

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama
Sidang Akademik 1995/96

Oktober/November 1995

ZSE 423 - Spektroskopi

Masa : [3 jam]

Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi ENAM muka surat yang bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.

Jawab LIMA soalan sahaja, DUA daripada Bahagian A dan TIGA daripada Bahagian B. Kesemuanya wajib dijawab di dalam Bahasa Malaysia kecuali Bahagian A.

BAHAGIAN A

1. Spektrum molekul dwiatom disebabkan oleh tiga jenis peralihan yang jelas iaitu: elektronik, getaran dan putaran. Tuliskan satu paragraf pendek bagi setiap jenis peralihan dan nyatakan di kawasan mana di dalam spektrum elektromagnet garisan-garisan peralihan tersebut biasanya berlaku. (30/100)

Lakarkan satu bentuk graf tenaga keupayaan $V(r)$ melawan jarak antara atom r di dalam suatu molekul dwiatom dan tunjukkan jarak antara atom di dalam keadaan keseimbangan r_0 di dalam lakaran anda. (10/100)

Terangkan dengan menggunakan lakaran anda kenapa peralihan-peralihan getaran boleh diperihalkan menggunakan pengayun harmonik mudah. Dengan anggapan bahawa jisim yang digunakan ialah jisim terkurang $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ dengan m_1 dan m_2 ialah jisim-jisim individu, dapatkan satu formula untuk frekuensi pengayun klasik ω di dalam sebutan μ dan pembezaan kedua d^2V/dr^2 . (20/100)

Tuliskan formula untuk paras-paras tenaga kuantum E_n yang bersangkutan. (10/100)

Bandingkan molekul-molekul H_2 , HD dan D_2 di mana D ialah deuterium. Dengan anggapan bahawa $m_D = 2m_H$, kira nisbah-nisbah $\mu(HD)/\mu(H_2)$ dan $\mu(D_2)/\mu(H_2)$. Dengan anggapan bahawa $V(r)$ sama bagi setiap kes, nyatakan dengan tepat bagaimana skema paras tenaga getaran dan peralihan-peralihan spektrum yang bersangkutan itu dihubungkan. (20/100)

....2

Dengan anggapan bahawa momen inersia ialah $2\mu r_0^2$, kira nisbah-nisbah antara sebutan-sebutan setara di dalam skema tenaga putaran bagi H_2 , HD dan D_2 .

(10/100)

2. Titik-titik kuantum, yang merupakan sebagai bintik-bintik kecil dihasilkan melalui proses litografi, sekarang ini menjadi bidang yang diminati di dalam fizik semikonduktor. Modelkan satu titik kuantum sebagai satu kotak segiempat dengan panjang a pada arah-arah x dan y dan panjang b pada arah z . Nilai a dan b biasanya pendek sedikit sahaja daripada jarak-jarak antara atom. Anggapkan bahawa keupayaan ialah sifar di dalam kotak dan tak terhingga diluar kotak.

Bincangkan dengan terperinci spektroskopi elektron-tunggal satu titik kuantum GaAs jenis-n. Aturkan perbincangan anda mengikut struktur berikut:

- (a) Tuliskan skema paras tenaga di dalam sebutan nombor-nombor kuantum n_1 , n_2 dan n_3 yang dihubungkan dengan x , y dan z . Buat satu anggaran tenaga pada keadaan dasar di dalam unit eV bagi nilai $a = b = 10$ nm. Berapakah nilai a , dengan $a = b$, bagi serapan tenaga terendah daripada keadaan dasar yang dikaitkan dengan cahaya nampak dengan panjang gelombang 500 nm? (35/100)

- (b) Jikalau titik kuantum tersebut dibuat di atas suatu substrat (kebiasaannya) maka arah yang termudah untuk sinaran menuju padanya ialah mengikut arah z . Dapatkan peralihan-peralihan yang dibenarkan daripada keadaan dasar dan dapatkan juga petua-petua pemilihan pengutuban (jika ada). (15/100)

Buktikan bahawa elemen matriks dwikutub bagi garis serapan terendah daripada keadaan dasar ialah $16a/9\pi^2$. (25/100)

- (c) Apakah maklumat tambahan yang boleh diperolehi daripada spektrum yang didapati daripada sinaran yang datang daripada arah-arah lain? Bagi sinaran yang datang, katakan mengikut arah x , dapatkan peralihan-peralihan yang dibenarkan dan dapatkan juga petua-petua pemilihan. (25/100)

