**Tentamen i Fasta tillståndets fysik (FFY012/FYP330)**

**Tid:** em, 2022-03-17

**Examinator:** Eva Olsson (3247)

**Lärare vid tentamen:**

Frågorna 1 och 2, Eva Olsson (031 772 3247)

Fråga 3, Mattias Thuvander (073 143 3709)

Frågorna 4 och 5, Elsebeth Schröder (031 772 8424)

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

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

# Skriv tydligt och motivera dina svar.

# Lycka till!

## Uppgift 1

Antag att Du har en FCC-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 (111)- och (210)-planen och gör separata skisser av planen med markeringar för atomerna. **(5p)**

b) Rita det reciproka gittret. Markera enhetscellen och koordinataxlar x, y och z. Ange kantlängden på enhetscellen uttryckt i a. Rita xz-planet i det reciproka gittret och markera (hkl) för de 12 punkterna närmast origo. Rita Wigner-Seitz cellen i xz-planet. **(15p)**

*(Observera att uppgifterna kan lösas utan att de tidigare deluppgifterna har lösts.)*

## Uppgift 2

Antag att Du tar upp ett diffraktogram från ett material som består av en enkel kubisk, SC, struktur med en basen som har atomerna Cs i (0,0,0) och Cl i (1/2,1/2,1/2). Kantlängden på enhetscellen är 4.119 Å.

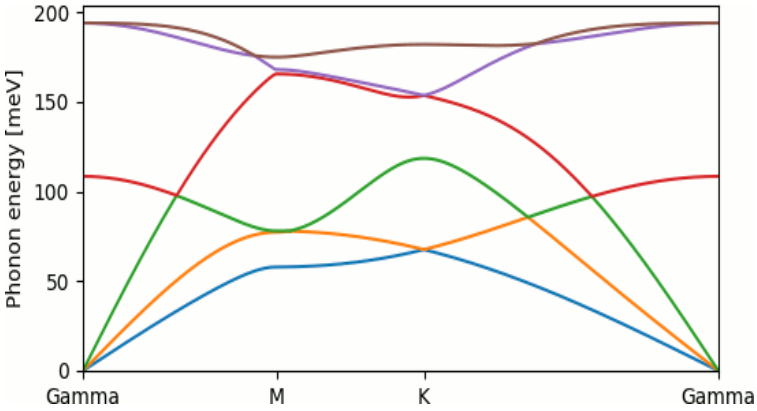
a. Ta fram uttrycket för strukturfaktorn, $S_{hkl}$. Ange villkoren för diffraktion och värden på $S_{hkl}$ för olika hkl. Antag att formfaktorerna är $f_{Cs} = C \cdot 55$ och $f_{Cl} = C \cdot 17$ där C är en konstant. **(10p)**

b. Du studerar materialet med röntgenstrålning med våglängden 1.54 Å och elektronstrålning med våglängden 2.51 pm. Strålningen faller in längs [0-3-1] i båda fallen. Konstruera Ewald sfären för båda fallen och rita cirklarna där Ewald sfären skär yz-planet. Vilket villkor skall vara uppfyllt för diffraktion? För vilka (hkl) i yz-planet erhålls diffraktion för de två strålningarna? **(10p)**

*(Observera att uppgifterna kan lösas utan att de tidigare deluppgifterna har lösts.)*

## Uppgift 3

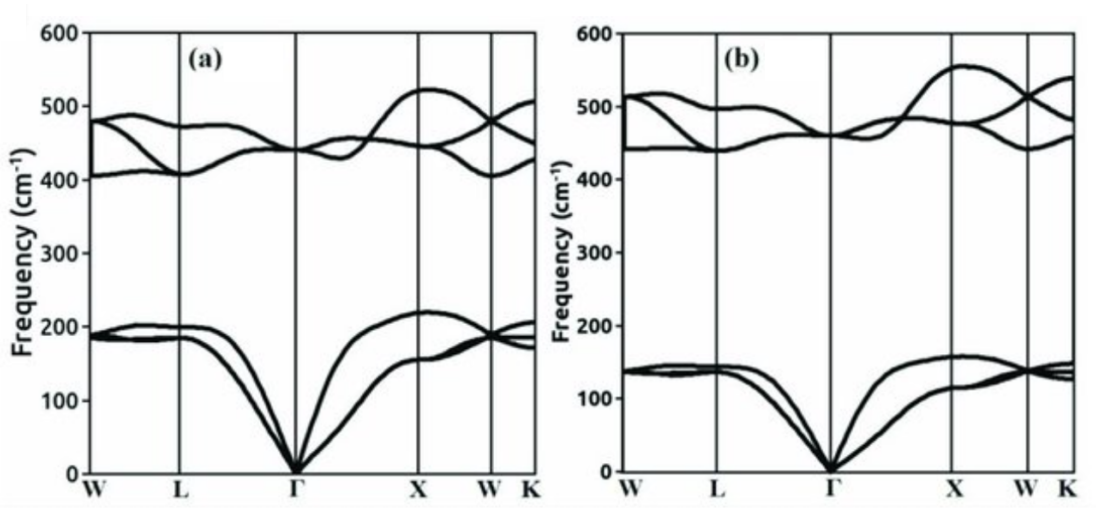
a. Grafen är som bekant ett 2D material som består av kol-atomer i ett hexagonalt mönster (hönsnätsmönster). Nedan visas dispersionsrelationen för gittersvängningar i grafen. Använd diagrammet för att bestämma hur många atomer det finns i den primitiva cellen. Motivera svaret. **(4p)**




