Tentamen i Fasta tillståndets fysik (FFY012/FYP330)

Tid och plats: 2018-08-23, kl. 14:00-18:00, SB-salarna.

Examinatorer: Mats Granath och Mattias Thuvander.

Lärare vid tentamen: Vitali Zhaunerchyk, telefon 076 622 9150.

Hjälpmedel: Beta, Physics Handbook, penna, sudd, passare, linjal, typgodkänd räknare eller annan räknare i fickformat utan inprogrammerad text/ekvationer relevant för duggan och ett egenproducerat A4 (dubbelsidigt) med valfritt innehåll.

Bedömning: Max 20p. Betyg Chalmers: 3 – 10p, 4 – 14p, 5 – 17p. Betyg GU: G – 10p, VG – 15p.

Skriv tydligt och motivera dina svar.

Uppgift 1

Ett ämne i pulverform med ortorombisk struktur, med a=2,53 Å, b=3,45 Å och c=5,87 Å, undersöks med röntgendiffraktion med energi 8,04 keV (Cu-K_α). Bestäm de fem minsta diffraktionsvinklarna. Det är vinklarna mellan den inkommande och de diffrakterade strålarna som ska anges.

(4 p)

Uppgift 2

NaF, NaCl, NaBr och NaI har alla FCC struktur med gitterparametrar givna nedan.

NaF: a=4,62 Å
NaCl: a=5,64 Å
NaBr: a=5,97 Å
NaI: a=6,46 Å

I figuren visas dispersionsrelationer för fononer i de fyra kristallerna.

a) Vad är den huvudsakliga anledningen till att NaI och NaBr har ett gap mellan optiska och akustiska fononer, till skillnad mot NaF och NaCl?

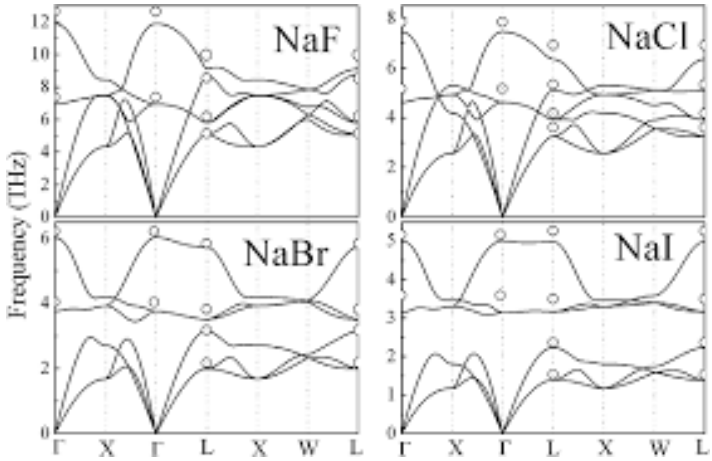
(1 p)

b) För vilken vågvektor (av de som finns representerade i diagrammet) är gapet minst för NaI?

(1 p)

c) Uppskatta ljudhastigheten i den av de fyra kristallerna där ljudhastigheten är störst.

(2 p)



Uppgift 3

CsCl är en jon-kristall med struktur SC (enkelt kubisk) med bas Cs i (0,0,0) och Cl i (1/2, 1/2, 1/2)a. Gitterparametern a=4,12 Å.

a) Beräkna Coloumb-bidraget (gitterenergin) till bindningsenergin för en jon i eV. Inkludera närmaste och näst-närmaste granne i beräkningen.

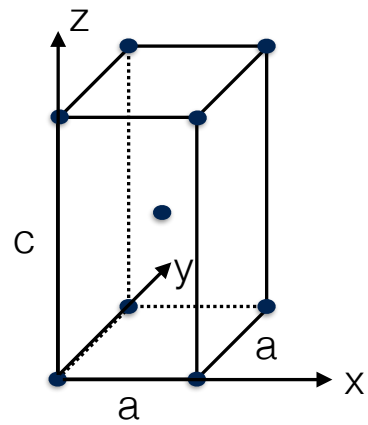
(3 p)

b) Vad blir Madelung-konstanten i a-uppgiften (alltså om endast närmaste och näst-närmaste granne beaktas)? Den verkliga Madelung-konstanten är 1,7627.

(1 p)

Uppgift 4

En enatomig kristall har rymdcentrerad tetragonal enhetscell enligt figur, där $c = 2a$



a) Skriv ner gittervektorerna för det reciproka gittret. (Tips. Det är förmodligen enklast att utgå från en enkel tetragonal enhetscell och beräkna vilka gittervektorer som försvinner på grund av utsläckning.) (2p)

b) Skissa det reciproka gittret. Skalan på axlarna ska framgå. (1p)

c) Antag att antalet ledningselektroner per atom kan justeras så att Fermiytan är precis så stor att den tangerar närmsta Braggplan i första Brillouinzonen. Beräkna antalet ledningselektroner per atom. Fria elektronmodellen kan antas. (1p)

Uppgift 5

Betrakta en donatordopad halvledare, med effektiva massor m_e^*, m_h^* och donatortäthet n_d. Bandgapet är E_g och donatornivån ligger E_d under ledningsbandet.

