Tentamen i Fasta tillståndets fysik

ffy012, ffy011, samt fyp330 (GU)

Tid och plats: torsdag 20/8, 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 $\leq$ 3 < 14p, 14p $\leq$ 4 < 17p, 5 $\geq$ 17p för Chalmers, och 10p $\leq$ G <15p, VG $\geq$ 15, för GU.

Rättningsgranskning: Tisdag 8/9, kl 12.00-13.00, lunchrum Soliden pl3.

Uppgift 1

Perovskitstrukturerade material, ABO_3 (A and B är katjoner och O är syre), uppvisar en mängd olika egenskaper beroende på atomslag (A och B), dopning, temperatur, tryck o.s.v. En ny typ av perovskitmaterial är kubiskt perovskitstrukturerade oxyhydrider, $BaTiO_{3-x}H_x$ ($x < 0.6$), vilka uppvisar hydridjonledande egenskaper och för vilka en del av syrejonerna i $BaTiO_3$ är substituerade mot väte, se Figur 1.

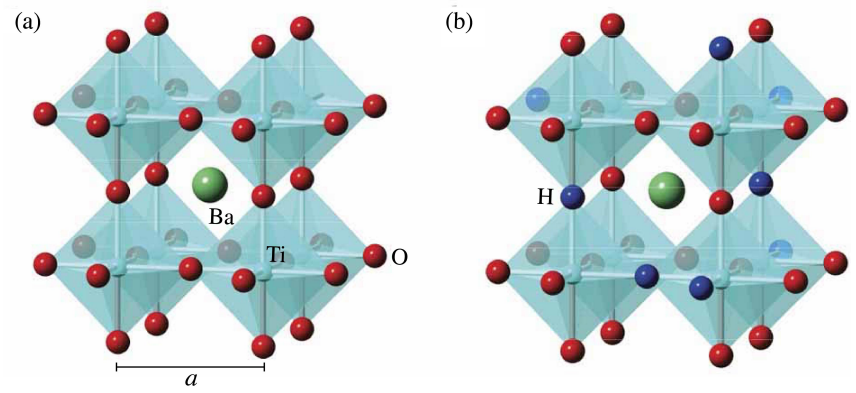
a) Vad är koordinationstalen för Ba, Ti, och O i $BaTiO_3$? (1p)

b) Beskriv strukturen för $BaTiO_3$ med gitter + bas. (1p)

c) Låt oss antaga att väteatomerna i oxyhydriden [Figur 1(b)] uppvisar en ordning sådan att de bildar en så kallad superstruktur och att du vill bestämma denna superstruktur med hjälp av diffraktion. Du har att tillgå 10 gram av ett polykristallint prov av $BaTiO_{2.5}H_{0.5}$, och som verktyg elektrondiffraktion, röntgendiffraktion, och neutrondiffraktion. Vilken av metoderna skulle fungera bäst? Motivera ditt svar. (1p)

d) Låt oss nu anta att du har till förfogande polykristallina prover av både den "normala" oxyhydriden, $BaTiO_{2.5}H_{0.5}$, och dess iso-strukturella deutererade ekvivalent, $BaTiO_{2.5}D_{0.5}$. Vilket prov skulle du då med fördel använda för att bestämma superstrukturen av H (D) i oxyhydriden? Varför skulle det vara svårt att bestämma superstrukturen för det andra provet? Motivera ditt svar i termer av spridningstvärsnitt och den koherenta spridningslängden för H, D, och O. (1p)

Koherenta spridningslängder för neutronspridning (Spridningstvärsnittet, $\sigma \propto b^2$):
H: b = -3.74 fm.
D: b = 6.67 fm.
O: b = 5.80 fm.



Figur 1: Schematisk bild över strukturen för (a) $BaTiO_3$ och dess oxyhydrid (b) $BaTiO_{3-x}H_x$.

Uppgift 2

Kålle och Ada träffas för att äta lunch. Kålle tycker att maten är lite osalt och tar därför fram en burk med salt (NaCl). Ada, som är Chalmerist och går en kurs i materialvetenskap, har med sig en burk med diamantpulver och en burk med cesiumklorid (CsCl). De tre burkarna är (tyvärr) identiska, så de blandar snart ihop dem. Då Kålle och Ada inte klarar av att med ögat avgöra vilken burk som innehåller vilket ämne, så föreslår Ada att de går till Chalmers och använder en uppställning för röntgendiffraktion för att reda ut oredan. Vid experimentet erhålls följande resultat.

