Tentamen i Fasta tillståndets fysik

ffy012, ffy011, samt fyp330 (GU)

Tid och plats: torsdag 19/3, 2015, 14.00 i M salar.

Examinatorer:

Mats Granath, 7869026, 0723087160, mats.granath@physics.gu.se
Maths Karlsson, 7728038, 0723526106, maths.karlsson@chalmers.se

Hjälpmedel: Penna, suddgummi, Beta, Physics Handbook, egen formelsamling på ett A4-blad (fram- och baksidan), typgodkänd räknare eller annan räknare i fickformat dock utan inprogrammerad text eller ekvationer av intresse för tentan.

Bedömning: Kursbetyget är baserat på summan av tentamenspoängen +40 % av duggapoängen. Gränserna är: 10p≤3<14p, 14p≤4<17p, 5≥17p. GU: 10p≤G<15p, VG≥15.

Rättningsgranskning: Onsdag 8/4, kl 12.00-13.00, lunchrum Soliden pl3.

Uppgift 1

a) Bestäm alla möjliga diffraktionsvinklar för röntgenstrålar med energi 10 keV som diffrakteras mot (111)-planen i en enkel kubisk struktur. Gitterparametern är 5.3 Å. (3 p)

b) Vad är packningstätheten för en enkel kubisk struktur? (0.5 p)

c) Vad är koordinationstalet (för en specifik atom) i en enkel kubisk struktur? (0.5 p)

Uppgift 2

Dispersionsrelationen för en oändligt lång endimensionell linjär kedja av atomer, med växelverkan endast mellan närmsta grrannar, kan skrivas

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4C}{m}} |\sin \frac{ka}{2}|, \tag{1}$$

där C är kraftkonstanten mellan närmsta grannar, m är en atoms massa, k är vågtalet, och $a = 4$ Å är avståndet mellan närmsta grannar. I kontinuumgränsen (dvs för långa väglängder) är gittervågornas fortplantningshastighet 100 m/s.

a) Inom vilket energiintervall finner vi de möjliga fononenergierna? Ange den nedre och övre gränsen för intervallet i enheten meV. (2 p)

b) Vi antar nu att längden på kedjan är begränsad till 100 nm. Vad blir nu den minsta möjliga fononenergin? Samma dispersionsrelation som ovan antas gälla. (2 p)

Uppgift 3

För en dopad halvledare uppmäts vid rumstemperatur en Hallkofficient $R_H = -1.3 \cdot 10^{-4} m^3/C$ och resistivitet $\rho = 1.2 \cdot 10^{-3} \Omega m$. Elektroner i lednings och valensband har

energier $\epsilon_{\vec{k}} = E_c + \frac{\hbar^2}{0.2m_e}k^2$ respektive $\epsilon_{\vec{k}} = E_v - \frac{\hbar^2}{0.5m_e}k^2$, där m_e är fria elektronmassan, $k = |\vec{k}|$, och $E_g = E_c - E_v = 3.5eV$.

a) Är halvledaren dopad med elektroner eller hål? (1p)

b) Beräkna tätheten av dopade laddningsbärare. (Antag att andelen intrinsiska laddningsbärare kan försummas.) (1p)

c) Beräkna mobilitet (μ) och kollisionstid (τ). (1p)

d) Givet ett statiskt elektriskt fält på $10^3 V/m$, vad är drifthastigheten (v_d) och medelfriavägen (ℓ) (1p)?

