ och e^- absorberas, dock icke neutrino. Dvs. den absorberade energin per sönderfall $E_{\text{abs}} = Q - 1/2 K_{\text{max}} = 2.5057 \text{ MeV}$.

$5000 \text{ Curie} = 5000 \times 3.7 \times 10^{10}$ sönderfall per sekund.

Absorberad effekt = energi/sek = $5000 \times 3.7 \times 10^{10} \times 2.5057 \text{ MeV/sek} = 74 \text{ W}$.

39) Reaktionen kan skrivas $^{13}\text{C} + n \rightarrow ^{13}\text{B} + p$

$$Q_{\text{reaktion}} = [M(^{13}\text{C}) + M_n - M(^{13}\text{B}) - M(^1\text{H})]c^2 = -12.65 \text{ MeV (Obs! Atommassor)}$$

a) Sönderfallet sker via β^- -sönderfall enligt: $^{13}\text{B} \rightarrow ^{13}\text{C} + \beta^- + \text{antineutrino}$.

b) Betapartikelns maximala kinetiska energi ges av: $K_{\text{max}}(\beta^-) = Q_{\beta^-}$

$$Q_{\beta^-} = [M(^{13}\text{B}) - M(^{13}\text{C})]c^2$$

$$\text{Alltså är } Q_{\beta^-} = [M_n - M(^1\text{H})]c^2 - Q_{\text{reaktion}} = 939.57 - 938.78 + 12.65 \text{ MeV} = 13.44 \text{ MeV}$$

40) (Se given massa i uppgiften och från tabell i boken)

a) Vid infångning av en termisk neutron på ^{232}Th får den nyskapade kärnan ^{233}Th en excitationenergi $E_{\text{ex}} = (M(^{232}\text{Th}) + M_n - M(^{233}\text{Th}))c^2$ (neutronens kinetiska energi $\ll 1$ eV försummas). $E_{\text{ex}} = (232.038051 + 1.008665 - 233.041577) \times 931.494 \text{ MeV} = 4.787 \text{ MeV}$. Eftersom Th inte fungerar i reaktorn måste alltså aktiveringsenergin vara större än ca 4.8 MeV.

b) $^{232}\text{Th} + n \rightarrow ^{233}\text{Th} + \gamma \rightarrow ^{233}\text{Pa} + \beta^- + \text{anti } \nu \rightarrow ^{233}\text{U} + \beta^- + \text{anti } \nu$
Som ovan är $E_{\text{ex}}(^{234}\text{U}) = (233.039630 + 1.008665 - 234.040946) \times 931.494 \text{ MeV} = 6.85 \text{ MeV}$ dvs. större än aktiveringsenergin 6.5 MeV. Alltså kan ^{233}U användas som kärnbränsle och klyvas vid infångning av termiska neutroner. Halveringstiden är 1.59×10^5 år som gör att det är tillräckligt långlivat.

41) Vi undersöker om de olika sönderfallen (β^- , β^+ , EC (electron capture), α och fission) är energetiskt möjliga. Enl. tabell A3 i boken är atommassan för $^{50}\text{V} = 49.947161 \text{ u}$.

β^- : leder till ^{50}Cr [$M(^{50}\text{Cr}) = 45.946047 \text{ u}$]

$$Q_{\beta^-} = (49.947161 - 45.946047) \times 931.494 \text{ MeV} = 1.038 \text{ MeV} > 0 \text{ MeV}.$$

Alltså uppfylls det energetiska villkoret för β^- -sönderfall.

β^+ och EC leder till ^{50}Ti .

$$Q_{\text{EC}} = (49.947161 - 49.944792) \times 931.494 \text{ MeV} = 2.207 \text{ MeV} > 0 \text{ MeV}.$$

$$Q_{\beta^+} = Q_{\text{EC}} - 1.022 \text{ MeV} = 1.185 \text{ MeV} > 0 \text{ MeV}$$

Alltså är energetiska villkoren uppfyllda för både β^- , β^+ och EC sönderfall.

Hur är det med alfasönderfall och fission?

Vi förväntar oss inte alfasönderfall vid så låga A-värden men kolla för säkerhets skull:

$$Q_{\alpha} = (M_X - M_Y - M(^4\text{He})) \times 931.494 \text{ MeV (sönderfall till } ^{46}\text{Sc}).$$

$$\text{Insättning ger: } Q_{\alpha} = (49.947161 - 45.955174 - 4.002602) \times 931.494 = -9.888 \text{ MeV}$$

dvs. < 0 och ej energetiskt möjligt.

Fission förväntar vi oss ej på vänstra sidan om maximum på kurvan över bindningsenergin per nukleon = $f(A)$ (fig. 44.8).

42) Reaktionens Q-värde anger hur mycket energi som frigörs, $Q = (m_{\text{före}} - m_{\text{efter}}) c^2$. Med given reaktion ${}_0^1n + {}_{92}^{235}\text{U} \rightarrow {}_{56}^{141}\text{Ba} + {}_{36}^{92}\text{Kr} + 3({}_0^1n)$ och massor $M(n) = 1.008665 \text{ u}$, $M(\text{U}) = 235.043924 \text{ u}$, $M(\text{Ba}) = 140.9139 \text{ u}$, $M(\text{Kr}) = 91.8973 \text{ u}$ får vi

a) $Q = (m_{\text{före}} - m_{\text{efter}}) c^2 = (236.052589 - 235.837195) c^2 = 200.6 \text{ MeV}$

b) andelen $= (236.052589 - 235.837195) / 236.052589 = 0.09 \%$

43) a) Halvtjockleken är den tjocklek som halverar intensiteten.

Dvs. $I(x) = I_0/2 \Rightarrow x = \ln 2 / \mu = 0.436 \text{ cm}$

b) Samma som i a) men med $I(x) = 0.0001 I_0$. $\Rightarrow x = 5.8 \text{ cm}$

44) ${}^{76}\text{As} \rightarrow {}^{76}\text{Se}$ sker via β^- sönderfall.

$$Q_{\text{max}}^{\beta^-} = m({}^{76}\text{As}) - m({}^{76}\text{Se}) \cdot 931.494 \text{ MeV} = 2.968 \text{ MeV}$$

${}^{76}\text{Br} \rightarrow {}^{76}\text{Se}$ sker via β^+ sönderfall.

$$Q_{\text{max}}^{\beta^+} = m({}^{76}\text{Br}) - m({}^{76}\text{Se}) \cdot 931.494 \text{ MeV} - 2m_e c^2 = 3.620 \text{ MeV}$$

45) Den per reaktion avgivna energin ges av reaktionens Q-värde. Så, vi beräknar Q-värdet för de två fusionsreaktionerna:

$${}^2\text{H} + {}^2\text{H} \rightarrow {}^1\text{H} + {}^3\text{H}$$

$$Q = (2 \cdot 2.014102 - 1.007825 - 3.016049) \cdot 931.494 \text{ MeV} = 4.033 \text{ MeV}$$

$${}^2\text{H} + {}^2\text{H} \rightarrow {}^1\text{n} + {}^3\text{He}$$

$$Q = (2 \cdot 2.014102 - 1.008665 - 3.016029) \cdot 931.494 \text{ MeV} = 3.270 \text{ MeV}$$

Eftersom de två reaktionsvägarna är lika sannolika sätter vi medelenergin per fusionsreaktion $\frac{1}{2}(4.033 + 3.270) = 3.651 \text{ MeV} = 5.84 \cdot 10^{-13} \text{ J}$. $1 \text{ W} = 1 \text{ J/s} \Rightarrow 1.71 \cdot 10^{12}$ reaktioner per sekund.

46) Antalet sönderfall per tidsenhet ges av aktiviteten (eller decay rate) $R = \lambda N = \lambda N_0 e^{-\lambda t}$ och avgiven effekt $P = RQ$. När "alla" kärnor sönderfallit har det bildats 3 mg He vilket

motsvarar N_0 . $N_0 = \frac{3 \text{ mg}}{4u} = \frac{3 \cdot 10^{-6} \text{ kg}}{4 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}} = 4.5 \cdot 10^{20}$. Efter 80 dygn har 1/3 av de radioaktiva kärnorna sönderfallit, dvs $N_{80} = 2/3 N_0 = 3.0 \cdot 10^{20}$.

$$\frac{N_{80}}{N_0} = \frac{2}{3} = e^{-\lambda 80} \Rightarrow \lambda = \frac{\ln \frac{3}{2}}{80 \text{ dygn}} = 58.7 \cdot 10^{-9} \text{ s}^{-1}$$

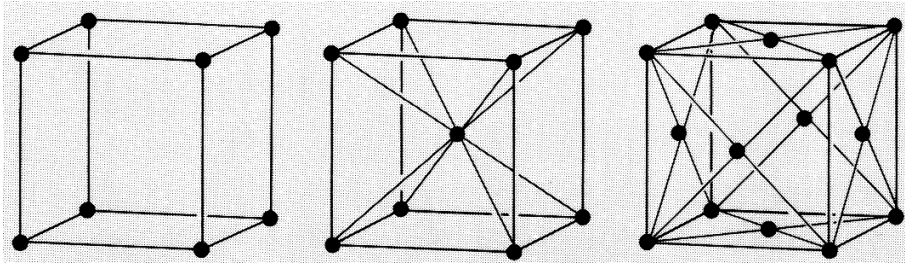
Vi vet effekten, P_{80} , efter 80 dygn.

a) Energi per sönderfall, $Q = \frac{P_{80}}{R_{80}} = \frac{14 \text{ W}}{\lambda N} = 5.0 \text{ MeV}$

b) $\frac{P_0}{P_{80}} = \frac{N_0}{N_{80}} = 3/2 \Rightarrow P_0 = 14 \cdot \frac{3}{2} \text{ W} = 21 \text{ W}$

Kristallstruktur (47-59)

47) De tre kristallgittern sc, bcc, fcc visas i figuren nedan.



Placera en sfär i varje gitterposition och låt dessa sfärer vara i kontakt med den närmsta grannen. Från detta får vi atomradien (r) = halva närmsta granneavståndet. Dvs.

$$\text{s.c. } r = \frac{a}{2} \quad \text{bcc } r = \frac{a\sqrt{3}}{4} \quad \text{fcc } r = \frac{a\sqrt{2}}{4}$$

Beräkna sfärernas volymsandel (V_s) av kubens volym $V_k = a^3$.

s.c. har en atom per kub,

$$\text{dvs. } V_s = \frac{4\pi r^3}{3} = \frac{4\pi a^3}{3 \cdot 8} \Rightarrow \text{packningsgrad} = \frac{V_s}{V_k} = \frac{\pi}{6} = 52.4\%$$

bcc har två atomer per kub

$$V_s = \frac{2 \cdot 4\pi r^3}{3} = \frac{2 \cdot 4\pi \frac{a\sqrt{3}}{4}^3}{3 \cdot 64} = \frac{\pi\sqrt{3}a^3}{8} \Rightarrow \text{packningsgrad} = \frac{V_s}{V_k} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} = 68.0\%$$

fcc har fyra atomer per kub

$$V_s = \frac{4 \cdot 4\pi r^3}{3} = \frac{4 \cdot 4\pi \frac{a\sqrt{2}}{4}^3}{3 \cdot 64} = \frac{\pi\sqrt{2}a^3}{3 \cdot 2} \Rightarrow \text{packningsgrad} = \frac{V_s}{V_k} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} = 74.0\%$$

48) a) gitter fcc, bas Na i (0,0,0) och Cl i (1/2,0,0)

b) gitter sc, bas Cs i (0,0,0), Cl i (1/2, 1/2, 1/2)

d) gitter sc, bas Ba i (0,0,0), Ti i (1/2, 1/2, 1/2), O i (1/2, 1/2, 0), (1/2, 0, 1/2) och (0, 1/2, 1/2)

49) För att ta fram ett plans Millerindex gör man på följande vis

1) Bestäm planets skärningspunkter med vektoraxlarna

2) Ta inversen av dessa tal

3) Sök minsta heltal med samma kvot

Här är skärningspunkterna (2, -1, 1)

Inversen är (1/2, -1, 1)

Minsta heltalskombination (1,-2,2) vilket således är planets Millerindex.

50) bcc gittret beskrivs av vektorerna:

$$\bar{a} = \frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}), \quad \bar{b} = \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) \quad \text{och} \quad \bar{c} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

a är gitterparametern i den konventionella kubcellen.

De reciproka gittervektorerna skapas enligt

$$a^* = \frac{2\pi\bar{b}\bar{c}}{\bar{a} \circ (\bar{b}\bar{c})}, \quad b^* = \frac{2\pi\bar{c}\bar{a}}{\bar{a} \circ (\bar{b}\bar{c})} \quad \text{och} \quad c^* = \frac{2\pi\bar{a}\bar{b}}{\bar{a} \circ (\bar{b}\bar{c})}$$

Med givna vektorer fås

$$a^* = \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z}), \quad b^* = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{z}) \quad \text{och} \quad c^* = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y}) \quad \text{vilket beskriver ett fcc gitter.}$$

51) Från de givna vinklarna och sambandet $\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2 + k^2 + l^2)$ kan kristallstruktur och

gitterparametern a tas fram. $\frac{\lambda^2}{4a^2}$ är konstant och $(h^2 + k^2 + l^2)$ antar endast heltalsvärden

enligt den i uppgiften givna figuren. Kvoten $\frac{\sin^2 \theta_n}{\sin^2 \theta_1}$ ger kvoten mellan $(h^2 + k^2 + l^2)$ för olika vinklar.

θ	28.78	33.77	51.83	67.21	74.35
kvot	3/3	4/3	8/3	11/3	12/3

Jämför med figur och identifiera fcc-strukturen. Därefter beräknas a från en tillåten kombination av vinkel och $(h^2 + k^2 + l^2)$ till $a = 2.77 \text{ \AA}$.

b) Den första planskaran har $(hkl) = (111)$. Packningstätheten är den del av planet som upptas av atomer (här cirklar). Cirklarnas radie fås från halva närmsta granneavståndet $r = d/2 = a/2\sqrt{2} = 0.98 \text{ \AA}$. Planets enhetscell är rombisk med arean $\sqrt{3}/2 (d^2)$. Packningstäthet är 0.91.

- 52) Från de givna vinklarna och sambandet $\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2 + k^2 + l^2)$ kan kristallstruktur och gitterparametern a tas fram. $\frac{\lambda^2}{4a^2}$ är konstant och $(h^2 + k^2 + l^2)$ antar endast heltalsvärden enligt den givna figuren. Kvoten $\frac{\sin^2 \theta_n}{\sin^2 \theta_1} \Rightarrow$ ger kvoten mellan $(h^2 + k^2 + l^2)$ för olika vinklar.

θ	21.68	31.51	39.80	47.66	55.73	64.86	77.90
kvot	1	2	3	4	5	6	7
alt	2/2	4/2	6/2	8/2	10/2	12/2	14/2

Det finns två möjligheter, antingen sc eller bcc. Men $(h^2 + k^2 + l^2) = 7$ är omöjlig, dvs. det är inte sc utan bcc. Därefter beräknas a för given kombination av vinkel och $(h^2 + k^2 + l^2)$ till $a = 2.87 \text{ Å}$.

b) Första planskaran $(hkl) = (110)$. Packningstätheten är den del av planet som upptas av atomer (här cirklar). Cirkelnas radie (r) fås från halva närmsta granneavståndet (d), $r = d/2 = \sqrt{3}a/2$. Planets enhetscell är rektangulär med arean $\sqrt{2} a^2$. Packningstäthet blir då 0.83

- 53) Från de givna vinklarna och sambandet $\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2 + k^2 + l^2)$ kan kristallstruktur och gitterparametern a tas fram. $\frac{\lambda^2}{4a^2}$ är konstant och $(h^2 + k^2 + l^2)$ antar endast heltalsvärden. Kvoten $\frac{\sin^2 \theta_n}{\sin^2 \theta_1} \Rightarrow$

θ	10.83	15.39	18.99	22.07	24.84
kvot	1	2	3	4	5

Strukturen är enkel kubisk med a) gitterparametern 4.10 Å

b) Millerindex för de plan som ger upphov till de observerade diffraktionsvinklarna $\{100\}$, $\{110\}$, $\{111\}$, $\{200\}$, $\{210\}$

c) Millerindex för de plan som ger upphov till den största tillåtna Braggvinkeln $\sin^2 \theta_{hkl} \leq 1 \Rightarrow (h^2 + k^2 + l^2)_{\max} \leq 28$. Största tillåtna värde som går att skapa är 27, vilket fås för $\{hkl\} = \{511\}$ och $\{333\}$

- 54) Den linjära termiska expansionskoefficient, α , anger hur mycket ett material ökar i längd till följd av en temperaturökning enligt: $\Delta L = \alpha L_0 \Delta T$. Här identifierar vi L_0 med a vid 300 K. Vid 600 K har avståndet ökat till $a_{111}(600\text{K}) = 3.9292 \text{ Å}$. Braggvinklarna fås från $\sin \theta = \frac{\lambda}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$; $\theta(300\text{K}) = 20.00^\circ$ och $\theta(600\text{K}) = 19.84^\circ$. Spridningsvinklarna är dubbla Braggvinklarna; 40.00 och 39.68 vilket ger en ändring på 0.32° .

55) **tänk på formfaktorn!!**

Sambandet $\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2} (h^2 + k^2 + l^2)$ eller $\sin \theta = \frac{\lambda}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ gäller som vanligt.

För enkel kubisk struktur (s.c.) gäller att $(h^2 + k^2 + l^2) = 1, 2, 3, 4, \dots$

För CsCl får vi med $\lambda = 1.54 \text{ Å}$ och $a = 4.12 \text{ Å}$ de två minsta vinklarna 10.77° resp. 15.32° , vilket ger spridningsvinklarna (dvs. dubbla Braggvinkeln) 21.5° resp. 30.6° .

För CsI gäller att $a = 4.57 \text{ Å}$. Men !! Cs^+ och I^- har lika många elektroner och sprider lika bra. Dvs. vi "ser" inte skillnad på de två jonsorterna i vår kristall och den "effektiva" kristallstrukturen blir då bcc. Då gäller att $(h^2 + k^2 + l^2) = 2, 4, 6, \dots$. Vilket ger Braggvinklarna 13.78° och 19.69° och spridningsvinklarna 27.6° resp. 39.4° .

56) Från de givna spridningsvinklarna och gitterparametern kan vi med hjälp av det vid det här

laget välkända uttrycket $\sin \theta = \frac{\lambda}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ räkna ut neutronernas

deBroglievåglängd och vid vilken vinkel nästa reflex kan förväntas dyka upp. För diamantstruktur gäller att $(h^2 + k^2 + l^2) = 3, 8, 11, 16, 19$. Från t.ex. den fjärde reflexen fås:

$$\lambda = \frac{2 \cdot 3.57 \sin\left(\frac{72}{2}\right)}{\sqrt{16}} = 1.05 \text{ Å}$$

a) Den femte reflexen ges av $\sin \theta = \frac{1.05}{2 \cdot 3.57} \sqrt{19} \Rightarrow 2\theta = 80^\circ$

b) För att få fjärde reflexen i 180° gäller som ovan $\lambda = \frac{2 \cdot 3.57 \sin\left(\frac{180}{2}\right)}{\sqrt{16}} = 1.785 \text{ Å}$

Vi vet också att neutronernas deBroglievåglängd ges av $\lambda = \frac{h}{mv} \Rightarrow v = \frac{h}{m\lambda}$

Låt v_0 beteckna hastigheten för $\lambda = 1.05 \text{ Å}$ och v betecknar hastigheten då $\lambda = 1.785 \text{ Å}$.

$$\text{Vi får då: } \frac{v_0 - v}{v_0} = \frac{\frac{h}{m\lambda_0} - \frac{h}{m\lambda}}{\frac{h}{m\lambda_0}} = \frac{\frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda}}{\frac{1}{\lambda_0}} = \frac{1}{\frac{1.05}{1.785} - 1} = 41\%$$

c) För fotoner gäller $E = hc/\lambda$. $\lambda = 1.785 \text{ Å}$ ger $E = 6960 \text{ eV}$, $\lambda = 1.05 \text{ Å}$ ger $E = 11830 \text{ eV}$

57) Räkna ut strukturfaktorn för fcc.

$$\text{Strukturfaktorn ges av } S_{hkl} = \sum_j f_j e^{i2\pi(hu_j + kv_j + lw_j)}$$

Alla atomer är av samma sort och har samma formfaktor f.

I fcc-cellen finns 4 atomer i positionerna (0,0,0), (1/2, 1/2, 0), (1/2, 0, 1/2), (0, 1/2, 1/2).

Vi får då:

$$S_{hkl} = f \sum_j e^{i2\pi(hu_j + kv_j + lw_j)} = f(1 + e^{i2\pi(\frac{h}{2} + \frac{k}{2})} + e^{i2\pi(\frac{h}{2} + \frac{l}{2})} + e^{i2\pi(\frac{k}{2} + \frac{l}{2})})$$

$S_{hkl} = 4$ för (000), $S_{hkl} = 0$ för (100), $S_{hkl} = 0$ för (110), $S_{hkl} = 4$ för (111), $S_{hkl} = 4$ för (220),

Endast reflexer med alla hkl udda eller alla hkl jämna ger ett bidrag.

58) Både Si och Ge kristalliserar i diamantstruktur, med gitterparametrar 5.43 Å respektive 5.66 Å. Legeringens gitterparameter varierar som

$$a(x) = a_{Si} + x(a_{Ge} - a_{Si}) = 5.43 + x(5.66 - 5.43) \Rightarrow x = \frac{a(x) - 5.43}{5.66 - 5.43}.$$

$$\text{För röntgendiffraktion gäller } \sin \theta = \frac{\lambda}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \Rightarrow a = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}.$$

För diamant gäller att $h^2 + k^2 + l^2 = 3, 8, 11, 16, \dots$

Så med givna vinklar får vi $a = 5.465 \text{ Å}, 5.465 \text{ Å}, 5.465 \text{ Å}, 5.465 \text{ Å}$ från de olika vinklarna, från vilket vi får $x = 0.152$.

59) Det reciproka mönstret byggs upp av de reciproka vektorerna, vilka ges av ekvation 11.9 i

Hook and Hall: $\mathbf{a}^* = \frac{2\pi(\mathbf{b} \times \mathbf{c})}{\mathbf{a} \circ (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}$. Här låter vi a och b vara de i figuren angivna vektorerna.

Vektorn c saknas och kan under uträkningen sättas till planets normalvektor $\mathbf{n}$ med

längden 1. Vi får då $\mathbf{a}^* = \frac{2\pi(\mathbf{b} \times \mathbf{n})}{\mathbf{a} \circ (\mathbf{b} \times \mathbf{n})}$ och $\mathbf{b}^* = \frac{2\pi(\mathbf{n} \times \mathbf{a})}{\mathbf{b} \circ (\mathbf{n} \times \mathbf{a})}$.

Det gäller som i tre dimensioner att $\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a} = 2\pi$, $\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{b} = 2\pi$ och $\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b} = 0$, $\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{a} = 0$.

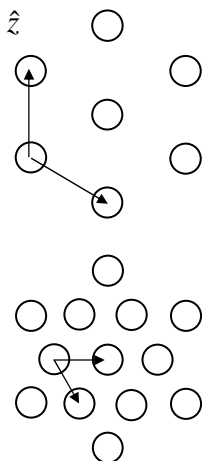
Lägg x-axeln så att för Pt(111)-ytan $\mathbf{a} = a\hat{x}$ och $\mathbf{b} = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{y}$ och $\mathbf{n} = \hat{z}$

Kryssningen ger då $\mathbf{a}^* = \frac{2\pi}{a} \left(\hat{x} - \frac{\hat{y}}{\sqrt{3}} \right)$ och $\mathbf{b}^* = \frac{2\pi}{a} \frac{2}{\sqrt{3}} \hat{y}$

För Pt(111)-Sn ytan är $\mathbf{a}' = \frac{3a}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{y}$ och $\mathbf{b}' = \sqrt{3}a\hat{y}$ och $\mathbf{n} = \hat{z}$

Notera att a är längden på basvektorn för Pt(111)-ytan.

Kryssning ger $\mathbf{a}^{*'} = 2\pi \frac{\mathbf{b}' \times \mathbf{n}}{\mathbf{a}' \cdot (\mathbf{b}' \times \mathbf{n})} = 2\pi \frac{2}{3a} \hat{x}$ och $\mathbf{b}^{*'} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \left(\hat{y} - \frac{\hat{x}}{\sqrt{3}} \right)$



Frielektronmodellen (60-70)

60) Fermienergin (ϵ_F) ges av uttrycket $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n)^{2/3} = \{n = 8.50 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}\} = 7.06 \text{ eV}$.

Fermihastigheten (v_F) är elektronernas hastighet vid Ferminivån, vilket kan skrivas

$$\epsilon_F = \frac{m_e v_F^2}{2} \Rightarrow v_F = \sqrt{\frac{2\epsilon_F}{m_e}} = 1.57 \cdot 10^6 \text{ m/s}.$$

Tillståndstätheten $g(\epsilon)$ anger antalet tillstånd per energienhet. Avståndet mellan energinivåerna ges sålunda av $1/g(\epsilon)$.

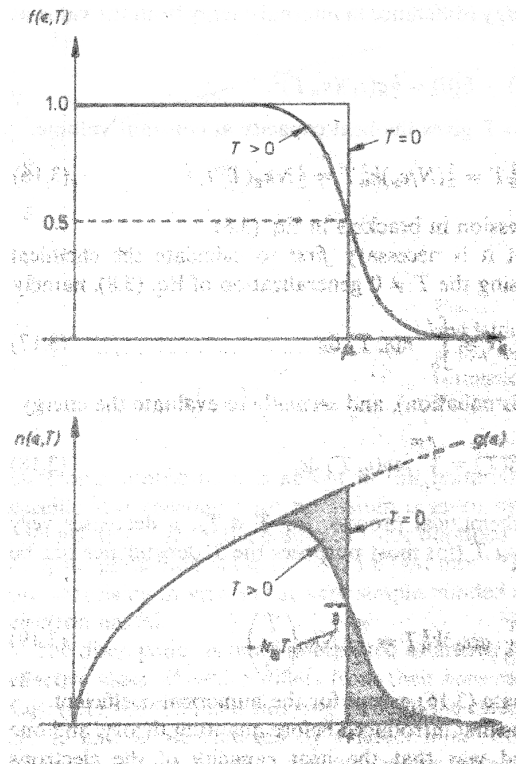
$$\frac{1}{g(\epsilon)} = \frac{\pi^2 \hbar^3}{V} \frac{1}{\sqrt{2m^3 \epsilon}} = \{\epsilon = \epsilon_F\} = 8.85 \cdot 10^{-42} \text{ J} = 5.5 \cdot 10^{-23} \text{ eV}$$

- 61) Vi utgår från en metall vid $T > 0$. I den översta figuren ges Fermifunktionen vid $T = 0$ och för $T > 0$, och den undre figuren anger de besatta tillstånden.

I boken antar man att den skuggade delen kan beskrivas av två trianglar med basen $2k_B T$ och höjden $\frac{1}{2} g(\epsilon_F)$. Elektroner inom detta intervall bidrar till elektrisk ledning. Deras antal, N_c , fås genom integration

$$N_c = \int_{\epsilon_F - 2kT}^{\epsilon_F + 2kT} g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon.$$

För att förenkla problemet antar vi att den skuggade delen under Fermienergin har samma area som den skuggade delen över.



$$\int_{\epsilon_F - 2kT}^{\epsilon_F} g(\epsilon) d\epsilon = \frac{V}{2\pi} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{\epsilon_F - 2kT}^{\epsilon_F} \sqrt{\epsilon} d\epsilon = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left[\epsilon_F^{3/2} - (\epsilon_F - 2k_B T)^{3/2} \right]$$

För Na är $E_F = 3.15 \text{ eV}$. Med $T = 300 \text{ K}$ är andelen elektroner som bidrar till ledning 2.4 %.

- 62) Den elektriska ledningsförmågan ges av $\sigma = ne^2 \tau / m$. Relaxationstiden $\tau = 6.5 \cdot 10^{-14} \text{ s}$. Hallkoefficienten $R_H = 1/nq$. Med givet R_H fås $n = 1.6 \cdot 10^{29} \text{ m}^{-3}$. $\sigma = 2.93 \cdot 10^8 (\Omega \text{ m})^{-1}$. Den termiska ledningsförmågan K relaterar till den elektriska dito enligt Wiedemann-Franz lag

$$\frac{K}{\sigma} = \frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2} T. \Rightarrow K = 556 \text{ W/m} \cdot \text{K}$$

63) jämför 3D-fallet i Hook and Hall.

$$\begin{aligned}\frac{dN}{2} &= \frac{L}{2\pi} 2dk \Rightarrow dN = \frac{2L}{\pi} dk \\ E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Rightarrow dk = \frac{\sqrt{2m}}{2\hbar} \frac{dE}{\sqrt{E}} \\ dN &= \frac{2L}{\pi} \frac{\sqrt{2m}}{2\hbar} \sqrt{\frac{1}{E}} dE \Rightarrow N(E) = \frac{2L}{h} \sqrt{\frac{2m}{E}}\end{aligned}$$

64) a) Fermienergin ges av $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 \frac{N}{V})^{2/3}$, där N är antalet elektroner i volymen V. Välj den kubiska cellen där det finns 2 atomer som var och en ger 2 elektroner. $N = 4$ och $V = (4\text{\AA})^3$, vilket ger oss $E_F = 5.74 \text{ eV}$.

b) Elektronernas bidrag till värmekapaciteten ges av $C_e = \frac{\pi^2 k_B^2 n_0 T}{2E_F}$ per atom. n_0 är atomens valens. Med $n_0 = 2$ och multiplikation med N_A fås 0.37 J/mol K .

