Tentamen i Fasta tillståndets fysik (FFY012/FYP330)

Tid: 2020-06-10, kl. 14:00-18:00.

Examinator: Eva Olsson.

Lärare vid tentamen:

Frågorna 1 och 2, Eva Olsson

Fråga 3, Mattias Thuvander

Frågorna 4 och 5, Elsebeth Schröder

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

Frågorna är inte ordnade efter svårighetsgrad.

Var god notera att tentamen inte är anonym. Spara alla papper med lösningar och även pdf-filen som Du skickar in.

Inför inlämningen:

Lösningar till tentamensproblem som kräver beräkningar, härledningar, figurer, diagram och liknande, skall lösas på papper, som vid en vanlig salstentamen, eller läsplatta.

- Märk varje papperssida tydligt med ditt namn, tentamensuppgiftens nummer och sidnummer.
- Scanna eller fotografera dina lösningar. Tänk på att ha god belysning och använd gärna en dokumentskannings-app, t.ex. CamScanner eller Genius Scan.
- Skapa ett dokument för Din tentamen.
- Namnge Ditt textdokument enligt FFY012_DittNamn.pdf.
- Skicka in dina lösningar genom att ladda upp pdf-filen via Canvas innan tentamens sluttid.
- Inlämningen skall vara klar 18:00. Canvas-portalen kommer att vara öppen tills 18:30 men inte längre. Tiden är enligt den klocka som Canvas använder, det kan alltså mycket väl vara att det stängs någon minut tidigare, så allt vi kan lova är att det ska gå att lämna in tills kring 18:25. Då stänger Canvas och det går inte att lämna in senare.

Viktig information:

Skriv tydligt och motivera dina svar.

Uppgift 1

a) Beräkna atomdensiteten (antal atomer per kvadratmeter) för det atomplan med högst atomdensitet i guld (FCC med a=4,08 Å). (2 p)

b) Betrakta ett (120) plan i guld (FCC med a=4,08 Å). Konstruera det reciproka två-dimensionella gittret av detta plan. (2 p)

Uppgift 2

a) Beräkna strukturfaktorn för molybden (BCC med a = 3,147 Å) och ange värdet uttryckt i formfaktorn för olika h, k, l. (2p)

b) Antag en BCC-struktur i reella rummet med basen (0,0,0). Byt ut atomen i mitten av detta BCC-gittret mot en annan atom. Antag att atomen i mitten av enhetscellen har formfaktorn f_m och de andra f_h. Beräkna strukturfaktorn och ange värdet uttryckt i formfaktorerna. Antag att f_i är proportionell mot atomnumret Z, dvs $f_i = CZ_i$ där C är en konstant. (2p)

Uppgift 3

I ett LEED (Low Energy Electron Diffraction) experiment undersöks en nickelkristall. Elektroner med energin 40 eV träffar en (110)-yta under vinkelrätt infall. För vilka vinklar fås diffraktion? Ange vinklarna relativt ytans normal. Ange också hur många strålar det blir för varje vinkel. (4p)

Uppgift 4.
En intrinsisk två-dimensionell halvledare, med ett simpelt kubisk gitter, har lednings- och valensband som kan beskrivas med relationerna

$$E_{\text{ledning}}(\mathbf{k}) = -\frac{E_0}{4}\cos(k_x a) - \frac{E_0}{2}\cos(k_y a) + 2E_0 \quad (1)$$

$$E_{\text{valens}}(\mathbf{k}) = \frac{E_0}{4}\cos(k_x a) + \frac{E_0}{2}\cos(k_y a)\ . \quad (2)$$

Här är a gitterkonstanten, $E_0 > 0$ är en konstant med energi-enheter, och $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$. Nollpunkten för energin $E(\mathbf{k})$ är här arbiträrt valt.

