Tentamen i Fasta tillståndets fysik (FFY012/FYP330)

Tid: 2021-08-19, kl. 14:00-18:00.

Examinator: Eva Olsson.

Lärare vid tentamen:

Frågorna 1 och 2, Eva Olsson

Fråga 3, Mattias Thuvander

Fråga 4 och 5, Elsebeth Schröder

Bedömning: Max 100p. Betyg Chalmers: 3- 50p, 4- 70p, 5- 85p. Betyg GU: G- 50p, VG- 75p.

Viktig information:

Skriv tydligt och motivera dina svar.

Spara alla papper med lösningar och även pdf-filen som Du skickar in.

Inför inlämningen:

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

- Se till att skriva in alla värden du använder i dina beräkningar, att endast skriva formel = numeriskt svar godtas inte.
- 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/FYP330_DittNamn.pdf.
- Skicka in dina lösningar genom att ladda upp pdf-filen via Canvas innan tentamens sluttid.
- Inlämningen skall vara klar 18:00. Med tanke på att uppladdningen kan ta lite längre så kommer Canvas-portalen 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 18:30. Då stänger Canvas och det går inte att lämna in senare.

I och med att du laddar upp dina lösningar till tentan intygar du att du gjort dessa lösningar själv utan att ta hjälp av någon annan person. Detta innebär att samarbete inte är tillåtet. Kontroll av plagiering kommer att utföras. Du får inte heller visa Dina lösningar för någon annan innan kl. 21:00 den 19e augusti 2021.

Uppgift 1

(Observera att uppgifterna kan lösas utan att de tidigare deluppgifterna har lösts.)
Antag att Du har en BCC-struktur med kantlängden a=3.15 Å. Basen består av atomen A i (0,0,0).

a) Rita enhetscellen med markerade koordinataxlar x, y och z samt rita in atomerna. Markera (102)- och (123)-planen.
(5p)

b) Rita det reciproka gittret. Markera enhetscellen och koordinataxlar x, y och z. Ange kantlängden på enhetscellen uttryckt i a. Skriv Miller-index för 8 gitterpunkter som är närmast (000) i yz-planet **(10p)**

c) Beräkna packningstäheten, uttryckt i atomer per nm^2, för (100)- och (110)-planet.
(5p)

Uppgift 2

(Observera att uppgifterna kan lösas utan att de tidigare deluppgifterna har lösts.)
Antag att Du tar upp ett diffraktogram från ett material som består av en FCC-struktur med basen B i (0,0,0). Kantlängden är 4.08 Å och Du använder röntgenstrålning med våglängden 1.54 Å.

a) Beräkna Braggvinklarna. Ange alla Braggvinklar upp till 50° där Du erhåller intensitet. **(10p)**

b) Antag att Du har en enkristall av FCC-strukturen. Du studerar den med röntgenstrålning (våglängd 1.81 Å) och elektronstrålning (våglängd 2.51 pm). Strålningen faller in längs [0-1-2] i båda fallen. Konstruera Ewald sfären för båda fallen och rita cirkeln där Ewald sfären skär yz-planet. Vilket villkor skall vara uppfyllt för diffraktion? För vilka (hkl) i yz-planet erhålls diffraktion? **(10p)**

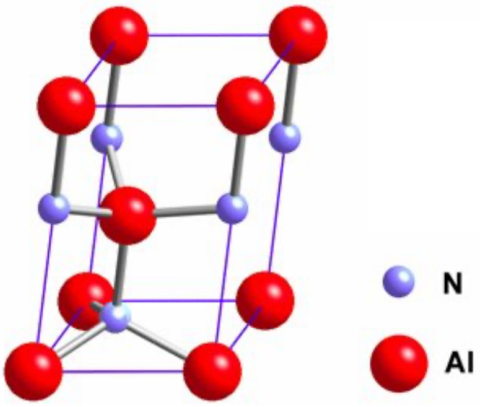
Uppgift 3

a) Antag att du har en en-dimensionell kedja av 101 stycken aluminiumatomer som sitter på avståndet 2,5 Å från varandra. Atomerna antas förbundna med varandra med en fjäder med fjäderkonstant på 25 N/m. Vad är den största respektive minsta fononenergin, uttryckt i eV?
(9 p)