65) a) I fcc strukturen med gitterparameter a ges närmsta-granne-avståndet d av

$$d = \frac{a\sqrt{2}}{2} = \frac{4.04\text{\AA}}{\sqrt{2}} = 2.86\text{\AA}.$$

b) Fermienergin ges av $E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (\frac{3\pi^2 N}{V})^{2/3}$. I fcc innehåller varje cellkub 4 atomer, som i det här fallet var och en ger 3 elektroner till frielektrongasen. Dvs. cellens volym $V = a^3$, och antalet elektroner per kub $N = 4 \times 3$. Vi får således $E_F = 11.7 \text{ eV}$.

c) Fotoemitterade elektroner från Ferminivån har den högst kinetiska energin enligt $K_{\max} = hf - \phi = hc/\lambda - \phi$. När $K_{\max} = 0$ fotoemitteras inga elektroner, vilket ger $\lambda_{\max} = hc/\phi = 305\text{nm}$. ϕ är 4.08 eV enligt tabell i Serway.

66) Fermienergin ges som vanligt av $E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3}$. Litium är monovalent och bcc strukturen innehåller 2 atomer per kub, dvs. $N = 2$. Volymen $V = a^3$. Här är närmsta-granne-avståndet (d) givet. För bcc är $d = \sqrt{3}/2 a$. Med givna värden får vi $N/V = 4.72 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$ och $E_F = 4.77 \text{ eV}$.

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} \Rightarrow k_F = 1.12 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}.$$

$$\text{Medelenergin ges av } \langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty E f(E) N(E) dE}{\int_0^\infty f(E) N(E) dE}.$$

Antag att $T=0$, $f(E) = 1$ för $0 < E < E_F$ och 0 för övrigt.

För frielektronmodellen är $N(E) = C \sqrt{E}$ och vi får $\langle E \rangle = 3/5 E_F = \mathbf{2.86 \text{ eV}}$.

67) a) Sambandet mellan relaxationstiden och den elektriska konduktiviteten ges av

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e} \Rightarrow \tau = \frac{\sigma m_e}{ne^2}.$$

Den elektriska konduktiviteten ges också av $\sigma = L/RA$. Vilket leder till att $\tau = \frac{Lm_e}{RAn e^2} \cdot L$,

A och R är givna. Beräkna n. Cu har fcc struktur med $a = 3.61 \text{ \AA}$. En fri elektron per atom ger $n = \frac{4}{a^3}$, och $\tau = 2.18 \cdot 10^{-14} \text{ s}$

b) Drifthastigheten ges av $J = nv_{\text{drift}}e \Rightarrow v_{\text{drift}} = \frac{0.5 A}{10^{-6} m^2} \frac{1}{ne} = 37 \mu m/s$

c) Den fria medelväglängden ges av $\lambda = v_{\text{Fermi}}\tau$.

$$\text{Fermihastigheten ges av } E_F = \frac{mv_F^2}{2} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}}{2m_e} \Rightarrow v_F = 1.58 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

Vilket ger oss en medelfri väglängd $\lambda = 3.43 \cdot 10^{-8} \text{ m}$

68) a) Vi vet att medelfria väglängden ges av $\lambda = \tau v_F$. Relaxationstiden τ fås från

resistiviteten $\rho = \frac{m_e}{ne^2\tau}$. Vi behöver n. Vi vet att Cu har fcc struktur, dvs 4 atomer per kub.

$n = N/V = 4/(3.61 \text{ \AA})^3 = 8.50 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$. Med given resistivitet får vi $\tau = 2.46 \cdot 10^{-14} \text{ s}$. Och

$$\text{från } E_F = \frac{m_e v_F^2}{2} \Rightarrow v_F = 1.57 \cdot 10^6 \text{ m/s} \Rightarrow \lambda = 386 \text{ \AA}$$

b) Enligt Matthiesens regel (3.29 i boken) gäller att resistivitet från olika "källor" kan summeras, dvs. $\rho = \rho_{\text{ren}} + \rho_{\text{As}}$, där ρ_{As} är resistiviteten från arsenik föroreningarna. Med givna data vet vi att $\rho_{\text{As}} = 5.3 \cdot 10^{-8} \Omega m$. Samma resonemang som i a) kan användas, dvs. vi

räknar ut $\lambda_{\text{As}} = \tau_{\text{As}} v_F$, med $\rho_{\text{As}} = \frac{m_e}{ne^2\tau_{\text{As}}}$. Vi antar att E_F och gitterparameter inte

påverkas. Svaret blir sålunda $\lambda = 124 \text{ \AA}$.

69) Vi söker $\lambda = \tau v_F$. τ fås från resistiviteten $\frac{1}{\rho} = \sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \Rightarrow \tau = \frac{m}{\rho ne^2} = 3.67 \cdot 10^{-15} \text{ s}$

Fermihastigheten fås från $E_F = \frac{mv_F^2}{2} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \Rightarrow v_F = 2.23 \cdot 10^6 \text{ m/s}$

Den medelfria väglängden är således 82 Å.

70) a) Enligt ekvation 3.34 i boken är $\partial \mathbf{k} = \frac{m_e}{\hbar} \mathbf{v} = -\frac{e\tau}{\hbar} \mathbf{E}$. Givet att

$$\partial \mathbf{k} = 0.01 \mathbf{k}_F = 0.01 \frac{\sqrt{2m_e E_F}}{\hbar} = 1.36 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1} \text{ ger oss en fältstyrka } E = 4.5 \text{ MV/m.}$$

b) $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} = \{ \sigma = 5.9 \cdot 10^7 (\Omega \text{m})^{-1}, \text{ se t.ex. uppgift 67} \} = 2.7 \cdot 10^{14} \text{ A/m}^2$.

Svaren i både a) och b) är helt orimliga, vilket visar att Fermisfären är obetydligt förskjuten vid normala strömmar och fält.

Gittervibrationer, fononer och termiska egenskaper (71-76)

71) Grupphastigheten ges av $v_g = d\omega/dk = \Delta\omega/\Delta k$, som kan mätas direkt ur figuren.

Frekvensaxeln är märkt med rätt enhet. k-axeln går från 0 till första Brillouinzonsgärnsen. För en enkelt kubisk kristallstruktur (med gitterparameter a) vet vi att reciproka gittret också är enkelt kubiskt med sidan $2\pi/a$. Brillouinzonsgärnsen ligger då vid $\pi/a = 0.628 \text{ Å}^{-1}$.

a) $\Delta\omega/\Delta k = (\text{mät t.ex. mellan andra och tredje punkten}) = \frac{0.5 \cdot 10^{12}}{\frac{1}{10} 0.628 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}} \approx 800 \text{ m/s}$

b) $\Delta\omega = 0$ ger $v_g = 0$.

72) a) Vi vet att enligt Debye gäller det för ljudvågor att $\omega = vk$. Den högsta frekvensen, och därmed den högsta energin ges av $\omega = \omega_D$. Ekv 2.50 i boken ger Debyefrekvensen enligt:

$$\frac{6\pi^2 N}{V} = \frac{\omega_D^3}{v^3} \Rightarrow \omega_D = v \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N}{V}} = vk. \text{ Med } N = 2 \text{ och } V = (4.23 \text{ Å})^3 \text{ får vi } k = 1.16 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1} \text{ och energi } 7.6 \text{ meV.}$$

b) För en elektron vid Fermivån gäller

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} = 3.24 \text{ eV} \Rightarrow k_F = \frac{\sqrt{2mE_F}}{\hbar} = 0.92 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

c) Fononens energi är mycket lägre än elektronens energi vid Fermivån. Vid en kollision kan därför elektronens energi inte ändras nämnvärt. Däremot är vågvektorerna av samma storlek och en elektron kan därför ändra rörelseriktning efter en fononkollision.

73) Vid låga temperaturer gäller att gittrets bidrag till värmekapaciteten ges av

$$C = \frac{12R\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3. \text{ Elektronernas bidrag är linjärt beroende av temperaturen så } C \text{ kan}$$

även skrivas: $C = \alpha T^3 + \gamma T$, där den första termen är från gittret och den andra från

elektronerna. Ur den första termen kan vi lösa $\theta_D = \left(\frac{12\pi^4}{5\alpha} R \right)^{1/3}$, där allt utom α är känt.

α fås ur $\frac{C}{T} = \alpha T^2 + \gamma$, dvs. plotta C/T mot T^2 . Lutningen ger $\alpha = 3.01 \text{ J kmol}^{-1} \text{ K}^{-4}$, och $\theta_D = 86.8 \text{ K}$.

b) Eftersom $T > \theta_D$ ges fononbidraget till specifika värmekapaciteten av Dulong-Petits lag:

$$C(T=200\text{K}) = 3R + \gamma T$$

{ γ fås från linjens skärningspunkt med C/T axeln, $1.98 \text{ J kmol}^{-1} \text{ K}^{-2}$ }

$$C = 8314 + 1.98 \cdot 200 = 2.53 \cdot 10^4 \text{ (J kmol}^{-1} \text{ K}^{-1}\text{)}$$

74) Värmekapaciteten har två bidrag, gitterbidraget C_g och elektronbidraget C_e .

Gitterbidraget ges av Debyemodellen, $C_g = \frac{12Nk_B\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3$. Här är $N = N_A$.

$$\text{Elektronbidraget } C_e = \frac{\pi^2 k_B^2 T N}{2E_F}$$

Givet E_F , N och θ_D för Al och Cu.

Al	$E_F = 11.58 \text{ eV}$	$N = 3N_A$	$\theta_D = 428 \text{ K}$
Cu	$E_F = 7.00 \text{ eV}$	$N = N_A$	$\theta_D = 345 \text{ K}$

Sätt värmekapaciteterna för Al och Cu lika =>

$$\frac{12N_A k_B \pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_{DCu}} \right)^3 + \frac{\pi^2 k_B^2 T N_A}{2 \cdot E_{FCU}} = \frac{12N_A k_B \pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_{DAL}} \right)^3 + \frac{\pi^2 k_B^2 T 3N_A}{2 \cdot E_{FAl}}$$

$$\text{Skriv om till } \frac{12k_B \pi^4}{5} \left(\frac{1}{\theta_{DCu}^3} - \frac{1}{\theta_{DAL}^3} \right) T^3 + \frac{\pi^2 k_B^2}{2 \cdot} \left(\frac{1}{E_{FCU}} - \frac{3}{E_{FAl}} \right) T = 0$$

$$\text{En lösning är } T=0. \text{ De övriga två ges av } T^2 = - \frac{5k_B}{2 \cdot 12\pi^2} \left(\frac{1}{E_{FCU}} - \frac{3}{E_{FAl}} \right) \left(\frac{1}{\theta_{DCu}^3} - \frac{1}{\theta_{DAL}^3} \right)^{-1}$$

Enda lösningen med $T > 0$ är $T = 4.3 \text{ K}$.

75) Materialets värmekapacitet kan skrivas (1) $C = \gamma T + \alpha T^3$, där den första termen är elektronernas bidrag och den andra är gittrets bidrag.

a) Plotta C/T mot T^2 . Man får då en rät linje vars skärningspunkt med C/T -axeln ger γ . Här får vi $\gamma = 3 \text{ mJ/mol K}^2$, vilket stämmer väl med Pb i tabellen.

b) Stoppa in resultaten från a) i (1) för en i tabellen given kombination av temperatur och

C. Härur löses $\alpha = 2.2 \text{ mJ/mol K}^4$. Vi vet att $\alpha = \frac{12\pi^4 R}{5\theta_D^3}$. Vilket ger en $\theta_D = 95 \text{ K}$.

Man kan naturligtvis ta fram θ_D från lutningen och lösa ut γ ur (1) om man så vill.

76) Värmekapaciteten för ett material ges generellt av $C = C_g + C_e$ där den första termen är gittrets bidrag och den andra elektronernas bidrag.

(med $\alpha = \frac{12\pi^4 N}{5\theta_D^3}$) vid låga temperaturer (jämfört med Debyetemperaturen) och

$C_g = 3Nk_B$ vid högre T (Dulong-Petit)

$C_e = \gamma T$. Diamant är en isolator, så $\gamma = 0$.

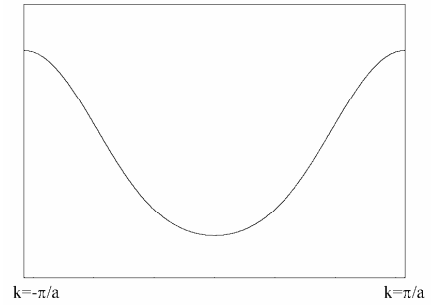
För Cu kan vi räkna ut $\gamma = \frac{\pi^2 k_B^2 N}{2E_F} = 0.5 \text{ mJ/mol} \cdot \text{K}^2$

Så i vårt fall gäller Debyemodellen för både diamant och koppar vid 4 K och 30 K. Vid 400 K beskrivs diamant fortfarande av Debyemodellen, men för Cu gäller Dulong-Petits samband. Så vi får

	4K	30K	400K
Diamant	11 $\mu\text{J/mol}\cdot\text{K}$	4.7 $\text{mJ/mol}\cdot\text{K}$	11.2 $\text{J/mol}\cdot\text{K}$
Cu	5.1 $\text{mJ/mol}\cdot\text{K}$	1.32 $\text{J/mol}\cdot\text{K}$	25.1 $\text{J/mol}\cdot\text{K}$

Elektroner i periodisk potential, nästa frielektronmodellen (77-82)

- 77) Med gitterparametern a blir den reciproka vektorn $2\pi/a$. Den första Brillouin-zonen är intervallet $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$, inom vilket vi skissar funktionen enligt figuren.



Energien vid zongränserna är $\mathcal{E}(\pm \frac{\pi}{a}) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$ och i

mitten av zonen $\mathcal{E}(0) = \frac{\hbar^2}{ma^2} (\frac{7}{8} - 1 + \frac{1}{8}) = 0$

Elektronernas hastighet ges av $\frac{1}{\hbar} \frac{d\mathcal{E}}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{\hbar^2}{ma} \left(\sin ka - \frac{1}{4} \sin 2ka \right)$, dvs

$$\frac{d\mathcal{E}}{dk}(0) = \frac{d\mathcal{E}}{dk}(\pm \frac{\pi}{a}) = 0$$

Den effektiva massan m^* definieras som $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\mathcal{E}}{dk^2}$.

Derivera dispersionsrelationen $\frac{d^2\mathcal{E}}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m} \left(\cos ka - \frac{1}{2} \cos 2ka \right)$ och sätt in relevanta värden

på k . $k = 0$ ger $\frac{d^2\mathcal{E}}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{2m}$ och $m^* = 2m$ och $k = \pm \pi/a$ ger $m^* = -2m/3$

- 78) Jämför uppgift 63. Sätt in aktuellt uttryck för sambandet mellan energi och vågvektor. Om

$$\text{du gjort rätt ska svaret bli: } g(\mathcal{E}) = \frac{2L}{\pi a} \cdot \frac{1}{\sqrt{B^2 - (A - \mathcal{E})^2}}$$

- 79) Iden är att ta fram k -värdet för olika symmetripunkter, beräkna energin för dessa punkter

utgående från frielektronmodellen $\mathcal{E}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. För att första zonen ska vara helt fylld

ska den högsta energin motsvara frielektronvärdet för det största k -värdet. Vid de andra symmetripunkterna är energin lägre, och om inget energigap finns vid dessa gränser kommer elektroner att fyllas på i den andra zonen istället för att fylla de avlägsna punkterna i den första zonen. Energigapet vid en given punkt på zongränsen måste då vara den högsta energin minus frielektronvärdet i den aktuella punkten..

Från en geometrisk betraktelse av den givna figuren kan man sluta sig till att de olika symmetripunkterna i Brillouin-zonen har följande värden på k och energi (med $a = 5.58 \text{ \AA}$)

	Γ	X	L	U	W
k	0	$2\pi/a$	$1.73\pi/a$	$6.68/a$	$7.05/a$
$\mathcal{E} \text{ (eV)}$	0	4.84	3.63	5.45	6.09

Det högsta värdet är 6.09 eV, och de minsta energigapen är t.ex. $6.09 - 4.84 = 1.25 \text{ eV}$ vid X, och $6.09 - 3.63 = 2.46 \text{ eV}$ vid L.

80) I den oordnade formen är potentialen i varje gitterpunkt ett medelvärde av värdet från X och värdet från Y. Avståndet mellan två ekvivalenta punkter är därför gitterparametern a och dispersionrelationen skrivs som i problemställningen. I den ordnade formen är varannan atom X och varannan Y, på avstånden a från varandra. Avståndet mellan två ekvivalent gitterpunkter är då $2a$. Dispersionsrelationen ges då av $\varepsilon(k) = A - B \cos 2ka$

81) För en enkel kubisk struktur är $k_F^3 = \frac{3\pi^2}{a^3} \Rightarrow k_F = 3.09/a$.

Den första Brillouinzonen är en kub med sidan $2\pi/a$, och zongränsen har värdet $k = \pi/a$, som är något litet större än k_F . Fermisfären ryms då i den första Brillouinzonen, och det kortaste avståndet mellan sfär och kub är $0.05/a$.

82) Endast de fria delarna av Fermiytan som ej är i kontakt med zongränsen kan bidra till den elektriska ledningen.

Halvledare (83-98)

83) Ledningsförmågan ges av $\sigma = en_e \mu_e + en_p \mu_p$. Vid egenledning är $n_e = n_p = n_i = 1.4 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$.

a) $\mu_p = \sigma / en_i - \mu_e = 0.05 \text{ m}^2/\text{Vs}$.

b) Dopning ger $n = N_D + p$. Vi vet även att $np = n_i p_i = \text{konstant}$

Dvs. $(N_D + p)p = n_i^2 \Rightarrow p = 2.70 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3}$. $n = 7.27 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3}$, $\Rightarrow \sigma = 1.53 \cdot 10^{-3} (\Omega\text{m})^{-1}$.

84) Konduktiviteten ges av $\sigma = \frac{1}{\rho} = ne\mu_e + pe\mu_h$

Provet är egenledande, då är koncentrationen av hål och elektroner desamma, dvs. $n = p$. Den totala laddningskoncentrationen ges av

$$n_i^2 = np = 2 \left(\frac{2\pi n_e^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} e^{\frac{\mu - E_g}{k_B T}} 2 \left(\frac{2\pi n_h^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} e^{\frac{-\mu}{k_B T}} =$$

$$4 \left(\frac{2\pi n_e k_B}{h^2} \right)^3 T^3 \left(\frac{m_e^*}{m_e} \right)^{3/2} \left(\frac{m_h^*}{m_e} \right)^{3/2} e^{\frac{-E_G}{k_B T}} = 1.75 \cdot 10^{42} T^3 e^{\frac{-E_G}{k_B T}}$$

$$\frac{1}{\rho} = n_i e (\mu_e + \mu_h) = 4.18 \cdot 10^{20} e (\mu_e + \mu_h) T^{3/2} e^{\frac{-E_G}{2k_B T}}$$

lös ut E_g och tag logaritmen $\Rightarrow$

$$E_G = -2k_B T \ln \left(\frac{1}{\rho (\mu_e + \mu_h) e \cdot 4.18 \cdot 10^{20} T^{3/2}} \right) = 0.70 \text{ eV}$$

- 85) a) Jonisationsenergin är den energi som krävs för att lyfta bort den svagast bundna elektronen från en atom, dvs. dess bindningsenergi. För en dopatom i kisel kan den yttersta elektronens bindningsenergi fås från Bohrmodellen med $n=1$. Byt m mot m_e^* och ϵ mot $\epsilon\epsilon_0$.

$$E_j = \frac{m_e^* e^4}{8\epsilon^2 \epsilon_0^2 h^2} = \frac{0.43 m_e e^4}{(11.7)^2 8\epsilon_0^2 h^2} = \frac{0.43}{(11.7)^2} 13.6 \text{ eV} = 0.043 \text{ eV}$$

- b) För att beräkna konduktiviteten antas att endast dopatomernas bidrar, $N_D \gg n_i$.

Sålunda gäller $\sigma = en\mu_e$. e och μ_e kan anses temperaturoberoende och förhållandet mellan ledningsförmågorna är detsamma som förhållandet mellan laddningsbärarkoncentrationerna vid de olika temperaturerna.

$$\frac{\sigma(T = 250)}{\sigma(T = 300)} = \frac{n(T = 250)}{n(T = 300)} = \frac{e^{-E_d/k_B 250}}{e^{-E_d/k_B 300}} = 0.72$$

- 86) Vi vet att 1) $\sigma = e(n\mu_e + p\mu_h)$ och att 2) $n_i^2 = n \cdot p$. För att minska konduktiviteten skall vi minska antalet elektroner och öka antalet hål. Dvs. vi ska dopa med Al som är trevärt.

Skriv om 1) med 2) till $\sigma = \frac{n_i^2}{p} e\mu_e + pe\mu_h$. Minimum fås då

$$\frac{d\sigma}{dp} = -\frac{n_i^2}{p^2} e\mu_e + e\mu_h = 0 \Rightarrow p = n_i \sqrt{\frac{\mu_e}{\mu_h}} \Rightarrow n = n_i \sqrt{\frac{\mu_h}{\mu_e}}$$

$$p = N_A + n \Rightarrow N_A = p - n = n_i \sqrt{\frac{\mu_e}{\mu_h}} - n_i \sqrt{\frac{\mu_h}{\mu_e}} = 1.47 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}.$$

- 87) Fermivå i materialet ges av $\mu = \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \frac{m_h}{m_e}$

Med $E_g = 1.42 \text{ eV}$, och $\frac{m_h}{m_e} = \frac{0.68}{0.07}$ får vi $\mu = 0.744 \text{ eV}$

Konduktiviteten ges av $\sigma_i = n_i e \mu_e + p_i e \mu_h$. Odopat innebär att $n_i = p_i = \sqrt{np}$.

Från ekv 5.23, 5.21 och 5.17 får vi $n_i = \sqrt{np} = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} e^{-E_g/2k_B T}$

Hål- respektive elektronmobiliteter i GaAs är: $\mu_h = 0.045 \text{ m}^2/\text{Vs}$ och $\mu_e = 0.85 \text{ m}^2/\text{Vs}$, vilket ger oss konduktiviteten $\sigma = 4.3 \times 10^{-7} (\Omega\text{m})^{-1}$.

- 88) a) Hallkoefficienten är $R_H = \frac{1}{nq}$. Här är $R_H < 0$ och laddningsbärarna är negativt laddade,

dvs. elektroner. Med givet värde på R_H och värdet på elektronens laddning får vi en laddningsbärarkoncentration $n = 7.18 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$.

Vi har ett n-dopat prov med $n \gg n_i$ vilket ger att $n \gg p$. Då ges konduktiviteten av $\sigma = ne\mu_e$. Mobiliteten i kisel är $0.13 \text{ m}^2/\text{Vs}$, och resistiviteten blir då $\rho = 0.67 \text{ m}\Omega \text{ m}$.

b) Ekvation 5.35 i Hook and Hall ger ett samband mellan N_D^+ , N_D , E_D , μ , E_G och T . Här är n känt från a) och kan antas vara lika med N_D^+ , N_D är givet, $\mu = E_G - 25 \text{ meV}$, $E_G = 1.14 \text{ eV}$. Lös ut $T \Rightarrow T = 315 \text{ K}$.

89) Bandgapet, E_g , för GaAs är 1.42 eV och för InAs 0.36 eV. Gitterparametern är 5.653 Å för GaAs och 6.058 Å för InAs.

a) Bandgapet för olika x kan då varieras mellan 1.42 eV respektive 0.36 eV. Vi skriver $E_g(x) = 0.36 + 1.06x \text{ eV}$. För given våglängd, 1.24 mm, är fotonernas energi 1.00 eV, vilket skall sammanfalla med bandgapet. Ur detta löser vi $x = 0.60$.

b) Gitterparametern $a(x)$ kan analogt skrivas $a(x) = x \cdot 6.058 + (1-x) 5.653$. Med från a) uträknat x får vi $a = 5.90 \text{ Å}$. Med sambandet $\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2} (h^2 + k^2 + l^2)$ beräknas första vinkeln till $\theta = 13.06^\circ$.

90) När en foton absorberas och en elektron exciteras från valensbandet till ledningsbandet skapas ett elektron-hål par. Rörelsemängden (vågvektorer) liksom energin ska bevaras i processen. Fotonens rörelsemängd är försumbar vid dessa energier, så elektronen lyfts från ett tillstånd (k_0) "rakt upp" i k -rummet så att efter excitationen är $k_e = k_h = k_0$.

Energien för elektronen i ledningsbandet ges av $\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_e^*}$, och energin för hålet i

valensbandet ges av $\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_h^*}$, där m_e^* och m_h^* är de effektiva massorna. Energins

bevarande ger då $\frac{\hbar^2 k_0^2}{2} \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right) = hf - \varepsilon_G$

För GaAs är bandgapet 1.4 eV, och de effektiva massorna är $m_e^* = 0.07 m_e$, och $m_h^* = 0.68 m_e$. Lös ut $k_0 = 0.58 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$, sätt in i uttrycken för energierna ger $E_h = 0.0187 \text{ eV}$, $E_e = 0.1813 \text{ eV}$.

91) Vi känner $N_D = 10^{18} \text{ m}^{-3}$. $n_i = N_D$ kan sättas som gränsen mellan extrinsisk och intrinsisk. Vid 300 K är $n_i = 2 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$, och provet är extrinsiskt. Vi kan beräkna den intrinsiska laddningsbärarkoncentrationen från

$$\text{ekv 5.23: } n_i = (N_C N_V)^{1/2} \exp\left(-\frac{E_G}{2k_B T}\right) = A T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_G}{2k_B T}\right).$$

Bestäm A från $n_i = 2 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$ vid $T = 300 \text{ K}$, ger $A = 7 \cdot 10^{21}$.

Använd detta A i ekv 5.23 och lös för $n_i = 10^{18} \text{ m}^{-3}$, vilket ger $T = 360 \text{ K}$. Dvs under 360 K är Si extrinsiskt och över 360 K är det intrinsiskt.

92) Vi kan använda Bohrmodellen på sidan 136 i H&H. Ekv. 5.12 ger grundtillståndets energi

$$E_1 = -\frac{m_e^*}{m_e} \cdot 13.6 \text{ eV} = -6.6 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$$

$$\text{Banradien ges av ekvation 5.13 } r_1 = \frac{m_e \mathcal{E}}{m_e^*} \cdot 0.53 \text{ \AA} = 650 \text{ \AA}$$

Och slutligen kan vi ta fram den donatortäthet då banorna överlappar genom att beräkna

$$N_D = \frac{1}{V} = \frac{3}{4\pi r^3} = 8.7 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-3}$$

93) I figuren har vi konduktiviteten given som funktion av temperaturen.

Konduktiviteten ges av $\sigma(T) = n\mu_e e + p\mu_h e$. Här har vi donatordopat Ge, och om vi betraktar kurvan för $N_D = 10^{22} \text{ m}^{-3}$ kan vi bortse från hålens bidrag ($n_i \ll N_D$ i grafens linjära område). $\sigma(T) = n\mu_e e = \mu_e e \sqrt{N_C N_V} \exp\left(-\frac{E_D}{2k_B T}\right)$. Här har vi använt ekv. 5.36 i H&H;

$n = \sqrt{N_C N_V} \exp\left(-\frac{E_D}{2k_B T}\right)$ för att beskriva laddningsbärarkoncentrationen. Antag att mobilitetens och $N_C N_V$'s temperaturberoenden är dels svagare än n 's och dels att de motverkar varandra. Så det enda som spelar roll är n , så $\sigma \approx A \exp\left(-\frac{E_D}{2k_B T}\right)$

Ur $\frac{d \ln \sigma}{d(1/T)}$ kan vi lösa E_D . Med hjälp av linjal och ett gott ögonmått (eller lite tjuvläsning i H&H's facit) kommer man fram till att i den linjära delen ändras σ en faktor 100 när $1/T$ ändras 0.04.

$$\frac{d \ln \sigma}{d(1/T)} = \frac{\Delta \ln \sigma}{\Delta(1/T)} = \frac{-\ln 100}{0.04} = \frac{-E_D}{2k_B} \Rightarrow E_D = 0.020 \text{ eV}$$

94) Hall-koefficienten ges av uttrycket $R_H = \frac{1}{nq}$. Vi behöver n för Na och InSb.

$$\text{För Na fås värdet från } n = \frac{N}{V} = \frac{2}{(4.28 \cdot 10^{-10})^3} = 2.55 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3} \text{ och } R_H = -2.45 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3/\text{C}.$$

InSb är instrinsiskt laddningsbärarkoncentrationerna är n_i , som ju ser ut på följande vis:

$$\text{Ekv 5.23 H\&H } n_i = \sqrt{N_C N_V} \exp\left(-\frac{E_G}{2k_B T}\right). \text{ Som med hjälp av 5.17 och 5.21 kan}$$

$$\text{skrivas } n_i = 2 \left(\frac{2\pi k_B T}{h^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_h^*)^{3/4} \exp\left(-\frac{E_G}{2k_B T}\right) = 1.55 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}.$$

$n=p$, men InSb ger en negativ Hallkoefficient, därför att elektronernas mobilitet är mycket större, deras effektiva massa är mer än 10 gånger lägre. Så InSb har $R_H = -0.40 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{C}$. Härur bestämmer vi Hallspänningarna från sambandet 3.38 i H&H

$$V_H = E_H \cdot \text{bredd} = j_x B \cdot R_H \cdot \text{bredd} = \frac{I_x B \cdot R_H \cdot \text{bredd}}{t_{\text{tjocklek}} \cdot \text{bredd}} = \frac{0.1 \cdot 0.1 \cdot R_H}{0.001} = 10 R_H$$

För Na är $V_H = -2.45 \text{ nV}$ och för InSb blir det -4 mV .