(a) Identifiera var i $\mathbf{k}$-planet det minsta värdet för bandgapet uppstår och beräkna bandgapsenergin (i enheter av E_0). (1p)

(b) Bandstrukturen är två-dimensionell, men vi ska i denna delfråga fokusera på en linje genom $\mathbf{k}$-planet som har $k_y = 0$. Rita bandstrukturen längs denna linje i första Brillouin-zonen. Rita in värden på energi- och k_x-axeln korrekt och tydligt (i enheter satt ihop av relevanta konstanter från ovan) och se till att få kurvornas utseende kvalitativt korrekt. Lägg in kemiska potentialen i figuren med kvalitativt korrekt energi, motivera i ord. (1p)

(c) Ange grupphastighet för ledningselektronerna i följande punkter, motivera dina svar med beräkningar/tydlig skiss: $\mathbf{k} = (\pi/a, 0)$, $\mathbf{k} = (0, 0)$, och $\mathbf{k} = (\pi/(2a), 0)$.
OBS: Om du vill, får du ignorera hastighetens k_y-komponent och basera dina svar på kurvan i fråga (b), utan avdrag av poäng. (1p)

(d) Beräkna den inverse effektive hålmassan (en tensor!) i punkten $\mathbf{k} = (0, 0)$. (1p)

Uppgift 5.
Koppar (Cu) kan beskrivas med fria-elektron-gas-modellen, med den effektive massan $m_e^* \approx m_e$, där m_e är elektronens massa.

(a) Beräkna en fri elektrons termiska hastighet v_t vid rumstemperatur. (0.5p)

(b) Densiteten (masstätheten) hos Cu är 8,95 g/cm^3 vid rumstemperatur. Beräkna ledningselektronernas täthet n. (0.5p)

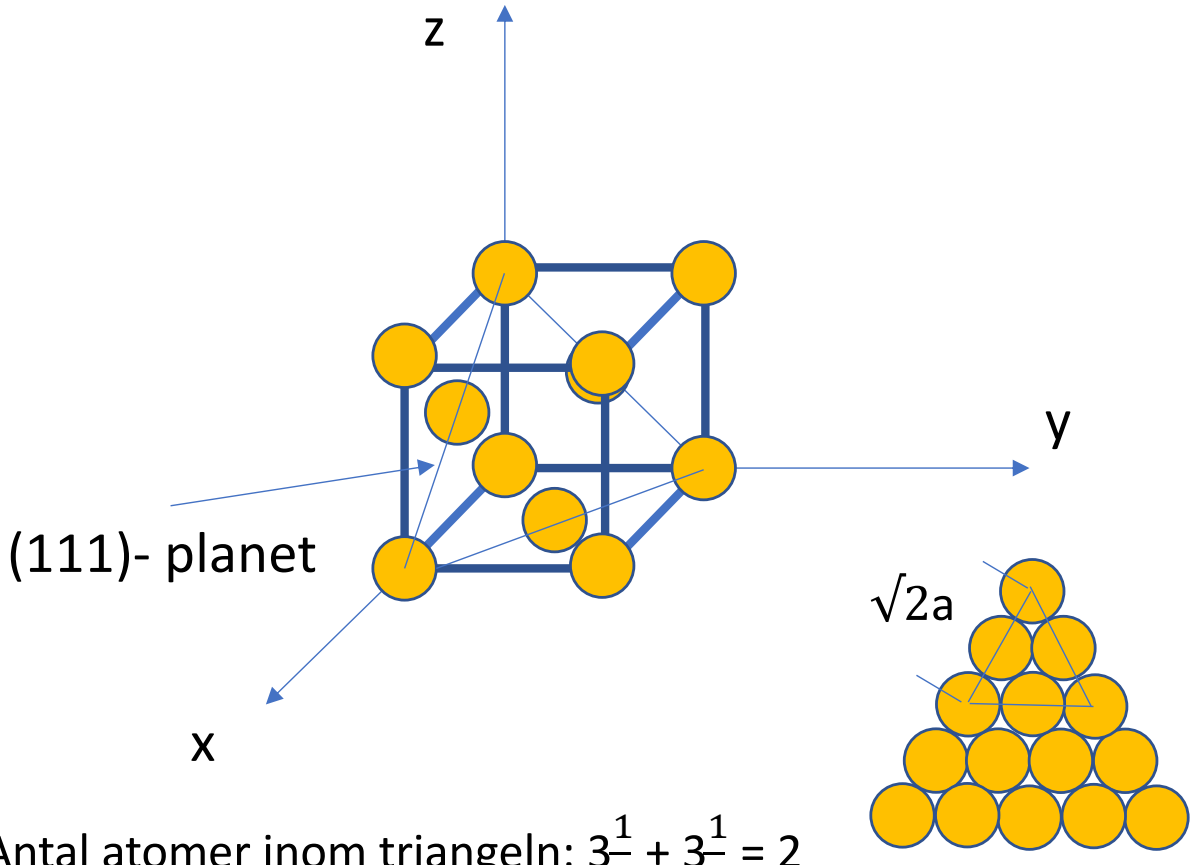
(c) Beräkna fermienergin E_F och den motsvarande fermihastigheten v_F för Cu. (1p)

