Tentamen i Fasta tillståndets fysik

FFY012, FFY011, samt FYP330 (GU)

Tid och plats: torsdag 17/3, 2016, 14.00 i M salar.

Examinatorer:

Mats Granath, 7869026, 0723087160, mats.granath@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: 1/4, kl 12.00-13.00, lunchrum Soliden pl3.

Uppgift 1

a) Vilka fysikaliska egenskaper kan relateras till materials gittervibrationer? Ge 5 exempel. (1p)

b) Beskriv de väsentliga skillnaderna mellan Dulong-Petit, Einstein, och Debye-modellerna för gittervibrationernas bidrag till ett materials värmekapacitet, och rita upp deras temperaturberoende. (1p)

c) Nämn 4 spridningsmekanismer som leder till förminskad värmeledningsförmåga i ett verkligt prov av en enkristall koppar. (1p)

d) Vad är en vätebindning? (1p)

Uppgift 2

En stråle lågenergielektroner (30 eV) faller in ortogonalt mot (100)-ytan av en monoatomär tetragonal kristall med gitterparameterna $a = 3.75$ Å och $c = 4.1$ Å (se Figur 1). Beräkna vinklarna mellan normalen och de diffrakterade strålarna? (4p)

Uppgift 3

En enkel metall har elektroner i ett band som beskrivs enligt $\epsilon_{\vec{k}} = a|\vec{k}|^2$ med $a = 2.9\text{eVÅ}^2$.

a) Beräkna relativa effektiva massan m^*/m_e. (1p)

b) Metallen är genomskinlig för UV strålning med energier $\hbar\omega > 5.8\text{eV}$. Uppskatta med hjälp av denna information, samt svaret från (a), elektontätheten n. (2p)

c) Antag att metallen är natrium. Beräkna n med hjälp av tabellerat värde på dess densitet samt det faktum att varje atom bidrar med en ledningselektron. Jämför med svaret

i (b). Vad kan skillnaden bero på? (1p)

Uppgift 4

En metall har tetragonal struktur med enhetscell enligt figur, och en atom per gitterpunkt. Ledningselektronerna kan beskrivas som fria elektroner fast med en anisotrop energi

$$\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m_e}(k_x^2 + k_y^2 + \alpha k_z^2)\,,$$

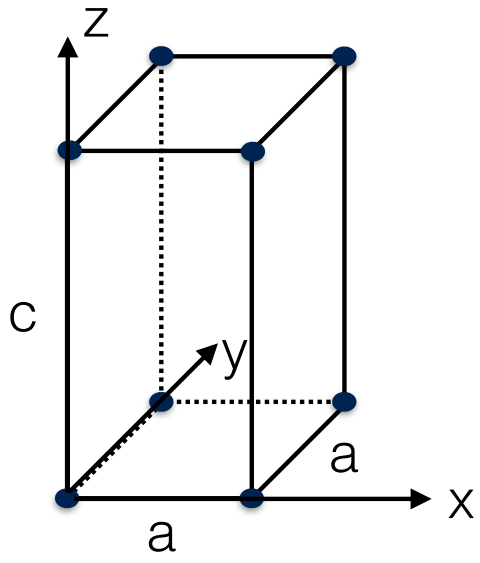
där $\alpha = (\frac{a}{c}) < 1$.

a) Skriv ner reciproka gittervektorer och rita första Brillouinzonen (1BZ). Längden på sidorna ska framgå. (1p)

b) Fermiytan är en ellipsoid med halvaxlar $k_{F,x} = k_{F,y} \neq k_{F,z}$. Antag att Fermiytan är precis så stor att den får plats i 1BZ. (Dvs. Fermiytan tangerar något av Braggplanen.) Bestäm $k_{F,z}$ och k_F, x i termer av a och c. (1p)

c) Beräkna elektrontätheten n som en följd av svaret i (b). (1p)

d) Antag att varje atom bidrar med en ledningselektron. Vad är då den relativa tetragonala utsträckningen c/a? (1p)



Figur 1: Enkel tetragonal kristall med $c > a$.