95) Ekvationerna 6.7 och 6.9 gäller enligt frågan, se slutet av lösningen. I kapitel 6.2 räknar man från dessa sig fram till ekv 6.10, som ger laddningsbärarkoncentrationerna $\phi(x)$.

$$\begin{aligned} \text{Ekv 6.10} \quad n(x) &= n_0 \exp[e\phi(x)/k_B T] \\ p(x) &= p_0 \exp[-e\phi(x)/k_B T] \end{aligned}$$

$n(x)$ och $p(x)$ når värdet $0.50n_0$ resp. $0.50p_0$ när $e\phi(x)/k_B T = -\ln 2$ och

$-e\phi(x)/k_B T = -\ln 2$. Härur löser vi att $\phi(x) = \frac{\ln 2 k_B T}{e} \approx 0.018V$ när laddningsbärar-

koncentrationen är 50%. Ekv 6.9 ger utarmningsområdesdjupen. Med $N_A=N_D$ är de lika stora på båda sidor om gränsen. Och ur ekv 6.7 löser vi för t.ex. p-sidan att

$$\phi(x) = 2\Delta\phi_0 \frac{(x+w_p)^2}{(w_n+w_p)^2} \Rightarrow \sqrt{\frac{\phi(x)}{2\Delta\phi_0}} = \frac{x+w_p}{w_n+w_p}$$

$$\text{Ekv. 6.2} \quad \Delta\phi_0 = \frac{k_B T}{e} \ln \left(\frac{N_A N_D}{n_i^2} \right) \text{ ger}$$

$$(Si) : \frac{x+w_p}{w_n+w_p} = 0.11 \text{ och } (Ge) : \frac{x+w_p}{w_n+w_p} = 0.17$$

$$\text{Ekv 6.7} \quad \phi(x) = \begin{cases} \frac{eN_A}{2\epsilon\epsilon_0} (x+w_p)^2 \\ \Delta\phi_0 - \frac{eN_D}{2\epsilon\epsilon_0} (x-w_n)^2 \end{cases} \text{ för } \begin{cases} -w_p < x < 0 \\ 0 < x < w_n \end{cases}$$

$$\text{Ekv 6.9} \quad w_n = \left(\frac{2\epsilon\epsilon_0 N_A \Delta\phi_0}{eN_D (N_A + N_D)} \right)^{1/2} \text{ och } w_p = \left(\frac{2\epsilon\epsilon_0 N_D \Delta\phi_0}{eN_A (N_A + N_D)} \right)^{1/2}$$

96) Resonansfrekvensen ges av $f = \frac{1}{2\pi\sqrt{LC}}$. L är givet (100 μH), vi söker C. Från ekv. 6.17

lär vi oss att $C = \left(\frac{\epsilon\epsilon_0 N_A N_D}{2(N_A + N_D)(\Delta\phi_0 - V)} \right)^{1/2}$ per areaenhet (F/m^2). Här är allt givet utom

$\Delta\phi_0$, som, inte helt förvånande, står att lösa ur en annan ekvation i boken, nämligen 6.2.

Den lyder: $\Delta\phi_0 = \frac{k_B T}{e} \ln \left(\frac{N_A N_D}{n_i^2} \right)$. Med $N_A=N_D=10^{22} \text{ m}^{-3}$, $T=300K$, $\epsilon_r=12$, $n_i=2 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$

och pn-övergångens area 10^{-6} m^2 , får vi $C(-1 \text{ V})=1.59 \cdot 10^{-10} \text{ F}$ och $C(-10 \text{ V})=0.63 \cdot 10^{-10} \text{ F}$. Härur löser vi $f(-1 \text{ V}) = 1262 \text{ Hz}$ och $f(-10 \text{ V}) = 2005 \text{ Hz}$.

97) Dopningen ger upphov till en laddningstäthet $e(N_D - N_A) = ekx = \rho(x)$. Poissons ekvation 6.4:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon\epsilon_0} = -\frac{ekx}{\epsilon\epsilon_0}. \text{ Integration ger } \frac{d\phi}{dx} = -\frac{ekx^2}{2\epsilon\epsilon_0} + A = -E(x). \text{ Ytterligare en}$$

$$\text{integration ger } \phi(x) = -\frac{ekx^3}{6\epsilon\epsilon_0} + Ax + B. \text{ A och B får vi ur randvillkor.}$$

Dopningen är symmetrisk med avseende på $x=0$, så även $\phi(x)$ och $E(x)$.

Utarmningsområdena är också lika tjocka, $w_n = w_p = w$.

$$\text{I båda utarmningsområdesgränserna är } E=0 \Rightarrow A = \frac{ekw^2}{2\epsilon\epsilon_0}$$

$$\phi(-w)=0 \Rightarrow B = \frac{ekw^3}{3\epsilon\epsilon_0} \text{ och } \phi(w)=\Delta\phi_0 \Rightarrow \Delta\phi_0 = \frac{2ekw^3}{3\epsilon\epsilon_0} \Rightarrow w = \left(\frac{3\epsilon\epsilon_0\Delta\phi_0}{2ek}\right)^{1/3} \text{ ger}$$

$$\phi(x) = -\frac{ekx^3}{6\epsilon\epsilon_0} + \frac{ekw^2}{2\epsilon\epsilon_0}x + \frac{ekw^3}{3\epsilon\epsilon_0} = \frac{\Delta\phi_0}{4w^3}(w+x)^2(2w-x)$$

98) Ekvationen 6.19 säger $I_e = I_{e0} \left[\exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) - 1 \right]$, där V är den pålagda spänningen över

pn-övergången. Med $V=-0.15\text{V}$ och $T=300\text{K}$ är $I_e = 5\mu\text{A}$ och $I_{e0} = 5.015\mu\text{A}$. I framspänt läge är $V = 0.15\text{V}$ och $I_e = 1.65\text{mA}$

Gamla tentor med lösningar från åren 2004 - 2009

Tentamen i IF1602 - Fysik del 2 – Materialfysik för E, 2009-01-13

Tillåtna hjälpmedel: miniräknare, läroböckerna Serway och Hook & Hall eller ekvivalenta alternativ, (t.ex. Halliday/Resnick istället för Serway, Kittel, Rosenberg eller Myers istället för Hook & Hall) dock max 2 böcker, formelsamling (Tefyma/Beta/Physics Handbook), en sammanfattning av kursen på högst ett A4-blad, samt tillägget "Massformeln".

*Rita tydliga figurer, motivera använda samband antingen genom egen härledning eller hänvisning till boken och förklara beteckningar. Lösningar med enbart ekvationer utan förklaring ger poängavdrag. Läs igenom uppgifterna noggrant innan ni börjar räkna och **om ni har problem, fråga!***

Rätt löst uppgift i del A ger 4p. Del B är **komplettering** av inlämningsuppgifterna, dvs ni som redan fått poäng på motsvarande inlämningsuppgift behöver ej lösa detta tal. Detta gäller även omtentamen. Korrekt lösning på del B ger 1.5p. Totalt kan 30p (24 + 6) erhållas.

Betygsgränser:	≥ 24 p ger betyg A,	22-23.5 p ger betyg B,
	19-21.5 p ger betyg C,	17-18.5 p ger betyg D,
	15-16.5 p ger betyg E	13-14.5 ger betyg Fx med rätt till komplettering

Tentaresultat kommer att anslås inne på STEX och per email. Skriftligt klagomål på tentarättning skall vara examinator tillhanda senast 3 veckor efter det att resultatet anslagits. För muntlig komplettering, kontakta examinator inom 3 veckor efter att resultatet anslagits.

Del A.

- 1) Den miljömedvetne, och könsneutrale, teknologen Oscarulda vill skapa en solcell genom att belägga en TiO_2 yta med en tunn metallfilm. Tanken är att metallfilmen ska fungera som en kvantbrunn vari det skapas kvantiserade energinivåer. Solljuset absorberas när det lyser på kvantbrunnen och elektroner lyfts till titandioxidens ledningsband. Absorptionen sker inom smala våglängdsintervall som beror på filmtjockleken. Störst absorption fås när elektronen lyfts precis ut ur kvantbrunnen in i ledningsbandet och där förs bort. Man får också med ökande tjocklek fler nivåer som bidrar till absorptionen. (För att det eventuellt ska fungera i verkligheten krävs lite fler komponenter än de jag anger här)

a) Er uppgift blir att räkna fram tjockleken, L , på metallfilmen sådan att man får absorption av $\lambda = 450$ nm från grundnivån i gropan. Beräkna energinivåerna från den oändligt djupa gropan. Antag att brunnen är $U = 3.2$ eV djup. (2p)

b) Hur många bundna tillstånd finns det i kvantgropan och vilka ytterligare våglängder kommer att absorberas (2p)

- 2) En stjärnklar vinternatt 1974 studerade L.E. Snyder och D. Buhl radiostjärnan Orion A och fann en signal med frekvensen 86.243 GHz, som man förklarade med övergångar mellan två rotationsnivåer i $^{28}\text{Si}^{16}\text{O}$. Jämviktsavståndet mellan kärnorna i molekylen är 1.5097 Å.

a) Vilka är de aktuella rotationsnivåerna? (3p)

b) Om molekylen inte når sitt grundtillstånd efter den ovan beskrivna övergången kommer den att ta ytterligare steg nedåt. Vilken(a) ytterligare frekvens(er) kan man observera från molekylen i a)? (1p)

- 3) Ett $2 \cdot 10^{13}$ Bq starkt ^{72}Zn preparat är inneslutet i en tjockväggig blybehållare. ^{72}Zn β -sönderfaller till en exciterad nivå i ^{72}Ga , betecknad $^{72}\text{Ga}^*$. $^{72}\text{Ga}^*$ de-exciterar genom att sända ut två fotoner (γ) med energierna $\gamma_1=0.145$ MeV och $\gamma_2=0.016$ MeV. Massan för ^{72}Zn är 71.926856 u, och massan för ^{72}Ga är 71.926365 u.

a) beräkna Q-värdet för sönderfallsprocessen (2p)

b) Hur stor effekt upptas av blybehållaren? Antag att medelenergin för β -partikeln är halva K_{max} . (2p)

- 4) Vatten fryser till is, snö faller, det är vinter. Den vanliga storstadsbon kanske inte ägnar vattnets, snöns och isens molekylstruktur många tankar, men för eskimåer och samer som lever sina liv i snörika områden vet man att snö kan ha väldigt olika egenskaper. Vid det relativt okända Eskimo Research Lab vet man, efter många års studier, att is existerar i flera olika kristallstrukturer beroende på temperatur och tryck och även på iskristallernas storlek. Vid ett röntgendiffraktionsexperiment ($\lambda = 1.54 \text{ \AA}$) mätte man en struktur som gav följande Braggvinklar: 12.11° , 20.03° , 23.68° och 28.98° .

a) Bestäm kristallstruktur och gitterparameter. (3p)

b) Friktionen mellan en släde och snön beror på vilka kristallplan som ligger parallellt med "snöytan", och hur många obundna syreatomer det finns i just de planen. Hur många syreatomer/ $\text{\AA}^2$ innehåller det plan som ger upphov till den första reflexen i a)? (1p)

Tillåtna reflexer för kubiska strukturer.

$h^2 + l^2 + k^2$	0	1	2	3	4	5	6	•	8	9	10	11	12	13	14	•	16	17	18	19	20	21	22	•	24
sc																									
bcc																									
fcc																									
diamond cubic																									

- 5) Genomfrusen och ensam på en vindpinad fjälltopp söker du värme och skydd från kylan. En björn går förbi och bjuder dig hem till sitt ide. Ni pratar en stund men ni förstår inte riktigt vad det har med tentauppgiften att göra. Nej ibland kan det vara svårt att se sambanden.

Tabellen nedan visar dock resultatet från en serie mätningar av silvers specifika värme.

T(K)	0.50	1.00	5.00	10.00	15.00
Cv (mJ/mol·K)	0.34	0.82	24.6	177.0	585.5

a) Beräkna med hjälp av dessa data Fermitemperatur och Debytemperatur för silver. (2p)

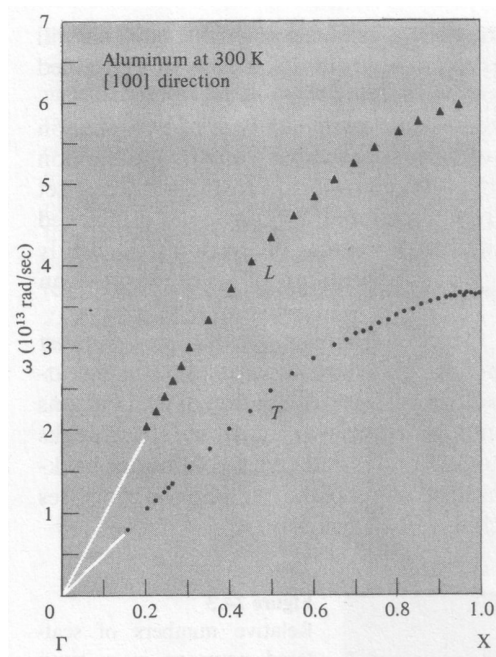
b) Jämför det ovan erhållna värdet på Fermitemperaturen med ett värde som ni beräknar ur den fria elektronmodellen. Silver har fcc struktur, med gitterparameter $4.09 \text{ \AA}$, och en valenselektron/atom. (2p)

- 6) Kisel har ett betydligt större bandgap än germanium och därmed också högre resistivitet. Beräkna vilken temperatur kisel skall ha för att ha samma elektriska ledningsförmåga som germanium vid rumtemperatur. (4p)

	E_G (eV)	a (Å)	μ_e (m^2/Vs)	μ_h (m^2/Vs)	m_e^* (m_e)	m_h^* (m_e)	ϵ
Si	1.12	5.43	0.13	0.048	0.43	0.54	11.7
Ge	0.67	5.66	0.38	0.18	0.12	0.32	16

Del B.

- 7) Beräkna fotonenergin för K_α -strålning från Mn. (1.5p)
- 8) Beräkna en väteatoms rekylen energi då en foton emitteras till följd av en övergång från $n=2$ till $n=1$. Använd Bohrmodellens energier.
Hur påverkas denna energi om atomen befinner sig i ett magnetfält $B=1\text{T}$? (1.5p)
- 9) Beräkna skillnaden i atomär kohesivenergi mellan NaCl i NaCl-struktur och NaCl i CsCl-struktur. Vilken struktur är mer stabil? (1.5p)
- 10) Figuren visar uppmätta dispersionsrelationer för fononer i Al. Vad är ljudhastigheten (longitudinella grenen L) längs [100] riktningen? X är Brillouinzongränsen längs [100] riktningen. (1.5p)
Figuren är från Ashcroft & Mermin "Solid State Physics", Saunders College 1976



Lösningförslag till Tentamen i IF1602 - Fysik del 2 – Materialfysik för E 2009-01-13

Lösning 1)

Elektroner i kvantgropar har energi enligt (1) $E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$. Här söker vi E_1 så att $U - E_1$ motsvarar

fotonenergin för våglängden 450 nm, dvs $U - E_1 = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow E_1 = U - \frac{hc}{\lambda} = 3.20 - 2.76 = 0.44 \text{ eV}$

a) Ur detta löser vi $L = \sqrt{\frac{h^2}{8mE_1}} n^2 = 9.25 \text{ Å}$

b) Alla tillstånd med $E_n < U$ är bundna. Ur (1) löser vi: $E_2 = 1.76 \text{ eV}$, $E_3 = 3.96 \text{ eV}$. Dvs endast ett tillstånd utöver grundtillståndet är bundet. Fotoner med energin $3.2 - 1.76 \text{ eV}$ absorberas när elektroner lyfts från E_2 till ledningsbandet, det motsvarar våglängden 863 nm.

Den föreslagna solcellen är förmodligen inte speciellt effektiv.

Lösning 2)

Rotationsenergier för molekyler ges av uttrycket $E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$. Vid övergångar från J till $J-1$

emitteras ljus, vars energi ges av $\Delta E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I} \{J(J+1) - (J-1)J\} = \frac{J\hbar^2}{I}$. Där tröghetsmomentet

$$I = \mu r^2 = \left(\frac{m_{Si} m_O}{m_{Si} + m_O} \right) r^2. \text{ Med kännedom om detta kan vi lösa ut } J \text{ (dvs startnivån) såsom varande}$$

$$J = \frac{I \Delta E_{rot}}{\hbar^2} = \frac{\Delta E_{rot}}{\hbar^2} \left(\frac{m_{Si} m_O}{m_{Si} + m_O} \right) r^2.$$

a) $J = 2$ är startnivå och $J = 1$ är slutnivå för den observerade övergången.

b) från nivå $J = 1$ kan molekylen gå till nivå $J=0$, och då emittera ljus med energin $\Delta E_{rot} = \frac{J\hbar^2}{I}$.

Skillnaden mot a) är att J nu är 1 mot 2 förut, dvs fotonenergin, liksom frekvensen sjunker till hälften så att $f = 43.12 \text{ GHz}$.

Lösning 3)

a) Sönderfallet är av β^- -typ och då gäller att $Q = (M_{Zn} - M_{Ga})c^2 = 0.457 \text{ MeV}$.

b) Q -värdet är energiskillnaden mellan kärnorna i grundtillstånd. Denna energivinst delas mellan de två γ -strålarna, elektronen och neutrino. De två γ -energierna är givna. Resterande energi delas broderligt mellan elektron och neutrino enligt figur 44.14 i Serway. $K_{\max}$ för elektronen fås då neutrinons energi är noll (eller nära) så att $K_{\max} = Q - \gamma_1 - \gamma_2 = 0.296 \text{ MeV}$. Medelenergin för en elektron är densamma som medelenergin för en neutrino. Neutrino absorberas inte så absorberad energi per sönderfall blir då $E_{abs} = \gamma_1 + \gamma_2 + K_{\max}/2 = 0.309 \text{ MeV}$

Antalet sönderfall per sekund $= 2 \times 10^{13}$.

Absorberad effekt $= \text{energi/sek} = 2 \times 10^{10} \times 0.309 \text{ MeV/sek} = 1 \text{ W}$.

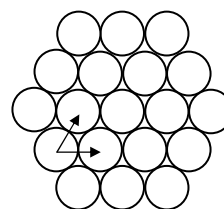
Lösning 4):

En gammal klassiker som löses med hjälp av Braggs samband mellan spridningsvinkel och avstånd mellan gitterparameter. $a = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$. h,k,l är Millerindex för de planskaror som ger upphov till en reflex. De reflexer som "syns" för en given struktur ges av den i frågan givna figuren. För att ta reda på strukturen tar vi kvoten av $\sin^2 \theta$ för de olika reflexerna och ser vilken serie av tillåtna heltal som skapas.

vinkel	12.11	20.03	23.68	28.98
$\sin^2 \theta$	0.0440	0.117	0.161	0.2347
kvot	1	2.666	3.665	5.333
	3/3	8/3	11/3	16

Dvs reflexerna följer serien 3,8,11,16 dvs diamant. För att räkna ut gitterparametern väljer vi en vinkel och till den hörande Millerindex: $a = 6.357 \text{ \AA}$.

b) Den första reflexen kommer från (111)-planet. Planet har en hexagonal struktur med atomsavstånd detsamma som närmsta granne-avstånd. Bindningen mellan två närmsta-granne-atomer i diamantstrukturen har längden $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ dvs $\sqrt{3}a/4 = 2.75 \text{ \AA} = d$. Ytan av en romb med en atom (se figur) är $d^2/\sqrt{3} = 4.366 \text{ \AA}^2 \Rightarrow 0.23 \text{ atomer/\AA}^2$.



Lösning 5):

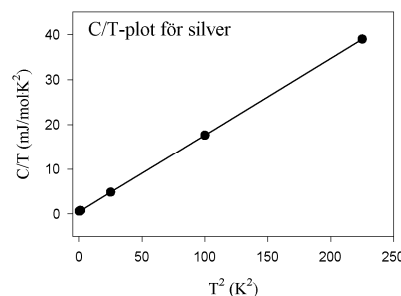
a) Generellt kan en metalls värmekapacitet som $C_V = \alpha T^3 + \gamma T$ med $\alpha = \frac{12R\pi^4}{5\theta_D^3}$ och $\gamma = \frac{\pi^2}{2} \frac{R}{T_F}$.

Här har vi utnyttjat att $N_A k_B = R$.

Plotta C/T mot T^2 , ger oss en figur där lutningen ger α och skärningspunkten med C/T axeln ger γ . Det är enklare att ta fram lutningen, så vi börjar med det och räknar fram γ från en lämpligt vald temperatur.

Ur plotten får vi $\alpha = 0.17 \text{ mJ/mol}\cdot\text{K}^4$.

Från $T = 1 \text{ K}$ tar vi sen fram att $\gamma = 0.65 \text{ mJ/mol}\cdot\text{K}^2$.



Härur löses sen $\theta_D = 225 \text{ K}$ och $T_F = 63\,100 \text{ K}$.

b) Från ekvation 3.9 i H&H vet vi att $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3}$. Med $N = 4$ och $V = (4.09 \text{ \AA})^3$ får vi

$\epsilon_F = 5.5 \text{ eV} = k_B T_F \Rightarrow T_F = 63700 \text{ K}$. Dvs silver är (åtminstone i detta avseende en god frielektronmetall)

Lösning 6):

En halvledares ledningsförmåga skrivs $\sigma = ne\mu_e + pe\mu_h$. Är den odopad gäller också att $n = p = n_i$. Mobiliteterna är givna i tabell, så det vi saknar är den intrinsiska laddningsbärarkoncentrationen.

$$(1) \quad n_i^2 = N_C N_V e^{-\epsilon_G/k_B T} = 4 \left(\frac{2\pi k_B T}{h^2} \right)^3 (m_e^* m_h^*)^{3/2} e^{-\epsilon_G/k_B T}$$

Vi kan ställa upp kvoten mellan ledningsförmågorna för de två materialen och sätta den till 1.

$$\frac{\sigma_{Si}}{\sigma_{Ge}} = \frac{en_i(Si)(\mu_e + \mu_h)_{Si}}{en_i(Ge)(\mu_e + \mu_h)_{Ge}} = \{(1)\} = \frac{T_{Si}^3 \left[(m_e^* m_h^*)_{Si}^{3/4} e^{-\epsilon_G(Si)/2k_B T_{Si}} \right]_{Si} (\mu_e + \mu_h)_{Si}}{T_{Ge}^3 \left[(m_e^* m_h^*)_{Ge}^{3/4} e^{-\epsilon_G(Ge)/2k_B T_{Ge}} \right]_{Ge} (\mu_e + \mu_h)_{Ge}} = 1$$

Vi har allt utom T, som efterfrågas. Skriv om och lös ut T

$$\frac{(m_e^* m_h^*)_{Si}^{3/4} (\mu_e + \mu_h)_{Si}}{(m_e^* m_h^*)_{Ge}^{3/4} (\mu_e + \mu_h)_{Ge}} = X = \frac{T_{Ge}^3 e^{-\epsilon_G(Ge)/2k_B T_{Ge}}}{T_{Si}^3 e^{-\epsilon_G(Si)/2k_B T_{Si}}}. \text{ Numeriska värden ger } X = 1.2256$$

Flytta om och logaritmera

$$3 \ln T_{Si} - \frac{\epsilon_G(Si)}{2k_B T_{Si}} = 3 \ln T_{Ge} - \frac{\epsilon_G(Ge)}{2k_B T_{Ge}} - \ln X = 3.96$$

Numerisk lösning ger $T_{Si} = 452 \text{ K}$

Tentamen i IF1602 - Fysik del 2 – Materialfysik för E

2008-10-22

Tillåtna hjälpmedel: miniräknare, läroböckerna Serway och Hook & Hall eller ekvivalenta alternativ, (t.ex. Halliday/Resnick istället för Serway, Kittel, Rosenberg eller Myers istället för Hook & Hall) dock max 2 böcker, formelsamling (Tefyma/Beta/Physics Handbook), en sammanfattning av kursen på högst ett A4-blad, samt tillägget "Massformeln".

*Rita tydliga figurer, motivera använda samband antingen genom egen härledning eller hänvisning till boken och förklara beteckningar. Lösningar med enbart ekvationer utan förklaring ger poängavdrag. Läs igenom uppgifterna noggrant innan ni börjar räkna och **om ni har problem, fråga!***

Rätt löst uppgift i del A ger 4p. Del B är **komplettering** av inlämningsuppgifterna, dvs ni som redan fått poäng på motsvarande inlämningsuppgift behöver ej lösa detta tal. Detta gäller även omtentamen. Korrekt lösning på del B ger 1.5p. Totalt kan 30p (24 + 6) erhållas.

Betygsgränser:	≥ 24 p ger betyg A,	22-23.5 p ger betyg B,	
	19-21.5 p ger betyg C,	17-18.5 p ger betyg D,	
	15-16.5 p ger betyg E	13-14.5 p ger betyg	Fx med rätt till komplettering

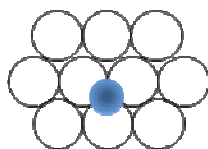
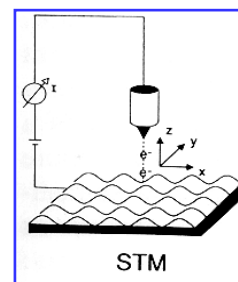
Tentaresultat kommer att anslås inne på STEX. Klagomål på tentarättning skall vara examinator tillhanda senast 3 veckor efter det att resultatet anslagits. För muntlig komplettering, kontakta examinator för tidsbokning inom 3 veckor efter att resultatet anslagits.

Gå gärna in på daisy.it.kth.se och utvärdera kursen.

Del A.

- 1) En Pt(111) yta studeras med sveptunnelmikroskop (STM), se figur till höger. Mätningen går till så att man låter en metallnål svepa över ytan, man mäter tunnelströmmen och justerar avståndet så att strömmen hela tiden är konstant (t.ex. 1 nA).

När ytan exponeras för syre binder syreatomer till tre Pt-atomer och sticker ut $0.6 \text{ \AA}$ ovanför ytans Pt-atomer, enligt figurer nedan. Trots att syreatomerna ligger geometriskt högre ser de ut att ligga $0.8 \text{ \AA}$ lägre i STM-bilden, dvs nålen måste flyttas närmare ytan för att få önskad ström.



sidan



Vy från ovan

Vy från

Beräkna kvoten mellan Pt-atomernas och syreatomernas elektrondensiteter. Låt den effektiva potentialbarriären ($E-U$) vara 2.0 eV , där E är de tunnlande elektronernas energi och U är medelvärdet av utträdesarbetet för nål och yta (4p)

- 2) För att uppskatta vid vilken töjning en bindning bryts kan man studera molekyl-vibrationer. När molekylen exciteras till högre vibrationsnivåer ökar både energi och vibrationsamplitud. Om vibrationsenergin överstiger molekylen bindningsenergi kan den brytas sönder. Den totala bindningspotentialen kan (i en harmonisk approximation) skrivas $U(r - r_0) = \frac{k(r - r_0)^2}{2} - U_0$.

r_0 är jämviktsavståndet och U_0 är bindningsenergin.

Antag att vi studerar en CO-molekyl ($\Delta E_{\text{vib}} = 0.25$ eV, $r_0 = 1.12$ Å, $U_0 = 1.40$ eV). Uppskatta vibrationsamplituden när molekylen brister. (4p)

- 3) I våra kärnreaktorer åstadkommes prompt, inducerad fission genom att termiska neutroner fångas in av ^{235}U kärnor. Därigenom tillförs den erforderliga aktiveringsenergi som behövs för att kärnan skall undergå prompt fission. Undersök om isotoperna ^{227}Th respektive ^{230}Th också kan undergå prompt, inducerad fission genom infångning av termiska neutroner. Erforderliga aktiveringsenergies är 6.4 MeV för ^{230}Th och 6.2 MeV för ^{227}Th . Om inte prompt, inducerad fission kan åstadkommas med termiska neutroner, vilken energi behöver neutronerna minst ha (i tyngdpunktsystemet) för att prompt fission skall åstadkommas? (4p)

Kopior från tabell A3 i den gamla Serway-boken (det var bättre förr) finns i slutet. Neutronens massa är 1.008665 u.

