

- 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 $n_{\text{fcc}} = \frac{4}{a} = \frac{4 \cdot 2\sqrt{2}}{4^3 r_0^3} = \frac{\sqrt{2}}{8r_0^3}$. 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 $\frac{n_{\text{fcc}}}{n_{\text{bcc}}} = \frac{4\sqrt{2}}{3\sqrt{3}} \approx 1.0887$
- Strukturen för de tre ämnena är: NaCl (fcc-struktur), CsCl(sc-struktur) och diamant (diamant-struktur). För att få Braggspridning så måste spridningsfaktorn S vara skild från noll. För sc $S \neq 0$ för alla h, k, l . För fcc $S \neq 0$ för alla h, k, l udda eller alla h, k, l jämna. För diamant $S \neq 0$ för alla h, k, l udda eller alla h, k, l jämna och $h + k + l = 4n$. Braggs lag ger $2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$ där $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ Analys enligt labbhandledning ger A=sc, B=fcc och C=diamant.
- Silver har fcc-struktur med en atom per primitiv enhetscell. Finns bara akustiska fononer, en longitudinell och två transversella.

De maximala k-vektorerna ligger på 1BZ zonens begränsningsyta. Det finns totalt 24 stycken k-vektorer med maximal längd. längden ges av (från centrum ut till hörnen på de kvadratiska ytorna)

$$k_{max} = \sqrt{\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{a}\right)^2} = \sqrt{5} \frac{\pi}{a} \quad (1)$$

Elektronbidraget till värmekapacitiveteten ges av

$$C_v^{el} = \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F} \quad (2)$$

Fononbidraget ges enligt Debyemodellen av

$$C_v^{fo} = 9Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{x_D} dx \frac{x^4 e^x}{(e-1)^2} \rightarrow \begin{cases} 3Nk_B & \text{då } T \gg \Theta_D \\ \frac{12\pi^4}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 & \text{då } T \ll \Theta_D \end{cases} \quad (3)$$

Det kommer att finnas tre skärningspunkter mellan de två kurvorna C_v^{el} och C_v^{fo} , en vid $T = 0\text{K}$, en vid mycket låg temperatur och en vid en hög temperatur. Lösningen vid $T=0\text{K}$ ger $C_v = 0$. För höga temperaturer får man att $C_v^{el} = C_v^{fo}$ då:

$$\frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F} = 3Nk_B \rightarrow T = \frac{6}{\pi^2} T_F. \quad (4)$$

För silver gäller att $T_F = 6.36 \cdot 10^4 \text{K}$. Detta ger $T = 3,87 \cdot 10^4 \text{K}$, dvs långt över kokpunkten (2466 K), alltså en ofysikalisk lösning. Vid mycket låg temperaturer får man att $C_v^{el} = C_v^{fo}$ då:

$$\frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F} = \frac{12\pi^4}{5} N k_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \rightarrow T = \sqrt{\frac{5\Theta_D^3}{24\pi^2 T_F}} \quad (5)$$

För silver gäller att $\Theta_D = 225\text{K}$. Detta ger $T = 1.94\text{K}$, som är $\ll \Theta_D$. Den totala värmekapacitiveteten (vid $T = 1.94\text{K}$) ges av $C_v^{tot} = C_v^{el} + C_v^{fo}$

$$C_v^{tot} = \frac{\pi^2}{2} Nk_B \frac{T}{T_F} + \frac{12\pi^4}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 = 2.50 \text{ J/kmol K} \quad (6)$$

och för $T = 300 \text{ K}$ får man

$$C_v^{tot} \approx \frac{\pi^2}{2} Nk_B \frac{T}{T_F} + 3Nk_B = 24.9 \cdot 10^3 \text{ J/kmol K} \quad (7)$$

4. För en enkel kubisk kristall med kantlängden a gäller att 1:a BZ är en kub med kantlängden $2\pi/a$, avståndet från centrum till närmaste yta är då π/a . dvs $k_F = \pi/a$ där $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ där n är elektrontätheten. Om m är antalet elektroner per atom gäller att $n = m/a^3$. Efter uträkning erhålles att $m = 1.047$.
5. Den elektriska ledningsförmågan för en halvledare ges av $\sigma = ne\mu_e + pe\mu_h$ och dessutom gäller att $np = n_i^2$ med $n = n_i^2/p$ insatt erhålles $\sigma = e\left(\frac{n_i^2}{p}\mu_e + p\mu_h\right)$. Man inser direkt att $\sigma = \sigma(p)$ har ett minimum för något p . $\frac{d\sigma}{dp} = 0 \rightarrow p = n_i\sqrt{\frac{\mu_e}{\mu_h}}$ och $n = n_i\sqrt{\frac{\mu_h}{\mu_e}}$ och därmed erhålles $\sigma_{min} = 2n_i e\sqrt{\mu_e\mu_h}$. För $\mu_h = 0.35\mu_e$ erhålles $\sigma_{min} = 1.2n_i e\mu_e$

Jämför detta med $\sigma_i = n_i e\mu_e + p_i e\mu_h = 1.35n_i e\mu_e$ Vi ser att $\sigma_{min} < \sigma_i$!! Jämför n och p ovan $n = n_i\sqrt{\frac{\mu_h}{\mu_e}} = 0.59n_i$ och $p = n_i\sqrt{\frac{\mu_e}{\mu_h}} = 1.7n_i$ dvs $p > n$. Med mycket svag p-dopning erhålles minimum för Si. Med doping undertryckes koncentrationen av de laddningsbärare som har den större mobiliteten. I fallet Si är det elektronerna. Svar: $\sigma_{min} = 2n_i e\sqrt{\mu_e\mu_h}$, $n = n_i\sqrt{\frac{\mu_h}{\mu_e}}$ och $p = n_i\sqrt{\frac{\mu_e}{\mu_h}}$.