Uppgift 5

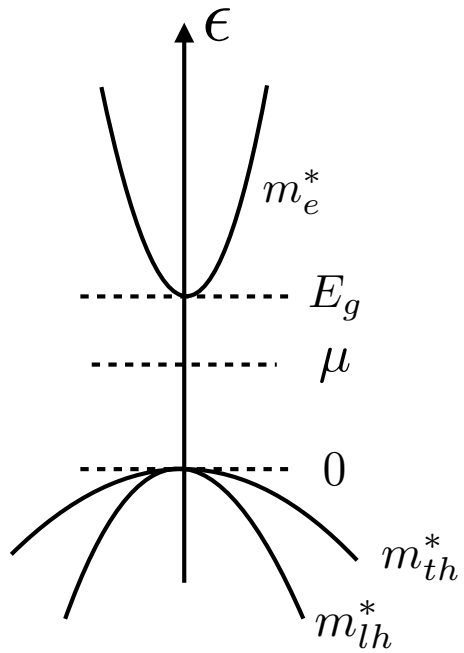
Betrakta en intrinsisk halvledare med ett elektronband (ledningsband) och två hålband (valensband) enligt figuren. Laddningarna i de senare beskrivs i termer av tunga och lätta hål. Den effektiva massan för elektronerna är m_e^*, och den effektiva massan för tunga hål m_{th}^* och för lätta hål m_{lh}^*. Bandgapet ges av $E_g \gg k_B T$, nollnivån för energin sätts vid valensbandens topp, och kemiska potentialen μ ligger nära bandgapets mitt.

a) Skriv ner uttryck för elektrontäthet n, täthet av tunga hål p_{th} och täthet för lätta hål p_{lh} vid temperatur T i termer av μ, E_g och de effektiva massorna. (1p)

b) Vilken ekvation behöver n, p_{th} och p_{lh} uppfylla så att halvledaren är laddningsneutral? (1p)

c) Härled ett utryck för den kemiska potentialen μ uttryckt i givna storheter. (Använd laddningsneutralitet.) (1p)

d) Givet $m*_e = 0.6m_e$, $m_{th}^* = 1.5m_e$, $m_{lh}^* = 0.8m_e$ (m_e är den fria elektronmassan), samt $E_g = 1eV$, beräkna n, p_{th} och p_{lh} vid $T = 300$K. Bekräfta att laddningsneutralitet är uppfyllt samt att tätheterna verkar rimliga för en intrinsisk halvledare. (1p)



Figur 2: Skiss av bandstruktur.

Lycka till!
Maths och Mats

Lösningsförslag Tenta FFY012/FYP33C 2016-03-17

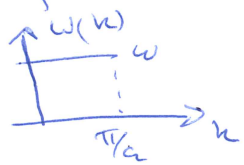
Uppgift 1

a) Gittervibrationer påverkar bland annat ett materials
- förmåga att transportera värme
- termisk expansion
- värmekapacitet
- Elektrisk ledningsförmåga
- Jouleledningsförmåga
- Ljudhastighet

b) Dulong-Petit, Einstein, Debye

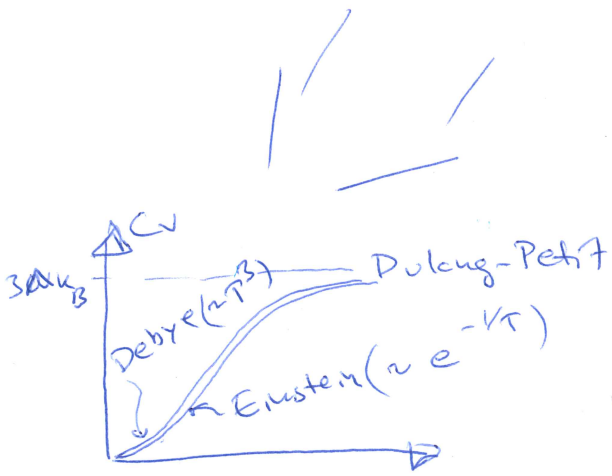
- Bygger på klassisk mekanik
- Atomerna vibrerar oberoende av varandra.
- C_V oberoende av temperatur $= 3Nk_B$

- Bygger på kvantmekanik
- Atomern vibr. oberoende av varandra, varje med har frekvens ω



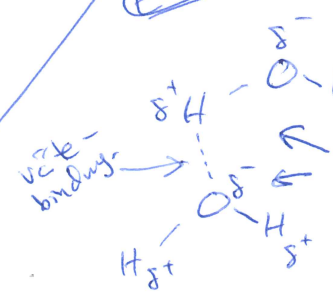
- Bygger på kvantmek.
- Atomerna vibr. inte oberoende av varandra.
- Tar hänsyn till distributionen av vibrations-frekvenser D.v.s. varje med har sin egen frekvens.