- 4) I ett röntgendiffraktionsexperiment ($\lambda = 1.54$ Å) uppmättes följande Braggvinklar från ett InP-prov: 13.29° , 15.40° , 22.06° och 26.12° . De tillåtna $h^2 + k^2 + l^2$ kombinationerna för olika kubiska strukturer ges enligt tabell nedan.

a) Bestäm materialets struktur och gitterparameter (2p)

- b) Man vill, för att få rätt bandgap, blanda in GaAs och göra $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_x\text{P}_{1-x}$. Den första Braggreflexen syns vid 13.50° . Bestäm x. Antag att gitterparametern varierar linjärt med sammansättningen, GaAs har gitterparameter 5.65 Å. (2p)

Tillåtna reflexer för kubiska strukturer.

$h^2 + l^2 + k^2$	0	1	2	3	4	5	6	•	8	9	10	11	12	13	14	•	16	17	18	19	20	21	22	•	24
sc																									
bcc																									
fcc																									
diamond cubic																									

- 5) Resistiviteten i en metall mäts vid olika temperaturer: $\rho(T=10\text{ K}) = 2.7 \cdot 10^{-8} \Omega\text{m}$ och $\rho(T=300\text{ K}) = 5.0 \cdot 10^{-7} \Omega\text{m}$. Hallkoefficienten $R_H = -6.25 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3/\text{C}$. Elektronerna sprids mot både gittervibrationer och defekter. Hur långt är det genomsnittliga avståndet mellan två på varandra följande kollisioner mot defekter? (4p)

- 6) I en halvledare beskrivs valens- och ledningsbanden i första Brillouinzonen enligt uttrycken. Energiskalan är satt så att $\epsilon=0$ vid valensbandets högsta punkt.

$$\epsilon_c(k) = 1.0 + 0.5 \cdot \cos(ka) - 0.25 \cdot \cos(2ka)$$

$$\epsilon_v(k) = 0.5 \cdot \cos(ka) - 0.5$$

- a) Vilka fotonenergier absorberas med hjälp av samtidig fononexcitation? (2p)
b) Vilka fotonenergier absorberas utan hjälp av fononer? (2p)

Del B.

- 7) Beräkna fotonenergin för K_α -strålning från Mn. (1.5p)
- 8) Beräkna en väteatoms rekylenergi då en foton emitteras till följd av en övergång från $n=2$ till $n=1$. Använd Bohrmodellens energier. Hur påverkas denna energi om atomen befinner sig i ett magnetfält $B=1\text{ T}$? (1.5p)
- 9) Beräkna skillnaden i atomär kohesivenergi mellan NaCl i NaCl-struktur och NaCl i CsCl-struktur. Vilken struktur är mer stabil? (1.5p)
- 10) Figuren visar uppmätta dispersionsrelationer för fononer i Al. Vad är ljudhastigheten (longitudinella grenen L) längs [100] riktningen? X är Brillouinzongränsen längs [100] riktningen. (1.5p)

Figuren är från Ashcroft & Mermin "Solid State Physics", Saunders College 1976

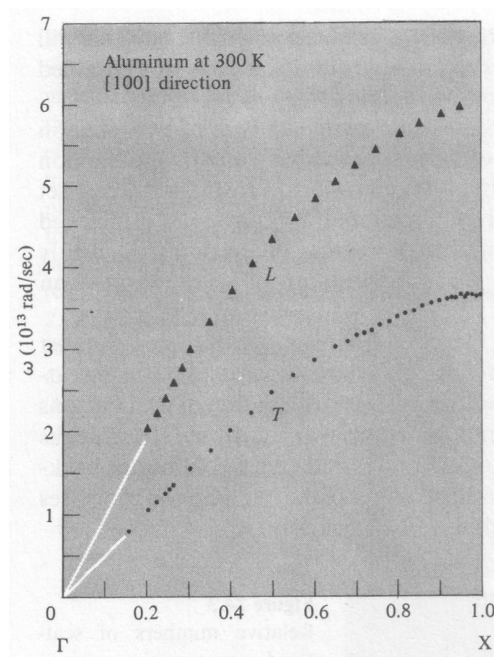


TABLE A.3 Continued

Atomic Number Z	Element	Symbol	Chemical Atomic Mass (u)	Mass Number (* Indicates Radioactive) A	Atomic Mass (u)	Percent Abundance	Half-Life (If Radioactive) $T_{1/2}$
88	Radium	Ra		223*	223.018 499		11.43 days
		(Ac X)		224*	224.020 187		3.66 days
		(Th X)		226*	226.025 402		1 600 yr
		(Ra)		228*	228.031 064		5.75 yr
89	Actinium	(Ms Th ₁)		227*	227.027 749		21.77 yr
		Ac		228*	228.031 015		6.15 h
		(Ms Th ₂)					
90	Thorium	Th	232.038 1				
		(Rd Ac)		227*	227.027 701		18.72 days
		(Rd Th)		228*	228.028 716		1.913 yr
				229*	229.031 757		7 300 yr
		(Io)		230*	230.033 127		75.000 yr
		(UY)		231*	231.036 299		25.52 h
		(Th)		232*	232.038 051		1.40 × 10 ¹⁰ yr
		(UX ₁)		234*	234.043 593		24.1 days
				231*	231.035 880		32.760 yr
				234*	234.043 300		6.7 h
91	Protactinium	Pa		232*	232.037 131		69 yr
				233*	233.039 630		1.59 × 10 ⁵ yr
				234*	234.040 946		2.45 × 10 ⁵ yr
		(Ac U)		235*	235.043 924		7.04 × 10 ⁸ yr
				236*	236.045 562		2.34 × 10 ⁷ yr
		(UI)		238*	238.050 784		4.47 × 10 ⁹ yr
92	Uranium	U	238.028 9	235*	235.044 057		396 days
				236*	236.046 560		1.15 × 10 ⁵ yr
				237*	237.048 168		2.14 × 10 ⁶ yr
				236*	236.046 033		2.87 yr
93	Neptunium	Np		238*	238.049 555		87.7 yr
				239*	239.052 157		2.412 × 10 ⁴ yr
				240*	240.053 808		6 560 yr
				241*	241.056 846		14.4 yr
				242*	242.058 737		3.73 × 10 ⁶ yr
94	Plutonium	Pu		244*	244.064 200		8.1 × 10 ⁷ yr

^a The masses in the sixth column are atomic masses, which include the mass of Z electrons. Data are from the National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, prepared by Jagdish K. Tuli, July 1990. The data are based on experimental results reported in *Nuclear Data Sheets* and *Nuclear Physics* and also from *Chart of the Nuclides*, 14th ed. Atomic masses are based on those by A. H. Wapstra, G. Audi, and R. Hoekstra. Isotopic abundances are based on those by N. E. Holden.

Lösningförslag till Tentamen i IF1602 - Fysik del 2 – Materialfysik för E 2008-10-22

Lösning 1)

Tunnelströmmen $I(L) = n \cdot \exp(-2CL)$. L är avståndet mellan metallnålen och ytatomen, och

$$C = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} = 0.724 \text{ Å}^{-1}. \text{ Nu kan vi ställa upp uttrycket för tunnling från en Pt-atom och}$$

tunnling från en syreatom, strömmen är densamma men avstånden ändras pga de olika elektrontätheterna n .

$$I_{Pt}(L_{Pt}) = n_{Pt} \cdot \exp(-2CL_{Pt}) = n_O \cdot \exp(-2CL_O) = I_O(L_O)$$

Kvoten ges av uttrycket $\frac{n_{Pt}}{n_O} = \frac{\exp(-2CL_O)}{\exp(-2CL_{Pt})} = \exp(-2C(L_O - L_{Pt}))$ och bestäms av skillnaden i

avstånd mellan nålen och de respektive atomerna. Här är skillnaden i avstånd summan av det uppmätta avståndet (0.8 Å) och det geometriska avståndet (0.6 Å) = 1.4 Å med ett större avstånd till platinaatomerna.

Svar: Kvoten blir då 7.6.

Lösning 2)

När molekylen bryts är $U(r-r_0) = 0$, dvs $\frac{k(r-r_0)^2}{2} = U_0 \Rightarrow r = \sqrt{\frac{2U_0}{k}} + r_0$

$$k \text{ ges av } \Delta E_{vib} = h\sqrt{\frac{k}{\mu}} \Rightarrow k = \left(\frac{\Delta E_{vib}}{h}\right)^2 \mu = 415 \text{ N/m}.$$

$$r = 0.33 \text{ Å} + 1.12 \text{ Å} = 1.45 \text{ Å}$$

Lösning 3)

Genom infångning av en neutron ges den bildade "blandkärnan" en excitationsenergi som ges av masskillnaden mellan neutronen + målkärnan och den bildade "blandkärnan" plus neutronens kinetiska energi i tyngdpunktsystemet. För termiska neutroner är kinetiska energin försumbar vid denna överläggning.

Vi får då:

$$\begin{aligned} \text{Th: } M(^{227}\text{Th}) &= 227.027701 \text{ u}, M(n) = 1.008665 \text{ u}, \text{ dvs summan} = 228.036366 \text{ u}. \\ M(^{228}\text{Th}) &= 228.028716 \text{ u}. \end{aligned}$$

Excitationsenergin blir då (försumma neutronens kinetiska energi) = $228.036366 - 228.028716 \text{ u} = 0.007650 \text{ u}$. $1 \text{ u} = 931.494 \text{ MeV}/c^2$. Alltså blir excitationsenergin $0.007650 \times 931.494 \text{ MeV} = 7.1 \text{ MeV}$. Erforderlig aktiveringsenergin var 6.2 MeV , dvs ^{227}Th klyvs prompt av termiska neutroner.

^{230}Th : På samma sätt fås excitationsenergin till 5.1 MeV medan erforderlig aktiveringsenergi var 6.4 MeV , dvs ^{230}Th klyvs ej prompt av termiska neutroner. Neutronen behöver ha en energi på minst $6.4 - 5.1 \text{ MeV} = 1.3 \text{ MeV}$ (i tyngdpunktsystemet) för att åstadkomma prompt, inducerad fission.

Lösning 4):

a) Vid diffraktionsstudier gäller Bragg: $\sin \theta = \frac{\lambda}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ De tillåtna reflexerna ges som vanligt av den i frågan givna figuren. För att ta reda på strukturen tar vi kvoten av $\sin^2 \theta$ för de olika reflexerna och ser vilken serie av tillåtna heltal som skapas.

Vinkel	13.29	15.40	22.06	26.12
$\sin^2 \theta$	0.0528	0.0705	0.1411	0.1938
Kvot	1	1.33	2.67	3.67
heltalskvot	3/3	4/3	8/3	11/3

Reflexerna följer serien 3,4,8,11 dvs fcc.

För att räkna ut gitterparametern sätter vi in värdet för en vinkel, t.ex. den första, vilket ger oss $a = 5.80 \text{ \AA}$

b) Om vi har samma struktur kan vi bara sätta in värdet på den första vinkeln: 13.50 och få att gitterparametern är $5.713 \text{ \AA}$.

Vi skriver gitterparametern $a(x) = a_{\text{InP}} - x(a_{\text{InP}} - a_{\text{GaAs}})$ vilket ger oss $x = 0.58$

Lösning 5):

Vi vill veta avståndet mellan två kollisioner, dvs den medelfria väglängden. De olika bidragen till resistiviteten beror på temperaturen; t.ex. vid låga temperaturer är fononbidraget försvinnande litet, men det ger ett dominerande bidrag vid rumstemperatur. Just i vårt fall vill vi veta avståndet mellan två kollisioner mot defekter som bäst bestäms från resistiviteten vid låg temp. Vad som händer vid rumstemperatur kan vi strunta i.

$$\rho(10K) = \frac{m_e}{ne^2 \tau_{\text{def}}} = \{\lambda_{\text{def}} = v_F \cdot \tau_{\text{def}}\} \Rightarrow \lambda_{\text{def}} = \frac{m_e v_F}{ne^2 \rho}$$

ρ är givet, elektronkoncentrationen och v_F saknas. n får vi från Hallkoefficienten

$$R_H = \frac{-1}{ne} \Rightarrow n = \frac{-1}{R_H e} = 1 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3} \text{ och } v_F \text{ är Fermihastigheten som ges av } \epsilon_F = \frac{mv_F^2}{2}.$$

ϵ_F ges av frielektron teorin $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$ vilket leder oss till följande

$$v_F = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3} = 0.77 \text{ Mm/s}$$

Med all info får vi till slut att $\lambda_{\text{def}} = 100 \text{ nm}$.

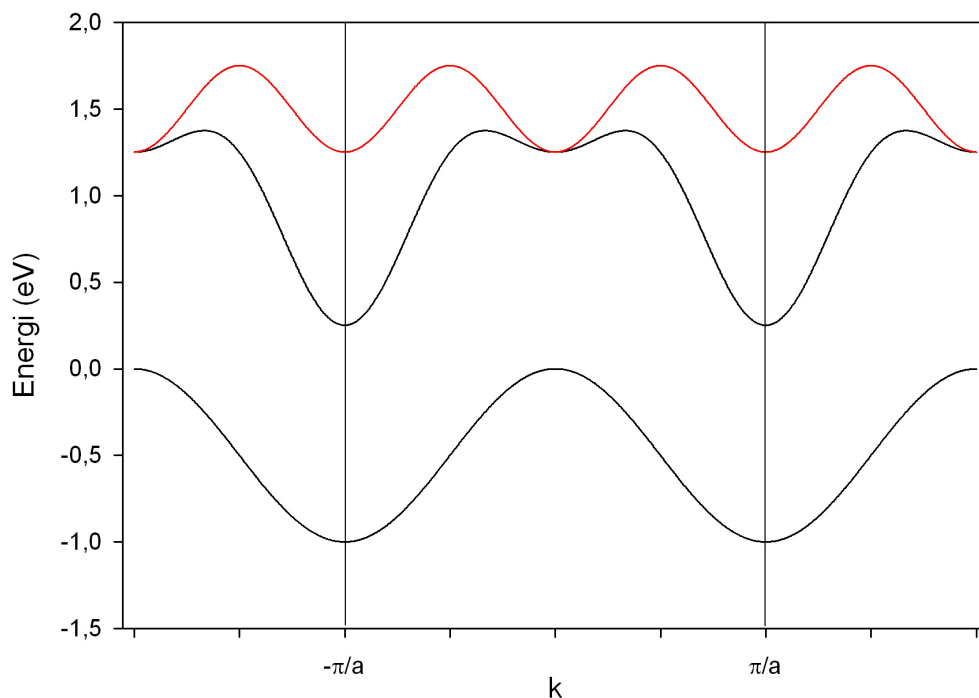
Lösning 6):

Vid fotoexcitation av elektroner och samtidig excitation av fononer kan vi utnyttja hela valensbandets bredd och hela ledningsbandets bredd. (Kanske inte med hög verkningsgrad, men det går). Valensbandet har sitt minimum vid -1.0 eV och maximum vid 0.0 eV. Ledningsbandet har sitt minimum vid 0.25 eV och sitt maximum vid 1.35 eV. Minsta energiskillnaden är bandgapet 0.25 eV, och den största är från valensbandets botten till ledningsbandets topp. Vilket ger att ljus mellan 0.25 eV och 2.35 eV absorberas.

Utan hjälp av fononer måste elektronens k bevaras i excitationsprocessen. Vi kan räkna vilka energier det motsvarar genom att ta skillnaden mellan ledningsbandet och valensbandet i varje k -punkt.

$$\varepsilon_c(k) - \varepsilon_v(k) = 1.0 + 0.5 \cdot \cos(ka) - 0.25 \cdot \cos(2ka) - 0.5 \cdot \cos(ka) + 0.5 = 1.5 - 0.25 \cdot \cos(2ka)$$

Resultatet ligger mellan 1.25 eV och 1.75 eV, enligt den röda kurvan i figuren.



Tentamen i IF1602 - Fysik del 2 – Materialfysik för E

2007-10-26

Tillåtna hjälpmedel: miniräknare, läroböckerna Serway och Hook & Hall eller ekvivalenta alternativ, (t.ex. Halliday/Resnick istället för Serway och Kittel, Rosenberg eller Myers istället för Hook & Hall) dock max 2 böcker, formelsamling (Tefyma / Beta), en sammanfattning av kursen på högst ett A4-blad, samt tillägget "Massformeln" från hemsidan.

*Rita tydliga figurer, motivera använda samband antingen genom egen härledning eller hänvisning till boken och förklara beteckningar. Lösningar med enbart ekvationer utan förklaring ger poängavdrag. Läs igenom uppgifterna noggrant innan ni börjar räkna och **om ni har problem, fråga!***

Rätt löst uppgift i del A ger 4 p. Del B är **komplettering** av inlämningsuppgifterna, dvs ni som redan fått godkänt på motsvarande inlämningsuppgift behöver ej lösa detta tal. Detta gäller även omtentamen. Korrekt lösning på del B ger 1.5 p. Totalt kan maximalt 30 p (24 + 6) erhållas.

Betygsgränser:	≥ 24 p ger betyg A,	22-23.5 p ger betyg B,	
	19-21.5 p ger betyg C,	17-18.5 p ger betyg D,	
	15-16.5 p ger betyg E	13-14.5 ger betyg	Fx med rätt till
	komplettering		

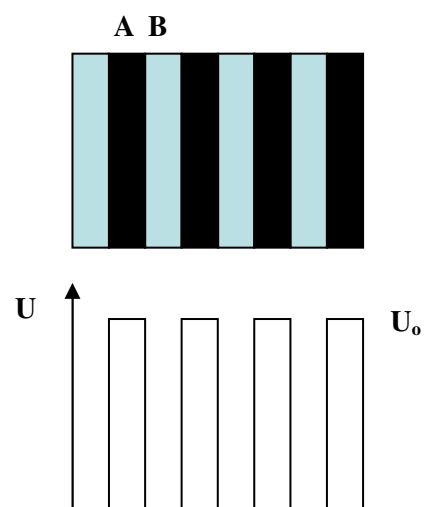
Tentaresultat kommer att anslås inne på STEX, om så önskas kan resultatet meddelas per email, ange din emailadress. Klagomål på tentarättning skall vara examinator tillhanda senast 3 veckor efter det att resultatet anslagits. För muntligt komplettering, kontakta examinator för tidsbokning inom 3 veckor efter att resultatet anslagits.

Gå gärna in på www.e.kth.se och utvärdera kursen, tänk på edra efterföljande.

Del A.

- 1) Ett material är byggt av ett supergitter, där tunna lager av material A (svart) och material B (grå) varvas enligt figuren. Båda lagren har bredden L . Varje tunn skiva av material B fungerar som en kvantbrunn, inom vilken elektroner är instängda av det svarta området, A. Energibarriären är U_0 . Energierna för de bundna elektronerna kan beräknas från den oändligt djupa potentialbrunnen.

- a) Vid vilken bredd, L , är tunnlingssannolikhet från grundtillståndet mellan två brunnar 1%, givet att potentialbarriären $U_0 = 0.5$ eV? (4p)

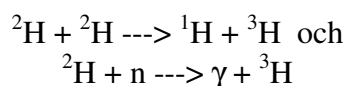


- 2) Förekomst av icke önskvärda "avgas"-molekyler i luften kan mätas med hjälp av infrarödspektroskopi (IR). (Även önskvärda molekyler går naturligtvis att detektera, men de skapar kanske inte lika säljande rubriker i kvällspressen)

a) Beräkna vid vilken fotonenergi man kan förväntas ha hög IR-absorption från NO med fjäderkonstant 1600 N/m. (3p)

b) Kommer rotationsenergierna att spela någon stor roll för de uppmätta energierna? (1p)
Ett generellt, men motiverat, argument räcker.

- 3) För att bestämma bindningsenergin för ^2H (deuterium) studeras följande reaktioner:



Q-värden för reaktionerna uppmättes till 4.033 MeV respektive 6.257 MeV.

a) Bestäm bindningsenergin för ^2H utgående från dessa mätningar. (3p)

b) Hur väl stämmer värdet från a) med vätskedroppens värde. (1p)

- 4) Värmekapaciteten för en divalent metall, med fcc-struktur och gitterparameter 4.0 Å, mäts vid låga temperaturer, med tabellerat resultatet.

T(K)	1.00	1.50	2.00	2.50	3.00	3.50	5.00
$C_V(\text{mJ/mol K})$	1.02	1.98	3.49	5.73	8.88	13.12	34.22

a) Beräkna, utgående från uppmätta värden, Debyetemperaturen och den högsta fononfrekvensen i materialet vid låga temperaturer. (2p)

b) Beräkna metallens Fermienergi från den uppmätta värmekapaciteten och från frielektronmodellen (2p).

- 5) I ett röntgendiffraktionsexperiment ($\lambda=1.54 \text{ \AA}$) uppmättes de fyra minsta Braggvinklarna till: 20.05° , 23.32° , 34.05° och 41.03° . De tillåtna $h^2+k^2+l^2$ kombinationerna för olika kubiska strukturer ges enligt tabell nedan.

Bestäm materialets struktur och gitterparameter (3p)

Skissa atomstrukturen för (110)-planet i strukturen (1p)

Tillåtna reflexer för kubiska strukturer.

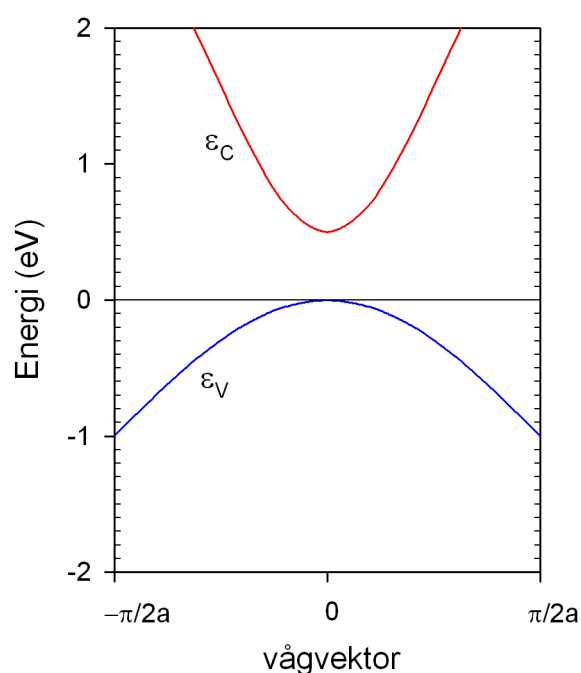
$h^2 + l^2 + k^2$	0	1	2	3	4	5	6	•	8	9	10	11	12	13	14	•	16	17	18	19	20	21	22	•	24
sc																									
bcc																									
fcc																									
diamond cubic																									

- 6) I en odopad halvledare (fiktiv men baserad på ett verkligt material) beskrivs valens- och ledningsbanden enligt figuren. Energiskalan är satt så att $\epsilon=0$ vid valensbandets högsta punkt. Dispersionsrelationerna för banden skrivs

$$\epsilon_c(k) = -\cos(2ka) - 0.25 \cdot \cos(ka) + 1.75$$

$$\epsilon_v(k) = \cos(ka) - 1$$

Beräkna Fermivåns (μ) position i bandgapet vid $T = 300 \text{ K}$. (4p)



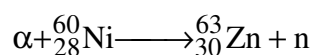
Del B.

- 7) I ett fotoemissionsexperiment med Al K α (hf = 1486.0 eV) strålning studeras titan med ett tunt lager etanol. De fotoemitterade elektronerna har atomspecifika kinetiska energier. Vilka är dessa energier? Utträdesarbetet för titan är 4.7 eV

Relevanta elektroners bindningsenergier i eV

Ti2s 560.9	Ti2p 457.0	Ti3s 58.7	Ti3p 32.6
O1s 531.5	O2s 41.6	C1s 284.5	H1s 13.6

- 8) Bindningen i en diatomär molekyl beskrivs av potentialen $U(r) = U_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$, med $\sigma = 10^{-10}$ m. Bestäm jämviktsavstånd och U_0 givet att fjäderkonstanten är 516 J/m².
- 9) När ^{60}Ni bestrålas med α -partiklar med kinetisk energi 18.0 MeV sker följande reaktion:



Hur stor kinetisk energi har den emitterade neutronen i denna reaktion om rekyleenergin (dvs kinetiska energin) hos ^{63}Zn är 0.74 MeV. Energierna är uppmätta i ett koordinat-system där Ni är i vila. Zn antas vara i grundtillståndet efter reaktionen. $M({}^{63}_{30}\text{Zn}) = 62.933215u$

- 10) I ett elektrondiffraktionsexperiment från en Cu(100) yta (T=293 K) faller elektronstrålen in normalt mot ytan. Vilken är vinkeln för första diffraktionsmaximum om elektronernas energi är 50 eV? Kristallen värms till 800K och expanderar till följd av detta. Vid vilken vinkel observeras då första diffraktionsmaximum? Cu har fcc-struktur med gitter-parameter 3.61Å och en linjär expansionskoefficient $\alpha = 17 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$.

Lösningsförslag

1) I område B bestäms elektronernas energinivåer av uttrycket $E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$ från den oändligt djupa potentialbrunnen. Här är det grundtillståndet med $n=1$ vi är intresserade av.

$$\text{Tunnlingssannolikheten } T = e^{-2CL} = \left\{ C = \frac{\sqrt{2m(U_o - E_1)}}{\hbar} \right\}$$

Sätt in uttrycket för E_1 i den andra ekvationen och lös ut L .

$$\ln T = -2CL = -\frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(U_o - E_1)} = -\frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(U_o - \frac{h^2}{8mL^2})}$$

$$\left(\frac{\hbar}{2L} \ln T \right)^2 = 2mU_o - \frac{h^2}{4L^2}$$

$$L^2 = \frac{h^2}{8mU_o} \left(1 + \left(\frac{\ln T}{2\pi} \right)^2 \right) \text{ och } L = \sqrt{\frac{h^2}{8mU_o} \left(1 + \left(\frac{\ln T}{2\pi} \right)^2 \right)}$$

Med $U_o = 0.5 \text{ eV}$ och $T = 0.01$ får vi $L = 1.07 \text{ nm}$

2) a) Excitationsenergin för en vibration ges av uttrycket $\Delta E_{vib} = \hbar \sqrt{k/\mu}$. För att beräkna dessa energier behövs bara den reducerade massan, $\mu = \frac{m_N \cdot m_O}{m_N + m_O} = 7.47u$.

$$\text{Från detta får vi: } \Delta E_{vib} = \hbar \sqrt{k/\mu} = 237 \text{ meV}$$

b) Rotationsenergies är normalt i storleksordningen någon meV, så det bidraget spelar ingen stor roll i det här fallet.

3) a) Bindningsenergin definieras som skillnaden i massa mellan den sammansatta kärnan och summamassan av de ingående kärnpartiklarna: $E_b = M(^1\text{H})c^2 + M_n c^2 - M(^2\text{H})c^2$

$$Q_1 = 2 M(^2\text{H})c^2 - M(^1\text{H})c^2 - M(^3\text{H})c^2 = 4.033 \text{ MeV}$$

$$Q_2 = M(^2\text{H})c^2 + M_n c^2 - M(^3\text{H})c^2 = 6.257 \text{ MeV}$$

$$Q_1 - Q_2 = M(^2\text{H})c^2 - [M(^1\text{H})c^2 + M_n c^2] = -2.224 \text{ MeV}$$

Enligt ovan är detta = $-E_b$, dvs $E_b = 2.224 \text{ MeV}$

b) Enligt vätskedroppsmodellen skrivs bindningsenergin:

$$E_b = C_1 A - C_2 A^{2/3} - C_3 \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} - C_4 \frac{(N-Z)^2}{A}$$

Där $C_1 = 15.7 \text{ MeV}$, $C_2 = 17.8 \text{ MeV}$, $C_3 = 0.71 \text{ MeV}$ och $C_4 = 23.6 \text{ MeV}$. Här är $A = 2$, $Z = 1$ och $N = 1$, så det hela summeras till 3.14 MeV . Det stämmer väl inte så fantastiskt bra, men det beror på att modellen är en kontinuummodell och deuteriumkärnan är för liten, där båda nukleonerna ligger på ytan.