[Fungsi-fungsi eigen ternormal di dalam suatu kotak $|x| < d/2$ ialah:

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &= (2/d)^{1/2} \cos(n\pi x/d) & n &= 1,3,5,\dots \\ \psi_n(x) &= (2/d)^{1/2} \sin(n\pi x/d) & n &= 2,4,6,\dots\end{aligned}$$

Elemen matriks dwikutub ialah $\int \psi_1^* \epsilon \cdot r \psi_2 d^3r$ di mana vektor unit ϵ ialah arah pengutuban.

$$\begin{aligned}\cos(\theta) \sin(\theta) &= [\sin(m+1)\theta + \sin(m-1)\theta]/2 \\ \int z \sin \alpha z dz &= (\sin \alpha z)/\alpha^2 - (z \cos \alpha z)/\alpha\end{aligned}$$

Jisim berkesan elektron di dalam GaAs ialah $m^* = 0.067 m_e$.]

....3

3. Terangkan secara ringkas idea tentang medan swa-konsisten yang digunakan untuk mengira skema aras tenaga bagi satu atom banyak-elektron. (10/100)

Konfigurasi elektronik bagi keadaan dasar atom C ialah $K2s^22p^2$. Terangkan secara terperinci maksud ayat tersebut. (10/100)

Kenapakah spesifikasi konfigurasi adalah tidak lengkap untuk dijadikan sebagai satu takrifan keadaan elektronik? (10/100)

Jumlah momentum sudut L ialah hasil tambah L_1 dan L_2 : $L = L_1 + L_2$. Nyatakan hukum-hukum yang menentukan nilai-nilai jumlah nombor kuantum L dan nombor azimuth M yang bersangkutan yang boleh diperolehi menggunakan sebutan L_1 dan L_2 . Buktikan bahawa jumlah bilangan keadaan di dalam keterangan (L, M) sama seperti keterangan (L_1, L_2) . (30/100)

Jelaskan bagaimana hukum-hukum bagi tambahan momentum sudut digunakan untuk menjanakan sebutan-sebutan yang boleh berlaku bagi satu konfigurasi elektronik yang diberikan. (10/100)

Dapatkan semua sebutan bagi suatu konfigurasi s^1d^1 . Gunakan hukum-hukum Hund untuk menentukan nilai S dan L bagi sebutan-sebutan tenaga terendah yang boleh berlaku. Apakah interaksi fizikal yang menentukan nilai J yang bersangkutan dengan tenaga terendah? (30/100)

BAHAGIAN B

- 4.(a) Terangkan hubungan antara interferogram terhingga dari sumber monokromatik dengan spektrum yang diperolehi. Jelaskan cara untuk memperbaiki spektrum tersebut. (30/100)
- (b) Jelaskan hubungan selang persampelan dengan fenomena konvolusi spektrum. (40/100)
- (c) Bincangkan maklumat-maklumat yang boleh diperolehi daripada spektrum infra merah jauh suatu bahan semikonduktor daripada kumpulan III-V seperti GaAs. (30/100)
- 5.(a) [i] Lakarkan fungsi dwielektrik (ϵ) GaAs di persekitaran jalur reststrahlen. Terangkan lakaran tersebut dan labelkan fonon TO, LO, nilai-nilai ϵ_∞ dan ϵ_0 .
- [ii] Terangkan faktor kelembapan keatas lakaran (i) di atas dan kesan suhu terhadap kelembapan. (50/100)

....4

- (b) Bincangkankan komponen Stokes dan anti-Stokes menggunakan persamaan dwikutub elektrik teraruh di dalam penyerakan Raman. Terangkan maksud ungkapan *fonon TO anti-Stokes* ialah pada $61 \times 10^4 \text{ cm}$. (30/100)
- (c) Lukiskan tatarajah penyerakan Raman 90° dan 180° . Terangkan kedua-dua kegunaannya dan sebab-sebab mengapa salah satu daripadanya digunakan untuk mempelajari sampel semikonduktor AlGaAs menggunakan laser ion Ar^+ . (20/100)
- 6.(a) Terangkan bagaimana penjanaan harmonik boleh berlaku. (20/100)
- (b) Bincangkan bagaimana sel Pockels beroperasi di dalam laser tersuis-Q dan kegunaan laser tersebut. (50/100)
- (c) Jelaskan prinsip
- [i] penceraian 2-foton
 - [ii] laser He-Ne asas
- (30/100)

