

1. Låt järnatomen ha radien  $r_0$ . Vad blir då  $a$  för fcc? diagonalen på enhetskubens sidokvadrat  $a\sqrt{2}$  men detta är också lika med  $4r_0$  (det är dessa atomer som är närmst). I fcc finns 4 gitterpunkter per enhetskub tätheten blir då  $n_{\text{fcc}} = \frac{4}{a^3} = \frac{4 \cdot 2\sqrt{2}}{4^3 r_0^3} = \frac{\sqrt{2}}{8r_0^3}$ . Motsvarande räkning för bcc blir  $\frac{\sqrt{3}a}{4} = r_0$  detta ger tätheten  $n_{\text{bcc}} = \frac{2}{a^3} = \frac{3\sqrt{3}}{2^5 r_0^3}$  vilket ger förhållandet  $\frac{n_{\text{fcc}}}{n_{\text{bcc}}} = \frac{4\sqrt{2}}{3\sqrt{3}} \approx 1.0887$

2. (a) Enligt Debye teori ges  $C_v$  för fasta material vid låga temperaturer av  $C_v = \frac{12\pi^4}{5} N k_B \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 = AT^3$ . Elektronbidraget är linjärt ( $\gamma T$ ) i temperaturen och  $\frac{C_v}{T} = AT^2 + \gamma$ . En graf över  $\frac{C_v}{T}$  som funktion av  $T^2$  ger en rät linje med lutningskoefficienten  $A = 3.00 \cdot 10^{-7} \frac{J}{\text{mol K}^4}$

(b) Från lutningen  $A$  fås  $\Theta^3 = \frac{12\pi^4 N_A k_B}{5A} = 6.4793 \cdot 10^9 K^3$  ( $N_A = 6.022 \cdot 10^{23}$  atomer per mol) och detta ger  $\Theta = 1.86 \cdot 10^3 K$ .

(c)  $\frac{C_v}{T}$  går mot noll eftersom det inte finns något bidrag från elektronerna till  $C_v$ . Diamant är en isolator, bandgap, inga elektroner vid  $\epsilon_F$ .

3. Aluminium i Germanium ger p-doping. Tätheten av störatomer  $N_{Al} = 0.0001 \frac{8}{(5.658 \cdot 10^{-10})^3} = 4.4167 \cdot 10^{24} \text{m}^{-3}$ . (8:an kommer från 8 Ge atomer per enhetskub.) Hur stort är det intrinsiska bidraget till?  $n_i = p_i = 2 \left( \frac{1.3807 \cdot 10^{-23} \cdot 300}{2\pi \cdot 1.05459^2 \cdot 10^{-34}} \right)^{3/2} (0.10^2 \cdot 9.10953^2 \cdot 10^{-31} \cdot 2)^{3/4} \cdot e^{-0.9 \cdot 1.60219 \cdot 10^{-19} / 2 \cdot 1.3807 \cdot 10^{-23} \cdot 300} = 2.188 \cdot 10^{16} \text{m}^{-3} \ll N_{Al}$  dvs ledning sker enbart med hål från störatomer (Al).  $\sigma = e N_{Al} \mu_h = 1.60219 \cdot 10^{-19} \cdot 4.4167 \cdot 10^{24} \cdot 0.19 = 1.3445 \cdot 10^5 (\Omega \text{m})^{-1}$  ocd då blir  $\rho = 7.44 \cdot 10^{-6} \Omega \text{m}$ .

4. En analys av strukturfaktorn  $S_{hkl}$  för diamant ger följande (fcc med bas 000 och  $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ ):  $S_{hkl} = \sum_i f_i e^{-2\pi i(hx_i + ky_i + lz_i)} = f_C \left(1 + e^{-\frac{\pi}{2}i(h+k+l)}\right) \left(1 + e^{-\pi i(h+k)} + e^{-\pi i(k+l)} + e^{-\pi i(h+l)}\right)$  och  $S_{hkl} \neq 0$  om  $h+k+l = 4 \cdot \text{heltal}$  och  $S_{hkl} \neq 0$  om alla  $h, k, l$  är udda eller jämna. Följande serie för hkl erhålles. 111, 220, 311, 400, 331... För Braggspridning gäller  $2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$  där  $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$  dvs  $d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}$  och  $\frac{1}{d^2} \sim h^2 + k^2 + l^2$  vilket ger följande analys

$\theta$	21.4	36.6	44.5	57.5
$d$	2.0555	1.25791	1.0700	0.88927
$\frac{1}{d^2}$	0.23668	0.63197	0.87378	1.2645
$x = \frac{3}{0.23668}$	3	8.010	11.07	16.028
$h^2 + k^2 + l^2$	3	8	11	16
(hkl)	111	220	311	400

Detta ger att ämnet har diamantstruktur och enhetskubens kantlängd  $a$  blir  $d = 2.0555 = \frac{a}{\sqrt{3}}$  vilket ger  $a = 3.56 \text{Å}$ .

5. Provet är diamagnetiskt med en paramagnetisk förorening. För Langevin diamagnetism gäller  $\chi = \frac{\mu_0 n Z e^2}{6m_e} \langle r^2 \rangle$  detta uttryck är temperaturoberoende. För paramagnetism gäller  $\chi = \frac{\mu_0 n p^2 \mu_B^2}{3k_B T}$  detta uttryck är temperaturberoende. Alltså är  $\chi$  på följande form  $\chi = A \frac{1}{T} + B$ , gör en graf över  $\chi$  som funktion av  $\frac{1}{T}$  och dra en rät linje som ansluter till punkterna. Lutningen för linjen är ungefär  $A = 1.7875 \cdot 10^{-4} \text{K}$  och värdet vid  $\frac{1}{T} = 0.0$  ger  $B = -9.48 \cdot 10^{-6}$ . Givet att föroreningen är  $\text{Mn}^{2+}$  joner med konfiguration  $3d^5$ . Denna har enligt Hund's regler  $S = \frac{5}{2}$  och  $L = 0$  och  $J = \frac{5}{2}$ , därmed blir Lande's g faktor  $g = 2$  och  $p = \sqrt{35} \approx 5.92$ . Från lutningen  $A$  erhålles nu koncentrationen av  $\text{Mn}^{2+}$  joner  $n = \frac{A 3k_B}{\mu_0 p^2 \mu_B^2} = \frac{A 3k_B 4m_e^2}{\mu_0 p^2 \mu_B^2 e^2 \hbar^2} = \frac{1.7875 \cdot 10^{-4} \cdot 12 \cdot 1.3807 \cdot 10^{-23} (9.10939 \cdot 10^{-31})^2}{4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 35 (1.6022 \cdot 10^{-19})^2 \cdot 1.05457 \cdot 10^{-34}} = 1.9572 \cdot 10^{24} \text{m}^{-3} \approx 1.96 \cdot 10^{24} \text{m}^{-3}$ . Det diamagnetiska bidraget är  $\chi_{\text{dia}} = -9.48 \cdot 10^{-6}$ .