$\omega(k) = v_s \cdot k$ för $k \leq k_D$



c) fonon-fonon (Umklapp) spridning
fonon-defekt spridning
fonon-gränsyta spridning
fonon-elektron spridning

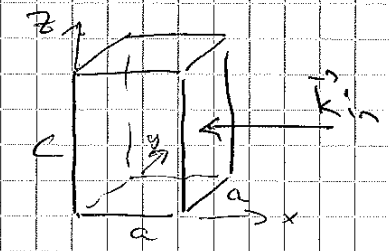
Exempel



Vätet känner av elektroneg. karaktär från syre i närliggande H_2O-molekyl.

d) Bindning mellan väte (H) och närliggande elektronegativ atom (vanligtvis O, N eller F). H binder ofta kovalent till annan atom

uppg. 2

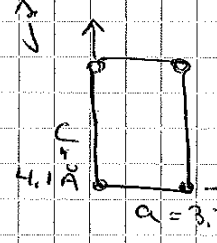


$$E = \frac{\hbar^2 k_{in}^2}{2m} = 30\,eV$$

$$\Downarrow$$

$$k_{in} = 2.8\ \text{Å}^{-1}$$

elektrondiffraktion $\Leftrightarrow$ ser bara ytan



rektangulärt gitter

$\vec{a}_1 = a\hat{i}$

$\vec{a}_2 = c\hat{j}$

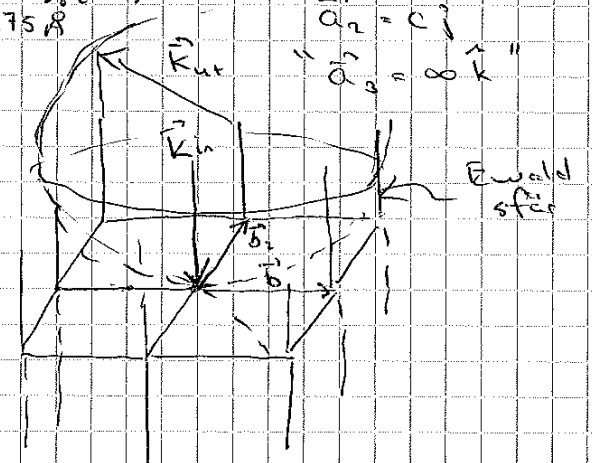
$\vec{a}_3 = \infty\hat{k}$

reciprokt gitter

$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{i}$

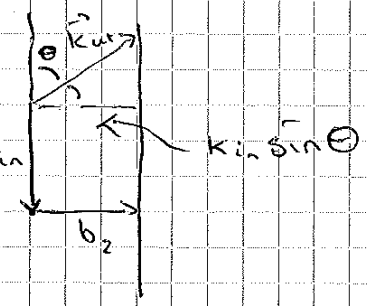
$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{c}\hat{j}$

$\vec{b}_3 = 0\hat{k}$



$|b_1| = 1.68\ \text{Å}^{-1}$

$|b_2| = 1.53\ \text{Å}^{-1}$



$$\sin\theta = \frac{|b_1|}{k_{in}} \Rightarrow \boxed{\theta = 36^\circ}$$

$$\sin\theta = \frac{|b_2|}{k_{in}} \Rightarrow \boxed{\theta = 33^\circ}$$

$$\sin\theta = \frac{2|b_1|}{k_{in}} > 1 \text{ funkar inte}$$

diagonalen:

$$\sin\theta = \frac{\sqrt{b_1^2 + b_2^2}}{k_{in}} = 0.81 \Rightarrow \boxed{\theta = 54^\circ}$$

3a) $\varepsilon_n = a|k|^2 \qquad a = \frac{\hbar^2}{2m^*} = 2{,}9\,eV\,Å^2$

$\frac{\hbar^2}{2m_e} = 3{,}8\,eV\,Å^2 \qquad \boxed{\frac{m^*}{m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e}\Big/a = 1{,}3}$

b) $\frac{\omega}{\omega_p} > 1$ ljus propagerar i metall — ω_p plasman — fotonens

$\hbar\omega_p = 5{,}8\,eV$

$\Rightarrow \omega_p^2 = \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m^*} \Rightarrow (\hbar\omega_p)^2 = \frac{n\hbar^2 e^2}{\varepsilon_0 m^*}$

$\left\{\frac{\varepsilon_0}{e^2} = 5{,}6\cdot 10^{-3}/eVÅ^3\right\} \Rightarrow (\hbar\omega_p)^2/a = \frac{2ne^2}{\varepsilon_0}$