TERJEMAHAN

BAHAGIAN A

1. The spectrum of a diatomic molecule is due to three distinct kinds of transition: electronic, vibrational and rotational. Write a short paragraph on each type of transition and state in which part of the electromagnetic spectrum the corresponding lines typically occur. (30/100)

Sketch the form of the graph of potential energy $V(r)$ versus interatomic separation r in a diatomic molecule and identify the equilibrium separation distance r_0 . (10/100)

Use your graph to explain why vibrational transitions are described by the simple harmonic oscillator. Assuming that the mass that appears is the reduced mass $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ where m_1 and m_2 are the individual masses, find the expression for the classical oscillator frequency ω in terms of μ and the second derivative d^2V/dr^2 . (20/100)

Write down the expression for the corresponding quantum energy levels E_n . (10/100)

Compare the H_2 , HD and D_2 molecules, where D is deuterium. Assuming that $m_D = 2m_H$, find the ratios $\mu(HD)/\mu(H_2)$ and $\mu(D_2)/\mu(H_2)$. Assuming that $V(r)$ is the same in each case, state precisely how the vibrational energy-level schemes and corresponding spectral transitions are related. (20/100)

Assuming that the moment of inertia is $2\mu r_0^2$, find the ratios between equivalent terms in the rotational-energy schemes of H_2 , HD and D_2 . (10/100)

2. Quantum dots, which are very small islands produced by lithographic processing, are of current interest in semiconductor physics. Model a quantum dot as a rectangular box with side lengths a in the x and y directions and b in the z direction. Typically a and b are not much larger than interatomic distances. Assume that the potential is zero inside the box and infinite outside it.

Discuss in detail the single-electron spectroscopy of an n-type GaAs quantum dot. Structure your discussion as follows:

(a) Write down the energy-level scheme in terms of quantum numbers n_1 , n_2 and n_3 corresponding to x , y and z . Estimate the ground-state energy in eV for $a = b = 10$ nm. For what value of a , with $a = b$ does the lowest-energy absorption from the ground state correspond to the visible wavelength 500 nm? (35/100)

....6

(b) If the dot is prepared on a substrate (as it always is) then the easiest direction for incident radiation is along z . Find the allowed transitions from the ground state and the polarization selection rules (if any). (15/100)

Prove that the dipole matrix element for the lowest absorption line from the ground state is $16a/9\pi^2$. (25/100)

(c) What additional information can be obtained from spectra with other directions of incidence? For grazing incidence, along x say, find the allowed transitions and selection rules. (25/100)

[The normalised eigenfunctions in a box $|x| < d/2$ are

$$\psi_n(x) = (2/d)^{1/2} \cos(n\pi x/d) \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

$$\psi_n(x) = (2/d)^{1/2} \sin(n\pi x/d) \quad n = 2, 4, 6, \dots$$

The dipole matrix element is $\int \psi_1^* \epsilon \cdot r \psi_2 d^3r$ where the unit vector ϵ is the polarization direction.

$$\cos(\theta) \sin(m\theta) = [\sin(m+1)\theta + \sin(m-1)\theta]/2$$

$$\int z \sin \alpha z dz = (\sin \alpha z)/\alpha^2 - (z \cos \alpha z)/\alpha$$

Electron effective mass in GaAs is $m^* = 0.067m_e$.]

3. Explain briefly the idea of the self-consistent field that is used in calculating the energy level scheme of a many-electron atom. (10/100)

The electronic configuration of the ground state of the C atom is $K2s^22p^2$. Explain in detail what this means. (10/100)

Why is a specification of the configuration insufficient as a definition of the electronic state? (10/100)

The total angular momentum L is the sum of L_1 and L_2 : $L = L_1 + L_2$. State the rules governing possible values of the total quantum number L and the corresponding azimuthal number M in terms of L_1 and L_2 . Verify that the total number of states in the (L, M) description is the same as in the (L_1, L_2) description. (30/100)

Explain how the rules for addition of angular momentum are used to generate the possible terms for a given electronic configuration. (10/100)

Find all the terms for an s^1d^1 configuration. Apply Hund's rules to determine the S and L values of possible lowest-energy terms. What physical interaction governs the value of J corresponding to the lowest energy? (30/100)