b) Varför kan inte fononenergin vara godtyckligt liten? **(3 p)**

c) Antag att du har en stor bit aluminium, struktur fcc med gitterparameter 4,05 Å. Hur lång är den längsta vågvektor du kan ha i första Brillouinzon? **(4 p)**

d) Den primitiva enhetscellen för en variant av aluminiumnitrid (AlN) visas i figur 1. Utgående från denna information, vad kan du säga om dispersionsrelationen för gittersvängningar för denna variant av AlN? **(4 p)**



Figur 1.

Uppgift 4

Halvledare. *För fullt poäng krävs egna beräkningar och motiveringar, att använda externa tabellvärden för material godtas inte i denna uppgift.*

a) Bandgapet för tre halvledarmaterial är:
Si: $1{,}8 \cdot 10^{-19}$ J, Ge: $1{,}1 \cdot 10^{-19}$ J, CdS: $3{,}9 \cdot 10^{-19}$ J.
Vilket/vilka av ovanstående material kan, i princip, fungera som simpel fotodiod (solcell) över **hela** den synliga delen av det optiska spektret?

(5p)

b) Ett antal halvledare dopas. Gör en egen bedömning av dopningen: n-typ, p-typ, eller inget?

(i) germanium dopas med arsenik
(ii) kisel dopas med germanium
(iii) germanium dopas med indium
(iv) indiumantimonid (InSb) dopas med kisel i enstaka av antimons atompositioner
(v) galliumnitrid (GaN) dopas med magnesium i enstaka av galliums atompositioner

Glöm inte att motivera dina svar!

(5p)

c) För odopad germanium är elektron- och hål effektiva massorna $m_e^* = 0{,}12\ m_e$ och $m_h^* = 0{,}28\ m_e$, och den motsvarande mobiliteten $\mu_e = 3900$ cm^2/Vs och $\mu_h = 1900$ cm^2/Vs. Övrig information som behövs hittas i texten (inte i svaren) till delfrågorna ovan.
Beräkna elektron- och håltätheterna samt den kemiska potentialen vid rumstemperatur.
Beräkna odopad germaniums elektriska resistivitet.

(10p)

Uppgift 5

a) I ett en-dimensionellt material beskrivs ett av energibanden på formen

$$E(k) = -E_1 \cos(kb) + E_0$$

där $b = 3$ Å är gitterkonstanten, $E_1 = 3$ eV och $E_0 = 4$ eV. Ferminivån ligger i noll, alltså under bandets botten.
Beräkna effektiva elektronmassan i bandet i $k = 0$, i enheter av elektronmassan (m_e). Hur stor del av tillstånden i bandet är fyllda med elektroner vid temperaturen 0 K?

(5p)

b) I modellen i fråga a) läggs ett statiskt elektriskt fält $\mathcal{E}$ på systemet, och en elektron antas att - vid tiden när fältet läggs på - befinna sig i tillståndet $k = 0$. Med vilken (vinkel-)frekvens svänger elektronen? Svara med ingående parametrar, inte numeriskt. Frågan b) kan räknas utan att ha svar på frågan a). Tips: börja med att ta fram ett uttryck för $k(t)$ där t är tiden.