4) Värmekapaciteten har bidrag från såväl gitter som elektroner: $C_V = C_g + C_{el} = \alpha T^3 + \gamma T$

Plotta C_V/T mot T^2 , lutningen ger α och skärningspunkten med C/T axeln ger γ , här är $\alpha = 0.2428 \text{ mJ/mol K}^4$, och $\gamma = 0.775 \text{ mJ/mol K}^2$.

a) Ur detta kan man ta fram Debyetemperaturen enligt:

$$\alpha = \frac{12Nk_B\pi^4}{5\theta_D^3} = \{N = N_A \Rightarrow N_A k_B = R = 8.314 \text{ J/mol K}\} \Rightarrow \theta_D = \sqrt[3]{\frac{12R\pi^4}{5\alpha}} = 200 \text{ K}$$

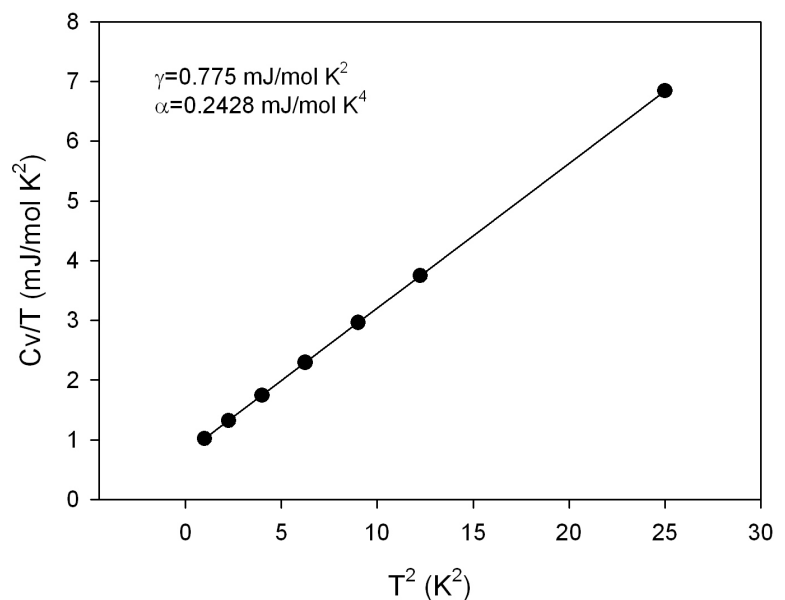
Det gäller att $k_B\theta_D = \hbar\omega_D$, där ω_D är Debyefrekvensen som är den högsta fononfrekvens som är aktiverad vid låga temperaturer, här är $\omega_D = 2.62 \times 10^{13} \text{ rad/sec}$

b) Fermienergin fås ur sambandet $\gamma = \frac{\pi^2 Nk_B}{2T_F} \{N = 2N_A\} \Rightarrow \varepsilon_F = k_B T_F = \frac{\pi^2 2N_A k_B^2}{2\gamma} = 9.13 \text{ eV}$

Från frielektronmodellen beräknas Fermienergin enligt sambandet:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n)^{2/3} = \{N = 8, V = (4 \times 10^{-10} \text{ m})^3\} = 9.13 \text{ eV}$$

Ett enastående exempel på frielektronmodellens förträfflighet.



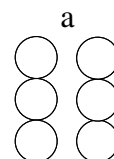
5) a) Vid diffraktionsstudier gäller Bragg: $\sin \theta = \frac{\lambda}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ De tillåtna reflexerna ges som vanligt av den i frågan givna figuren. För att ta reda på strukturen tar vi kvoten av $\sin^2 \theta$ för de olika reflexerna och ser vilken serie av tillåtna heltal som skapas.

vinkel	20.05	23.32	34.05	41.03
$\sin^2 \theta$	0.1175	0.1567	0.3135	0.4309
kvot	1	1.334	2.668	3.667
heltalskvot	3/3	4/3	8/3	11/3

Reflexerna följer serien 3,4,8,11 dvs fcc.

För att räkna ut gitterparametern sätter vi in värdet för en vinkel, t.ex. den första, vilket ger oss $a = 3.89 \text{ \AA}$

b) Atomstrukturen ser ut som i figuren, med gitterparametern a markerad



6) Ferminivåns läge bestäms av $\mu = \frac{\epsilon_G}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln(m_h^* / m_e^*)$ (notera att i uttrycket är det beloppen av massorna som ska sättas in)

Bandgapet fås som energiskillnaden vid $k=0$, $\epsilon_G = 0.5 \text{ eV}$

De effektiva massorna fås från $\epsilon(k)$, enligt $m^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2 \epsilon}{dk^2}\right)}$, och vi söker värdet vid $k=0$

Derivering ger: $\frac{d^2 \epsilon_c(k)}{dk^2} = 4a^2 \cos(2ka) + 0.25a^2 \cdot \cos(ka)$ och $\frac{d^2 \epsilon_v(k)}{dk^2} = -a^2 \cos(ka)$

$$m_h^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2 \epsilon_c}{dk^2}\right)} = \{k=0\} = \frac{\hbar^2}{4.25a^2} \text{ och } m_e^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2 \epsilon_v}{dk^2}\right)} = \{k=0\} = \frac{\hbar^2}{-a^2}$$

Så avslutningsvis får vi: $\mu = \frac{\epsilon_G}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln(m_h^* / m_e^*) = 0.25 + \frac{3}{4} k_B 300 \ln(1/4.25) = 0.22 \text{ eV}$ över valensbandets topp.

Tentamen i 2B1101 - Fysik del 2 – Materialfysik för E
2007-01-15

Tillåtna hjälpmedel: miniräknare, läroböckerna Serway och Hook & Hall eller ekvivalenta alternativ, (t.ex. Halliday/Resnick istället för Serway och Kittel, Rosenberg eller Myers istället för Hook & Hall) dock max 2 böcker, formelsamling (Tefyma / Beta), en sammanfattning av kursen på högst ett A4-blad, samt tillägget "Massformeln" från hemsidan.

*Rita tydliga figurer, motivera använda samband antingen genom egen härledning eller hänvisning till boken och förklara beteckningar. Lösningar med enbart ekvationer utan förklaring ger poängavdrag. Läs igenom uppgifterna noggrant innan ni börjar räkna och **om ni har problem, fråga!***

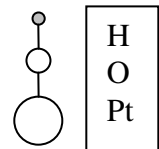
Rätt löst uppgift i del A ger 4 p. Del B är **komplettering** av inlämningsuppgifterna, dvs ni som redan fått godkänt på motsvarande inlämningsuppgift behöver ej lösa detta tal. Detta gäller även omtentamen. Korrekt lösning på del B ger 1.5 p. Totalt kan maximalt 30 p (24 + 6) erhållas.

Betygsgränser: ≥ 24 p ger betyg 5, 19-23.5 p ger betyg 4,
 15-18.5 p ger betyg 3 13-14.5 ger rätt till komplettering.

Tentaresultat kommer att anslås inne på STEX, om så önskas kan resultatet meddelas per email, ange din emailadress. Klagomål på tentarättning skall vara examinator tillhanda senast 3 veckor efter det att resultatet anslagits. För komplettering, kontakta examinator för överenskommelse inom 3 veckor efter att resultatet anslagits.

Del A.

- 1) När vatten adsorberar på (binder till) en yta händer det ofta (beronde på temperatur och material) att en av väteatomerna i molekylen bryts loss och endast OH binder till ytan. I vårt fall studerar vi en Pt(111)-yta med vibrationsspektroskopi. Elektroner skickas mot och reflekteras från ytan och kan då förlora energi genom att excitera molekylvibrationer. Antag att bindingen är sådan att syreatomen binder till en Pt och vätet sitter på syret utanför enligt Pt-O-H, se figur.



- a) Beräkna excitationsenergierna (ΔE) för de två "stretchvibrationerna" i molekylen om kraftkonstanten för Pt-O bindningen är 175 N/m och för O-H bindningen 700 N/m. (3p)
- b) I "fritt vatten" är excitationsenergi för OH-vibrationen 521 meV. Varför skiljer den sej från resultatet i a) (1p)
- 2) Plaster består av långa molekylkedjor som var och en inte är så starka, men som när de är många och växer lite kors och tvärs ger en stark och seg plast. Här ska ni beräkna den dragkraft som behövs för att dra sönder en ensam molekylkedja. Bindningen mellan två atomer i kedjan beskrivs av $U(r) = \frac{B}{r^{10}} - \frac{C}{r^2}$, med konstanterna $B = 59049 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^{10}$ och $C = 45 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^2$. r är avståndet mellan de tvenne atomerna.

Vid vilken dragkraft bryts kedjan? (4p)

- 3) ^{210}Po α -sönderfaller till ^{206}Pb med 138.39 dagars halveringstid. Metallen är en mycket stark alfa-källa och man har haft funderingar på att ha den som portabel energikälla i rymden.

Beräkna den utstrålade effekten från 1g Po-210. (4p)

- 4) Is förekommer i flera olika kristallstrukturer beroende på temperatur och tryck och även på iskristallernas storlek. Vid ett röntgendiffraktionsexperiment ($\lambda = 1.54 \text{ \AA}$) uppmättes följande Braggvinklar: 12.11° , 20.03° , 23.68° och 28.98°

Bestäm kristallstruktur och gitterparameter. (3p)

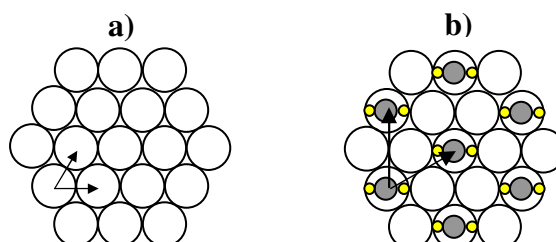
Hur många syreatomer/ $\text{\AA}^2$ innehåller det plan som ger upphov till den första reflexen? (1p)

Tillåtna reflexer för kubiska strukturer.

$h^2 + l^2 + k^2$	0	1	2	3	4	5	6	•	8	9	10	11	12	13	14	•	16	17	18	19	20	21	22	•	24
sc																									
bcc																									
fcc																									
diamond cubic																									

- 5) Den elektriska resistansen ρ för en monovalent metall (fcc med gitterparameter = $4.0 \text{ \AA}$) beror av temperaturen och har uppmätts till $\rho(T=200\text{K})=5 \cdot 10^{-8} \text{ } \Omega\text{m}$ och $\rho(T \approx 5\text{K})=3 \cdot 10^{-10} \text{ } \Omega\text{m}$. Beräkna medelavståndet mellan två konsekutiva kollisioner mot gitterdefekter. (4p)

- 6) På en Pt(111) yta kan man växa tunna ordnade vatten/is-lager. Ytans periodicitet ändras då och de basvektorer som beskriver ytan ändras. Basvektorerna som beskriver den tätpackade Pt(111) ytan i a) har längden $2.77 \text{ \AA}$, och vinkeln mellan dem är 60° . För att kontrollera ytans periodicitet och symmetri använder man lågenergi-elektrondiffraktion (LEED). Här skall ni beräkna (jämför laserdelen i den obligatoriska laborationen) LEED-mönstret från vattenlagret enligt figur b). Ledtråd: LEED-mönstret är det samma som det tvådimensionella reciproka mönstret för ytan. Rita tydliga figurer, med alla relevanta mått och riktningar markerade. (4p)



Del B.

- 7) Vid ett experiment belyses Ar med röntgenstrålning med energin $hf = 1486.0$ eV. Argons elektronskal har bindningsenergier 2s: 326.3 eV, $2p_{1/2}$: 250.5 eV, $2p_{3/2}$: 248.4 eV, 3s: 29.3 eV, 3p: 15.8 eV.

Vilka kinetiska energier kan observeras för fotoelektronerna?

Vilka röntgenenergier emitteras från de fotojoniserade atomerna där tabellerade elektronnivåer ingår?

- 8) I ett uranmineral uppmättes 90 mg Pb^{206} per gram uran-238. Blyet har skapats genom sönderfall från U^{238} med halveringstiden $T_{1/2} = 4.5 \cdot 10^9$ år. Beräkna mineralets ålder.

- 9) Beräkna, med hjälp av Lennard-Jones potential ($U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$), kvoten mellan kohesivenergierna för neon i bcc och fcc struktur. Vilken struktur är mer stabil?

Värdet på σ är 2.75 Å. Närmsta-granne-avståndet i jämvikt är 3.00 Å.

Tänk på att man får bidrag även längre ifrån än närmsta-granne.

- 10) Cu_3Pt är en legering som existerar både i en ordnad form och en oordnad form. Båda kan beskrivas som en fcc struktur, med Cu och Pt slumpvis utplacerade på fcc-positionerna i den oordnade formen medan i den ordnade formen Pt atomerna sitter i (0,0,0) och Cu finns i de resterande gitterpunkterna.

Hur kan man med röntgendiffraktion se skillnad på de två fallen?

Beräkna strukturfaktorn för den ordnade strukturen.

Lösningsförslag

1) a) Excitationsenergin för en vibration ges av uttrycket $\Delta E_{vib} = \hbar \sqrt{k/\mu}$. För att beräkna dessa energier behövs bara den reducerade massan, $\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$. Eftersom "molekylen" har tre atomer kommer μ att vara olika för de två vibrationsmoderna: i den första sträcks H-O bindningen med $m_1=m_H$ och $m_2=m_O+m_{Pt}$, i den andra moden sträcks Pt-O bindningen med $m_1=m_H+m_O$ och $m_2=m_{Pt}$. $\mu_1=211/212$ u och $\mu_2=3315/212$ u.

$$\text{Från detta får vi: } \Delta E_{vib1} = \hbar \sqrt{k_1/\mu_1} = 429 \text{ meV} \text{ och } \Delta E_{vib2} = \hbar \sqrt{k_2/\mu_2} = 54 \text{ meV}$$

b) Till en viss del skiftas vibrationsenergin därför att Pt-atomen hänger i syret, men det största bidraget kommer från den försvagning av O-H bindningen som Pt-O bindningen ger upphov till.

2) Från uttrycket $U(r)$ vet vi den potentiella energin i bindningen. Den kraft som den kemiska bindningen ger upphov till ges av derivatan av U : $F(r) = -\frac{dU(r)}{dr}$. Den kraft som behövs för att bryta kedjan är densamma som den maximala kraften given av uttrycket ovan (fast med ombytt tecken). Sålunda deriverar vi $F(r)$, söker det r för vilket derivatan är noll och räknar ut $F(\text{detta } r)$.

$$F(r) = -\frac{dU(r)}{dr} = \frac{10B}{r^{11}} - \frac{2C}{r^3} \Rightarrow \frac{dF(r)}{dr} = \frac{110B}{r^{12}} - \frac{6C}{r^4}$$

$$\frac{dF(r)}{dr} = \frac{110B}{r^{12}} - \frac{6C}{r^4} = 0 \Rightarrow r^8 = \frac{110B}{6C} \Rightarrow r = 3.528 \text{ \AA}$$

$$F(r = 3.528 \text{ \AA}) = \frac{10B}{r^{11}} - \frac{2C}{r^3} = 0.560 \text{ eV/\AA} - 2.050 \text{ eV/\AA} = -1.6 \text{ nN}$$

Vårt svar blir negativt, men vad vi räknat ut är den återförande kraften från bindningarna inom molekylen.

3) Den utstrålade effekten ges av aktiviteten R (dvs antalet sönderfall per sekund) multiplicerat med Q -värdet (avgiven energi per sönderfall).

$$Q = Q_\alpha = (m_{Po} - m_{Pb} - m_\alpha) \cdot c^2 = \{tab.A3\} =$$

$$(209.982848u - 205.974440u - 4.002602u) \cdot 931.494 \text{ MeV/u} = 5.40 \text{ MeV}$$

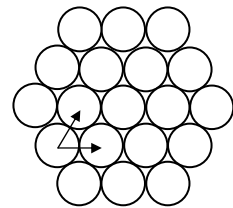
Aktiviteten ges av ekvation 44.8 med $R_0 = N_0 \lambda$, där $\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}}$ och N_0 =antalet Po-210 i 1g som är $2.87 \cdot 10^{21}$, vilket ger oss en utstrålad effekt på 144W.

4) En gammal klassiker som löses med hjälp av Braggs samband mellan spridningsvinkel och avstånd mellan gitterparameter. $a = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$. h,k,l är Millerindex för de planskaror som ger upphov till en reflex. De reflexer som "syns" för en given struktur ges av den i frågan givna figuren. För att ta reda på strukturen tar vi kvoten av $\sin^2 \theta$ för de olika reflexerna och ser vilken serie av tillåtna heltal som skapas.

vinkel	12.11	20.03	23.68	28.98
$\sin^2 \theta$	0.0440	0.117	0.161	0.2347
kvot	1	2.666	3.665	5.333
	3/3	8/3	11/3	16

Dvs reflexerna följer serien 3,8,11,16 dvs diamant. För att räkna ut gitterparametern väljer vi en vinkel och till den hörande Millerindex: $a = 6.357 \text{ \AA}$.

b) Den första reflexen kommer från (111)-planet. Planet har en hexagonal struktur med atomsavstånd detsamma som närmsta granne-avstånd. Bindningen mellan två närmsta-granne-atomer i diamantstrukturen har längden $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ dvs $\sqrt{3}a/4 = 2.75 \text{ \AA} = d$. Ytan av en romb med en atom (se figur) är $d^2/\sqrt{3} = 4.366 \text{ \AA}^2 \Rightarrow 0.23 \text{ atomer/\AA}^2$.



5) Den elektriska resistansen diskuteras i kapitel 3.3.2. i Hook&Hall. Man läser där att olika bidrag till resistiviteten adderas enligt Matthiesens regel. T.ex. om man har spridning mot kristall(gitter)defekter ger det ett bidrag som, för tillräckligt små T då atomdiffusionen i materialet är försumbar, är oberoende av T. Spridning mot fononer (gittervibrationer) har ett temperaturberoende (se t.ex. figur 3.6 i Hook&Hall). Det temperaturberoende bidraget går mot noll då T är litet, och det enda bidrag som finns kvar är den s.k. residuala resistiviteten ρ_0 (i vårt fall är

$\rho_0 = 3 \cdot 10^{-10} \text{ } \Omega \text{m}$. Från ekvation 3.27 $\sigma = \frac{ne^2 \tau}{m_e}$ och $\rho = \frac{1}{\sigma}$ och $\lambda = v_F \tau$ kan vi räkna ut den

medelfria väglängden λ . Vi behöver bara plocka fram n och v_F , där v_F är Fermihastigheten.

n är elektronkoncentrationen som ges av $n = \frac{N}{V} = \frac{4}{(4 \cdot 10^{-10} \text{ m})^3} = 6.25 \cdot 10^{28} \text{ e}^- / \text{m}^3$.

Fermihastigheten fås ur $\frac{m_e v_F^2}{2} = \epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n)^{2/3} \Rightarrow v_F = 1.42 \text{ Mm/s}$

$\lambda = \frac{m_e}{ne^2 \rho} v_F = 2.7 \text{ } \mu \text{m}$

6) Det reciproka mönstret byggs upp av de reciproka vektorerna, vilka ges av ekvation 11.9 i Hook&Hall. $\mathbf{a}^* = \frac{2\pi(\mathbf{b} \times \mathbf{c})}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}$. Här låter vi $\mathbf{a}$ och $\mathbf{b}$ vara de i figuren angivna vektorerna. Vektorn $\mathbf{c}$ saknas och kan under uträkningen sättas till planets normalvektor $\mathbf{n}$ med längden 1.

$$\mathbf{a}^* = \frac{2\pi(\mathbf{b} \times \mathbf{n})}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{n})}, \quad \mathbf{b}^* = \frac{2\pi(\mathbf{n} \times \mathbf{a})}{\mathbf{b} \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{a})}$$

Lägg x-axeln så att för Pt(111)-ytan $\mathbf{a} = a\hat{x}$ och $\mathbf{b} = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{y}$ och $\mathbf{n} = \hat{z}$

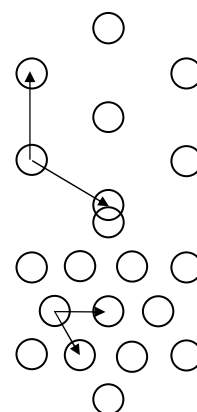
Kryssningen ger då $\mathbf{a}^* = \frac{2\pi}{a} \left(\hat{x} - \frac{\hat{y}}{\sqrt{3}} \right)$ och $\mathbf{b}^* = \frac{2\pi}{a} \frac{2}{\sqrt{3}} \hat{y}$

För Pt(111)-H₂O ytan är $\mathbf{a} = \frac{3a}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{y}$ och $\mathbf{b} = \sqrt{3}a\hat{y}$ och $\mathbf{n} = \hat{z}$

Notera att a är längden på basvektorn för Pt(111)-ytan.

Kryssning ger $\mathbf{a}^* = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{n}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{n})} = 2\pi \frac{2}{3a} \hat{x}$ och $\mathbf{b}^* = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \left(\hat{y} - \frac{\hat{x}}{\sqrt{3}} \right)$

Längden på de reciproka vektorerna äro 1.51 Å⁻¹.



Tentamen i 2B1101 - Fysik del 2 – Materialfysik för E
2006-10-23

Tillåtna hjälpmedel: miniräknare, läroböckerna Serway och Hook & Hall eller ekvivalenta alternativ, (t.ex. Halliday/Resnick istället för Serway och Kittel, Rosenberg eller Myers istället för Hook & Hall) dock max 2 böcker, formelsamling (Tefyma / Beta), en sammanfattning av kursen på högst ett A4-blad, samt tillägget "Massformeln" från hemsidan.

*Rita tydliga figurer, motivera använda samband antingen genom egen härledning eller hänvisning till boken och förklara beteckningar. Lösningar med enbart ekvationer utan förklaring ger poängavdrag. Läs igenom uppgifterna noggrant innan ni börjar räkna och **om ni har problem, fråga!***

Rätt löst uppgift i del A ger 4 p. Del B är **komplettering** av inlämningsuppgifterna, dvs ni som redan fått godkänt på motsvarande inlämningsuppgift behöver ej lösa detta tal. Detta gäller även omtentamen. Korrekt lösning på del B ger 1.5 p. Totalt kan maximalt 30 p (24 + 6) erhållas.

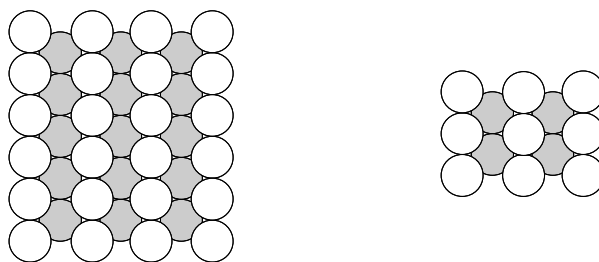
Betygsgränser: ≥ 24 p ger betyg 5, 19-23.5 p ger betyg 4,
15-18.5 p ger betyg 3 13-14.5 ger rätt till komplettering.

Tentaresultat kommer att anslås inne på STEX, om så önskas kan resultatet meddelas per email, ange din emailadress. Klagomål på tentarättning skall vara examinator tillhanda senast 3 veckor efter det att resultatet anslagits. För muntligt komplettering, kontakta examinator för tidsbokning inom 3 veckor efter att resultatet anslagits.

Gå gärna in på www.e.kth.se och utvärdera kursen, tänk på edra efterföljande.

Del A.

- 1) På en Pd(110) yta (palladium) skapas atomrader längs [001] riktningen enligt den vänstra figuren som föreställer ytan sedd uppifrån. Den högra bilden visar ytan sedd från sidan, höjdskillnaden mellan de översta atomerna (vita) och atomerna i lagret under (grå) är 1.30 Å.



För att undersöka ytan används ett sveptunnelmikroskop där en tunn metallnål sveps på ett kort avstånd över ytan och tunnelströmmen mäts. Beräkna kvoten mellan tunnelströmmen ovanför en atom i det översta lagret och en atom i det andra lagret. Antag att elektronkoncentrationerna är desamma på de två atomerna, att tunnlingsbarriären är 3 eV, och att energin på de tunnlande elektronerna är 2 eV. (4p)

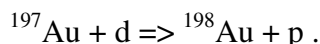
- 2) En kristall studeras med neutroondiffraktion, där man mäter intensiteten som funktion av spridningsvinkeln precis som i röntgendiffraktion. Neutronerna har energin 5.0 meV. De tre första uppmätta Braggvinklarna är 18.25° , 30.75° och 36.84° .

Bestäm kristallstruktur och gitterparameter. (3p)
Vid vilken Braggvinkel detekteras nästa reflex? (1p)

Tillåtna reflexer för kubiska strukturer.

$h^2 + l^2 + k^2$	0	1	2	3	4	5	6	•	8	9	10	11	12	13	14	•	16	17	18	19	20	21	22	•	24
sc																									
bcc																									
fcc																									
diamond cubic																									

- 3) Bestrålning av ^{197}Au med deuteroner (dvs deuteriums kärna) kan inducera reaktionen:



Kärnan ^{198}Au sönderfaller från sitt grundtillstånd till en exciterad nivå vid 481 keV i ^{198}Hg . Den högsta kinetiska energin för betapartikeln är 892 keV.

Uppskatta Q-värdet för reaktionen $^{197}\text{Au} + d \rightarrow ^{198}\text{Au} + p$. Försumma kärnrekylar. (4p)

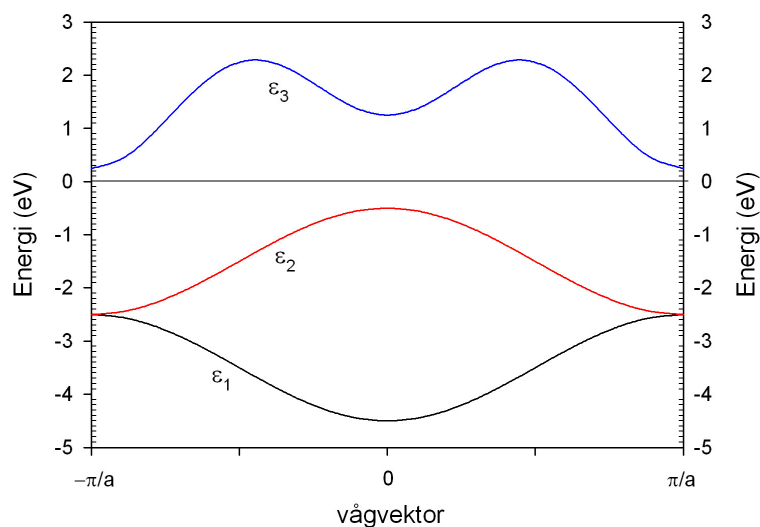
- 4) Värmekapaciteten för koppar mättes vid låga temperaturer, resultatet visas i tabellen.

T(K)	1.25	1.45	1.97	2.60	3.02	3.58	4.02
$C_V(\text{mJ/mol K})$	0.96	1.15	1.72	2.61	3.38	4.65	5.90

Beräkna, utgående från uppmätta värden, Debyetemperatur och Fermienergin för Cu. (Cu är monovalent, har fcc struktur med gitterparameter $3.61\text{\AA}$) (4p)

- 5) KCl har NaCl struktur och absorberar infraröd strålning, på grund av excitation av transversella optiska fononer vid $\mathbf{k}=0$ och vinkelfrekvensen $5.0 \cdot 10^{13} \text{ rads}^{-1}$. Bestäm frekvensskillnaden mellan de transversella optiska och akustiska fononerna vid Brillouin zongränsen i [111]-riktningen. Modellen med en linjär endimensionell kedja kan användas för denna riktning. (4p)

- 6) Elektronstrukturen i en endimensionell halvledare med gitterparametern a visas i figuren.



Dispersionerelationerna för de tre banden skrivs:

$$\varepsilon_1(k) = -3.5 - \cos(ka)$$

$$\varepsilon_2(k) = -1.5 + \cos(ka)$$

$$\varepsilon_3(k) = 1.5 + 0.5 \cos(ka) - 0.75 \cos(2ka)$$

Är bandgapet direkt eller indirekt? (1p)

För vilka fotonenergier är materialet genomskinligt? (1p)

Bestäm effektiva massan (m^*) för de tre banden vid $k=0$ (2p)

Del B.

- 7) Vid ett experiment belyses Ar med röntgenstrålning med energin $hf = 1486.0$ eV. Argons elektronskal har bindningsenergier 2s: 326.3 eV, $2p_{1/2}$: 250.5 eV, $2p_{3/2}$: 248.4 eV, 3s: 29.3 eV, 3p: 15.8 eV.

Vilka kinetiska energier kan observeras för fotoelektronerna?

Vilka röntgenenergier emitteras från de fotojoniserade atomerna där tabellerade elektronnivåer ingår?

- 8) I ett uranmineral uppmättes 90 mg Pb^{206} per gram uran-238. Blyet har skapats genom sönderfall från U^{238} med halveringstiden $T_{1/2} = 4.5 \cdot 10^9$ år. Beräkna mineralets ålder.

- 9) Beräkna, med hjälp av Lennard-Jones potential ($U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$), kvoten mellan kohesivenergierna för neon i bcc och fcc struktur. Vilken struktur är mer stabil?

Värdet på σ är 2.75 Å. Närmsta-granne-avståndet i jämvikt är 3.00 Å.

Tänk på att man får bidrag även längre ifrån än närmsta-granne.

- 10) Cu_3Pt är en legering som existerar både i en ordnad form och en oordnad form. Båda kan beskrivas som en fcc struktur, med Cu och Pt slumpvis utplacerade på fcc-positionerna i den oordnade formen medan i den ordnade formen Pt atomerna sitter i (0,0,0) och Cu finns i de resterande gitterpunkterna.

Hur kan man med röntgendiffraktion se skillnad på de två fallen?

Beräkna strukturfaktorn för den ordnade strukturen.