(d) Ett elektrisk fält på 1 V/m läggs på materialet. Estimera relaxationstiden τ enligt Drudemodellen, utifrån elektrontätheten beräknat i fråga (b). Beräkna ledningselektronernas genomsnittliga drifthastighet v. Cu har elektrisk resistivitet $1,55 \cdot 10^{-8}$ Ω m vid rumstemperatur. (1p)

(e) Diskutera i hela meningar de fysikaliska orsakerna till skillnaderna på hastigheterna v_t, v_F och v. (1p)

Uppgift 1a

{111}-planen är de tätpackade planen i FCC.

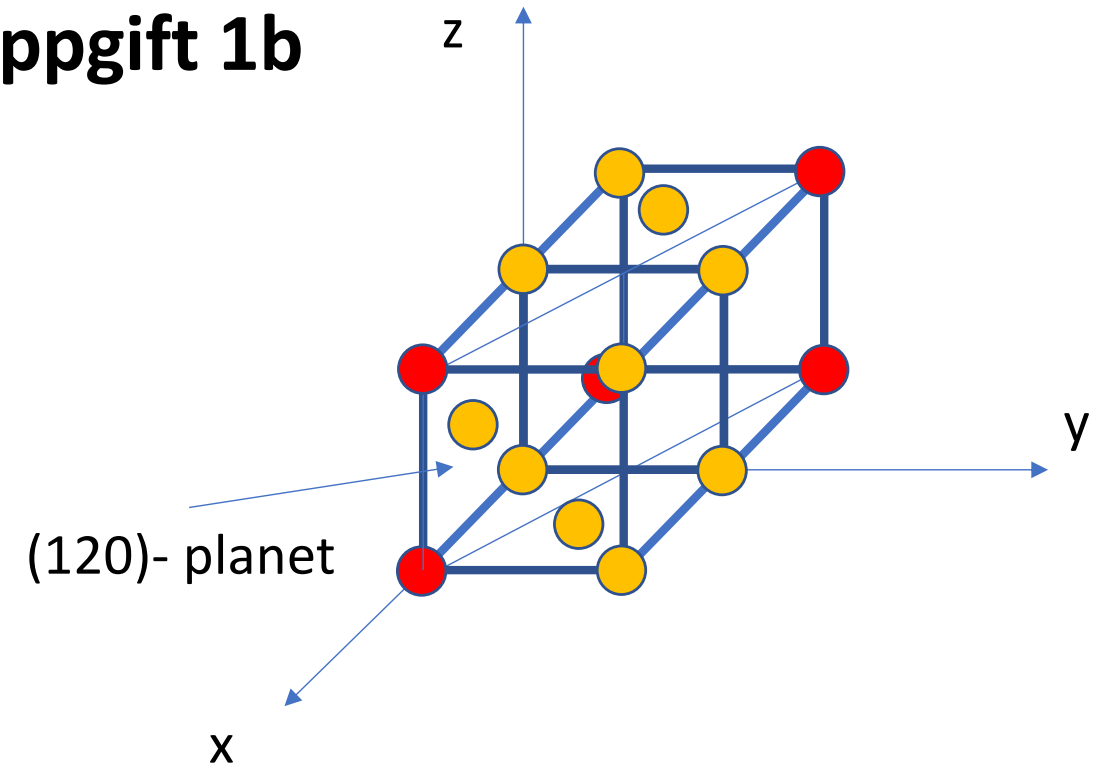


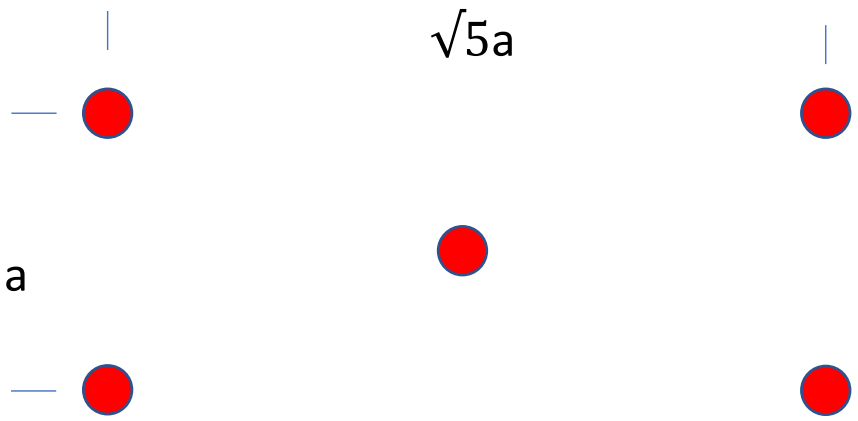
Antal atomer inom triangeln: $3\frac{1}{6} + 3\frac{1}{2} = 2$

Triangelns area: $\frac{1}{2}\sqrt{2}\ a\ a = \sqrt{2}\ a^2$

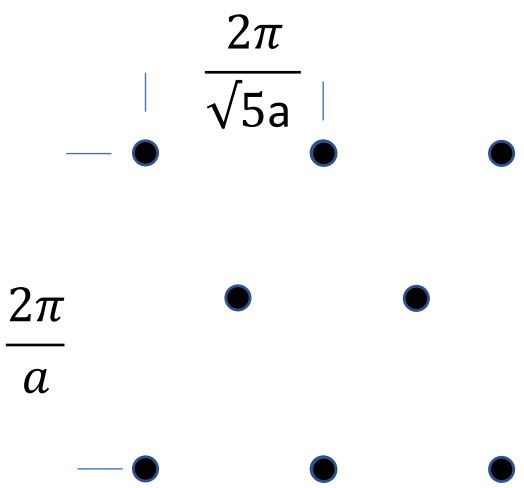
Atomdensiteten: $2/(\sqrt{2}\ a^2) = 8.50\ 10^{18}\ m^2$