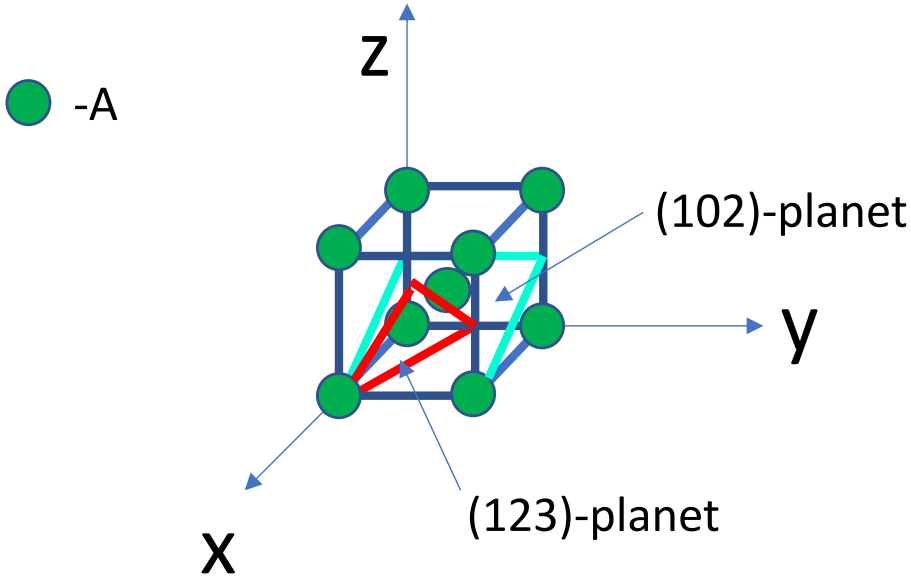
(5p)

c) Ge ett exempel på en vågfunktion för elektronen som fungerar i den potential som ger upphov till energi-bandet i fråga a). Vilka villkor måste vågfunktionen uppfylla (bortse från normering)? Du har relativ stor frihet i val av vågfunktion, men se till att den fungerar, och visa detta. För att besvara denna fråga behövs inga svar från frågorna a) och b).

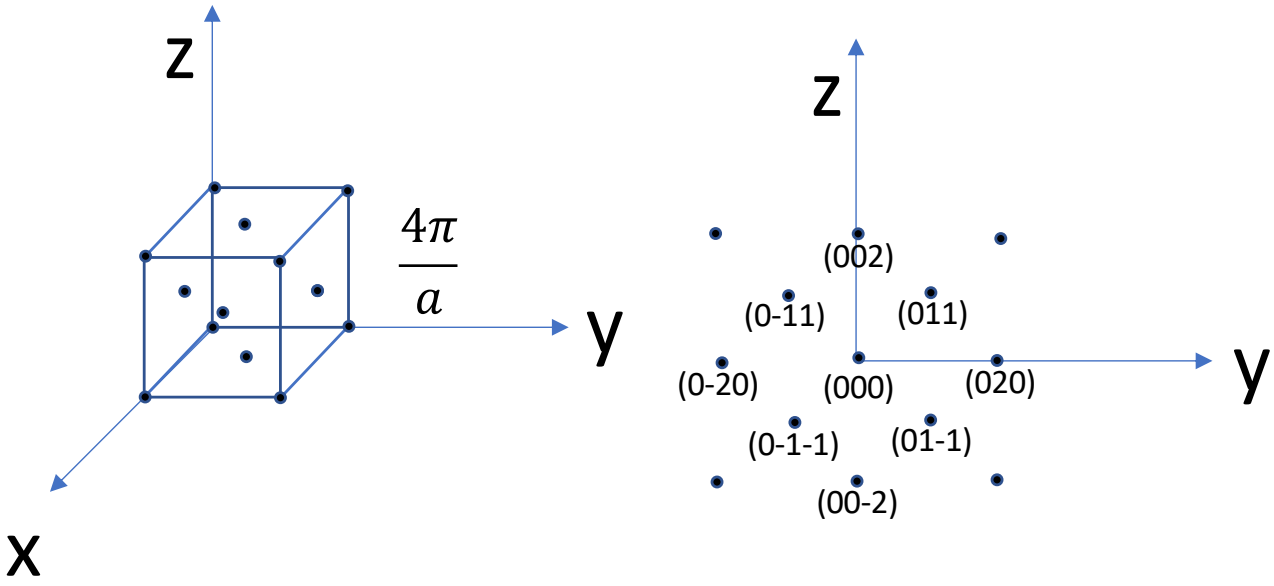
(5p)