Lösningförslag

- 1) Vi ska beräkna tunnelströmmen över två atomer på avstånden L och $L + 1.30\text{Å}$ från STM-nålen. Vi vet inte L , men eftersom vi söker kvoten mellan strömmarna kommer det att förkortas bort.
 $I(x) = I_0 \exp(-2Cx)$. I_0 är en okänd konstant.

$$\frac{I(L + 1.30)}{I(L)} = \frac{I_0 \exp(-2C(L + 1.30\text{Å}))}{I_0 \exp(-2CL)} = \frac{\exp(-2CL) \cdot \exp(-2C \cdot 1.30\text{Å})}{\exp(-2CL)} = \exp(-2C \cdot 1.30\text{Å})$$

$$\text{med } C = \frac{\sqrt{2m(U - E)}}{\hbar} = 0.512\text{Å}^{-1} \text{ blir den sökta kvoten } 0.26 = \text{saret}$$

- 2) Vid diffraktionsstudier gäller Bragg: $\sin \theta = \frac{\lambda}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$. De tillåtna reflexerna ges som vanligt av den i frågan givna figuren. För att ta reda på strukturen tar vi kvoten av $\sin^2 \theta$ för de olika reflexerna och ser vilken serie av tillåtna heltal som skapas.

vinkel	18.25	30.75	36.84
$\sin^2 \theta$	0.0981	0.261	0.359
kvot	1	2.666	3.666
	3/3	8/3	11

Dvs de tre första reflexerna följer serien 3,8,11 dvs diamant. Nästa reflex har $(h^2 + k^2 + l^2) = 16$.

För att räkna ut gitterparametern måste vi känna till våglängden, som är neutronens

deBroglievåglängd, $\lambda = h/p$. $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = 1.28\text{Å}$. Input λ ger $a = 3.54\text{Å}$.

Nästa reflex dyker upp vid 46.31 grader.

3) Sönderfallet av ^{198}Au ($Z=79$) till ^{198}Hg ($Z=80$) är ett β^- - sönderfall.

Då gäller att $Q_{\beta^-} = [M(Z,A) - M(Z+1,A)]c^2$ (neutrala atommassor)

Sönderfallet leder till en exciterad nivå i ^{198}Hg . $K_{\max}$ för β^- partikeln är 892 keV vilket $\approx Q_{\beta^-}$ värdet för sönderfallet till det exciterade tillståndet (kärnans rekyl försummas och neutrinet tar här ej med sig någon kinetisk energi och betraktas som masslös även om mätningar indikerar att den kan ha en mycket liten vilomassa).

Från boken fås vilomassan för $^{198}\text{Hg} = 197.966752$ u och för $^{197}\text{Au} = 196.966552$ u .

Q_{β^-} värdet för sönderfall mellan grundtillstånden i ^{198}Au och ^{198}Hg blir 892 + 481 keV = 1373 keV = 1.373 MeV.

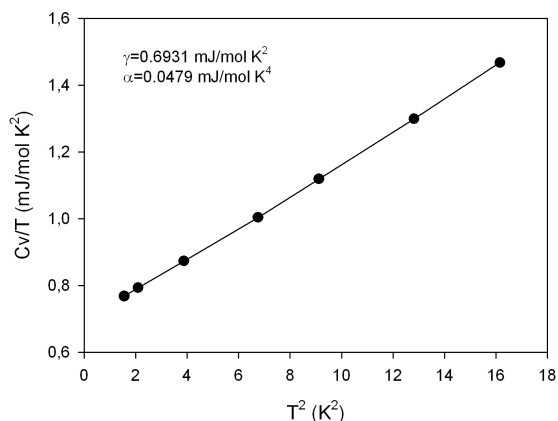
Nu är energiekvivalenten för 1 u = 931.494 MeV, dvs 1.373 MeV svarar mot en masskillnad mellan ^{198}Au och ^{198}Hg på 1.373/931.494 u = 0.001474 u. Då massan för ^{198}Hg enligt boken är 197.966752 u blir massan för $^{198}\text{Au} = 197.966752 + 0.001474$ u = 197.968226 u

Q-värdet för reaktionen $^{197}\text{Au} + d \rightarrow ^{198}\text{Au} + p$ blir då: (OBS Använd neutrala atommassor konsekvent): $Q = [196.966552 + 2.014102 - 197.968226 - 1.007825] \times 931.494 \text{ MeV} = 4.288 \text{ MeV}$

4) Värmekapaciteten har bidrag från såväl gitter som elektroner:

$$C_V = C_g + C_{el} = \alpha T^3 + \gamma T$$

Plotta C_V/T mot T^2 , lutningen ger α och skärningspunkten med C/T axeln ger γ .



Ur α kan vi lösa θ_D och ur γ kan ϵ_F lösas enligt:

$$\alpha = \frac{12Nk_B\pi^4}{5\theta_D^3} = \{N = N_A \Rightarrow N_A k_B = R = 8.314 \text{ J/mol K}\} \Rightarrow \theta_D = \sqrt[3]{\frac{12R\pi^4}{5\alpha}} = 344 \text{ K}$$

$$\gamma = \frac{\pi^2 Nk_B}{2T_F} \{N = N_A\} \Rightarrow \epsilon_F = k_B T_F = \frac{\pi^2 N_A k_B^2}{2\gamma} = 5.1 \text{ eV}$$

5) Den linjära kedjan med två atomer i basen beskrivs i kapitel 2.3.2. i H&H, och figur 2.7 är värd en närmare studie. Vi söker frekvensskillnaden mellan de optiska och de akustiska fonon-grenarna vid Brillouinzonsgrenen, dvs vid π/a .

Vinkelfrekvenserna äro där $\omega_{\min}^{opt} = \left(\frac{2K}{m_{Cl}}\right)^{1/2}$ och $\omega_{\max}^{aku} = \left(\frac{2K}{M_K}\right)^{1/2}$ och skillnaden

$$\Delta\omega = \left(\frac{2K}{m_{Cl}}\right)^{1/2} - \left(\frac{2K}{M_K}\right)^{1/2}. \quad m_K = 39.10 \text{ u och } M_{Cl} = 35.45 \text{ u enligt tabell A3 i Serway.}$$

Vi saknar fjäderkonstanten K. Vid $k = 0$ har den optiska grenen sin högsta frekvens som är

$$\text{densamma som den absorberade frekvensen } \omega_{\max} = \left(\frac{2K(m_{Cl} + M_K)}{m_{Cl} \cdot M_K}\right)^{1/2} \Rightarrow K = \omega_{\max}^2 \frac{m_{Cl} \cdot M_K}{2(m_{Cl} + M_K)}$$

$$\Delta\omega = \left(\frac{2K}{m_{Cl}}\right)^{1/2} - \left(\frac{2K}{M_K}\right)^{1/2} = \omega_{\max} \left\{ \left(\frac{M_K}{m_{Cl} + M_K}\right)^{1/2} - \left(\frac{m_{Cl}}{m_{Cl} + M_K}\right)^{1/2} \right\} = 0,035 \cdot \omega_{\max}$$

$$\Delta f = 0,035 \cdot f_{\text{abs}} = 1.75 \cdot 10^{12} \text{ Hz}$$

6) a) bandgapet är indirekt

b) materialet är genomskinligt för energier mindre än bandgapet, dvs

$$\mathcal{E}_3(k = \pi/a) - \mathcal{E}_2(k = 0) = 1.5 + 0.5 \cos(\pi) - 0.75 \cos(2\pi) - (-1.5 + \cos(0)) = 0.75 \text{ eV}$$

c) Effektiva massan ges av $m^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2\mathcal{E}}{dk^2}\right)}$

$$m_1^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2\mathcal{E}_1}{dk^2}\right)} = \frac{\hbar^2}{a^2}, \quad m_2^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2\mathcal{E}_2}{dk^2}\right)} = -\frac{\hbar^2}{a^2}, \quad m_3^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2\mathcal{E}_3}{dk^2}\right)} = -\frac{\hbar^2}{2.5a^2}$$

Tentamen i 2B1101 - Fysik del 2 – Materialfysik för E
2006-01-16

Tillåtna hjälpmedel: miniräknare, läroböckerna Serway och Hook & Hall eller ekvivalenta alternativ, (t.ex. Halliday/Resnick istället för Serway och Kittel, Rosenberg eller Myers istället för Hook & Hall) dock max 2 böcker, formelsamling (Tefyma / Beta), en sammanfattning av kursen på högst ett A4-blad, samt tillägget "Massformeln" från hemsidan.

*Rita tydliga figurer, motivera använda samband antingen genom egen härledning eller hänvisning till boken och förklara beteckningar. Lösningar med enbart ekvationer utan förklaring ger poängavdrag. Läs igenom uppgifterna noggrant innan ni börjar räkna och **om ni har problem, fråga!***

Rätt löst uppgift i del A ger 4 p. Del B är **komplettering** av inlämningsuppgifterna, dvs ni som redan fått godkänt på motsvarande inlämningsuppgift behöver ej lösa detta tal. Detta gäller även omtentamen. Korrekt lösning på del B ger 1.5 p. Totalt kan maximalt 30 p (24 + 6) erhållas.

Betygsgränser: ≥ 24 p ger betyg 5, 19-23.5 p ger betyg 4,
 15-18.5 p ger betyg 3 13-14.5 p ger rätt till muntlig komplettering.

Tentaresultat kommer att anslås på STEX anslagstavla, om så önskas kan resultatet meddelas per email, ange din emailadress. Klagomål på tentarättning skall vara examinator tillhanda senast 3 veckor efter det att resultatet anslagits. För muntligt komplettering, kontakta examinator för tidsbokning inom 3 veckor efter att resultatet anslagits.

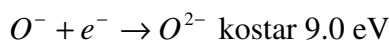
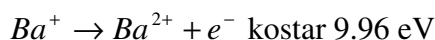
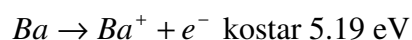
Del A.

- 1) Vid fotoemission från en fri atom kommer jonen att få en rekylenergi som tas från den fotoemitterade elektronen så att energi och rörelsemängd bevaras i processen.
Antag att du mäter på atomärt väte i vila i sitt grundtillstånd, med fotonenergin 100.0 eV.
Hur stor är protonens kinetiska energi efter fotoemissionsprocessen? (4p)
- 2) Bariumoxid har NaCl-struktur med närmsta granneavstånd (Ba-O) 2.76 Å. Den kan tänkas existera i två former, dels med Ba^+ och O^- joner och dels med Ba^{2+} och O^{2-} joner.

Beräkna den joniska kohesivenergin i de två olika fallen, bortse från det repulsiva bidraget(2p)

Avgör vilket av de två tillstånden som är energetiskt mest fördelaktigt (2p).

Jonisationspotentialerna för Ba är 5.19 eV och 9.96 eV, och elektronaffiniteterna för syre är 1.5 eV och -9.0 eV.



- 3) Under universums första minuter skapades de allra lättaste grundämnena. Ett hinder för skapande av tyngre ämnen var att ingen av de tre existerande atomkärnorna med $A=8$ är stabil.

Atommassorna för ${}^8\text{Li}$, ${}^8\text{Be}$ och ${}^8\text{B}$ är 8.022487 u, 8.005305 u respektive 8.024607 u.

Kortaste halveringstiden har ${}^8\text{Be}$ med $t_{1/2} = 2 \cdot 10^{-16}$ s.

Hur kan dessa kärnor sönderfalla? Ange också Q-värden för sönderfallen. (4p)

- 4) Vilken är den längsta röntgenvåglängd som ger en observerbar röntgendiffraktionsreflex från Pd med fcc-struktur och gitterparameter 2.77 Å ? (3p)

Om man gör om samma experiment med neutroner istället för röntgen, vilken energi har dessa neutroner? (1p)

Tillåtna reflexer för kubiska strukturer.

$h^2 + l^2 + k^2$	0	1	2	3	4	5	6	•	8	9	10	11	12	13	14	•	16	17	18	19	20	21	22	•	24
sc																									
bcc																									
fcc																									
diamond cubic																									

- 5) Natrium är en frielektronliknande metall med bcc-struktur och gitterparametern 4.22 Å, och Debyetemperaturen 160 K. Hur stor andel av den totala värmekapaciteten bidrar elektronerna med vid $T = 300$ K? (4p)

- 6) I ett LEED-experiment mäter man diffraktion av lågenergielektroner från en Pd(110)-yta.

Beräkna de tvådimensionella reciproka gittervektorerna för ytan, givet att Pd kristalliserar i fcc-struktur och har gitterparametern 2.77 Å. (3p)

Beräkna avståndet mellan reflexerna på en skärm 5 cm från provets yta. Antag att elektronernas energi är 100 eV och att de infaller normal mot provets yta. (1p)

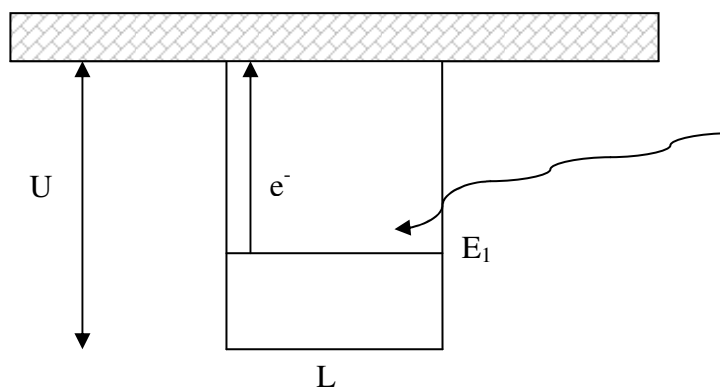
Del B.

- 7) Man vill försöka skapa en solcell med genom att växa en tunn metallfilm mellan två titandioxidskikt (TiO_2). Tanken är att metallfilmen ska fungera som en kvantbrunn vari det skapas kvantiserade energinivåer. Solljuset absorberas när det lyser på kvantbrunnen och en elektron lyfts upp i titandioxidens ledningsband. Det visar sej efter flera försök att absorptionen sker inom ett smalt våglängdsintervall för varje filmtjocklek, och att våglängdsintervallet varierar som funktion av filmens tjocklek. Störst absorption fås när elektronen lyfts precis ut ur kvantbrunnen in i ledningsbandet och där förs bort.

Er uppgift blir att räkna fram tjockleken, L , på metallfilmen sådan att man får maximal absorption vid våglängden 550 nm från den lägsta energinivån i kvantbrunnen upp till ledningsbandet. Antag att brunnen är 3.6 eV djup.

Hur långt utanför kvantbrunnen penetrerar elektronen i sitt grundtillstånd?

Figur till uppgift 7



- 8) Med hjälp av infra-röd (IR) spektroskopi kan man bestämma förekomsten av olika molekyler i luften. Man mäter en stark absorption av IR vid frekvensen 6.0×10^{13} Hz. Från en tabell över kända absorptionslinjer och finner man att det måste vara en diatomär molekyl (CO). Antag att molekylen är i grundtillståndet när den absorberar en infraröd foton.

Er uppgift är att räkna ut kraftkonstanten. Tänk på att fria molekyler både roterar och vibrerar. Bindningsavståndet är 1.20 Å.

- 9) Li och Mg är båda "nästan frielektronmetaller". Dessutom kan Mg lösas i Li upp till 70 atom %, utan att kristallstruktur och gitterparameter hos Li ändras (Mg substituerar Li i strukturen). Beräkna radien på Fermisfären som funktion av Mg koncentration med hjälp av frielektronmodellen. Li kristalliserar i bcc struktur med gitterparametern 3.51 Å.
- 10) I NaCl sker absorption av infraröd strålning, på grund av excitation av transversella optiska fononer vid $\mathbf{k}=0$ och frekvensen $5.0 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$. Bestäm frekvensskillnaden mellan de transversella optiska och akustiska fononerna vid Brillouin zongränsen i [111]-riktningen. Modellen med en linjär endimensionell kedja kan användas för denna riktning.

Lösningsförslag

1) I grundtillståndet har väteatomen en elektron i 1s-skalet med bindningsenergin 13.6 eV. Fotonen tillför 100 eV således kvarstår 86.4 eV för kinetisk energi. Den delas mellan protonen och elektronen så att energi och rörelsemängd bevaras. Vi får då:

$$1) E_{tot} = K_p + K_e = \frac{M_p v_p^2}{2} + \frac{m_e v_e^2}{2} = 86.4 \text{ eV}$$

$$2) \bar{p}_p + \bar{p}_e = 0 \Rightarrow M_p v_p = m_e v_e$$

Beloppen av rörelsemängderna är de samma, men de rör sej åt motsatt håll.

Vi söker K_p och löser det ur 1), samt sätter in 2) i 1) vilket ger oss:

$$K_p = 86.4 \text{ eV} - \frac{m_e v_e^2}{2} = 86.4 \text{ eV} - \frac{2M_p}{m_e} K_p \Rightarrow K_p = 23.5 \text{ meV}$$

2) a) Ba-O har NaCl struktur med närmsta granne avstånd 2.76 Å. Så den joniska kohesivenergin utan repulsivt bidrag ges av 43.16 i Serway.

$$U_o = -\alpha k_e \frac{e^2}{r} \text{ med } r = 2.76 \text{ Å}, \alpha = 1.7476, k_e = 8.988 \cdot 10^9 \text{ Nm}^2/\text{C}^2.$$

Det givna uttrycket gäller för envärt laddade joner, i fallet med tvåvärt laddade joner måste e^2 ersättas med $(2e)^2$.

För $\text{Ba}^+ \text{O}^-$ får vi $U_o = -9.1 \text{ eV}$ och för fallet $\text{Ba}^{2+} \text{O}^{2-}$ får vi $U_o = -36.4 \text{ eV}$

b) Det mest fördelaktiga tillståndet är det med lägst energi. Här måste vi jämföra med de fria neutrala atomerna och till den joniska kohesivenergin lägga vinster och förluster från jonisationen av atomerna. Enligt uppgiften kostar det 5.2 eV att ta en elektron från Ba och man tjänar 1.5 eV att lägga den i syre. Dvs jonisationen kostar totalt 3.7 eV, vilket ger en atomär kohesivenergi i fallet $\text{Ba}^+ \text{O}^-$

$$U_{tot} = U_o + 3.7 \text{ eV} = -9.1 + 3.7 \text{ eV} = -5.4 \text{ eV}$$

I det tvåvärda fallet kostar det 10.0 + 9.0 eV ytterligare, vilket ger oss:

$$U_{tot} = U_o + 3.7 \text{ eV} + 19.0 \text{ eV} = -36.4 + 3.7 \text{ eV} + 19.0 \text{ eV} = -13.7 \text{ eV}$$

Dvs det tvåvärda fallet ger en lägre totalenergi och är alltså fördelaktigast. Det stämmer bra med vad man observerar i naturen.

3) ${}^8\text{Li}$ ($Z=3$) kan β^- -sönderfalla till ${}^8\text{Be}$ med $Q_{\beta^-} = 0.017182 \cdot 931.494 \text{ MeV} = 16.005 \text{ MeV}$

${}^8\text{B}$ ($Z=5$) kan sönderfalla med EC eller β^+ till ${}^8\text{Be}$ med $Q_{\text{EC}} = 0.019302 \cdot 931.494 \text{ MeV} = 17.980 \text{ MeV}$ eller $Q_{\beta^+} = 16.958 \text{ MeV}$

${}^8\text{Be}$ ($Z=4$) kan ej betasönderfalla då den har mindre massa än sina grannar med $A=8$.

Vilka andra sönderfall kan då ske? Testa med hjälp av masstabellen:

${}^8\text{Be} \rightarrow {}^1\text{H} + {}^7\text{Li}$ går ej energetiskt

${}^8\text{Be} \rightarrow {}^2\text{H} + {}^6\text{Li}$ går ej energetiskt

Däremot går: ${}^8\text{Be} \rightarrow {}^4\text{He} + {}^4\text{He}$ med Q-värdet $0.000099 \cdot 931.494 \text{ MeV} = 0.092 \text{ MeV}$.

Detta beror på att ${}^4\text{He}$ (alfapartikeln) har så stor bindningsenergi).

4) a) Vid röntgendiffraktion gäller Braggs lag: $2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$ med $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$

Här är a givet = 2.77 Å . Vi söker det största λ som ger en mätbar reflex. Det sker när $\theta = 90^\circ$. För den första tillåtna reflexen, dvs $\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = 3$ eftersom vi har en fcc kristall.

Så med dessa värden insatta får vi $\lambda_{\text{max}} = 2 \frac{2.77 \text{ Å}}{\sqrt{3}} = 3.20 \text{ Å}$

b) Samma experiment med neutroner ställer samma krav på våglängden, vilket i det här fallet är neutronens deBroglievåglängd.

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = 3.20 \text{ Å} \Rightarrow E = \frac{h^2}{2m\lambda^2}. \text{ Med } m = 1.008 \text{ u} = 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \text{ får vi } E = 8 \text{ meV}.$$

5) Värmekapaciteten ges av $C = C_{\text{el}} + C_{\text{g}} = \{T > \theta_D\} = C_{\text{el}} + 3N_a k_B$, där $C_{\text{el}} = \frac{\pi^2 k_B^2 N_e}{2\epsilon_F} T$

Här är N_a antal atomer i någon volym och N_e antalet elektroner i samma volym. I vårt fall är dessa tal desamma eftersom Na ger en elektroner per atom.

Vi söker andelen av värmekapaciteten från elektronerna dvs

$$\frac{C_{\text{el}}}{C_{\text{el}} + C_{\text{g}}} = \frac{\frac{\pi^2 k_B^2 N}{2\epsilon_F} T}{\frac{\pi^2 k_B^2 N}{2\epsilon_F} T + 3Nk_B} = \frac{\frac{\pi^2 k_B}{2\epsilon_F} T}{\frac{\pi^2 k_B}{2\epsilon_F} T + 3}$$

Vi saknar ϵ_F , som ges av uttrycket $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} = 3.25 \text{ eV}$

Med denna Fermienergi insatt i uttrycket får vi att elektronerna bidrar med 1.3% av värmekapaciteten vid 300 K.

6) a) Ett (110) plan i en fcc kristall är rektangulärt, med kantlängderna a och $a/\sqrt{2}$ enligt figuren.

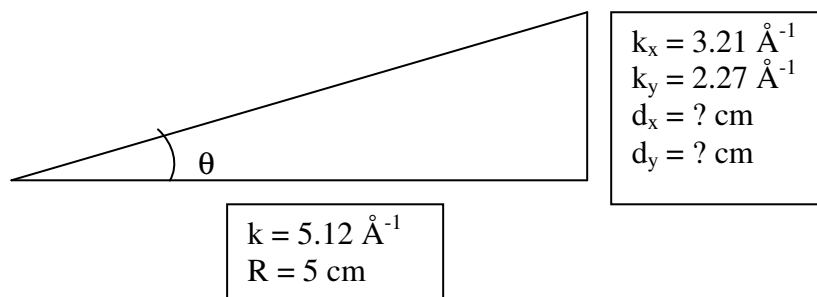
Planets struktur beskrivs av vektorna $\vec{a} = \frac{a}{\sqrt{2}} \hat{x}$ och $\vec{b} = a\hat{y}$.

De reciproka gittervektorerna ges av:

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi(\vec{b} \times \vec{c})}{\vec{a}(\vec{b} \times \vec{c})} = \{\vec{c} = a\hat{z}\} = \frac{2\pi a\hat{x}}{a^2/\sqrt{2}} = \frac{2\sqrt{2}\pi}{a} \hat{x} \text{ och}$$

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi(\vec{c} \times \vec{a})}{\vec{b}(\vec{c} \times \vec{a})} = \{\vec{c} = a\hat{z}\} = \frac{2\pi}{a} \hat{y}$$

b) När elektronernas spridningsvektor vinkelrätt mot ytan är en reciprok gittervektor fås konstruktiv interferens. På samma sätt som i den obligatoriska labben kan man beskriva diffraktionen dels med vågvektorer och dels med avstånden i det verkliga rummet enligt figur.



I figuren har elektronernas initiala vågvektor räknats ut till 5.12 Å^{-1} , och de reciproka gittervektorerna $k_x = 3.21 \text{ Å}^{-1}$ och $k_y = 2.27 \text{ Å}^{-1}$.

Det gäller i x-led att $\frac{k_x}{k} = \frac{d_x}{R} \Rightarrow d_x = \frac{k_x}{k} R = 3.1 \text{ cm}$

och i y-led $\frac{k_y}{k} = \frac{d_y}{R} \Rightarrow d_y = \frac{k_y}{k} R = 2.2 \text{ cm}$

Tentamen i 2B1101 - Fysik del 2 – Materialfysik för E 2005-10-20

Tillåtna hjälpmedel: miniräknare, läroböckerna Serway och Hook & Hall eller ekvivalenta alternativ, (t.ex. Halliday/Resnick istället för Serway och Kittel, Rosenberg eller Myers istället för Hook & Hall) dock max 2 böcker, formelsamling (Tefyma / Beta), en sammanfattning av kursen på högst ett A4-blad, samt tillägget "Massformeln" från hemsidan.

*Rita tydliga figurer, motivera använda samband antingen genom egen härledning eller hänvisning till boken och förklara beteckningar. Lösningar med enbart ekvationer utan förklaring ger poängavdrag. Läs igenom uppgifterna noggrant innan ni börjar räkna och **om ni har problem, fråga!***

Rätt löst uppgift i del A ger 4 p. Del B är **komplettering** av inlämningsuppgifterna, dvs ni som redan fått godkänt på motsvarande inlämningsuppgift behöver ej lösa detta tal. Detta gäller även omtentamen. Korrekt lösning på del B ger 1.5 p. Totalt kan maximalt 30 p (24 + 6) erhållas.

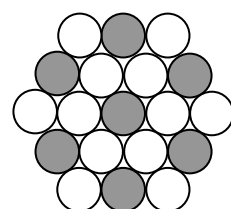
Betygsgränser: ≥ 24 p ger betyg 5, 19-23.5 p ger betyg 4,
15-18.5 p ger betyg 3 13-14.5 ger rätt till muntlig komplettering.

Tentaresultat kommer att anslås på STEX anslagstavla och lösenordsskyddat på kursens hemsida. Klagomål på tentarättning skall vara examinator tillhanda senast 3 veckor efter det att resultatet anslagits. För muntligt komplettering, kontakta examinator för tidsbokning inom 3 veckor efter att resultatet anslagits.

Kursutvärdering på www.e.kth.se (tänk på nästa generations E-teknologer)

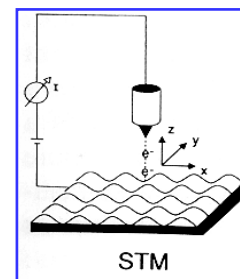
Del A.

- 1) Platina och tenn bildar en legering (en kemisk förening), där ytan ser som i figuren till höger. De vita "atomerna" är Pt och de grå är Sn. Ytstrukturen kan studeras med sveptunnelmikroskopi (STM). Man sätter en smal metallnål så nära ytan att elektroner kan tunnla mellan och nål och en tunnelström uppstår (se nedre figur). När nålen förs ytan kommer tunnelströmmen att variera beroende på avståndet L mellan ytatomer och nål.



ut
yta
över

- Beräkna kvoten mellan tunnelströmmen över en Pt-atom och över Sn-atom givet att Sn-atomer ligger $0.22 \text{ \AA}$ högre än Pt-atomer och elektronkoncentrationen på Pt-atomerna dubbelt så hög som elektronkoncentrationen på Sn-atomerna. Antag att de elektroner som bidrar till strömmen har energin 2 eV och att tunnelbarriären är 4 eV (4p)



en
att
som
hög.

Tänk på att tunnelströmmen är produkten av elektronkoncentrationen och sannolikheten att elektronen tunnlar igenom barriären.

- 2) Palladium (Pd) har utträdesarbete $\phi = 5.0$ eV och elektronnivåer enligt tabell

Elektronnivå	Bindningsenergi (eV)
3s	671
3p	540
3d	340
4s	87
4p	51

När Pd bestrålas med Mg $K\alpha$ strålning med energin $hf = 1255$ eV, fotoemitteras 3p elektroner. (Man får ut de andra elektronerna också, men det bortser vi från i den här uppgiften).

- Vilken kinetisk energi har 3p elektronerna? (1p)
- Vilka röntgenenergier observeras då 3p vakansen fylls? (3p)

- 3) I vår kropp finns en liten mängd den radioaktiva isotopen ^{40}K som har en halveringstid på 1.29×10^9 år. Detta ger ca 4000 sönderfall/s (Bq) i en normalstor person.

- Undersök på vilka sätt ^{40}K kan sönderfalla från sitt grundtillstånd. Vid sönderfall av ^{40}K observerar man bl a gammastrålning med energin 1.460 MeV. Förklara hur denna gammastrålning uppkommer. (4p)

- 4) Vid en röntgendiffraktionslaboration (XRD) skulle Oscar och Osqulda bestämma den termiska expansionskoefficienten för järn. För att imponera på sin labassistent bestämde de sej för att göra experimentet ordentligt från 300K upp till 1000K, men nåt gick snett. Resultaten från 500K respektive 1000K visas nedan. Röntgenvåglängden är 0.71 Å. Bestäm järnets struktur och gitterparameter i de två fallen. Vad har hänt? (4p)

- Vid **500K** mäts Braggvinklarna 10.04° , 14.27° , 17.57° , 20.40° , 22.94° , 25.28° och 27.46°

- Vid **1000K** mäts Braggvinklarna 10.06° , 11.64° , 16.57° , 19.54° , 20.45° , 23.79° och 26.08° .

Tillåtna reflexer för kubiska strukturer.