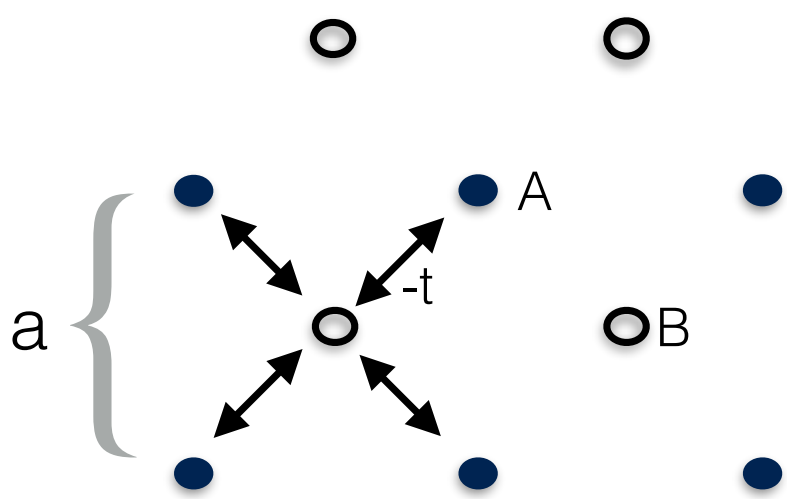
Uppgift 4

Antag att elektronerna i ett band har energier $\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m_e}(\alpha k_x^2 + \beta k_y^2 + \gamma k_z^2)$, där α, β, γ är dimensionslösa konstanter. Bandet beskriver en metall med elektrontäthet n.

a) Härled ett uttryck för Fermienergin för metallen. Bekräfta att i gränsen $\alpha = \beta = \gamma = 1$ fås standarduttrycket $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_e}(3\pi^2 n)^{2/3}$. (2p)

b) Rita en figur över Fermiytan, under förutsättning att $\alpha = \beta$ och $\gamma = \alpha/4$. Ytans relativa skärningspunkter med de tre koordinataxlarna (k_x, k_y, k_z) ska tydligt framgå. (2p)

Uppgift 5



Figuren visar ett kvadratiskt gitter (gittervektorer $\vec{a}_1 = a\hat{x}$ och $\vec{a}_2 = a\hat{y}$) med en bas av symmetriskt placerade A och B atomer. I en tight-binding modell för bandstrukturen av materialet antar vi lokala vågfunktioner $\varphi_A(\vec{r} - \vec{r}_j)$ och $\varphi_B(\vec{r} - \vec{r}_j)$ för elektroner på atom

A eller B i cell $\vec{r}_j$, med $j = 1, ..., N$ (N antal celler).

a) Visa att en vågfunktion på följande form är en Blochvåg (dvs. uppfyller Blochs teorem):

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \left(a_{\vec{k}} \varphi_A(\vec{r} - \vec{r}_j) + b_{\vec{k}} \varphi_B(\vec{r} - \vec{r}_j) \right), \tag{2}$$

där $a_{\vec{k}}$ och $b_{\vec{k}}$ är koefficienter. (1p)

b) Antag att det enda nollskiljda överlapp som finns är mellan närmsta grannar av vågfunktioner på A och B atomer. Såsom visas i figuren har detta överlapp amplitud $-t$. (Notera att närmsta grannar finns både inom en cell och mellan två celler.)

Visa att det finns två band med energier $\epsilon_{\vec{k}} = \pm 4t|\cos(k_x a/2)\cos(k_y a/2)|$. (För att härleda detta ställer man lämpligtvis upp problemet som en 2×2 matris som verkar på A respektive B atomer/koefficienter.) (2p)

c) Bekräfta att för $k_x = \pm\pi/a$ eller $k_y = \pm\pi/a$ fås $\epsilon_{\vec{k}} = 0$. Rita ut några celler av gittret med relativ fas på vågfunktionen i varje gitterpunkt då något av dessa vilkor är uppfyllda och förklara varför detta ger tillstånd med noll energi. (1p)

Lycka till!
Maths och Mats

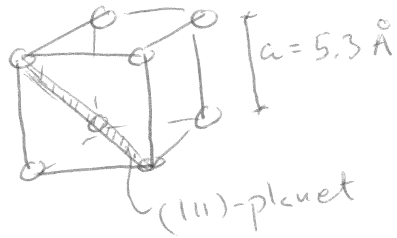
Lösningsförslag Tentamen FFY012 – 2015-03-19

Uppgift 1

Röntgenstrålar $E = 10\,\text{keV} = hc/\lambda \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{10\,\text{keV}} = \ldots = 1.24\,\text{Å}$