d) Ett annat material kan beskrivas vid den fria elektrongasen (i tre dimensioner), med Fermivektorn $k_F = 1{,}4 \cdot 10^{10}$ m^{-1}.
Beräkna: elektrontätheten, Fermienergin, och Fermitemperaturen.
Rita också i ett diagram för en av dimensionerna tillståndsenergin som funktion av den valde riktningen i k-rummet. Se till att få med numeriska värden och enheter i diagrammet, och markera vilka tillstånd som är fyllda vid temperaturen 0 K (t.ex. markerat med avvikande färg). **(5p)**

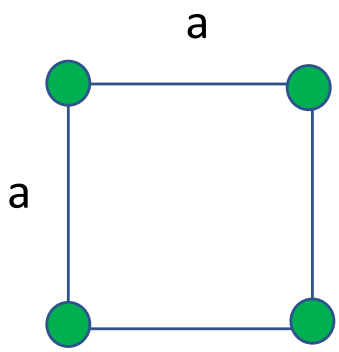
Uppgift 1a

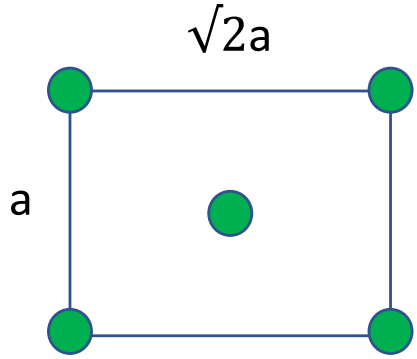


Uppgift 1b



Uppgift 1c





Area för plan: $a^2 = (0.315)^2$ nm^2
Antal atomer: 1
Packningstäthet: $\frac{Antal\ atomer}{Area\ för\ plan}$ = 10.1 nm^{-2}

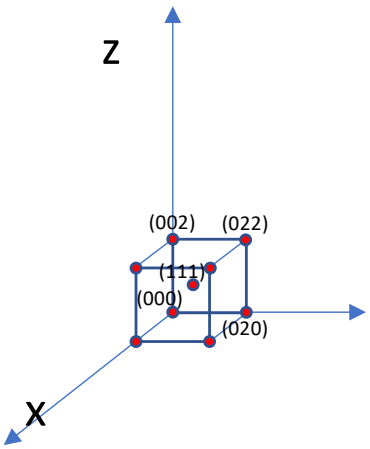
Area för plan: $a\sqrt{2}a$
An tal atomer: 2
Packningstäthet: $\frac{Antal\ atomer}{Area\ för\ plan}$ = 14.3 nm^{-2}

Uppgift 2a

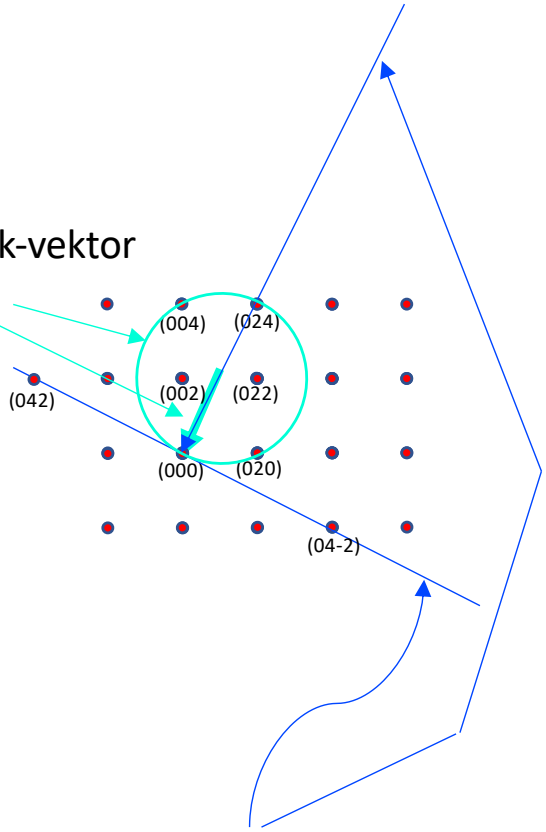
Braggvinklarna ges av Braggs lag $2d_{hkl} \sin\Theta = n\lambda$ där n = 1.
$d_{hkl} = a/ (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$ där a = 4.08 Å .
λ = 1.54 Å enligt uppgiften.
FCC innebär att de hkl där alla antingen är jämna eller udda tal är tillåtna. Detta ger Braggvinklarna