$h^2 + l^2 + k^2$	0	1	2	3	4	5	6	•	8	9	10	11	12	13	14	•	16	17	18	19	20	21	22	•	24
sc																									
bcc																									
fcc																									
diamond cubic																									

- 5) Värmekapaciteten för en divalent metall uppmättes enligt tabell:

T (K)	0.5	1	2	3	4	5
C_V (mJ/mol K)	0.75	3.0	18.0	57.0	132.0	255.0

Bestäm med hjälp av uppmätta värden den högsta fononfrekvensen i materialet? Använd Debye-approximationen. (4p)

- 6) Bestäm konduktivitet och Fermi-nivåns position för odopat InAs vid $T=300$ K. (3p)

$$E_G = 0.36 \text{ eV}, \mu_e = 30 \text{ m}^2/\text{Vs}, \mu_h = 0.045 \text{ m}^2/\text{Vs}, m_e^* = 0.026 m_e, m_h^* = 0.4 m_e.$$

Notera att här är $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31}$ kg, dvs den fria elektronens massa och de *-markerade massorna är de effektiva massorna.

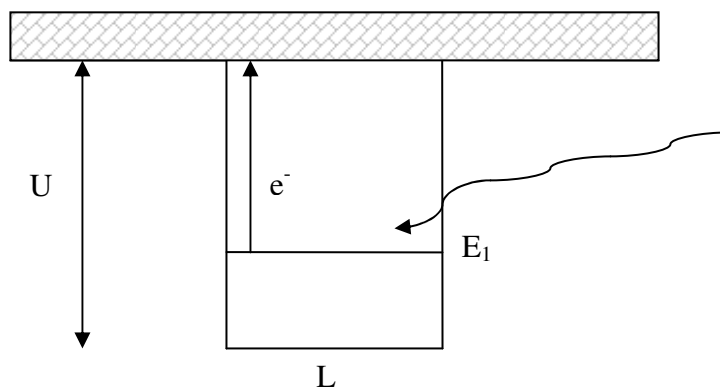
Del B.

- 7) Man vill försöka skapa en solcell med genom att växa en tunn metallfilm mellan två titandioxidskikt (TiO_2). Tanken är att metallfilmen ska fungera som en kvantbrunn var i det skapas kvantiserade energinivåer. Solljuset absorberas när det lyser på kvantbrunnen och en elektron lyfts upp i titandioxidens ledningsband. Det visar sej efter flera försök att absorptionen sker inom ett smalt våglängdsintervall för varje filmtjocklek, och att våglängdsintervallet varierar som funktion av filmens tjocklek. Störst absorption fås när elektronen lyfts precis ut ur kvantbrunnen in i ledningsbandet och där förs bort.

Er uppgift blir att räkna fram tjockleken, L , på metallfilmen sådan att man får maximal absorption vid våglängden 550 nm från den lägsta energinivån i kvantbrunnen upp till ledningsbandet. Antag att brunnen är 3.6 eV djup.

Hur långt utanför kvantbrunnen penetrerar elektronen i sitt grundtillstånd?

Figur till uppgift 7



- 8) Med hjälp av infra-röd (IR) spektroskopi kan man bestämma förekomsten av olika molekyler i luften. Man mäter en stark absorption av IR vid frekvensen 6.0×10^{13} Hz. Från en tabell över kända absorptionslinjer och finner man att det måste vara en diatomär molekyl (CO). Antag att molekylen är i grundtillståndet när den absorberar en infraröd foton.

En uppgift är att räkna ut kraftkonstanten. Tänk på att fria molekyler både roterar och vibrerar. Bindningsavståndet är $1.20 \text{ \AA}$.

- 9) Li och Mg är båda "nästan frielektronmetaller". Dessutom kan Mg lösas i Li upp till 70 atom %, utan att kristallstruktur och gitterparameter hos Li ändras (Mg substituerar Li i strukturen). Beräkna radien på Fermisfären som funktion av Mg koncentration med hjälp av frielektronmodellen. Li kristalliserar i bcc struktur med gitterparametern $3.51 \text{ \AA}$.
- 10) I NaCl sker absorption av infraröd strålning, på grund av excitation av transversella optiska fononer vid $\mathbf{k}=0$ och frekvensen $5.0 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$. Bestäm frekvensskillnaden mellan de transversella optiska och akustiska fononerna vid Brillouin zongränsen i [111]-riktningen. Modellen med en linjär endimensionell kedja kan användas för denna riktning.

Lösningsförslag

1) Tunnelströmmen från de två atomerna bestäms av avståndet L mellan nål och yta, elektronernas energi (E), den potentialbarriär de sak passera (U) och elektrondensiteterna över respektive atom. Enligt Serway (41.20, 41.21) gäller att transmissionen (tunnlingssannolikheten) är $T \sim e^{-2CL}$ där $C = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} = 0.724 \text{ Å}^{-1}$. T ger bara sannolikheten för tunnling. Tunnelströmmen beror på hur många elektroner det finns att tillgå för tunnling, dvs den lokala tillståndstätheten eller elektrontätheten, n . Så vi kan då skriva $I_T \sim ne^{-2CL}$.

$$\frac{I_{Sn}}{I_{Pt}} = \frac{n_{Sn} \cdot e^{-2CL_{Sn}}}{n_{Pt} \cdot e^{-2CL_{Pt}}} = \frac{1}{2} \frac{e^{-2CL_{Sn}}}{e^{-2C(L_{Sn}+0.22\text{Å})}} = 0.5 \frac{e^{-2CL_{Sn}}}{e^{-2CL_{Sn}}} e^{2C \cdot 0.22\text{Å}} = 0.69$$

2) a) Vid fotoemission absorberas fotonenergin som ges till elektronen som kinetisk energi $K = hf - E_B - \phi = 1255 - 540 - 5 = 710 \text{ eV}$

b) Vakansen kan fyllas av en elektron och sända ut röntgen under förutsättning att reglen $\Delta \ell = \pm 1$ är uppfylld. Observera att det inte finns några krav på huvudkvanttalet n , så elektroner kan falla från 4s och även från 3d men inte från 4p. Röntgenenergier som kan observeras är då energiskillnaden mellan 4s och 3p respektive 3d och 3p. Dvs 453 eV och 200 eV.

3) Studera tänkbara sönderfall och beräkna Q -värden. Tag massor från appendix i boken.

a) Alfasönderfall förväntas normalt ej förekomma vid lätta kärnor men kontrollera Q .

$$\begin{aligned} &\text{Sönderfallet sker enligt } {}^{40}_{19}\text{K} \rightarrow {}^{36}_{17}\text{Cl} + {}^4_2\text{He} \text{ med} \\ Q_\alpha &= (39.963999 - 35.968307 - 4.002603) \times 931.494 \text{ MeV} = -6.438 \text{ MeV} \end{aligned}$$

$Q < 0$ dvs alfasönderfall ej energetiskt möjligt.

b) β^- - sönderfall: leder till ${}^{40}\text{Ca}$ med $Q_{\beta^-} = (39.963999 - 39.962591) \times 931.494 = 1.312 \text{ MeV}$

Alltså är β^- -sönderfall möjligt men för att man skall kunna observera ett gammasönderfall med energin 1.460 MeV måste β^- -sönderfallet leda till en exciterad nivå vid 1.460 MeV (om gammasönderfallet sker direkt till grundtillståndet) eller högre. Detta är ej möjligt då $Q_{\beta^-} = 1.312 \text{ MeV}$.

c) Både EC och β^+ -sönderfall leder till ${}^{40}\text{Ar}$.

$$Q_{EC} = (39.963999 - 39.962383) \times 931.494 \text{ MeV} = 1.505 \text{ MeV}.$$

$$Q_{\beta^+} = Q_{EC} - 2m_e c^2 = 1.505 \text{ MeV} - 2 \times 0.511 \text{ MeV} = 0.483 \text{ MeV}$$

Alltså är både EC och β^+ -sönderfall energetiskt möjligt till grundtillståndet i ${}^{40}\text{Ar}$. Eftersom $Q_{EC} > 1.460 \text{ MeV}$ kan EC (men ej β^+ -sönderfall) ske till en exciterad nivå vid 1.460 MeV (eller upp till 1.505 MeV) varifrån gammasönderfall kan ske. I verkligheten finns en nivå vid 1.460 MeV varifrån gammasönderfall sker till grundtillståndet.

4) Från de givna vinklarna och Braggvillkoret i kvadrat $\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2} (h^2 + k^2 + l^2)$ kan kristallstruktur och gitterparametern a tas fram. $\frac{\lambda^2}{4a^2}$ är konstant och $(h^2 + k^2 + l^2)$ antar endast heltalsvärden enligt den i uppgiften givna figuren. Kvoten $\frac{\sin^2 \theta_n}{\sin^2 \theta_1}$ ger kvoten mellan $(h^2 + k^2 + l^2)$ för olika vinklar.

Vid **500K** blir kvoterna 1,2,3,4,5,6,7 och man skulle kunna förledas att tro att vi har en simple cubic struktur. Men $(h^2 + k^2 + l^2) = 7$ är aldrig tillåten. Samma kvoter fås även om första reflexen är $(h^2 + k^2 + l^2) = 2$ vilket är fallet för bcc.

Därefter beräknas a från en kombination av vinkel och $(h^2 + k^2 + l^2)$ till 2.88 Å.

Vid **1000K** blir kvoterna 3/3, 4/3, 8/3, 11/3, 12/3, 16/3 och 19/3. Jämför med figur och identifiera fcc-strukturen. Därefter beräknas a från en kombination av vinkel och $(h^2 + k^2 + l^2)$ till 3.52 Å.

Järnet har genomgått en fasomvandling från bcc till fcc, ett välkänt fenomen inom metallurgin som Oscar och Osqulda tyvärr inte läst.

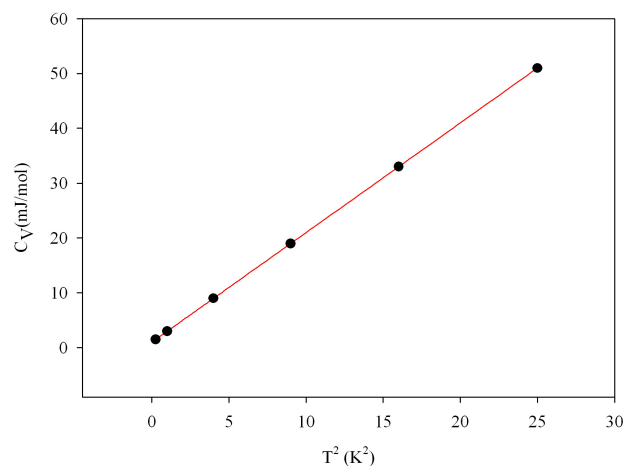
5) Vi söker den högsta fononfrekvensen i materialet. Debyeapproximationen säger att den högsta frekvensen är ω_D . Sambandet mellan Debyefrekvensen och Debyetemperaturen är $\hbar \omega_D = k_B \theta_D$. θ_D fås ur värmekapaciteten och allmänt gäller att $C = \gamma T + \alpha T^3$, där det första bidraget är från elektronerna och det andra från gittret.

$$\alpha = \frac{12N_a k_B \pi^4}{5\theta_D^3}$$

och

$$\gamma = \frac{\pi^2 k_B^2 N_e}{2\mathcal{E}_F}$$

Plotta C/T mot T^2 (som i figuren). Skärningspunkten med C/T -axeln ger γ och lutningen ger α . Här är vi bara intresserade av α som enligt min kurva blir 2.0 mJ/mol·K⁴. Vi löser $\theta_D = 99$ K och $\omega_D = 1.3 \cdot 10^{13}$ rad/sek.



6) För en odopad halvledare gäller $\sigma = n_i e(\mu_e + \mu_h)$, och $\mu = \frac{E_G}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right)$

Vi har allt utom n_i . (och en hel massa pengar så att vi kunde slippa tråkiga tentor). Med givna värden blir $\mu = 0.23 \text{ eV}$. $n_i = (N_V N_C)^{1/2} e^{-(E_G / k_B T)} = 2 \left(\frac{2\pi k_B T}{h^2} \right)^{3/2} (m_h^* m_e^*)^{3/4} e^{-(E_G / k_B T)} = 7.4 \cdot 10^{17} \text{ m}^{-3}$

Vilket ger oss en konduktivitet $\sigma = 3.56 (\Omega\text{m})^{-1}$.

7) För en oändligt djup kvantbrunn gäller att $E_n = \frac{h^2 n^2}{8mL^2}$. Vi vet att $n=1$ i vårt fall. Vi vet också att $U - E_1$ ska motsvara en viss fotonenergi $hf = hc/\lambda$, så att $E_1 = U - hc/\lambda$. Vi löser ut L och sätter in uttrycket för E_1 så att $L = \frac{h}{\sqrt{8mE_1}} = \frac{h}{\sqrt{8m(U - hc/\lambda)}}$. Vi vet också att penetrationsdjupet, δ , för en

elektron med energin E i ett område med potentialen U ges av $\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U - E)}}$.

8) Molekylen är i sitt grundtillstånd, dvs vibrationskvanttalet $v = 0$ och rotationskvanttalet $J = 0$. När molekylen absorberar IR-fotonen exciteras den till ett högre vibrationstillstånd och ett högre rotationstillstånd enligt reglerna $\Delta v=1$ och $\Delta J=\pm 1$. J kan inte vara negativ så J höjs till 1.

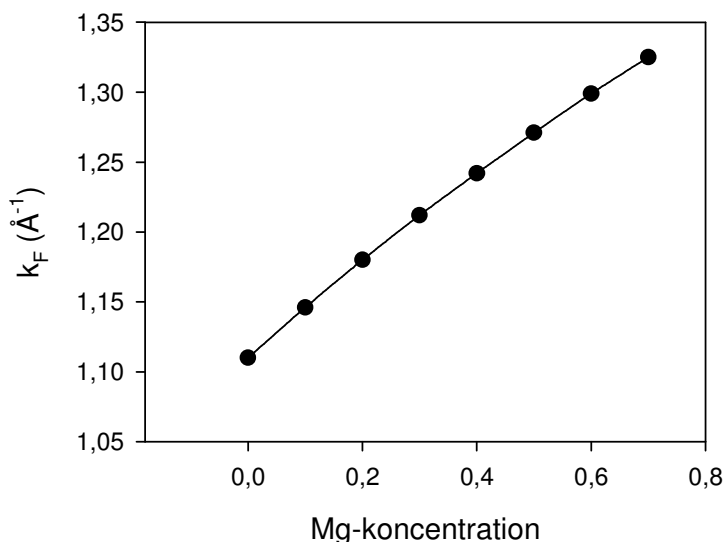
Molekylens ökning i energi ges i boken som: $\Delta E = \Delta E_{vib} + \Delta E_{rot} = \hbar \sqrt{\frac{k}{\mu}} + \frac{\hbar^2}{\mu r^2} (J+1)$, där J representerar initialtillståndet, $J=0$ i vårt fall. Vi söker k .

$\Delta E = \hbar \sqrt{\frac{k}{\mu}} + \frac{\hbar^2}{\mu r^2} \Rightarrow k = \mu \left(\frac{\Delta E}{\hbar} - \frac{\hbar}{\mu r^2} \right)^2$. Vi vet ΔE , μ och r vilket ger $k = 1613 \text{ N/m}$.

9) Fermisfärens radie är k_F . Enligt H&H ekv 3.10 gäller $k_F = (3\pi^2 N/V)^{1/3}$ där N/V är elektronkoncentrationen. Vi väljer sålunda en lämplig volym, t.ex. den kubiska enhetscellen, som för Li har sidan 3.51 Å (se t.ex. webelements). Li kristalliserar i bcc och är monovalent, dvs det avger en elektron per atom. Vi har alltså två elektroner per enhetskub vilket ger oss $N/V = 4.62 \cdot 10^{28} \text{ e}^-/\text{m}^3$. Fermisfärens radie för Li är $1.1 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$.

När man substituerar Li med Mg ändras inte volymen enligt uppgift. Dock ändras antalet elektroner eftersom Mg är divalent. Antalet elektroner per enhetskub blir sålunda en funktion av Mg-koncentrationen, C_{Mg} , enligt $N = 2(1 + C_{Mg})$.

Fermiradien $k_F(C_{Mg}) = (3\pi^2 2(1 + C_{Mg})/V)^{1/3}$



10) Den linjära kedjan med två atomer i basen beskrivs i kapitel 2.3.2. i H&H. Speciellt figur 2.7 är värd att titta närmare i. Vi söker frekvensskillnaden mellan de optiska och de akustiska fonongrenarna vid Brillouinzonsgrenen, dvs vid π/a .

Vinkelfrekvenserna äro där $\omega_{\min}^{opt} = \left(\frac{2K}{m_{Na}}\right)^{1/2}$ och $\omega_{\max}^{aku} = \left(\frac{2K}{M_{Cl}}\right)^{1/2}$ och skillnaden

$$\Delta\omega = \left(\frac{2K}{m_{Na}}\right)^{1/2} - \left(\frac{2K}{M_{Cl}}\right)^{1/2}. \quad m_{Na} = 22.99 \text{ u och } M_{Cl} = 35.45 \text{ u enligt tabell A3 i Serway.}$$

Vi saknar K. Vid $k = 0$ har den optiska grenen sin högsta frekvens som är densamma som den absorberade frekvensen $\omega_{\max}$

$$\omega_{\max} = \left(\frac{2K(m_{Na} + M_{Cl})}{m_{Na} \cdot M_{Cl}}\right)^{1/2} \Rightarrow K = \omega_{\max}^2 \frac{m_{Na} \cdot M_{Cl}}{2(m_{Na} + M_{Cl})}$$

$$\Delta\omega = \left(\frac{2K}{m_{Na}}\right)^{1/2} - \left(\frac{2K}{M_{Cl}}\right)^{1/2} = \omega_{\max} \left\{ \left(\frac{M_{Cl}}{m_{Na} + M_{Cl}}\right)^{1/2} - \left(\frac{m_{Na}}{m_{Na} + M_{Cl}}\right)^{1/2} \right\} = 0.15 \cdot \omega_{\max}$$

Svar: $\Delta f = 0.15 \cdot f_{\text{abs}}$.

Tentamen i 2B1101 - Fysik del 2 – Materialfysik för E
2005-08-24

Tillåtna hjälpmedel: miniräknare, läroböckerna Serway och Hook & Hall eller ekvivalenta alternativ, (t.ex. Halliday/Resnick istället för Serway och Kittel, Rosenberg eller Myers istället för Hook & Hall) dock max 2 böcker, formelsamling (Tefyma / Beta), en sammanfattning av kursen på högst ett A4-blad, samt tillägget "Massformeln" från hemsidan.

Rita tydliga figurer, motivera använda samband antingen genom egen härledning eller hänvisning till boken och förklara beteckningar. Lösningar med enbart ekvationer utan förklaring ger poängavdrag. Läs igenom uppgifterna noggrant innan ni börjar räkna och om ni har problem, fråga!

Rätt löst uppgift i del A ger 4 p. Del B är **komplettering** av inlämningsuppgifterna, dvs ni som redan fått godkänt på motsvarande inlämningsuppgift behöver ej lösa detta tal. Detta gäller även omtentamen. Korrekt lösning på del B ger 1.5 p. Totalt kan maximalt 30 p (24 + 6) erhållas.

Betygsgränser: ≥ 24 p ger betyg 5, 19-23.5 p ger betyg 4, 15-18.5 p ger betyg 3
13-14.5 ger rätt till muntlig komplettering.

Tentaresultat kommer att anslås på STEX anslagstavla och lösenordsskyddat på kursens hemsida. Klagomål på tentarättning skall vara examinator tillhanda senast 3 veckor efter det att resultatet anslagits. För muntligt komplettering, kontakta examinator för tidsbokning inom 3 veckor efter att resultatet anslagits.

Kursutvärdering på www.e.kth.se (tänk på nästa generations E-teknologer)

Del A.

1. En 300 keV gammastråle Comptonsprids mot en fri neutron, i vila. Beräkna neutronens maximala kinetiska energi efter kollisionen. (4p)
2. För att identifiera olika bindningar i stora molekyler kan man isotopmärka vissa atomer, och studera dem med t.ex. vibrationsspektroskopi. Antag att du studerar ett kolväte, dvs en molekyl med kol och väte, där du byter en väte mot en deuterium.
Hur stor är skillnaden i vibrationsenergin i grundtillståndet för en kol-väte bindning jämfört med en kol-deuterium bindning givet att fjäderkonstanten är 200 N/m. (4p)
3. Nukliden ^{60}Co är radioaktiv med en halveringstid på 5.27 år. Undersök tänkbar(a) sönderfallsväg(ar) för ^{60}Co samt ange motsvarande Q-värde(n). Motivera!
[M(^{56}Mn) = 55.938907 u]

4. Vid ett Debye-Scherrer experiment (våglängd 1.54 Å) observerades reflexer i följande vinklar; 15.63, 18.13, 26.10, 31.06.

a) Bestäm kristallstruktur och gitterparameter. (2p)

b) Beräkna den atomära (tvådimensionella) packningstätheten för de plan som ger upphov till den första av de ovan angivna vinklarna (2p)

Tillåtna reflexer för kubiska strukturer.

$h^2 + l^2 + k^2$	0	1	2	3	4	5	6	•	8	9	10	11	12	13	14	•	16	17	18	19	20	21	22	•	24
sc																									
bcc																									
fcc																									
diamond cubic																									

5. Kalciums specifika värme uppmättes vid låga temperaturer med följande resultat:

T(K)	1.05	1.53	2.02	2.54	3.10	4.23
C (J/m ³ ·K)	121.9	189.2	271.3	377.8	520.9	924.5

Bestäm Fermienergi och Debyetemperatur för Ca. Ca är en tvåvärd fcc metall med gitterparametern 5.58 Å (4p).

6. Bestäm Fermi nivå och konduktiviteten i odopat Ge vid rumstemperatur. (4p)

$$m_h^* = 0.32, m_e^* = 0.12, \mu_e = 0.38 \text{ m}^2/\text{Vs} \text{ och } \mu_h = 0.18 \text{ m}^2/\text{Vs}$$

Del B.

7. I en fri atom skapas en 1s vakans genom fotoemission. Vakansen fylls varpå röntgen eller Augerelektroner emitteras. Atomens lägsta energiniåver är

$E_b(1s)$	$E_b(2s)$	$E_b(2p_{1/2})$	$E_b(2p_{3/2})$
3206	326	250,6	248,4

Vilken är den lägsta fotonenergi som krävs för att fotoemittera 1s-elektronen?

Vilka röntgenenergier är möjliga att observera när jonen relaxerar?

Vilken är den högsta KLL Augerelektronenergi som observeras?

8. Beräkna Q-värdet för de två tänkbara beta-sönderfallen för ^{210}Bi .
Sker reaktionen spontant? Vad är beta-partikelns högsta energi? Antag att kärnan efter sönderfallet är i sitt grundtillstånd.
9. Beräkna Fermienergin och radien på Fermicirkeln för en tvådimensionell frielektronmetall (valens 2) med kvadratisk struktur med atomavstånd 3.0 Å.
10. I en KBr-kristall mäter man att längs [111] riktningen är den longitudinella akustiska grenens maximala frekvens $2.82 \cdot 10^{12}$ rad/sek. KBr kristalliserar i NaCl struktur med gitterparameter 6.59 Å. Uppskatta ljudhastigheten i [111]-riktningen från den linjära modellen med två atomer i basen.

Lösningsförslag

1) Fotonen kolliderar med en neutron. Energin skall bevaras, dvs. fotonens energiförlust är densamma som neutronens energivinst. Enligt Compton ändras fotonens våglängd

$$\lambda' - \lambda_0 = \frac{h}{m_n c} (1 - \cos \theta) \text{ där } \lambda' \text{ är våglängden efter kollision och } \lambda \text{ är före. Elektronen får maximal}$$

kinetisk energi när fotonens energiförluster är maximala dvs. spridningsvinkel = $180^\circ \Rightarrow E'(\text{foton}) = 299.81 \text{ keV}$ och $K_{\max} = 190 \text{ eV}$.

2) Grundtillståndet ges av $hf/2 = \text{nollpunktsenergin}$ och $hf = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$. $k = 200 \text{ N/m}$, och

$$\mu = \left(\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \right) = \frac{1 \cdot 12}{1 + 12} = 0.923u \text{ för kol-väte och } \mu = \left(\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \right) = \frac{2 \cdot 12}{2 + 12} = 1.714u \text{ för kol-}$$

deuterium. Med $u = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ får vi:

$$hf/2 (\text{H-C}) = 0.119 \text{ eV}$$

$$hf/2 (\text{D-C}) = 0.087 \text{ eV}$$

3) De olika tänkbara sönderfallen är β^- , β^+ , EC, α och fission. Ett positivt Q-värde säger att reaktionen är energetiskt möjlig. Enl. tabell A3 i boken är atommassan för $^{60}\text{Co} = 59.933\,820 \text{ u}$.

β^- : leder till ^{60}Ni [$M(^{60}\text{Ni}) = 59.930\,789 \text{ u}$], med ett $Q_{\beta^-} = (59.933\,820 - 59.930\,789) \times 931.494 \text{ MeV} = 2.823 \text{ MeV} > 0 \text{ MeV}$. Alltså uppfylls det energetiska villkoret för β^- -sönderfall.

β^+ och EC leder till ^{60}Fe , med $Q_{\text{EC}} = (59.933\,820 - 59.934\,078) \times 931.494 \text{ MeV} = -0.24 \text{ MeV} < 0 \text{ MeV}$, och $Q_{\beta^+} = Q_{\text{EC}} - 1.022 \text{ MeV} = -1.26 \text{ MeV} < 0 \text{ MeV}$

Alltså är energetiska villkoren uppfyllda för β^- men ej för β^+ och EC sönderfall.

Hur är det med alfasönderfall och fission? $Q_\alpha = (M_{\text{Co}} - M_{\text{Mn}} - M(^4\text{He})) \times 931.494 \text{ MeV}$ (sönderfall till ^{56}Mn). Insättning ger: $Q_\alpha = (59.933\,820 - 55.938\,907 - 4.002\,602) \times 931.494 = -7.069 \text{ MeV}$ dvs < 0 och ej energetiskt möjligt.

För att avgöra om fission är trolig eller inte tittar vi i figur 44.8, som visar kurvan över bindningsenergin per nukleon = $f(A)$. Maximal bindningsenergi har Fe, Co ligger väldigt nära, och inom det blåmarkerade området för "greatest stability". Vi förväntar oss inte att Co fissionerar.

4) a) Från de givna vinklarna och sambandet $\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2 + k^2 + l^2)$ kan kristall-struktur och gitterparametern tas fram. $\frac{\lambda^2}{4a^2}$ är konstant och $(h^2 + k^2 + l^2)$ antar endast heltalsvärden enligt den

i uppgiften givna figuren. Kvoten $\frac{\sin^2 \theta_n}{\sin^2 \theta_1}$ ger kvoten mellan $(h^2 + k^2 + l^2)$ för olika vinklar.

Kvoterna blir 3/3, 4/3, 8/3 och 11/3. Jämför med figur och identifiera fcc-strukturen. Därefter beräknas a från en kombination av vinkel och $(h^2 + k^2 + l^2)$ till 4.95 Å.

b) Den första planskaran har $(hkl) = (111)$. Packningstätheten är den del av planet som upptas av atomer (här cirklar). Cirklarnas radie fås från halva närmsta granneavståndet $r = d/2 = a/2\sqrt{2}$. Planets enhetscell är rombisk med arean $\sqrt{3}/2 (d^2)$. Packningstäthet är 0.91.

5) $C = \gamma T + \alpha T^3$, där det första bidraget är från elektronerna och det andra från gittret. Plotta C/T mot T^2 (som i figuren nedan).

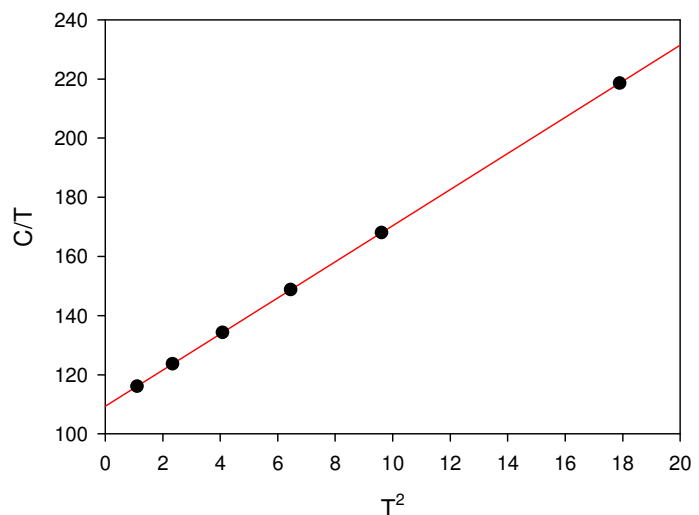
Skärningspunkten med C/T -axeln ger $\gamma = 109.38 \text{ J/m}^3 \cdot \text{K}^2$ och lutningen ger $\alpha = 6.10 \text{ J/m}^3 \cdot \text{K}^4$.

