

Solution to written exam in SOLID STATE PHYSICS F0053T

Examination date: 2016-12-20

The solutions are just suggestions. They may contain several alternative routes.

- The primitive unit cell: Pb fcc: 1, Na bcc: 1, Silicon diamond structure: 2.
 - The cubic unit cell: Pb fcc: 4, Na bcc: 2, Silicon diamond structure: 8.
 - Silicon has diamond structure with a side length of the unit cube cell of $a = 5.431\text{\AA}$. Nearest neighbours like $(0,0,0)$ and $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ have a distance of $\sqrt{3}a/4 = 2.35\text{\AA}$. Next nearest neighbours like $(0,0,0)$ and $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ have a distance $\sqrt{2}a/2 = 3.84\text{\AA}$.
- $C_v = C_v^{el} + C_v^{ph}$. As the temperature in question (320K) is well above the Debye temperature (160K) we can use Dulong-Petits law for the phonons $C_v^{ph} = 3Nk_B$. For the electron contribution $C_v^{el} = \frac{\pi^2}{2} Nk_B \frac{T}{T_F}$, $T_F = E_F/k_B$ and $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3}$. For Na we have $\rho = 971\text{kg/m}^3$, atomic weight = 22.9898u some calculations gives $T_F = 36599.353\text{K}$. Fraction contributed by the electrons: $F = \frac{C_v^{el}}{C_v^{el} + C_v^{ph}} = \frac{1}{1 + \frac{6T_F}{\pi^2 T}} = \frac{1}{1 + \frac{6 \cdot 36599.353}{\pi^2 \cdot 320}} \approx 0.0142$.
- 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. Våglängden för $K_\alpha = 1,542\text{\AA}$. Det kan vara svårt att avgöra vilken topp som är först i spektrat. Vi satsar till att börja med att den första är den kraftiga toppen vid 31 grader. De två första försöken (f1 och f2 i tabellen) visar att det blir ingen ordning på siffrorna. Tredje försöket (f3) där fungerar det.

(β)	27.50	31.04	45.60	56.58	66.34	75.36	84.06
$(\theta = \beta/2)$	13.75	15.52	22.80	28.29	33.17	37.68	42.03
d	3.2438	2.8814	1.9896	1.6268	1.4092	1.2613	1.1516
$1/d^2$	0.095038	0.12045	0.25262	0.37786	0.50356	0.62858	0.75404
f1 $x = 2/0.12045$		2.0000	4.1946	6.2741			
f2 $x = 3/0.12045$		3.0000	6.2919	9.4112			
f3 $x = 3/0.095038$	3.0000	3.8021	7.9741	11.9276	15.8955		
<i>integers</i>	3	4	8	12	16		

Sista raden i tabellen ger de sökta heltalen $h^2 + k^2 + l^2$.

En analys av strukturfaktorn för de 4 kubiska gittren ger (räkningar erfordras se tex Kittel) ger 4 serier av tillåtna (hkl) index. För fcc är denna serie:

(hkl)	111	220	311	222	400	331	422	511	333
$h^2 + k^2 + l^2$	3	8	11	12	16	19	24	27	27

Vi ser att det saknas ett plan, det som ger 11 dvs 311 relexionen. En inspektion av spektrat ser man att det finns en svag topp vid $\beta = 54.00$. En analys ger $d = 1.69827$ och $1/d^2 = 0.34672$ för att ge 10.945 vilket motsvarar den saknade linjen i tabellen. Så pulvret består av ett material med fcc struktur. Att två linjer syns så svagt beror på att det finns flera atomer i den primitiva cellen.

Även a låter sig bestämmas till $\sqrt{3} \cdot 3.2438 = 5.616 \text{ \AA}$ (tabell 5.6402 \AA), det frågas dock ej efter denna uppgift, provet bestod av NaCl ett material med fcc struktur och 2 atomer i den primitiva cellen.