{hkl}	Θ
111	19.1°
200	22.2°
220	32.3°
311	38.8°
222	40.8°
400	49.0°

Uppgift 2b



Ewald sfär och k-vektor
för λ= 1.81 Å

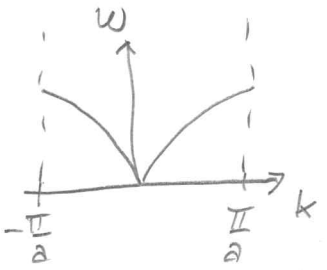


Ewald sfär och k-vektor för λ= 2.51 pm

Diffraktion sker i de riktningar av k´ där
Ewald sfären skär en reciprok gitterpunkt.

För λ= 1.81 Å fås diffraktion för (020), (004) och (024)
För λ= 2.51 pm fås diffraktion för (042), (084), (04-2) och (08-4)

(3) a) $\omega = 2\sqrt{\frac{\gamma}{M}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|$



$\omega_{max} = 2\sqrt{\frac{\gamma}{M}}$

$\gamma = 25\ N/m$

$M = 27u = 27 \cdot 1{,}66 \cdot 10^{-27} =$

$= 4{,}5 \cdot 10^{-26}\ kg$

$E_{max} = \hbar\omega_{max} = 2\hbar\sqrt{\frac{\gamma}{M}} = 2 \cdot 6{,}6 \cdot 10^{-16} \cdot \sqrt{\frac{25}{4{,}5 \cdot 10^{-26}}} =$

$= \underline{31\ meV}$

För E_{min} måste vi ta hänsyn till att k är diskret, så

$|k_{min}| = \frac{2\pi}{L} = \frac{2\pi}{100a} = \frac{\pi}{50a}$

Då blir

$\omega_{min} = 2\sqrt{\frac{\gamma}{M}}\sin\frac{\pi \cdot a}{50a \cdot 2} = 2\sqrt{\frac{\gamma}{M}}\sin\frac{\pi}{100} =$

$= 2\sqrt{\frac{25}{4{,}5 \cdot 10^{-26}}} \cdot \frac{\pi}{100} = 1{,}48 \cdot 10^{12}\ rad/s$

$E_{min} = \hbar\omega_{min} = 6{,}6 \cdot 10^{-16} \cdot 1{,}48 \cdot 10^{12} = \underline{0{,}98\ meV}$

b) Detta beror på att provstorleken inte är oändlig, vilket gör att vi måste använda randvillkor, t.ex. periodiska randvillkor. Detta gör att $e^{ikL} = 1 \rightarrow k = \frac{2\pi}{L}m$, m heltal

c) Se Brillouinzoner i Physics Handbook. För fcc är den längsta vektorn till punkten W.

$|k| = \frac{\pi}{a}\sqrt{2^2+1^2+0^2} = \frac{\sqrt{5}\pi}{a} = \frac{\sqrt{5}\cdot\pi}{4{,}05}\text{Å}^{-1} = 1{,}73\ \text{Å}^{-1}$

d) Primitiva cellen innehåller 2 Al och 2 N. Vi får då 3 akustiska och $3 \cdot 4 - 3 = 9$ optiska grenar.