Antag att varje donator har tre relevanta tillstånd:
1. Ingen elektron (joniserad), med energi 0
2. En elektron med spinn upp och energi $E_g - E_d$
3. En elektron med spinn ner och energi $E_g - E_d$

a) Visa att sannolikheten att en donator är joniserad (tom) är $P_0 = 1/(1+2e^{-(E_g-E_d-\mu)/(k_BT)})$. (Tips. Använd storkanonisk fördelning.) (1p)

Från (a) följer att tätheten av donatorhål ges av $n_d^+ = n_d/(1 + 2e^{-(E_g-E_d-\mu)/(k_BT)})$. (Om du inte kunde visa detta i (a) kan du ändå använda detta uttryck.)
b) Härled ett uttryck för den kemiska potentialen μ vid mycket låga temperaturer, dvs i "Freeze out" regimen då $n_d^+ \ll n_d$. (2p)

c) Från (b) visa att tätheten av elektroner ges av $n = \sqrt{\frac{n_0 n_d}{2}} e^{-E_d/(2k_BT)}$, där $n_0 \approx 4.8 \cdot 10^{21} T^{3/2} (m_e^*/m_e)^{3/2} \mathrm{m}^{-3}$ (T i Kelvin). (1p)

Lösningar – Tenta 23/8 – 2018

(1) Braggs lag: $2d_{hkl} \cdot \sin\theta_{hkl} = \lambda$

$$\lambda = hc/E = \frac{1241{,}5}{8040}\ \text{nm} = 0{,}154\ \text{nm} = 1{,}54\ \text{Å}$$

$$d_{hkl} = \left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}\right)^{-1/2}$$

Minsta θ_{hkl} för största d_{hkl}.

$a = 2{,}53$ Å, $b = 3{,}45$ Å, $c = 5{,}87$ Å.

Fem största d_{hkl} blir d_{001}, d_{010}, d_{011}, d_{002}, d_{100}.

h	k	l	d(Å)	θ(°)	2θ(°)
0	0	1	5.87	7.54	15.1
0	1	0	3.45	12.9	25.8
0	1	1	2.97	15.0	30.0
0	0	2	2.94	15.2	30.4
1	0	0	2.53	17.7	35.4

Svar: 15.1°; 25.8°; 30.0°; 30.4°; 35.4°

2)

a) Det är mass-skillnaden som gör att optiska fononer får höga frekvenser, jämför med 1D.

$m_{Na}/m_F \approx 1.2 \approx 1$

$m_{Na}/m_{Cl} = 0.66 \approx 1$

$m_{Na}/m_{Br} = 0.29 \ll 1$

$m_{Na}/m_I = 0.18 \ll 1$

b) Gapet är minst vid L. Där är vågvektorn

$\vec{k} = \frac{\pi}{a}[1,1,1] = \frac{\pi}{6{,}46}[1,1,1]\,\text{Å}^{-1} = 0{,}49[1,1,1]\,\text{Å}^{-1}$

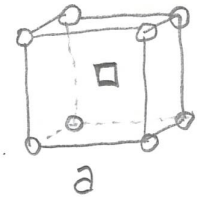
c) Ljudhastigheten ges av $d\omega/dk$ för små k, d.v.s nära Γ. $d\omega/dk$ är störst för NaF.

$$V = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k\to 0} \approx \left.\frac{\Delta\omega}{\Delta k}\right|_{k\to 0} \approx \left.\frac{2\pi\Delta\nu}{\Delta k}\right|_{k\to 0} = \text{från diag.} =$$

$$= \frac{2\pi\cdot 9\cdot 10^{12}}{k(L)} = \frac{2\pi\cdot 9\cdot 10^{12}}{\frac{\pi}{a}\cdot\sqrt{3}} = \frac{2\cdot a}{\sqrt{3}}\cdot 9\cdot 10^{12} = \frac{2\cdot 4{,}62\cdot 10^{-10}\cdot 9\cdot 10^{12}}{\sqrt{3}} =$$

$$= 4800\ \text{m/s} = 4{,}8\ \text{km/s}$$

③ CsCl



$a = 4{,}12$ Å

a) För två fria joner (laddning 1) blir Coulomb-energin

$$U_c^{fri} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}, \quad r = \text{avstånd mellan joner}$$

Vi adderar Coulomb energin för åtta närmaste grannar (attraktiv) och sex näst-närmaste grannar (repulsiv). Detta ger

$$U_c = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{8}{\sqrt{3}a/2} - \frac{6}{a}\right) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a}\left(\frac{16}{\sqrt{3}} - 6\right) =$$

$$= -\frac{(1{,}602\cdot 10^{-19})^2}{4\pi\cdot 8{,}85\cdot 10^{-12}\cdot 4{,}12\cdot 10^{-10}}\cdot 3{,}24 = -1{,}81\cdot 10^{-18}\ \text{J} =$$

$$= -\frac{1{,}81\cdot 10^{-18}}{1{,}6\cdot 10^{-19}}\ \text{eV} = \underline{\underline{-11{,}3\ \text{eV}}}$$

b) Madelungkonstanten, α, är definierad enligt

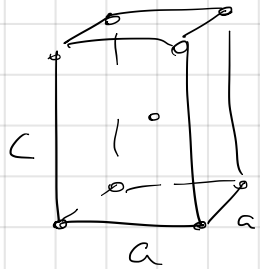
$$U_c = -\alpha\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}, \quad \text{där } r_0 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \quad (= \text{kortaste jonavståndet})$$