Uppgift 1b



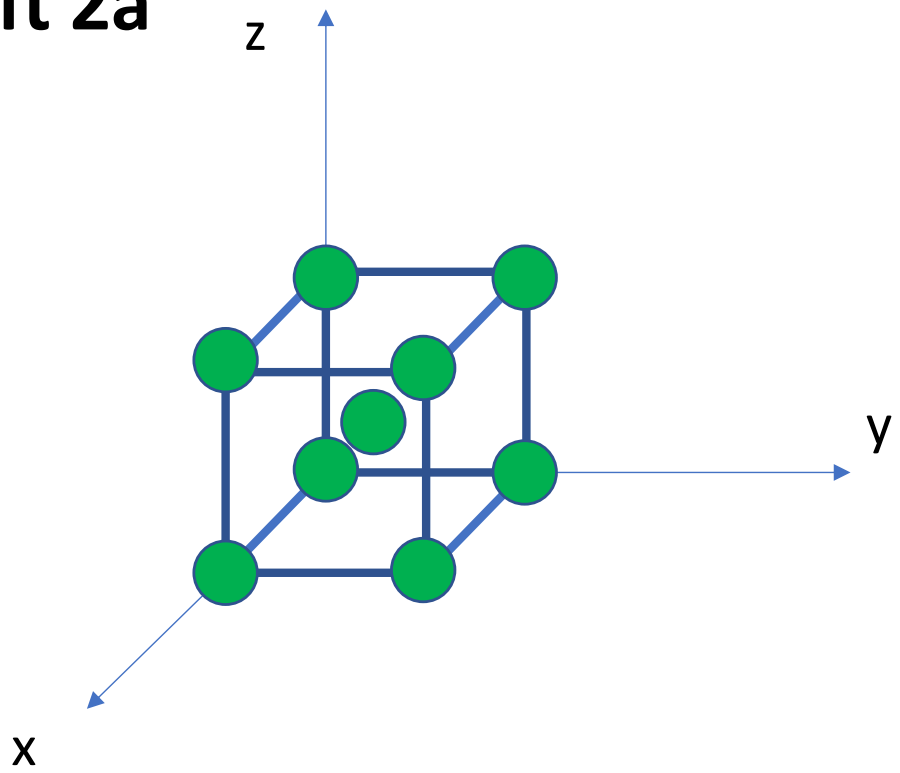


Reella rummet



Reciproka rummet

Uppgift 2a



Strukturfaktorn S_{hkl} för Mo:
BCC med Mo i (0,0,0) och (½, ½, ½)

$$S_{hkl} = \sum_{j=1}^{2} f_j \, e^{-i\boldsymbol{\pi G}\, \boldsymbol{r}_j} = f_{Mo} + f_{Mo} e^{-i\pi(v_1+v_2+v_3)} = \begin{cases} 2f_{Mo} \text{ om } h + k + l \text{ jämnt tal} \\ 0 \text{ om } h + k + l \text{ udda tal} \end{cases}$$

Uppgift 2b

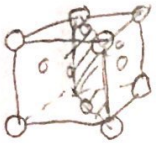
Strukturfaktorn S_{hkl} för
BCC med f_h för atomen i (0,0,0) och f_m för atomen i (½, ½, ½)

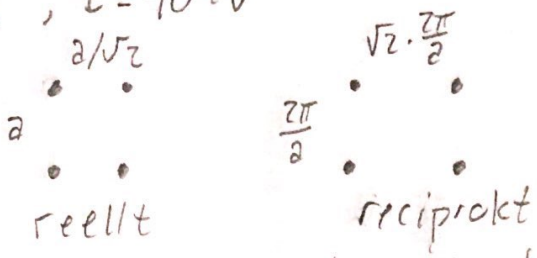
$$S_{hkl} = \sum_{j=1}^{2} f_j \, e^{-i\boldsymbol{\pi G}\, \boldsymbol{r}_j} = CZ_h + CZ_m e^{-i\pi(v_1+v_2+v_3)} = \begin{cases} CZ_h + CZ_m \text{ om } h + k + l \text{ jämnt tal} \\ CZ_h - CZ_m \text{ om } h + k + l \text{ udda tal} \end{cases}$$

③ LEED → låg energi → bara interaktion med ytan → 2D

Ni: fcc, $a = 3{,}52$ Å, $E = 40$ eV

(110)





Vi kan införa ett nytt koordinatsystem med reciproka vektorer

$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x} = 1{,}78\ \text{Å}^{-1}\hat{x}$