Uppgift 4

a) Bandgap $\Delta E_{Si} = 1{,}8 \cdot 10^{-19}\,J$ $\Delta E_{Ge} = 1{,}1 \cdot 10^{-19}\,J$ $\Delta E_{CdS} = 3{,}9 \cdot 10^{-19}\,J$

För att fungera som ampel fotocell behöver bandgapet vara mindre än energin för fotonen. Minst energi har rött ljus med våglängd $\lambda \simeq 700\,nm$, vilket motsvarar energin

$$E_\lambda = \hbar\omega = \hbar c \frac{2\pi}{\lambda} = hc \frac{1}{\lambda} = 6.6 \cdot 10^{-34}\,Js \cdot 3{,}00 \cdot 10^{8}\,\frac{m}{s} \cdot \frac{1}{7{,}0 \cdot 10^{-7}\,m}$$

($c = \lambda \frac{\omega}{2\pi}$)

$$= 2{,}8 \cdot 10^{-19}\,J$$

$\Delta E_{Si} < E_\lambda$, $E_{Ge} < E_\lambda$ men ej för CdS:

Si och Ge skulle kunna fungera, inte CdS.

b) Dopade halvledare, n- eller p-typ?

(i) Ge dopas med As. As 5 valenselektroner, Ge 4 valenselektroner.

⇒ överskott av elektroner

⇒ n-dopning

(ii) Si (4 valens) dopas med Ge (4 valens)

⇒ samma antal elektroner i struktur, ingen dopningseffekt.

(iii) Ge (4 valens) dopas med In (3 valens)

⇒ saknas elektroner, p-dopning

(iv) InSb (Sb 5 valens) dopas i Sb-positioner med Si (4 valens)

⇒ saknas elektroner, p-dopning

(v) GaN (Ga 3 valens) dopas i Ga positioner med Mg (2 valens)

⇒ saknas elektroner, p-dopning

c) Odopad Ge. Effektivmassor $m_e^* = 0{,}12\, m_e$ $\mu_e = 3900\ cm^2/Vs$
& mobilitet
$m_h^* = 0{,}28\, m_e$ $\mu_h = 1900\ cm^2/Vs$

För odopad halvledare gäller att elektron- och hålltäthet ges av

$$n = p = 2\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} (m_e^* m_h^*)^{3/4} e^{-E_g/2k_BT}$$

och kemiska potentialen μ

$$\mu = \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right)$$ (med energi = 0 i valensbandets topp)

Konduktiviteten ges av

$$\sigma = e(n\mu_e + p\mu_h) = en(\mu_e + \mu_h)$$

och resistiviteten av den inversa, $\rho = 1/\sigma$.

Från delfråga a) vet vi att $E_g = 1{,}1 \cdot 10^{-19}\,J = 0{,}69\,eV$.

Numeriska svar:

$$n = p = 2 \cdot \left(\frac{0{,}026\,eV}{2\pi\ 6{,}58\cdot10^{-16}eVs\ 1{,}055\cdot10^{-34}Js}\right)^{3/2} \times (0{,}12\cdot0{,}28)^{3/4}(9{,}11\cdot10^{-31}kg)^{3/2}\, e^{-\frac{0{,}69\,eV}{2\cdot0{,}026\,eV}}$$

$$= \underline{3{,}4\cdot10^{18}\ m^{-3}}$$

"Trick": $k_BT \approx 26\,meV$ vid rumstemperatur, ta ena $\hbar$ i enhet eVs, (tar ut eV från k_BT), ta andra i Js (ger oss de mer hanterliga SI-enheterna i övriga räkningen)