$\Rightarrow \boxed{n = 3{,}3\cdot 10^{-2}/Å^3}$

c) tabellvärde för Na $n_{Na} = 2{,}56\cdot 10^{28}/m^3$

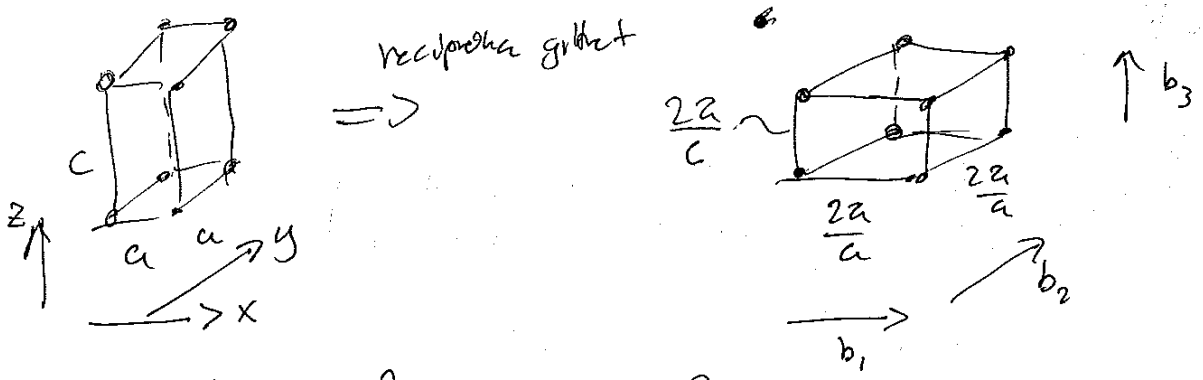
$= \boxed{2{,}56\cdot 10^{-2}/Å^3}$

Diskrepans:

- Använder en effektiv massa för hela bandet.
- Förenklad modell för dielektricitetsfunktionen

uppg 4 En atom per gitterpunkt

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(k_x^2 + k_y^2 + \alpha k_z^2\right) \qquad \alpha = \left(\frac{a}{c}\right) < 1 \Rightarrow \underline{a < c}$$

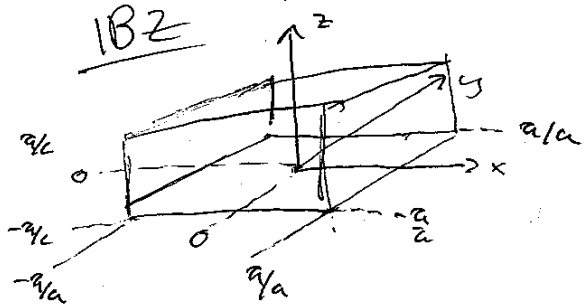


a) $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$

$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{y}$

$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{c}\hat{z}$

1BZ

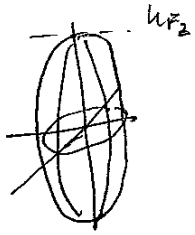


b) Fermiytan ges av $\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(k_x^2 + k_y^2 + \alpha k_z^2\right) = \varepsilon_F$

halvvarlar $\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m_e}k_{Fx}^2 = \varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_e}k_{Fy}^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e}\alpha k_{Fz}^2$

$\Rightarrow \alpha k_{Fz}^2 = k_{Fy}^2 = k_{Fx}^2 \Rightarrow k_{Fz} = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}k_{Fy} = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}k_{Fx} \qquad \frac{1}{\sqrt{\alpha}} > 1$

$\Rightarrow$



$\Rightarrow k_{Fz}$ tangerar 1BZ $\Rightarrow \boxed{k_{Fz} = \frac{\pi}{c}}$

$k_{Fx} = k_{Fy} = \sqrt{\alpha}\, k_{Fz} = \sqrt{a/c}\,\frac{\pi}{c} =$

$\boxed{k_{Fz} = \pi/c}$, $\boxed{k_{Fx} = k_{Fy} = \sqrt{\frac{a}{c}}\,\frac{\pi}{c} < k_{Fz}}$

c) Elektrontätheten $\frac{V}{(2\pi)^3}$ $\Rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} V_k \cdot 2 = N$

spin — antal elektroner

V_k: volymen av ellipsoid $V_k = \frac{4\pi}{3} k_{F_x} k_{F_y} k_{F_z}$

$$V_k = \frac{4\pi}{3}\left(\sqrt{\frac{a}{c}}\right)^2\left(\frac{a}{c}\right)^3$$

$$\Rightarrow \quad N = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi}{3}\left(\sqrt{\frac{a}{c}}\right)^2\left(\frac{a}{c}\right)^3 \cdot 2$$

$$\Rightarrow \boxed{n = \frac{N}{V} = \frac{1}{3a^2}\frac{a}{c}\left(\frac{a}{c}\right)^3}$$