Omvandla från $\text{J/m}^3 \text{K}$ till J/mol K , genom att beräkna volymen för 1 mol Ca till

$$\frac{1}{4} N_A (5.58 \text{ Å})^3 = 2.616 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ Varje atom}$$

ger 2 elektroner vilket ger oss $\gamma = 5.72$

$\text{mJ/mol} \cdot \text{K}^2$ och $\alpha = 0.16 \text{ mJ/mol} \cdot \text{K}^4$. Från



$$C_g = \alpha T^3 = \frac{12 N k_B \pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \text{ och } C_e = \gamma T = \frac{\pi^2 k_B^2 T N}{2 E_F} \text{ loser vi } \theta_D = 230 \text{ K och } E_F = 4.94 \text{ eV}.$$

6) Från ekv. 5.24 får vi $\mu = \frac{E_G}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln\left(\frac{m_h}{m_e}\right) = \{E_G = 0.66 \text{ eV tab 5.1}\} = 0.35 \text{ eV}$

$\sigma = n_i \mu_e + p_i \mu_h$. Odopad halvledare ger $n_i = p_i$, som kan läsas ur tabell till $2 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$ eller räknas ut från ekv. 5.25, 5.22 och 5.23. Vi får $\sigma = 1.79 (\Omega \text{m})^{-1}$.

Tentamen i 2B1101 - Fysik del 2 – Materialfysik för E

2005-01-11

Tillåtna hjälpmedel: miniräknare, läroböckerna Serway och Hook & Hall eller ekvivalenta alternativ, (t.ex. Halliday/Resnick istället för Serway och Kittel, Rosenberg eller Myers istället för Hook & Hall) dock max 2 böcker, formelsamling (Tefyma / Beta), en sammanfattning av kursen på högst ett A4-blad, samt tillägget "Massformeln" från hemsidan.

Rita tydliga figurer, motivera använda samband antingen genom egen härledning eller hänvisning till boken och förklara beteckningar. Lösningar med enbart ekvationer utan förklaring ger poängavdrag. Läs igenom uppgifterna noggrant innan ni börjar räkna och om ni har problem, fråga !

Rätt löst uppgift i del A ger 4 p. Del B är **komplettering** av inlämningsuppgifterna, dvs ni som redan fått godkänt på motsvarande inlämningsuppgift behöver ej lösa detta tal. Detta gäller även omtentamen. Korrekt lösning på del B ger 1.5 p. Totalt kan maximalt 30 p (24 + 6) erhållas.

Betygsgränser: 23.5 p (eller mer) ger betyg 5, 18.5-23 p ger betyg 4 och 14-18 p ger betyg 3.

Tentaresultat anslås på STEX anslagstavla.

Del A.

1. En platinayta belyses med Mg K_{α} röntgenstrålning och fotoelektroner emitteras.
 - (a) Beräkna Mg K_{α} röntgenfotonernas energi (2p)
 - (b) Beräkna den maximala kinetiska energin hos fotoelektronerna från provet (1p)
 - (c) Beräkna den kinetiska energin för fotoemitterade Pt 4f elektroner vars bindningsenergi är 71.7 eV (i förhållande till Ferminivån) (1p)
2. En Cu(100) yta bestrålas med elektroner med energin 50 eV. Cu kristalliserar i fcc-struktur med gitterparameterns 3.61 Å. Beräkna vinkeln till första diffraktionsmaximum. Antag att elektronerna faller in vinkelrätt mot ytan. (4p)
3. Ett $2 \cdot 10^{13}$ Bq starkt ^{72}Zn preparat är inneslutet i en tjockväggig blybehållare. ^{72}Zn β -sönderfaller till en exciterad nivå i ^{72}Ga , betecknad $^{72}\text{Ga}^*$. $^{72}\text{Ga}^*$ de-exciterar genom att sända ut två fotoner (γ) med energierna $\gamma_1=0.145$ MeV och $\gamma_2=0.016$ MeV. Massan för ^{72}Zn är 71.926856 u, och massan för ^{72}Ga är 71.926365 u.
 - a) beräkna Q-värdet för sönderfallsprocessen (2p)
 - b) Hur stor effekt upptas av blybehållaren? Antag att medelenergin för β -partikeln är halva $K_{\max}$. (2p)

4. Man vill bestämma andelen Ge i en $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -legering med röntgendiffraktion med Cu $K\alpha$ strålning ($\lambda = 1.540 \text{ \AA}$). Antag att gitterparametern varierar linjärt med koncentrationen, och att kristallstrukturen är densamma för legeringen som för de rena elementen ($a_{\text{Ge}} = 5.66 \text{ \AA}$ och $a_{\text{Si}} = 5.43 \text{ \AA}$). Följande Braggvinklar (i grader) uppmättes: 14.033, 23.327, 27.667 och 34.056. Hur stor andel Ge finns i legeringen? (4p)

Tillåtna reflexer för kubiska strukturer.

$h^2 + l^2 + k^2$	0	1	2	3	4	5	6	•	8	9	10	11	12	13	14	•	16	17	18	19	20	21	22	•	24
sc																									
bcc																									
fcc																									
diamond cubic																									

5. För frielektronmodellen är Fermienergin i praktiken oberoende av temperaturen. Dock kommer ett temperaturberoende in via den termiska expansionen hos gittret. Beräkna hur stort detta bidrag är då en tvåvärd frielektronmetall som kristalliserar i bcc-struktur, med gitterparameter $3.0 \text{ \AA}$ och linjär termisk expansionskoefficient, $\alpha = \frac{\Delta L}{L \cdot \Delta T} = 0.0005 \text{ K}^{-1}$ värms 50 K (4p)
6. När elektromagnetisk strålning (ljus) absorberas av NaCl kan fononer exciteras. Det gäller då att energi och rörelsemängd ska bevaras i processen.

Utgå från den linjära kedjan med två atomer i basen längs (111) riktningen för att räkna ut vid vilken fotonenergi absorptionen har sitt maximum. Låt gitterparametern vara $5.65 \text{ \AA}$, ljudhastigheten i (111) riktningen är 2750 m/s . (4p)

Del B.

7. I en fri atom skapas en 1s vakans genom fotoemission. Vakansen fylls varpå röntgen eller Augerelektroner emitteras. Atomens lägsta energiniåver är

$E_b(1s)$	$E_b(2s)$	$E_b(2p_{1/2})$	$E_b(2p_{3/2})$
3206	326	250,6	248,4

Vilken är den lägsta fotonenergi som krävs för att fotoemittera 1s-elektronen?

Vilka röntgenenergier är möjliga att observera när jonen relaxerar?

Vilken är den högsta KLL Augerelektronenergi som observeras?

8. Beräkna Q-värdet för de två tänkbara beta-sönderfallen för ^{210}Bi .
Sker reaktionen spontant? Vad är beta-partikelns högsta energi? Antag att kärnan efter sönderfallet är i sitt grundtillstånd.
9. Beräkna Fermienergin och radien på Fermicirkeln för en tvådimensionell frielektronmetall (valens 2) med kvadratisk struktur med atomavstånd 3.0 Å.
10. I en KBr-kristall mäter man att längs [111] riktningen är den longitudinella akustiska grenens maximala frekvens $2.82 \cdot 10^{12}$ rad/sek. KBr kristalliserar i NaCl struktur med gitterparameter 6.59 Å. Uppskatta ljudhastigheten i [111]-riktningen från den linjära modellen med två atomer i basen.

Lösningsförslag

1) a) K_α strålning fås då en elektron faller från L-skalet till en vakans i K-skalet. Fotonens energi $hf = E_L - E_K$. För att räkna ut E_K och E_L använda uttrycken i avsnitt 42.8 i Serway, sid 1380-82, med $Z = 12$ för Mg.

$$E_L = -(Z-1)^2 \frac{13.6}{2^2} eV = -411.4 eV \quad \text{och} \quad E_K = -(Z-1)^2 \frac{13.6}{1^2} eV = -1645.6 eV \quad \text{ger } hf = 1234.2 eV.$$

b) $K_{\max} = hf - \phi = \{f = 6.35 eV, \text{ tab } 40.1\} = 1227.9 eV$

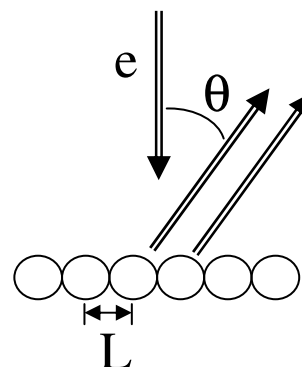
c) Generellt gäller att den kinetiska energin för en elektron ges av:

$$K = hf - \phi - E_B = 1234.2 - 6.35 - 71.7 = 1156.2 eV$$

2) Elektronvågen sprids mot ytan vars atomer fungerar som källor sfäriska vågor. Dessa interfererar och konstruktiv interferens fås då våglängdsskillnaden $\delta = L \sin \theta = n\lambda$. Vi söker första maximum, dvs. $n = 1$.

Elektronernas de Broglie-våglängd $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = 0.174 nm$

Avståndet mellan atomerna, L , är "gitterparametern"/ $\sqrt{2}$. (Tänk på att det är en atom i mitten av kvadraten på en fcc-kristall.



$$\sin \theta = \frac{\lambda}{L} = \frac{0.174}{0.255} \Rightarrow \theta = 43^\circ$$

3) a) Sönderfallet är av β^- -typ och då gäller att $Q = (M_{Zn} - M_{Ga})c^2 = 0.457 MeV$.

b) Q -värdet är energiskillnaden mellan kärnorna i grundtillstånd. Denna energivinst delas broderligt mellan de två γ -strålarna, elektronen och neutrino. De två γ -energierna är givna. Resterande energi delas mellan elektron och neutrino enligt figur 44.14 i Serway. $K_{\max}$ för elektronen fås då neutronens energi är noll (eller nära) så att $K_{\max} = Q - \gamma_1 - \gamma_2 = 0.296 MeV$. Medelenergin för en elektron är densamma som medelenergin för en neutrino. Neutron absorberas inte så absorberad energi per sönderfall blir då $E_{\text{abs}} = \gamma_1 + \gamma_2 + K_{\max}/2 = 0.309 MeV$

Antalet sönderfall per sekund $= 2 \times 10^{13}$.

Absorberad effekt = energi/sek $= 2 \times 10^{10} \times 0.309 MeV/\text{sek} = 1 W$.

4) Både Si och Ge kristalliserar i diamanstruktur, med gitterparametrar $5.43 \text{ \AA}$ respektive $5.66 \text{ \AA}$. För den som inte vet att Si och Ge har diamanstruktur kan man ta fram det från de tillåtna reflexerna. Legeringens gitterparameter varierar som

$$a(x) = a_{Si} + x(a_{Ge} - a_{Si}) = 5.43 + x(5.66 - 5.43) \Rightarrow x = \frac{a(x) - 5.43}{5.66 - 5.43}$$

$$\text{För röntgendiffraktion gäller } \sin \theta = \frac{\lambda}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \Rightarrow a = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}.$$

Så med givna vinklar får vi $a = 5.50 \text{ \AA}$ vilket vi får $x = 0.30$.

$$\text{5) Fermienergin ges av uttrycket } \varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n)^{2/3} = \left\{ n = \frac{N}{V} = \frac{4}{(3.0 \text{ \AA})^3} \right\} = 10.22 \text{ eV}$$

$$\text{När } T \text{ höjs ökar } V \text{ till } V_{\Delta T} = (L + \Delta L)^3 = L^3 (1 + \alpha \Delta T)^3 = 2.91 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$$

$$\text{Insättning i uttrycket för Fermienergin ger } \varepsilon_F(T + \Delta T) = 9.73 \text{ eV}.$$

Dvs förändringen i Fermienergi är 0.49 eV

6) En foton absorberas och skapar en fonon. Energi och rörelsemängd ska bevaras. Vi räknar ut tillåtna kombinationer av energi och rörelsemängd från den linjära kedjan med två atomer i basen, se figur 2.7 i Hook & Hall. Avståndet a = gitterparametern $\times \sqrt{3} = 9.8 \text{ \AA}$.

Den undre, akustiska, grenens energi (frekvens) går mot noll när rörelsemängden (vågvektorn) går

$$\text{mot noll. Den har en maximal frekvens } \omega_{\max} = \left(\frac{2K}{M_{Cl}} \right)^{1/2} \text{ för } k = \pi/a.$$

$$\text{För den övre, optiska, grenen gäller att } \omega_{\max} = \left(\frac{2K(M_{Cl} + m_{Na})}{M_{Cl}m_{Na}} \right)^{1/2} \text{ för } k = 0 \text{ och att}$$

$$\omega_{\min} = \left(\frac{2K}{M_{Na}} \right)^{1/2} \text{ för } k = \pi/a.$$

$$\text{Från ljudhastigheten } v_s = \frac{\omega}{k} = a \left(\frac{K}{2(M_{Cl} + m_{Na})} \right)^{1/2} \text{ kan vi lösa } K.$$

För att göra en grov uppskattning av fononens energi tar vi $\omega_{\max}$ för den optiska grenen. Med insatta värden får vi att $\hbar \omega_{\max} = 7.6 \text{ meV}$. En foton med den energin har vågvektor $k = 2\pi/\lambda = 3.9 \cdot 10^4 \text{ m}^{-1}$.

$$\text{Fononens maximala vågvektor } k = \pi/a = 3.2 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}.$$

Dvs en foton med så lite energi har en (i det här fallet) försumbar rörelsemängd, vilket innebär att fononens rörelsemängd ska vara $\approx 0 \equiv k \approx 0$.

För den akustiska grenen är energin noll när $k = 0$, dvs ljus kan inte excitera akustiska fononer.

För den optiska grenen är energin vid $k = 0$ given av $\hbar \omega_{\max} = 7.6 \text{ meV}$.

Dvs den fotonenergi som absorberas bäst är 7.6 meV.

Tentamen i 2B1101 - Fysik del 2 – Materialfysik för E

2004-10-18

Tillåtna hjälpmedel: miniräknare, läroböckerna Serway och Hook & Hall eller ekvivalenta alternativ, (t.ex. Halliday/Resnick istället för Serway och Kittel, Rosenberg eller Myers istället för Hook & Hall) dock max 2 böcker, formelsamling (Tefyma / Beta), en sammanfattning av kursen på högst ett A4-blad, samt tillägget "Massformeln" från hemsidan.

Rita tydliga figurer, motivera använda samband antingen genom egen härledning eller hänvisning till boken och förklara beteckningar. Lösningar med enbart ekvationer utan förklaring ger poängavdrag. Läs igenom uppgifterna noggrant innan ni börjar räkna och om ni har problem, fråga !

Rätt löst uppgift i del A ger 4 p. Del B är **komplettering** av inlämningsuppgifterna, dvs ni som redan fått godkänt på motsvarande inlämningsuppgift behöver ej lösa detta tal. Detta gäller även omtentamen. Korrekt lösning på del B ger 1.5 p. Totalt kan maximalt 30 p (24 + 6) erhållas.

Betygsgränser: 23.5 p (eller mer) ger betyg 5, 18.5-23 p ger betyg 4 och 14-18 p ger betyg 3.

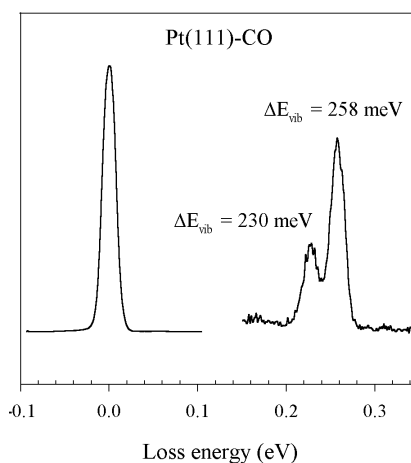
Tentaresultat kommer att anslås måndag 25 oktober på STEX anslagstavla.

Kursutvärdering på www.e.kth.se (tänk på nästa generations E-teknologer)

Del A.

1. En kolmonoxid (CO) molekyl binder till en Pt-yta. Beroende på hur den binder (till en eller två Pt) kommer C=O bindningen att försvagas olika mycket och den interna C=O-vibrationen har olika egenfrekvens. Med vibrations-spektroskopi, där en elektronstråle med väldefinierad energi reflekteras mot en yta, kan man mäta $\Delta E_{\text{vib}} = 230 \text{ meV}$ resp- $\Delta E_{\text{vib}} = 258 \text{ meV}$. (se figur)

Beräkna kraftkonstanten i CO-molekylen i de två fallen.
(4p)

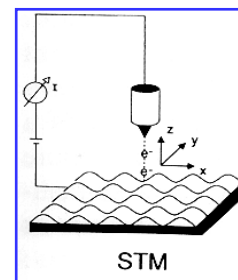


2. Antag att energiproduktionen i en kärnreaktor domineras av fissionsprocessen

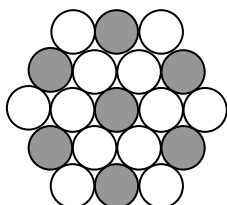
${}^{235}_{92}\text{U} + {}^1_0\text{n} \rightarrow {}^{236}_{92}\text{U}^* \rightarrow {}^{144}_{56}\text{Ba} + {}^{89}_{36}\text{Kr} + 3{}^1_0\text{n}$. De två dotterkärnorna (Ba och Kr) sönderfaller i sin tur via en rad betasönderfall till de stabila kärnorna ${}^{144}_{60}\text{Nd} + {}^{89}_{36}\text{Y}$. All energi som frigörs i de olika stegen absorberas av reaktorvattnet och används för energiproduktion.

Beräkna hur mycket ${}^{235}_{92}\text{U}$ som behövs för att ge 800 MW effekt från verket under ett år.
(4p)

3. Ytors atomära geometri och elektronstruktur kan studeras med sveptunnelmikroskopi (STM). Man sätter en smal metallnål så nära sin provyta att elektroner kan tunnla mellan provyta och nål och en tunnelström uppstår (se figur till höger). Tunnelströmmen beror på avståndet L mellan ytatomer och nål.



Doktorand Osqulda ska i sitt arbete studera en yta av en platina-tenn-legering (en legering är en kemisk förening). Ytan ser ut som i figuren nedan, där de vita "atomerna" är Pt och de grå är Sn.



På grund av den kemiska bindningen mellan Pt och Sn är elektronkoncentrationen på Pt-atomerna dubbelt så hög som elektronkoncentrationen på Sn-atomerna. Detta innebär att för att få samma tunnelström över en Sn-atom som över en Pt-atom måste man minska avståndet L .

Beräkna skillnaden i avstånd L_{Sn} och L_{Pt} för att få samma tunnelström från de två atomerna. Antag att de elektroner som bidrar till strömmen har energin 5 eV och att tunnelbarriären är 8 eV hög.

4. a) En kristall undersöks vid rumstemperatur (300 K) med röntgendiffraktion ($\lambda = 1.54 \text{ \AA}$), och följande Braggvinklar mäts: $\theta = 19.03^\circ$, 22.12° , 32.17° och 38.64° .

Bestäm struktur och gitterparameter. (2p)

b) Materialet värms till 600 K och nya Braggvinklar mäts upp enligt: $\theta = 18.74^\circ$, 21.78° , 31.64° och 37.97° .

Beräkna materialets linjära expansionskoefficient, $\alpha = \frac{\Delta L}{L \cdot \Delta T}$ (2p)

Tillåtna reflexer för kubiska strukturer.

$h^2 + l^2 + k^2$	0	1	2	3	4	5	6	•	8	9	10	11	12	13	14	•	16	17	18	19	20	21	22	•	24
sc																									
bcc																									
fcc																									
diamond cubic																									

5. Tabellen nedan visar resultat från mätningar av specifikt värme på silver, (per mol).

T(K)	0.50	1.00	5.00	10.00	15.00
Cv (mJ/mol·K)	0.34	0.82	24.6	177.0	585.5

a) Beräkna med hjälp av dessa data Fermitemperatur och Debyetemperatur för silver. (2p)

b) Jämför det ovan erhållna värdet på Fermitemperaturen med ett värde som ni beräknar ur den fria elektronmodellen. Silver har fcc struktur, med gitterparameter 4.09 Å, och en valenselektron/atom. (2p)

6. Ledningsförmågan hos ett prov av Ge befanns vara nästan konstant, $\sigma = 200 (\Omega\text{m})^{-1}$, i temperaturintervallet 100 K till 400 K. Hallkoefficienten uppvisade ett negativt värde. $\mu_e = 0.38 \text{ m}^2/\text{Vs}$, $\mu_h = 0.18 \text{ m}^2/\text{Vs}$, $m_e = 0.12$, $m_h = 0.32$, $E_G = 0.67 \text{ eV}$.

a) Är halvledaren intrinsisk eller extrinsisk vid rumstemperatur, dvs. dominerar egenledning eller bidraget från dopatomerna? Motivera (2p)

b) Hur stora är koncentrationerna av elektroner och hål vid $T = 300\text{K}$? Bestäm också Fermi-nivåns läge vid denna temperatur. (2p)

Del B.

- 7) I en fri atom skapas en 1s vakans genom fotoemission. Vakansen fylls varpå röntgen eller Augerelektroner emitteras. Atomens lägsta energinivåer är

$E_b(1s)$	$E_b(2s)$	$E_b(2p_{1/2})$	$E_b(2p_{3/2})$
3206	326	250,6	248,4

Vilken är den lägsta fotonenergi som krävs för att fotoemittera 1s-elektronen?

Vilka röntgenenergier är möjliga att observera när jonen relaxerar?

Vilken är den högsta KLL Augerelektronenergi som observeras?

- 8) Beräkna Q-värdet för de två tänkbara beta-sönderfallen för ^{210}Bi . Sker reaktionen spontant? Vad är beta-partikelns högsta energi? Antag att kärnan efter sönderfallet är i sitt grundtillstånd.
- 9) Beräkna Fermienergin och radien på Fermicirkeln för en tvådimensionell frielektronmetall (valens 2) med kvadratisk struktur med atomavstånd 3.0 Å.
- 10) I en KBr-kristall mäter man att längs [111]-riktningen är den longitudinella akustiska grenens maximala frekvens $2.82 \cdot 10^{12} \text{ rad/sek}$. KBr kristalliserar i NaCl struktur med gitterparameter 6.59 Å. Uppskatta ljudhastigheten i [111]-riktningen från den linjära modellen med två atomer i basen.

Lösningsförslag

1) När elektronen träffar molekylen och exciterar en vibration kommer molekylen att ändra sitt vibrationstillstånd med $\Delta v = +1$. Elektronens energiförlust är $\Delta E_{\text{vib}} = hf = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ (Serway 43.10). I vårt fall är de två olika energierna ΔE_{vib} givna och det enda vi behöver göra räkna ut den reducerade massan μ (som är densamma i de två fallen) och lösa ut k för de två fallen.

$$\mu = \frac{m_C \cdot m_O}{m_C + m_O} = \frac{12 \cdot 16}{12 + 16} u, \quad k = \mu \left(\frac{\Delta E_{\text{vib}}}{\hbar} \right)^2 \text{ ger oss}$$

$$k (258 \text{ meV}) = 1744 \text{ N/m} \text{ och } k (230 \text{ meV}) = 1386 \text{ N/m}$$

2) Den totala avgivna energimängden ges av antal sönderfall $\times$ energi per sönderfall. Avgiven energi per sönderfall är hela reaktionens Q -värde. I vårt fall sker det en hel rad sönderfall, men den totala energivinsten kan alltid skrivas som skillnaden i startmassa och slutmassa gånger c^2 förstås. Så i vårt fall har vi en uran-235 och en neutron som startmassa. I slutet har vi de två stabila kärnorna Nd-144 och Y-89 och 3 neutroner. Så vi får då:

$$Q_{\text{total}} = (M_U + m_n - M_{Nd} - M_Y - 3m_n)c^2 = \\ (235.043923 - 143.910083 - 88.905848 - 2 \cdot 1.008665) \times 931.494 \text{ MeV} / u = 196.2 \text{ MeV}$$

800 MW under ett år är en total energiproduktion på $2.52 \cdot 10^{16} \text{ J} = 1.57 \cdot 10^{29} \text{ MeV} = 8.10^{26}$ sönderfall = 1328 mol urankärnor vilket väger 312 kg = svaret.

3) Tunnelströmmen från de två atomerna bestäms av avståndet L mellan nål och yta, elektronernas energi, E och den potentialbarriär de sak passera, U .

Enligt Serway (41.20, 41.21) gäller att transmissionen (dvs tunnlingssannolikheten) är $T \sim e^{-2CL}$ där $C = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$. T ger bara sannolikheten för tunnling. Den faktiska tunnelströmmen beror på

hur många elektroner det finns att tillgå för tunnling, dvs den lokala tillståndstätheten eller elektrontätheten, n . Så vi kan då skriva $I_T \sim ne^{-2CL}$.

Givet att I_T och C är desamma över båda atomerna får vi en ekvation som relaterar n med L enligt

$$n_{Pt} \cdot e^{-2CL_{Pt}} = n_{Sn} \cdot e^{-2CL_{Sn}} \Rightarrow e^{-2C(L_{Pt}-L_{Sn})} = \frac{n_{Sn}}{n_{Pt}} = \frac{1}{2}.$$

Ta logaritmen och skriv om till $L_{Pt} - L_{Sn} = \frac{\ln 2}{2C} = 0.4 \text{ Å}$. Det här värdet motsvarar de höjdskillnader man mäter med STM mellan olika atomer.

4) a) Skriv Braggs lag i kvadrat $\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4 \cdot a^2} (h^2 + k^2 + l^2)$ (Hook & Hall 1.3 + kap 11). Till var och en av de 4 uppmätta vinklarna hör en kombination av (h, k, l) .

Steg 1) ta kvoten mellan $\sin^2 \theta$ för att utröna kristallstrukturen,

θ_n	19.03 °	22.12 °	32.17 °	38.64 °
$\sin^2 \theta_n / \sin^2 \theta_1$	1	1.333	2.666	3.667
heltal	3/3	4/3	8/3	11/3

Heltalsserien ser ut som 3, 4, 8, 11 som stämmer med fcc.

Steg 2) välj en kombination av (h,k,l) och vinkel för att ta fram gitterparametern a.

$$a = \frac{\lambda}{2 \cdot \sin \theta} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = 4.09 \text{ Å}$$

b) Materialet värms och gitterparametern ökar, men kristallstrukturen är densamma så för att bestämma den "nya" gitterparametern behöver vi endast titta på en vinkel, t.ex. den första.

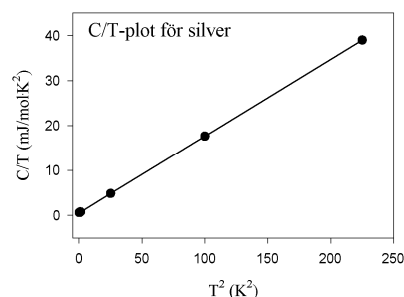
$$a_{600} = \frac{\lambda}{2 \cdot \sin \theta} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = 4.15 \text{ Å}. \text{ Med } L = 4.09 \text{ Å}, \Delta L = 4.15 - 4.09 = 0.06 \text{ Å} \text{ och } \Delta T = 300 \text{ K} \text{ får vi } \alpha = \frac{\Delta L}{L \cdot \Delta T} = \frac{0.06}{4.09 \cdot 300} = 4.89 \cdot 10^{-5}$$

5) a) Ett generellt uttryck för en metalls värmekapacitet är att den kan skrivas som $C_V = \alpha T^3 + \gamma T$ med $\alpha = \frac{12R\pi^4}{5\theta_D^3}$ och $\gamma = \frac{\pi^2}{2} \frac{R}{T_F}$. Här har vi utnyttjat att $N_A k_B = R$.

Plotta C/T mot T^2 , ger oss en figur där lutningen ger α och skärningspunkten med C/T axeln ger γ . Det är enklare att ta fram lutningen, så vi börjar med det och räknar fram γ från en lämpligt vald temperatur.

Ur plotten får vi $\alpha = 0.17 \text{ mJ/mol} \cdot \text{K}^4$.

Från $T = 1 \text{ K}$ tar vi sen fram att $\gamma = 0.65 \text{ mJ/mol} \cdot \text{K}^2$.



Härur löses sen $\theta_D = 225 \text{ K}$ och $T_F = 63\,100 \text{ K}$.

b) Från ekvation 3.9 i H&H vet vi att $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3}$. Med $N = 4$ och $V = (4.09 \text{ Å})^3$ får vi

$\epsilon_F = 5.5 \text{ eV} = k_B T_F \Rightarrow T_F = 63700 \text{ K}$. Dvs silver är (åtminstone i detta avseende en god frielektronmetall)

6) a) Halvledaren är extrinsisk därför att ledningsförmågan är oberoende av temperaturen i ett brett intervall runt rumstemperatur. Det betyder att alla dopatomer är joniserade och att dessa dominerar helt över de intrinsiska laddningsbärarna. Den negativa Hallkoefficienten säger att prover är dopat med donatorer. Alltså är elektronkoncentrationen $n = N_D$.

b) (H&H 5.41) Ledningsförmågan ges av $\sigma = N_D e \mu_e$, och vi får ur givet värde på ledningsförmågan att $N_D = 3.29 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$.

Hålkoncentrationen p erhålles ur (H&H 5.22): $np = N_V N_C \exp(-E_G/k_B T) = 5.38 \cdot 10^{37}$, och med $n = N_D$ får vi $p = 1.6 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$.

Ferminivån erhålls ur (H&H 5.20) $p = N_V \exp(-\mu/k_B T) \rightarrow \mu = k_B T \ln(N_V/p) = 0.52 \text{ eV}$ ovanför valensbandets kant.