Check av enheter: $\left(\frac{eV}{eVs\,Js}\right)^{3/2} kg^{3/2} = \left(\frac{kg}{kg\,m^2 s^{-2} s^2}\right)^{3/2} = \frac{1}{m^3}$

$$\mu = \frac{0{,}69\,eV}{2} + \underbrace{\frac{3}{4}\,0{,}026\,eV \ln\left(\frac{0{,}28}{0{,}12}\right)}_{\text{OBS: liten!}} = \underline{0{,}36\,eV}$$

$$\sigma = 1.602\cdot10^{-19}C \cdot 3{,}4\cdot10^{18}m^{-3}\,(3900+1900)\cdot10^{-4}m^2/Vs$$

$$= 0.32\ \Omega^{-1}m^{-1}$$

enheter: $C m^{-3} m^2 V^{-1} s^{-1} = \frac{As}{Vms} = \frac{1}{\Omega m}$

$C = As$ $\Omega = V/A$

$$\rho = \underline{3{,}1\ \Omega m}$$

Uppgift 5 Band $E(k) = -E_1 \cos(kb) + E_0$ $E_1 = 3V$, $E_0 = 4V$, $b = 3\text{Å}$

a) m_e^*/m_e vid $k=0$?

$$\frac{m_e^*}{m_e} = \frac{\hbar^2}{m_e \frac{d^2E}{dk^2}} = \frac{\hbar^2}{m_e E_1 b^2 \cos(kb)}$$

$$\frac{m_e^*|_{k=0}}{m_e} = \frac{\hbar^2}{m_e E_1 b^2} = \frac{(6.58\cdot10^{-16}\,eVs)(1.055\cdot10^{-34}\,Js)}{3eV\,(3\cdot10^{-10}\,m)^2\,9{,}109\cdot10^{-31}\,kg}$$

$$= \underline{0{,}29}$$

enheter: $\frac{eV\,s\,Js}{eV\,m^2\,kg} = \frac{kg\,m^2 s^{-2} s^2}{m^2\,kg} = 1$

Bandet ligger helt över Ferminivån ε_F ($=0\,eV$), eftersom ε_F definierar elektronernas högsta energi vid $T=0$ så finns inga elektroner i bandet vid $T=0$.

b) Statisk elektrisk fält $\mathcal{E}$ läggs på. Vinkelfrekvens ω för elektronens rörelse?

Vi vet $\hbar \frac{dk}{dt}$ = kraft $= -e\mathcal{E}$, samt för grupphastigheten

$v_g = \frac{1}{\hbar}\frac{dE(k)}{dk}$.

Konkret:
$$\begin{cases} v_g = \frac{1}{\hbar}\frac{dE(k)}{dk} = \frac{1}{\hbar}(-E_1)(-b)\sin(kb) = \frac{E_1 b}{\hbar}\sin(kb) \\ k(t) = -\frac{e\mathcal{E}}{\hbar}t + \text{konstant} \end{cases}$$

$$v_g = \frac{E_1 b}{\hbar}\sin\left(-\frac{e\mathcal{E}}{\hbar}tb + \text{konstant}\right) = \frac{E_1 b}{\hbar}\sin(-\omega t + \text{konst})$$

Rörelse med harmonisk hastighet, dvs

$$\omega = \frac{e\mathcal{E}}{\hbar} b$$

(kan också gå via uttryck för acceleration och m_e^*)

c) Vågfunktion i potentialen i a), dvs periodisk m period $b = 3\,\text{Å}$.

- Ett villkor är att vågfunktionen är en Bloch vågfunktion, dvs kan skrivas

$$\psi_k(x) = e^{ikx}\, u_k(x) \qquad (1D)$$

där

$$u_k(x+b) = u_k(x), \qquad b = 3\,\text{Å}$$

- Vågfunktionen ska vara normerad (elektronen finns någonstans i universum), men inte möjligt här med potential som är periodisk från $x \to -\infty$ till $x \to \infty$.

Förslag: Låt $k = \frac{2\pi}{b}$ i Blochfunktionen och välj $u_k(x) = \sin(\frac{2\pi}{b}x)$.

Då fås

$$\psi_k(x) = e^{i\frac{2\pi}{b}x} \sin(\tfrac{2\pi}{b}x).$$

$u_k(x+b) = u_k(x)$?

$$u_k(x+b) = \sin(\tfrac{2\pi}{b}(x+b)) = \sin(\tfrac{2\pi}{b}x + 2\pi) = u_x(x)$$

ok!