Diffraktion mot (111)-planen i enkel kubisk struktur

a)



Planavstånd $d_{111} = \frac{a}{\sqrt{1^2+1^2+1^2}} = \frac{a}{\sqrt{3}}$

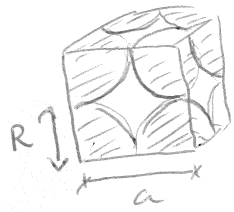
Braggslag: $2d_{111} \cdot \sin\Theta = n \cdot \lambda$

$$\Rightarrow \sin\Theta = \frac{n \cdot \lambda}{2d_{111}} = n \cdot \frac{\lambda\sqrt{3}}{2a} = n \cdot \left(\frac{1.24 \cdot \sqrt{3}}{2 \cdot 5.3}\right) = n \cdot 0{,}20262$$

$\sin\Theta < 1 \Rightarrow n = 1,2,3,4 \Rightarrow$

$$\begin{cases} \Theta_1 = \arcsin(0.20262) \approx 11{,}69^\circ \\ \Theta_2 = \arcsin(2 \cdot 0{,}20262) \approx 23{,}91^\circ \\ \Theta_3 = \arcsin(3 \cdot 0{,}20262) \approx 37{,}43^\circ \\ \Theta_4 = \arcsin(4 \cdot 0{,}20262) \approx 54{,}14^\circ \end{cases}$$

b) Packningstäthet $= \frac{\text{Atomvolym}}{\text{Kristallvolym}}$



Antag att atomerna är sfärer med radien R

Enligt figur: $2R = a$

Antal atomer/cell $= 8 \cdot \frac{1}{8} = 1$

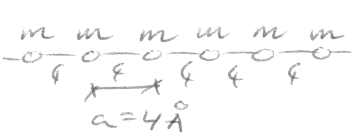
$$\Rightarrow \text{Packningstäthet} = \frac{\#\text{atomer/cell} \cdot 4\pi R^3/3}{a^3} = \frac{1 \cdot 4\pi R^3/3}{(2R)^3}$$

$$= \frac{4\pi R^3/3}{8R^3} = \frac{4\pi}{24} = \pi/6 \approx \underline{\underline{0.52}}$$

c) Koordinationstal = # närmaste grannar = $\underline{\underline{6}}$

Uppgift 2

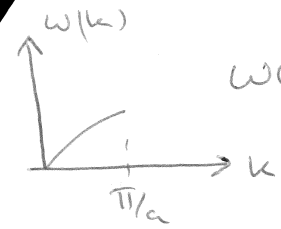
Endimensionell linjär kedja av atomer



Phononernas disp.relation: $\omega(k) = \sqrt{\frac{4f}{m}} \left|\sin\frac{ka}{2}\right|$

I kontinuumgränsen (dvs för mycket långa våglängder) är gittervågernas fortplantningshastighet $v_s = 100\,\text{m/s}$

a) Inom vilket energiintervall har vi de möjliga fononenergierna?



$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4G}{m}}\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$$

For små $k \Rightarrow \omega(k) \to v_s \cdot k$

$$\Rightarrow \frac{d\omega}{dk} = v_s$$

Kontinuumgränsen betyder $k \to 0$

$\Rightarrow \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \to 1$

Också: $\frac{d\omega}{dk} = \sqrt{\frac{4G}{m}} \cdot \frac{1}{2}a \cdot \cos\left(\frac{ka}{2}\right)$

$$v_s = \sqrt{\frac{4G}{m}} \cdot \frac{1}{2}a = 100\ \text{m/s} \Rightarrow \boxed{\sqrt{\frac{4G}{m}} = \frac{2v_s}{a}}$$

(enligt uppgift)

Vilket energintervall?

i) Oändligt lång kristall $\Rightarrow \lambda_{max} \to \infty \Rightarrow k_{min} \to 0$