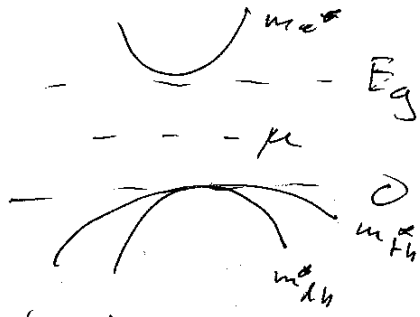
$[n] = 1/L^3$

d) vage antar att det är en leningselektron

$$\Rightarrow n = \frac{\#\text{atomer}}{V} = \frac{\#\text{atomer}}{\#\text{atomer} \cdot \underbrace{a^2 \cdot c}_{\text{volym av cell}}} = \frac{1}{a^2 c}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{a^2 c} = \frac{1}{3a^2}\frac{a}{c}\frac{a^3}{c^3} \Rightarrow \frac{c^4}{a^3 c} = \frac{\pi}{3} \Rightarrow \boxed{\frac{c}{a} = \left(\frac{\pi}{3}\right)^{1/3}}$$

5) $E_g \gg k_B T$ $\qquad \mu \approx \frac{E_g}{2}$



$$\Rightarrow n = n_0 e^{-\frac{E_g-\mu}{kT}}$$

$$p = p_0 e^{-\frac{\mu}{kT}}$$

a) $$n = 2\left(\frac{m_e^* kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{E_g-\mu}{kT}\right) = n_0 e^{-(E_g-\mu)/k_BT}$$

$n_0 \approx 4.83 \cdot 10^{21} T^{3/2} \left(\frac{m_e^*}{m_0}\right)^{3/2}$

$p_{hh} = \ldots \left(\frac{m_{hh}^*}{m_0}\right)^{3/2}$

$p_{lh} =$

$$p_{hh} = 2\left(\frac{m_{hh}^* kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{-\mu}{kT}\right)$$

$$\underline{\mu \approx \frac{E_g}{2}}$$

$$p_{lh} = 2\left(\frac{m_{lh}^* kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{-\mu}{kT}\right)$$

b) Ladungsneutralität: $n = p_{hh} + p_{lh}$

Ladungselektronen

c) $$\cancel{\frac{kT}{2\pi\hbar^2}}\ \cancel{2\alpha^{3/2}} m_e^{*3/2} e^{-\frac{E_g-\mu}{kT}} = \cancel{2\alpha^{3/2}}\left(m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2}\right) e^{\frac{-\mu}{kT}} \quad \boxed{\alpha = \frac{kT}{2\pi\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow e^{-\frac{(E_g-\mu)}{kT}} = \left(\frac{m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2}}{m_e^{*3/2}}\right) e^{-\mu/kT} \Rightarrow \frac{-(E_g-\mu)}{kT} = \ln\left(\frac{m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2}}{m_e^{*3/2}}\right) - \frac{\mu}{kT}$$

$$\Rightarrow 2\mu = E_g + kT \ln\left(\frac{m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2}}{m_e^{*3/2}}\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{\mu = E_g/2 + \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2}}{m_e^{*3/2}}\right)} \rightarrow \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} kT \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e}\right)$$

$m_{lh}^{*3/2} + m_{hh}^{*3/2} \rightarrow m_h^{*3/2}$

d)

$$\mu = \frac{E_g}{2} + \frac{kT}{2} \ln\underbrace{\left(\frac{m_{dn}^{*3/2} + m_{pn}^{*3/2}}{m_c^{3/2}}\right)}_{\ln(5{,}5)}$$

$m_c^* = 0{,}6 m_e$

$m_{pn}^* = 1{,}5 m_e$

$m_{dn}^* = 0{,}8 m_e$

$$\mu = \frac{1\,eV}{2} + kT \cdot 0{,}85$$

Rumstemperatur $T = 300K$

$\Downarrow$

$n \approx 1.09 \cdot 10^{17}\ m^{-3}$

$p_{tn} \approx 7.85 \cdot 10^{16}\ m^{-3}$

$p_{ch} \approx 3.06 \cdot 10^{16}\ m^{-3}$

$\Big\}\ n \approx p_{tn} + p_{ch}$