

1. Use the fonts to identify (bold-face, italics, capital letters). **rectangular unit cell, the q are lattice points**, *basis of letters associated with each lattice point*, *PRIMITIVE UNIT CELL*.

q p d b **q p d b** **q p d b** *Q p d b . . .*
d b q p **d b q p** *q p d b* *Q p d b* *Q p . . .*
q p d b **q p d b** *d b* **q p d b** *Q p d b . . .*
d b q p **d b q p** **q p d b** **q p d b** **q p**
 . . .
 . . .
 . . .

2. En analys av strukturfaktorn för de 4 föreslagna gittern ger (räkningar erfordras se tex Kittel) ger 4 serier av tillåtna (hkl) index. För diamant är denna serie:

(hkl)	111	220	311	400	331	422	511	333
$h^2 + k^2 + l^2$	3	8	11	16	19	24	27	27

Använd Braggs lag för att bestämma miller indexen (hkl) för topparna. $d = \lambda/2 \sin(\beta/2)$ där d är plan avståndet och $\beta/2 = \theta$. Vidare har vi för planavståndet $\left(\frac{d_{hkl}}{a}\right)^2 = \frac{1}{h^2+k^2+l^2}$ där a är enhetskubens kantlängd (ej känd). Följande tabell görs upp för att bestämma $h^2 + k^2 + l^2$ för topparna.

(θ)	28.44/2	47.32/2	56.14/2	69.12/2	76.34/2	76.56/2	88.02/2
d	3.13867	1.9212	1.6385	1.35914	1.2476	1.2445	1.109698
$1/d^2$	0.10151	0.27093	0.37248	0.54134	0.64246	0.64567	0.81206
$x = 2/0.10151$	2.00000	5.338					
$x = 3/0.10151$	3.00000	8.007	11.008	15.999	18.987	19.082	23.999

Sista raden i tabellen ger de sökta heltalen $h^2 + k^2 + l^2$. även a låter sig bestämmas till $\sqrt{3} \cdot 3.13867 = 5.436\text{Å}$, det frågas dock ej efter denna uppgift.

3. (a) Avståndet mellan (111)-plan i en kubisk kristall ges av $d = a/\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = a/\sqrt{3}$, vilket är storleken på den endimensionella kristallens primitiva enhetscell.
- (b) Eftersom kristallen innehåller två typer av atomer har dispersionsrelationen en akustisk och en optisk gren.
- (c) Serietutveckling av dispersionsrelationen för akustiska vågor ger

$$\omega^2 = C \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} - C \sqrt{\left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}\right)^2 - \frac{4 \sin^2(Ka/2)}{M_1 M_2}} \approx C \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{K^2 d^2}{M_1 M_2} \left(\frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}\right)^2}\right) \approx C \frac{K^2 d^2}{2(M_1 + M_2)}.$$

Detta ger

$$v = \frac{\partial \omega}{\partial K} = d \sqrt{\frac{C}{2(M_1 + M_2)}} \Rightarrow C = 6(M_1 + M_2) \left(\frac{v}{a}\right)^2 = 13.8 \text{ N/m},$$

där massorna är 22.99u och 35.45u för natrium respektive klor.

- (d) Konserveringslagarna är $\hbar\omega = \hbar\Omega$ för energi och $\hbar k = \hbar K$ för rörelsemängd. Eftersom ljusets hastighet är mycket större än fononernas hastighet inses att fotonens dispersionskurva måste vara mycket brantare än fononens. I praktiken blir den vertikal och skär endast de optiska fononernas där $K = 0$. Detta ger

$$\omega^2 = 2C \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \Rightarrow \lambda = \frac{2\pi c}{\omega} = \frac{2\pi c}{\sqrt{2C(M_1 + M_2)/M_1 M_2}} = 54.6 \text{ } \mu\text{m}.$$

4. (a) $E_d = -\frac{m_e e^4}{2\epsilon_r \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} = 6.6 \cdot 10^{-4} \text{ eV}.$
- (b) $r = \frac{\epsilon_r \hbar^2}{m_e e^2} 4\pi\epsilon_0 = 650 \text{ } \text{\AA}.$
- (c) Överlappet blir betydande om koncentrationen $N_d \sim \frac{1}{(2r)^3} \approx 10^{21} \text{ m}^{-3}.$
- (d) I likhet med hur atomära nivåer bildar band då atomer sammanförs till en kristall kommer donator nivåerna att bilda band då koncentrationen blir så stor att de lokala banorna överlappar.
5. Konduktiviteten ges av $\sigma = e(n\mu_e + p\mu_h)$. Sb har fem valenselektroner vilket betyder att det är en donator. Eftersom alla donatoratomer är joniserade blir neutralitetsvillkoret $n = p + N_d$. Massverkans lag ger $np = n_i^2$. Detta ger $n^2 - N_d n - n_i^2 = 0$, där $n_i = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} e^{-E_g/2k_B T} = 6.707 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3}$. Ur detta erhålls $n = \frac{N_d}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{N_d}{2}\right)^2 + n_i^2} = \frac{1.010^{21}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1.010^{21}}{2}\right)^2 + (6.707 \cdot 10^{18})^2} = 1.00004498 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$ och $p = n - N_d = 4.498 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$. Detta pga att $N_d \gg n_i$. Eftersom $p \ll n$ och $\mu_h < \mu_e$ kan hålens bidrag till konduktiviteten försummas och man får $\sigma \approx en\mu_e = 21 (\Omega\text{m})^{-1}$.