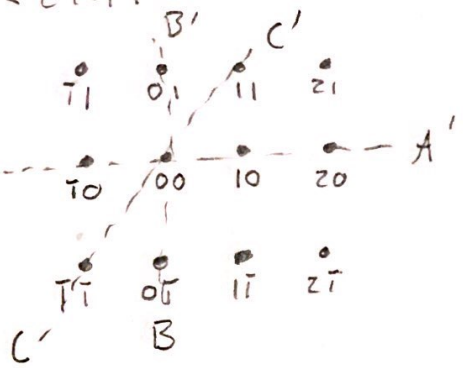
$\vec{b}_2 = \sqrt{2}\cdot\frac{2\pi}{a}\hat{y} = 2{,}52\ \text{Å}^{-1}\hat{y}$

$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{h}\sqrt{2mE} = \frac{2\pi}{6{,}626\cdot10^{-34}}\cdot\left(2\cdot 9{,}1\cdot10^{-31}\cdot 40\ 1{,}6\cdot10^{-19}\right)^{1/2} = 3{,}24\ \text{Å}^{-1}$

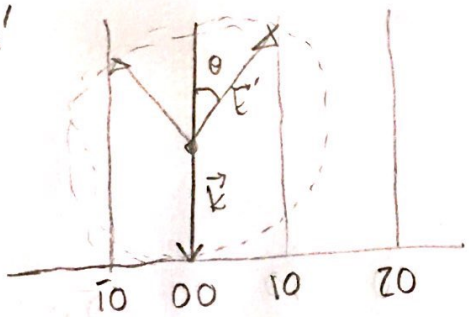
Vi ser att $k > |\vec{b}_1|$ och $k > |\vec{b}_2|$, men $k < 2|\vec{b}_1|$ och $k < 2|\vec{b}_2|$.

$|q_{11}| = \sqrt{b_1^2 + b_2^2} = 3{,}09 < k$

→ vi får alltså diffraktion från $11, \bar{1}1, \bar{1}\bar{1}, 1\bar{1}$



A-A'



$\theta_{10} = \theta_{\bar{1}0} = \arcsin\frac{|10|}{k} = \arcsin\frac{1{,}78}{3{,}24} = 33{,}3°$

På samma sätt för BB'

$\theta_{01} = \theta_{0\bar{1}} = \arcsin\frac{|01|}{k} = \arcsin\frac{2{,}52}{3{,}24} = 51{,}1°$

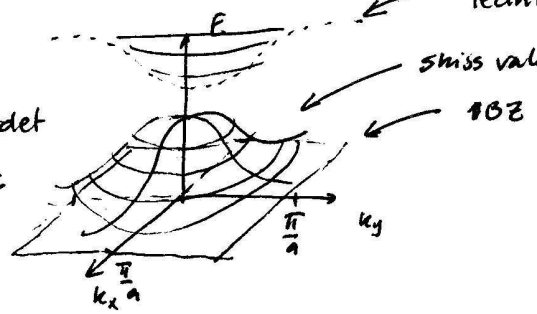
På samma sätt för CC'

$\theta_{11} = \theta_{\bar{1}1} = \theta_{\bar{1}\bar{1}} = \theta_{1\bar{1}} = \arcsin\frac{|11|}{k} = \arcsin\frac{3{,}09}{3{,}24} = 72{,}2°$

Svar: Två strålar med $\theta = 33{,}3°$
Två strålar med $\theta = 51{,}1°$
Fyra strålar med $\theta = 72{,}2°$

Svar skiss

Uppgift 4



a) Minsta värdet för bandgap:

Ledningsband har minimum i $\vec{k} = (0,0)$

M.a.o., minsta energiskillnad ledningsband – valensband är i $\underline{\vec{k} = 0}$.