$\Rightarrow \omega(k_{min}) = 0$

ii) $\omega(k_{max}) = ?$

$k_{max} = \pi/a \Rightarrow \omega(k_{max}) = \sqrt{\frac{4G}{m}}\sin\left(\frac{\pi}{a}\cdot\frac{a}{2}\right) = \sqrt{\frac{4G}{m}} = \frac{2v_s}{a}$

$$= \frac{2 \cdot 100\ \text{m/s}}{4 \cdot 10^{-10}\ \text{m}} = \underline{\underline{5 \cdot 10^{11}\ \text{rad/s}}}$$

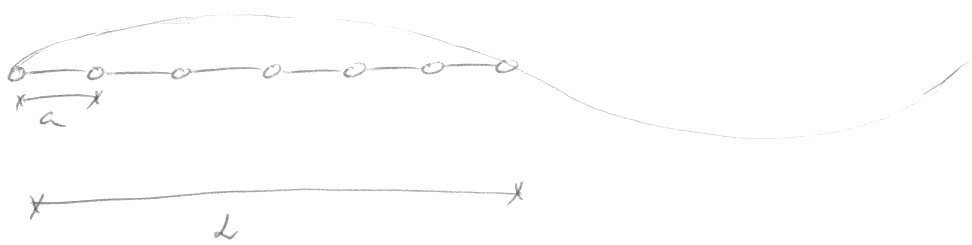
Minimal energi, $E_{min} = \hbar\omega_{min} = 0$

Maximal energi, $E_{max} = \hbar\omega_{max} = \hbar \cdot 5 \cdot 10^{11}\ \text{rad/s} = \ldots = \underline{\underline{0{,}329\ \text{meV}}}$

---

b) Kedjans längd är nu begränsad till 100 nm $= L$

Vad blir nu minsta möjliga fononenergi?



Maximalt $\underline{\underline{\lambda = 2 \cdot L}}$

Minimal energi fås ur k_{min}, k_{min} fås från $k_{min} = \frac{2\pi}{\lambda_{max}} = \pi/L$

$\Rightarrow \omega_{min} = \omega(k_{min}) = \sqrt{\frac{4G}{m}}\sin\left(\frac{\pi}{L}\cdot\frac{a}{2}\right) = 5 \cdot 10^{11}\ \text{rad/s} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{1000}\cdot\frac{1}{2}\right) \approx 5 \cdot 10^{11} \cdot \frac{\pi}{500} = \pi \cdot 10^{9}$

$E_{min} = \hbar\omega_{min} = \ldots = \underline{0.207 \cdot 10^{-2}\ \text{meV}}$

Lösningar Tenta 150319

(3) $R_H = -1.3 \cdot 10^{-4}\ m^3/C = \frac{1}{q n_q}$, $\rho = 1.2 \cdot 10^{-3}\ \Omega m$

a) elektrondopad (n-dopad) ty $R_H < 0$

b) $n = \frac{1}{|R_H e|} = \underline{\underline{4.8 \cdot 10^{22}\ m^{-3}}}$

c) $\mu = \frac{e\tau}{m^*}$ och $\underbrace{\sigma = ne\mu}$ $[\sigma = \frac{1}{\rho}]$

$\Rightarrow \mu = |R_H|/\rho = \underline{\underline{0.11\ \frac{m/s}{V/m}}}$

$\tau = \frac{m^*\mu}{e} = \left[\begin{array}{c} m^* \text{ ur ledningsbandets krökning} \\ m^* = 0.1 m_e \end{array}\right]$

$= \frac{0.1 m_e \mu}{e} = \underline{\underline{6.25 \cdot 10^{-14}\ s}}$

d) $E = 10^3\ V/m \Rightarrow v_d = \mu E \approx \underline{\underline{110\ m/s}}$

$L = v_d \tau = \underline{6.9 \cdot 10^{-12}}\ m$

[känns ofysikaliskt kort, men den verkliga sträcken mellan kollisioner hänger ihop med $v_F = \frac{\hbar k_F}{m} >> v_d$
E-fältet heller inte så starkt.]