Jämför med uttryck ovan

$$\alpha\frac{e^2\cdot 2}{4\pi\varepsilon_0\sqrt{3}a} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a}\left(\frac{16}{\sqrt{3}} - 6\right)$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{3}}{2}\left(\frac{16}{\sqrt{3}} - 6\right) = 8 - 3\sqrt{3} = \underline{\underline{2{,}80}}$$

4



a) Reciprokt för tetragonalt: $\vec{G}_{hkl} = \left(\frac{2\pi}{a}h, \frac{2\pi}{a}k, \frac{2\pi}{a}l\right)$

utslackning från bas $(0,0,0)$ $\left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{c}{2}\right)$

formfaktor $\sim 1 + e^{i\vec{G}_{hkl}\cdot\left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{c}{2}\right)} =$

$= 1 + e^{i\pi(h+k+l)} = 0$ om

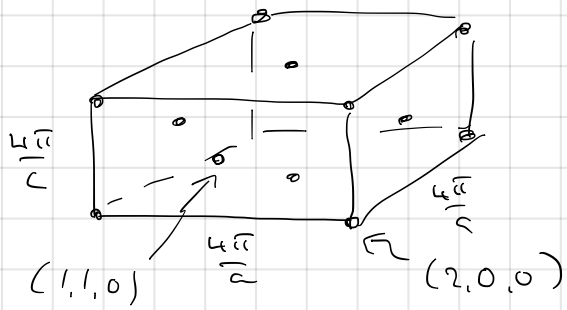
inte $h+k+l =$ jämn

samma som för BCC.

Reciproka Gittret: $\boxed{\vec{G} = \left(\frac{2\pi}{a}h, \frac{2\pi}{a}k, \frac{2\pi}{c}l\right) \text{ där } h+k+l = \text{jämn}}$

(1,1,0)
(2,0,0) etc

b)



c) Kortaste väg till BZ $= \frac{1}{2}\cdot$ (kortaste r.g.v.)

kortast? (1,0,1) eller (0,0,2)?

$$|\vec{G}_{101}| = 2\pi\sqrt{\frac{1}{a^2}+\frac{1}{c^2}} = \frac{2\pi}{a}\sqrt{1+\frac{1}{4}}$$

$$|\vec{G}_{002}| = \frac{4\pi}{c} = \frac{2\pi}{a} < G_{101}$$

vi kräver $k_F = \frac{1}{2}G_{002} = \frac{\pi}{a}$

Fri elektron $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$; från kristallen $n = \frac{2f}{a^2 c}$ (# per atom: f)

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

(5) storkanonisk: tillstånd r med energi E_r part. antal N_r

$\varepsilon = 0,\ N = 0 \qquad P_0 \sim e^{-(0)/k_BT} = 1$

$\uparrow: \varepsilon = E_g - E_d,\ N = 1 \qquad P_\uparrow \sim e^{-(E_g - E_d - \mu)/k_BT}$

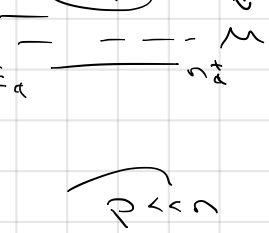
$\downarrow$: som $\uparrow$ $\qquad P_\downarrow = P_\uparrow$

a) $P_r = \dfrac{e^{-(E_r - \mu N_r)/k_BT}}{Z}$

$Z = \sum_r e^{-(E_r - \mu N_r)/k_BT} \Rightarrow \boxed{P_0 = \dfrac{1}{1 + 2e^{-(E_g - E_d - \mu)/k_BT}}}$

b) låga temp/: $n_d^+ \ll n_d$ där $n_d^+ = \dfrac{n_d}{1 + 2e^{-(E_g - E_d - \mu)/k_BT}}$
freeze-out

kräver: $e^{-(E_g - E_d - \mu)/k_BT} \gg 1 \Leftrightarrow E_g - E_d - \mu < 0$



$n = p + n_d^+ \simeq n_d^+$

$n = n_0 e^{-(E_g - \mu)/k_BT} \qquad n_d^+ = \frac{1}{2} n_d e^{-(\mu + E_d - E_g)/k_BT}$

$\Rightarrow \boxed{\mu = E_g - \frac{1}{2}E_d + \frac{1}{2}k_BT \ln\left(\frac{n_d}{2n_0}\right)}$

c) $n = n_0 e^{-(E_g - \mu)/k_BT} = n_0 e^{-E_d/2k_BT} \cdot \sqrt{\dfrac{n_d}{2n_0}}$

$= \sqrt{\dfrac{n_d n_0}{2}}\, e^{-E_d/2k_BT}$