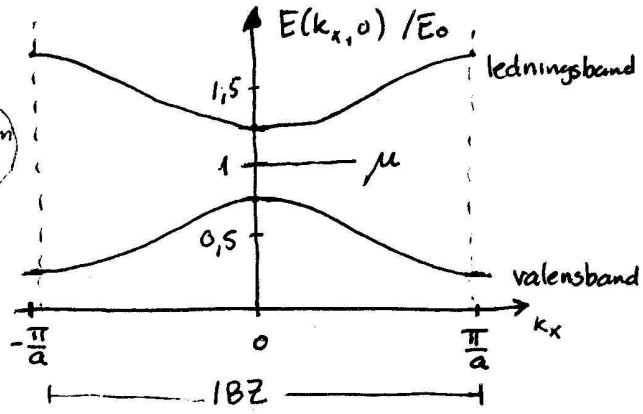
$$E_{led.}(\vec{k}=\vec{0}) = -\frac{E_0}{4} - \frac{E_0}{2} + 2E_0 = \frac{5}{4}E_0$$

$$E_{val.}(\vec{k}=0) = \frac{E_0}{4} + \frac{E_0}{2} = \frac{3}{4}E_0$$

$$E_{gap} = E_{led}(\vec{k}=0) - E_{val}(\vec{k}=0) = \frac{5}{4}E_0 - \frac{3}{4}E_0 = \underline{0{,}5\,E_0}$$

b)

snitt genom $k_y = 0$



$$E_{led.}(k_x,0) = -\frac{E_0}{4}\cos(k_x a) + 1{,}5\,E_0$$

$$E_{val.}(k_x,0) = \frac{E_0}{4}\cos(k_x a) + 0{,}5\,E_0$$

Kemiska potentialen mitt i bandgapet då de två banden har samma andra-derivat $\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\right)$ i $k_x = 0$, bortsett från tecknet!

dvs $\mu \approx E_0$

c) Grupphastighet i ledningsband

- $\vec{k} = (0,0)$ är minimum (även i 2D), då är tangenten noll, då även grupphastigheten $\vec{v}_g = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E$ $\left(\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk_x}\text{ i 1D}\right)$
- $\vec{k} = (\frac{\pi}{a}, 0)$ är maximum i k_x-riktningen (sadelpunkt i 2D) och tangenten i k_x-riktningen är noll, dvs grupphastighetens komponent k_x-riktningen är noll. [2D: sadelpunkt, dvs $\nabla_k E = 0$, $\vec{v}_g = 0$]
- $\vec{k} = (\frac{1}{2}\frac{\pi}{a}, 0)$. Tangent i k_x-riktning ej noll, $\vec{v}_g$ ej noll.

$$\left.\frac{\partial E_{led}(k_x,k_y)}{\partial k_x}\right|_{k_x=\frac{1}{2}\frac{\pi}{a}} = \frac{E_0 a}{4}\sin(k_x a)\Big|_{k_x=\frac{\pi}{2a}} = \frac{E_0 a}{4}$$

$$\left.\frac{\partial E_{led}(k_x,k_y)}{\partial k_y}\right|_{k_y=0} = \frac{E_0 a}{2}\sin(k_y a)\Big|_{k_y=0} = 0$$

$$\vec{v}_g = \frac{1}{\hbar}\begin{pmatrix} E_0 a/4 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(räcker att ange k_x-komponenten)

Uppgift 4 fortsatt :

d) Inverse hålmassan i $\vec{k} = (0,0)$.