[OBS! bandgapet E_g kommer inte in i lösningen.
Likaså effektiva massan för hål.]

(4) $$\varepsilon_E = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\alpha k_x^2 + \beta k_y^2 + \gamma k_z^2\right)$$

a) En konstant energiyta är en ellipsoid.

Skärningspunkt längs k_x ges av $k_y = k_z = 0$

samt $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m_e}\alpha k_x^2 = \varepsilon_F$, dvs

$$k_x = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}\frac{\varepsilon_F}{\alpha}} = \text{"}k_{Fx}\text{"}$$

P.S.S. $$k_{Fy} = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}\frac{\varepsilon_F}{\beta}}$$

$$k_{Fz} = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}\frac{\varepsilon_F}{\gamma}}$$

dessa är ellipsoidens 3 radier

antalet elektroner i denna volym i k-rummet:

$$N = \underbrace{2}_{\text{spinn}} \cdot V_{\text{ellipsoid}} \cdot \underbrace{\frac{V}{(2\pi)^3}}_{\text{tillståndstäthet i k-rummet}}$$

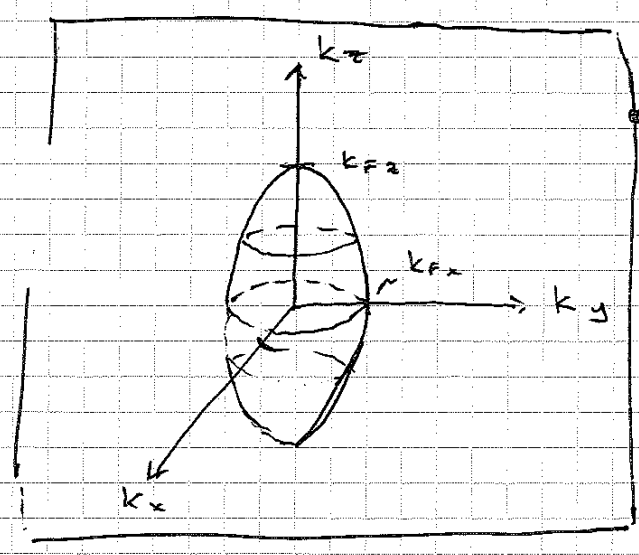
$$V_{\text{ellipsoid}} = \frac{4\pi}{3} k_{Fx} k_{Fy} k_{Fz}$$

$$\frac{N}{V} = n = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon_F^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\alpha\beta\gamma}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3}(\alpha\beta\gamma)^{1/3}}$$

vilket för $\alpha = \beta = \gamma = 1$ ger standarduttrycket med sfärisk Fermiyta.

b) med $\alpha = \beta$ och $\gamma = \alpha/4 \Rightarrow \underline{k_{Fx} = k_{Fy}}$ $\underline{k_{Fz} = 2k_{Fx}}$



ellipsoida Fermiytan

(5) a) Visa $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, u_k(\vec{r})$ där

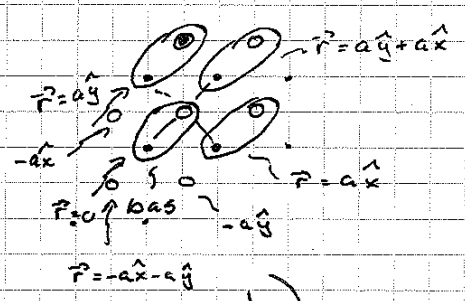
u_k är periodisk, dvs $u_k(\vec{r}+\vec{T}) = u_k(\vec{r})$

gittervek.

beviset som i textbok/föreläsning

skriv $\psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r})} \left(a_k e_A(\vec{r}-\vec{r}_j) + \dots\right)}_{u_k(\vec{r}),\ \text{skifta med } \vec{T},\ \text{tag}}$