Braggvinkel	Burk A	Burk B	Burk C
θ_1	10.8°	13.7°	22.0°
θ_2	15.3°	15.9°	37.7°
θ_3	18.9°	22.8°	45.8°
θ_4	22.0°	27.0°	59.8°
θ_5	24.7°	28.3°	70.4°

(a) Vilken burk innehåller vilket ämne? (3p)

Tips: För SC gäller att strukturfaktorn, $S \neq 0$ 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 samtidigt satisfierar $h+k+l = 4n$.

(b) Ada har också gått kursen i fasta tillståndets fysik och tänker sig att samma mätningar skulle kunna genomföras mycket snabbare på synkrotronljusanläggningen MAX-lab i Lund. Hur är en sådan anläggning uppbyggd, d.v.s. hur produceras synkrotronljus? Beskriv i ord och skissa en figur. (0.5p)

(c) Vad skulle hända med diffraktionstopparnas position och intensitet om man ökade temperaturen på proven under mätningarna (vi förutsätter att materialen inte ändrar struktur)? Beskriv i ord och skissa en figur. (0.5p)

Uppgift 3

En enkel metall har bcc struktur, en valenselektron per atom och den kubiska enhetscellen har gitterparameter $a = 4.5$Å.

a) Beräkna elektrontätheten n. (2p)

b) Beräkna Fermienergin ϵ_F. (1p)

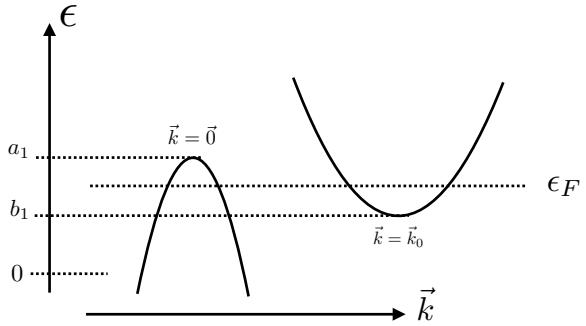
c) Elektronernas bidrag till värmekapaciteten ges av $C_V = \frac{\pi^2}{3} k_b^2 T D(\epsilon_F)$, där $D(\epsilon_F)$ är tillståndstätheten vid Fermienergin. Motsvarande storhet för N fria klassiska partiklar är $C_{V,klass} = \frac{3}{2} k_B N$. Beräkna den relativa värmekapaciteten $C_V / C_{V,klass}$ vid $T = 300$K. (1p)

Uppgift 4

Antag en 3-dimensionell metall vars elektroniska egenskaper kan beskrivas i termer av två paraboliska band som skissat i figur 2. Det ena bandet är hållikt med energi $\epsilon_{\vec{k}} = -a_0|\vec{k}|^2 + a_1$, det andra elektronlikt med energi $\epsilon_{\vec{k}} = b_0|\vec{k} - \vec{k}_0|^2 + b_1$. Storheterna $a_0 > 0$ och $b_0 > 0$ har dimension eV/Å^2 medan storheterna $a_1 > b_1 > 0$ har dimension eV och är definerade relativt en godtycklig nollnivå. ($\vec{k}_0$ är en punkt i Brillouinzonen där det elektronlika bandet har sitt minimum.)

a) Givet att metallen har ett jämnt antal elektroner per gitterpunkt och att alla andra band är fulla eller tomma, beräkna Fermienergin ($T = 0$) uttryckt i givna storheter. (2p)

b) Beräkna tillståndstätheten vid Fermienergin. (2p)



Figur 2: Skiss av bandstruktur. (Längs riktningen $\vec{0}$ till $\vec{k}_0$.)