OBS: hål, dvs byter tecken jämfört med häl!

$$\left(\frac{1}{m_h^*}\right)_{ij} = -\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E_{val}}{\partial k_i \partial k_j} \quad , \; i,j = x,y$$

$$\left.\frac{\partial^2 E_{val}}{\partial k_x^2}\right|_{k_x=0} = -\frac{E_0}{4}a^2\cos(k_x a) = -\frac{E_0}{4}a^2$$

$$\left.\frac{\partial^2 E_{val}}{\partial k_y^2}\right|_{k_y=0} = -\frac{E_0}{2}a^2\cos(k_y a) = -\frac{E_0}{2}a^2$$

$$\frac{\partial^2 E_{val}}{\partial k_x \partial k_y} = 0$$

$$\underline{\underline{\frac{1}{m_h^*}}} = \frac{1}{\hbar^2}E_0^2 a^2 \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

tensor, matris

Uppgift 5

a) Fri elektrons termiska hastighet vid rumstemperatur, $T \approx 300\,K$

$$\frac{1}{2} m_e v_t^2 = \frac{3}{2} k_B T$$

dvs

$$v_t = \sqrt{3 \frac{k_B T}{m_e}} = \sqrt{3 \frac{1{,}38 \cdot 10^{-23}\,J\,K^{-1}\,300\,K}{9{,}11 \cdot 10^{-31}\,kg}} \approx \underline{1{,}2 \cdot 10^5\,m/s}$$

(1,1676)

b) Masstäthet $\eta = 8{,}95\,g/cm^3$, atommassa $M = 63{,}546\,u$, (Phys. Handb.)

$1\,u = 1{,}66 \cdot 10^{-27}\,kg$. Cu har en valenselektron

Elektrontäthet $n = \frac{\eta}{M} \cdot 1 = \frac{8{,}95 \cdot 10^{-3+6}\,kg\,m^{-3}}{63{,}546 \cdot 1{,}66 \cdot 10^{-27}\,kg} = \underline{8{,}48 \cdot 10^{28}\,m^{-3}}$

antal valenselektroner

c) Fermienergin i fria-elektrongas-modellen

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n)^{2/3} = \frac{(1{,}05 \cdot 10^{-34})^2\,J^2 s^2}{2 \cdot 9{,}11 \cdot 10^{-31}\,kg} (3 \cdot \pi^2 \cdot 8{,}48 \cdot 10^{28}\,m^{-3})^{2/3}$$

$$= 1{,}1 \cdot 10^{-18}\,J = \underline{7{,}0\,eV}$$

(1,118)

Fermihastighet v_F: $E_F = \frac{1}{2} m v_F^2$

$$v_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m_e}} = \underline{1{,}6 \cdot 10^6\,\frac{m}{s}}$$

d) Resistivity $\rho = m_e / (n e^2 \tau)$, τ = relaxationstid

dvs

$$\tau = \frac{m_e}{n e^2 \rho} = \frac{9{,}1 \cdot 10^{-31}\,kg}{8{,}48 \cdot 10^{28}\,m^{-3} (1{,}6 \cdot 10^{-19})^2\,C^2\,1{,}55 \cdot 10^{-8}\,\Omega m}$$

$$= \underline{2{,}7 \cdot 10^{-14}\,s}$$

Drifthastighet $|v| = \frac{eE\tau}{m_e}$ E elektriska fältet, $E = 1\,V/m$

$$= \frac{1{,}6 \cdot 10^{-19}\,C\;1\,Vm^{-1}\;2{,}7 \cdot 10^{-14}\,s}{9{,}1 \cdot 10^{-31}\,kg} = \underline{4{,}7 \cdot 10^{-3}\,m/s}$$

Uppgift 5 fortsatt

e) Drifthastighet $V = 4{,}7 \cdot 10^{-3}$ m/s

termisk hastighet $V_t = 1{,}2 \cdot 10^{5}$ m/s

fermihastighet $V_F = 1{,}6 \cdot 10^{6}$ m/s

Drifthastigheten är den hastighet elektronerna får genom det påtryckta elektriska fältet. Denna är försumbar jämfört med V_t och V_F. Den termiska hastigheten är den approximative medelhastigheten i en gas av elektroner, men i fria-elektron-gas-modellen ökar endast elektronerna nära Fermienergin sin kinetiska energi, och den är då betydligt större (faktor ~10) än den klassiska medelhastighet, som är medel över alla elektroner.