$\vec{r}_j' = \vec{r}_j - \vec{T}$, ger samma funktion ty summan över (oändligt) Bravais gitter



b) $$\langle k|H|k\rangle = \frac{1}{N}\sum_{jm} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_m)} \int d^3r \left(a^* e_A^*(\vec{r}-\vec{r}_m) + b^* e_B^*(\vec{r}-\vec{r}_m)\right) H \cdot \left(a e_A(\vec{r}-\vec{r}_j) + b\, e_B(\vec{r}-\vec{r}_j)\right)$$

ställ upp som matris

$$(a^*, b^*)\begin{pmatrix} \overbrace{\langle A,m|H|A,j\rangle}^{=0} & \overbrace{\langle A,m|H|B,j\rangle}^{-t \text{ grannar}} \\ \underbrace{\langle B,m|H|A,j\rangle}_{-t \text{ om } m \text{ och } j \text{ granna}} & \underbrace{\langle B,m|H|B,j\rangle}_{=0} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$= \langle k|H|k\rangle = (a^*, b^*)\underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -t\sum_{\text{grannar till } A} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m} \\ -t\sum_{\text{grannar till } B} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m} & 0 \end{pmatrix}}_{=\bar{H}} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$= \bar{H} = \begin{pmatrix} 0 & -t\left(1+e^{ik_xa}+e^{ik_ya}+e^{i(k_x+k_y)a}\right) \\ -t\left(1+e^{-ik_xa}+e^{-ik_yb}+e^{-i(k_x+k_y)a}\right) & 0 \end{pmatrix}$$

energierna för egentillstånden ges av egenvärden till denna

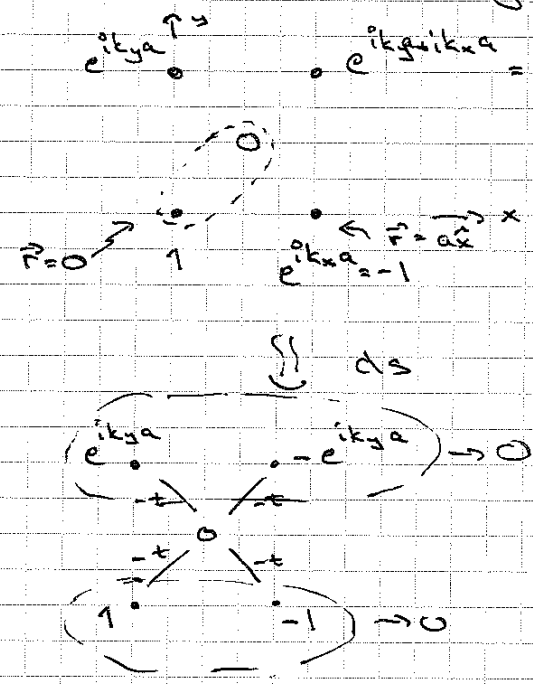
$$\varepsilon^2 = t^2 \underbrace{\left(1+e^{ik_xa}+e^{ik_ya}+e^{i(k_x+k_y)a}\right)}_{2e^{-i(k_x+k_y)a/2}\underbrace{\left(\cos(k_x+k_y)\frac{a}{2}+\cos(k_x-k_y)\frac{a}{2}\right)}_{2\cos\frac{k_xa}{2}\cos\frac{k_ya}{2}}} (\text{komplex konj.})$$

$$= 16t^2\cos^2\frac{k_xa}{2}\cos^2\frac{k_ya}{2}$$

$$\rightsquigarrow \quad \varepsilon = \pm 4t\left|\cos\frac{k_xa}{2}\cos\frac{k_ya}{2}\right|$$

c) ~~Om~~ $k_x = \frac{\pi}{a}$ eller $k_y = \frac{\pi}{a}$ $\Rightarrow$ $\varepsilon = \pm 0$

antag $k_x = \frac{\pi}{a}$ k_y godtycklig, betrakta en B atom med grannar, skriv ut fasen $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$



p.g.a relativa fasen "dödes" tillståndet av hoppingen $-t$

$\Downarrow$

energi $\underline{\underline{\varepsilon = 0}}$