Uppgift 5

Härled med hjälp av Drude-formalismen för elektrontransport uttrycket för Hall-koefficienten för en halvledare med laddningsbärare av båda typer $R_H \equiv \frac{E_y}{j_x B} = \frac{\mu_h^2 p - \mu_e^2 n}{e(\mu_h p + \mu_e n)^2}$. (4p)

Geometrin är standard, dvs magnetfältet B är i $\hat{z}$ riktning, en ström j_x leds i $\hat{x}$ riktning med hjälp av ett fält E_x, och ett fält E_y mäts i $\hat{y}$ riktningen. Ingen ström leds ut i $\hat{y}$ riktningen, dvs $j_y = 0$. Mobiliteterna är definierade enligt $\mu = e\tau/m^*$ för respektive laddningsbärare, där $e > 0$ är storleken på elektronens laddning. Anta att magnetfältet B är litet så att termer som innehåller B^2 kan försummas.

Lycka till!
Maths och Mats

Lösningsförslag FFY012 2015-08-20

① $BaTiO_3$

a) Koordinationstal (= # närmaste grannar)

Ba: 12
Ti: 6
O: 2

b) Struktur = gitter + bas

gitter: SC

bas: Ba $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
Ti (000)
O $(\frac{1}{2}00)$ $(0\frac{1}{2}0)$ $(00\frac{1}{2})$

c) Neutrondiffraktion!

- Elektrondiffraktion, tränger in endast en liten bit, men vi har att göra med ett stort prov (10 g) => Funkar inte
- Röntgen, växelverkar med elektronmolnet, H har bara en elektron => syns inte, funkar inte
- Neutron, växelverkar med atomens kärna. Förhållandevis stark för väte. Kan fungera

d) $BaTiO_{2.5}H_{0.5}$

- spridningstvärsnittet för D är för likt det för O => skulle bli väldigt svårt att särskilja. (Dock så skulle en mätning på det deutererade provet reflekteras av en mindre bakgrund (brus) på grund av lägre inkoherent spridning vilket inte ger strukturell information) - Se föreläsningsanteckningar.

(2)

a)

	Burk A	Burk B	Burk C
θ_1	10.8°	13.7°	22.0°
θ_2	15.3°	15.9°	37.7°
θ_3	18.9°	22.8°	45.8°
θ_4	22.0°	27.0°	58.8°
θ_5	24.7°	28.3°	70.4°

NaCl (FCC)
$S \neq 0$ för $(hkl) = (111), (nnn)$

CsCl SC
$S \neq$ för alla h, k, l

Diamant
$S \neq 0$ för $(hkl) = (nnn)$ eller (111) och samtidigt $4n = h, k, l$

Bragg: $2d_{hkl} \cdot \sin\theta = \lambda$

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

Teste

SC: $d_{100} = a$, $d_{110} = a/\sqrt{2}$ $\Rightarrow$ $2d_{100}\sin\theta_1 = 2d_{110}\sin\theta_2 \Leftrightarrow$

$$2\cancel{a}\sin\theta_1 = 2\frac{\cancel{a}}{\sqrt{2}}\sin\theta_2$$

$$2\sin\theta_1 = \sqrt{2}\sin\theta_2$$

$$\sqrt{2} = \frac{\sin\theta_2}{\sin\theta_1} = \frac{\sin(15.3°)}{\sin(10.8°)} \approx 1.41 \ (1.408)$$

ok!

(Funkar inte med de andra)

$\boxed{\text{Burk A} = \text{CsCl}}$

FCC: $d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}}$, $d_{200} = a/2$ $\Rightarrow$ $2d_{111}\sin\theta_x = \lambda$, $2d_{200}\sin\theta_y = \lambda$ $\Rightarrow$ $2d_{111}\sin\theta_x = 2d_{200}\sin\theta_y$

$$\Rightarrow \frac{a}{\sqrt{3}}\sin\theta_x = \frac{a}{2}\sin\theta_y$$

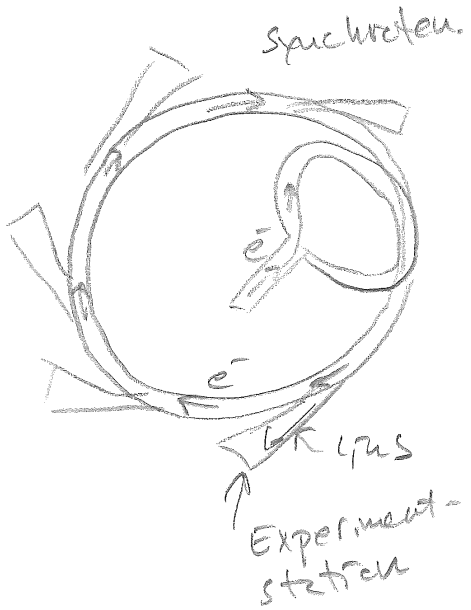
$$\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{3}}\sin\theta_x = \frac{1}{2}\sin\theta_y \Rightarrow \frac{\sin\theta_y}{\sin\theta_x} = \frac{2}{\sqrt{3}} = 1.1547.$$