Hur ser det ut med normering?

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^*(x)\, \psi_k(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2\pi}{b}x}\, e^{i\frac{2\pi}{b}x}\, u_k^2(x)\, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2(\tfrac{2\pi}{b}x)\, dx$$

$$\int_0^b \sin^2(\tfrac{2\pi}{b}x)\, dx = \pi$$ dvs kan ej normeras.

d) 3D material, fria elektrongasen, $k_F = 1{,}4 \cdot 10^{10}\ m^{-1}$.

Elektrontäthet

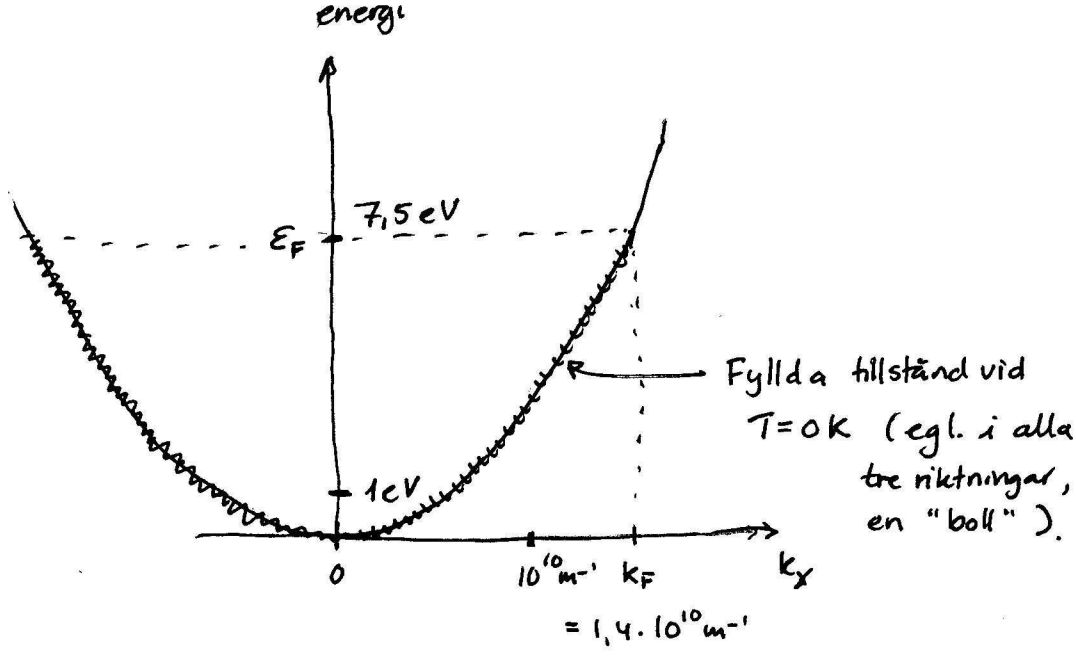
$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{(1{,}4 \cdot 10^{10}\ m^{-1})^3}{3\pi^2} = \underline{9{,}27 \cdot 10^{28}\ m^{-3}}$$

Fermienergin

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2 m_e} = \frac{(1{,}055 \cdot 10^{-34}\ Js)^2 (1{,}4 \cdot 10^{10}\ m^{-1})^2}{2 \cdot 9{,}11 \cdot 10^{-31}\ kg} = \underline{1{,}20 \cdot 10^{-18}\ J}$$

$$= \underline{7{,}5\ eV}$$

enheter: $\frac{J^2 s^2 m^{-2}}{kg} = J \quad \frac{kg\, m^2 s^{-2} s^2 m^{-2}}{kg} = J$

Fermitemperatur

$$T_F = \varepsilon_F / k_B = \frac{1{,}20 \cdot 10^{-18}\ J}{1{,}38 \cdot 10^{-23}\ J K^{-1}} = \underline{8{,}7 \cdot 10^4\ K}$$