4. (a) Let the commutator act on a wave function $\Psi(y)$ and $p_y = -i\hbar \frac{d}{dy}$
- $$[y^2, p_y^2]\Psi(y) = -\hbar^2 \left(y^2 \frac{d^2 \Psi(y)}{dy^2} - \frac{d^2 (y^2 \Psi(y))}{dy^2} \right) = -\hbar^2 \left(y^2 \frac{d^2 \Psi(y)}{dy^2} - y^2 \frac{d^2 \Psi(y)}{dy^2} - 4y \frac{d\Psi(y)}{dy} - 2\Psi(y) \right) = +\hbar^2 2\Psi(y) + 4y\hbar^2 \frac{d\Psi(y)}{dy} = \left(+\hbar^2 2 + i4\hbar y p_y \right) \Psi(y)$$
- concluding for the commutator:
- $$[y^2, p_y^2] = +2\hbar^2 + 4i\hbar y p_y = +2\hbar^2 + 4\hbar^2 y \frac{d}{dy} .$$

- (b) The energy levels for a hydrogen like system are given by: $E_n = -13.6 \frac{Z^2}{n^2}$ [eV], here we have $Z = 4$: $\Delta E = E(2s) - E(1s) = E_2 - E_1 = -13.54 \cdot \left(\frac{16}{2^2} - \frac{16}{1^2} \right) = 13.54 \cdot \frac{16 \cdot 3}{4} = 162.48$ eV

- (c) The angular part of the wave function can be written as a spherical harmonic:

$$3 \cos^2 \theta - 1 \propto Y_{20}$$

Which gives $l = 2$ och $m = 0$. The part depending on r (r^2/a_μ^2) $e^{-r/3a_\mu}$ corresponding to the principal quantum number $n = 3$ och $l = 2$ consistent with Y_{20} .

5. (a) There are several ways to determine A . One is to integrate and use the normalization condition to solve for A . A different path (done here) is to write the given wave function in terms of eigenfunctions (here particle in a box). The eigenfunctions are (PH)

$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$. We can directly conclude that the given wave function consists of $n = 1$, $n = 5$ and $n = 7$ functions, we can write:

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= \frac{\sqrt{13}}{\sqrt{8a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{1}{2\sqrt{a}} \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right) + \frac{A}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{7\pi x}{a}\right) \\ \psi(x, 0) &= \frac{\sqrt{13}\sqrt{2}}{4\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{\sqrt{2}}{2\sqrt{2} \cdot a} \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right) + \frac{A\sqrt{2}}{\sqrt{2} \cdot a} \sin\left(\frac{7\pi x}{a}\right) = \\ &= \frac{\sqrt{13}}{4} \psi_1(x, 0) + \frac{1}{\sqrt{8}} \psi_5(x, 0) + \frac{A}{\sqrt{2}} \psi_7(x, 0) \end{aligned}$$

As all three eigenfunctions are orthonormal the normalisation integral reduces to $\frac{13}{16} + \frac{1}{8} + \frac{A^2}{2} = 1$ and hence $A = \frac{1}{\sqrt{8}}$ (≈ 0.354).

- (b) The wave function contains only $n = 1$, $n = 5$ and $n = 7$ eigenfunctions and therefore the only possible outcome of an energy measurement are $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ with probability $\frac{13}{16}$ and $E_5 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} 25$ with probability $\frac{1}{8}$ and $E_7 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} 49$ with probability $\frac{1}{16}$.

The average energy is given by

$$\langle E \rangle = \frac{13}{16} E_1 + \frac{1}{8} E_5 + \frac{1}{16} E_7 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left(\frac{13}{16} + \frac{1}{8} \cdot 25 + \frac{1}{16} \cdot 49 \right) = \frac{112}{16} \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = 7 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

(c) The time dependent solution is given by $\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$ and hence

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{13}{16}} \psi_1(x, 0) e^{-i\frac{\hbar\pi^2 t}{2ma^2}} + \frac{1}{\sqrt{8}} \psi_5(x, 0) e^{-i\frac{25\hbar\pi^2 t}{2ma^2}} + \frac{1}{4} \psi_7(x, 0) e^{-i\frac{49\hbar\pi^2 t}{2ma^2}}$$