$\theta_y = 15.9°$, $\theta_x = 13.7°$ $\Rightarrow$ $\frac{\sin\theta_y}{\sin\theta_x} = 1.1567$

$\boxed{\text{Burk B} = \text{NaCl}}$

På samma sätt ... $\boxed{\text{Burk C} = \text{Diamant}}$

2b)

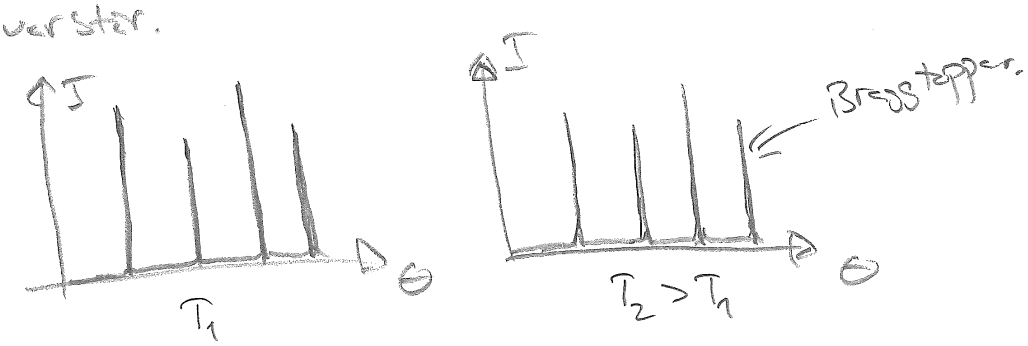

spaltvreten.
e^-
e^-
ljus
Experiment-
station

Elektroner accelereras i en linjär accelerator för att sedan gå in i en cirkel-formad bana.

Elektronerna rör sig nära ljusets hastighet och avger därför ljus (röntgenstrålning) när elektronerna böjs av av den cirkelformade banan (relativistisk effekt)

Se föreläsningsanteckningar.

c) Intensiteten minskar p.g.a. Debye-Waller faktorn (termiska vibrationer), medans positionerna kvarstår.


I
θ
T_1
I
Braggtoppar.
θ
$T_2 > T_1$

(3) a) bcc. $\Leftrightarrow$ 2 atomer / kubisk cell, $V = a^3$

1e/atom 2 elektroner / a^3

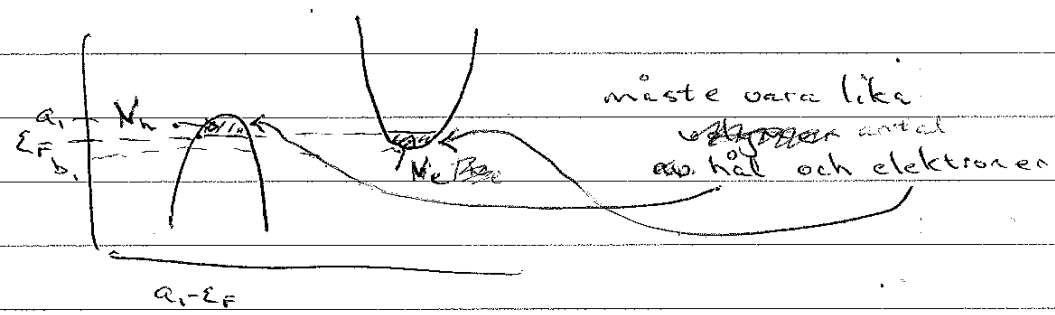
$$n = 2/a^3 = 2.2 \cdot 10^{28}\ m^{-3}$$

b) $$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{2/3} = 2.85\ eV$$

c) $$\frac{C_V}{C_{V\,klass}} = \left[D(\varepsilon_F) = \frac{3}{2}\frac{N}{\varepsilon_F}\right] = \frac{\pi^2}{3}\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \approx 2.97\ \%$$

---

4 a)



$$N_h = \int_0^{a_1 - \varepsilon_F} D_h(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

$$D_h(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m_h^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{\varepsilon}\ ;\quad m_h^* \text{ ur } a_0 k^2 = \frac{\hbar^2}{2m_h^*}k^2$$

$$m_h^* = \frac{\hbar^2}{2a_0}$$

$$N_h = \frac{V}{(2\pi)^2}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\frac{2}{3}(a_1 - \varepsilon_F)^{3/2}$$

P.S.S $$N_e = \frac{V}{(2\pi)^2}\left(\frac{1}{b_0}\right)^{3/2}\frac{2}{3}(\varepsilon_F - b_1)^{3/2}$$

$$N_h = N_e \Rightarrow \frac{a_1 - \varepsilon_F}{a_0} = \frac{\varepsilon_F - b_1}{b_0}$$

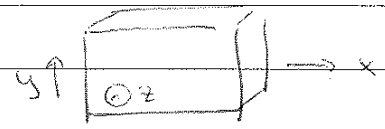
$$\varepsilon_F = \frac{\frac{a_1}{a_0} + \frac{b_1}{b_0}}{\frac{1}{b_0} + \frac{1}{a_0}}$$

b) $$D(\varepsilon_F) = D_h(\varepsilon_F) + D_e(\varepsilon_F) = \frac{V}{2\pi^2}\sqrt{\varepsilon_F}\left(a_0^{-3/2} + b_0^{-3/2}\right)$$

$$\cancel{= \frac{2}{3}\frac{V}{(2\pi)^2}\left[\left(\frac{a_1 - \varepsilon_F}{a_0}\right)^{3/2} + \left(\frac{\varepsilon_F - b_1}{b_0}\right)^{3/2}\right]}$$

med ε_F enligt (a)

(5)



$\vec{B} = B\hat{z}$

beräkna $R_H = \frac{E_y}{j_x B}$

rörelsekvationer: elektroner $m_e^* \frac{d\vec{v}_e}{dt} = -m_e^* \frac{\vec{v}_e}{\tau_e} - e\vec{E} - e\vec{v}_e \times \vec{B}$

stationärt $\frac{d\vec{v}}{dt} = 0$ $\Rightarrow$ $m_h^* \frac{d\vec{v}_h}{dt} = -m_h^* \frac{\vec{v}_h}{\tau_h} + e\vec{E} + e\vec{v}_h \times \vec{B}$

med $\mu_e = e\tau_e / m_e^*$

$$\vec{v}_e = -\mu_e(\vec{E} + \vec{v}_e \times \vec{B})$$

$$\vec{v}_h = \mu_h(\vec{E} + \vec{v}_h \times \vec{B})$$

komponenter:

$$(1) \begin{cases} v_{xe} = -\mu_e(E_x + v_{ye}B) & v_{ye} = -\mu_e(E_y - v_{xe}B) \\ v_{xh} = \mu_h(E_x + v_{yh}B) & v_{yh} = \mu_h(E_y - v_{xh}B) \end{cases}$$

ström $\vec{j} = -ne\vec{v}_e + pe\vec{v}_h$

$$\boxed{j_y = 0} \Leftrightarrow 0 = -nev_{ye} + pev_{yh} = e\left[n\mu_e(E_y - v_{xe}B) + p\mu_h(E_y - v_{xh}B)\right] =$$

$$= \left[\text{ekv. 1, linjärt i } B\right] \approx e\left[n\mu_e(E_y + \mu_e E_x B) + p\mu_h(E_y - \mu_h E_x B)\right]$$

$$\Rightarrow E_y = \frac{(-n\mu_e^2 + p\mu_h^2)E_x B}{n\mu_e + p\mu_h}$$

$$j_x B = (-nev_{xe} + pev_{xh})B \approx \left[\text{linjärt i } B\right] \approx (ne\mu_e E_x + pe\mu_h E_x)B$$

$$= e(n\mu_e + p\mu_h)E_x B$$

$$\Rightarrow \boxed{R_H = \frac{E_y}{j_x B} \approx \frac{-n\mu_e^2 + p\mu_h^2}{e(n\mu_e + p\mu_h)^2}}$$