b. Rita upp hur grafen ser ut, och rita primitiva gittervektorer. Det kortaste avståndet mellan två kolatomer är 0,142 nm. Beräkna arean av den primitiva enhetscellen. **(6p)**

c. Nedan visas dispersionsrelationer för två olika borider, XB, där X är ett okänt ämne och B är bor. Varför är de optiska grenarna så lika för de två boriderna? **(2p)**

d. Använd modellen för en 1D atomkedja för att försöka bestämma vilka de två okända ämnena X är (alltså XB i diagram a och XB i diagram b). Enheten för frekvens på y-axlarna är $cm^{-1}$. Denna enhet kan omvandlas till frekvens (ej vinkelfrekvens) genom att 1 $cm^{-1}$ motsvarar 0,030 THz. **(8p)**




*(Observera att uppgifterna kan lösas utan att de tidigare deluppgifterna har lösts.)*

## Uppgift 4

a. Isotopen $He^3$ har 2 protoner och en neutron och densiteten 81 kg/$m^3$ vid temperaturen nära 0 K. Den beskrivs med Fermi-Dirac statistik med spinn ½; antag att $He^3$ kan beskrivas inom fria-elektron-modellen (med $He^3$-atomerna i stället för elektroner). Beräkna:
   - Fermi-energin och Fermi-temperaturen
   - Sannolikheten vid temperaturen 3 K att ett tillstånd 1 meV över Fermienergin är besatt

   **(10p)**

b. Beskriv vad som menas när man säger att en supraledare är en ”perfekt diamagnet”, och hur denna ”diamagnetism” uppstår i en supraledare. 2-5 meningar, och rita gärna även en skiss. Vad är ett Cooper-pars massa, laddning, och spinn? **(10p)**

*(Observera att uppgifterna kan lösas utan att de tidigare deluppgifterna har lösts.)*

## Uppgift 5 Halvledare

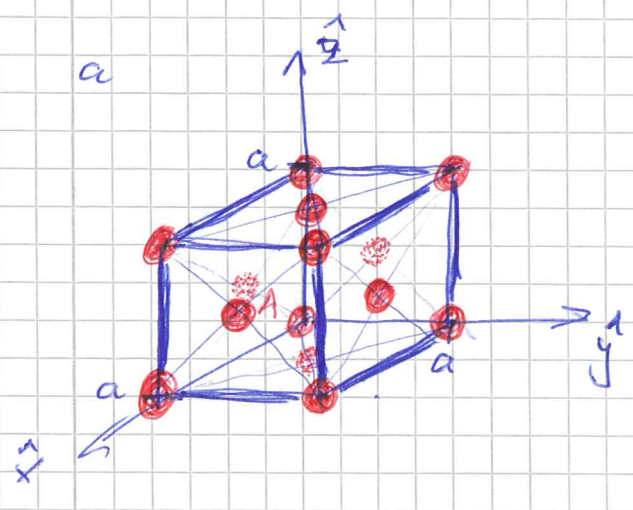
a. Beräkna elektrontätheten *n* och håltätheten *p* samt kemiska potentialen för odopad GaAs vid rumstemperatur. Bandgapet är 1,42 eV, och effektivmassorna i lednings- och valensbanden är $m_e^* = 0{,}067\ m_e$ och $m_h^* = 0{,}45\ m_e$. **(5p)**

b. Beräkna konduktiviteten för odopad GaAs vid rumstemperatur. Mobiliteten av elektroner och hål är $\mu_e = 0{,}85\ m^2/Vs$ och $\mu_h = 0{,}04\ m^2/Vs$. **(5p)**

c. GaAs n-dopas genom att en liten del As atomer ersätts med Se. Koncentration av Se atomer är $10^{23}/m^3$, och joniseringsenergin av Se i GaAs är ungefär 20 meV. Argumentera för att flertalet Se-atomer är joniserade vid rumstemperatur, och bestäm n i den dopade halvledaren samt den kemiska potentialens nya position. Rita upp en skiss av lednings- och valensbandet i ett E(k)-k diagram, och indikera donornivån och kemiska potentialen. Positioner på energiskalan måste vara realistiska (rita en energiskala) medan det inte behövs värden på k-skalan. **(5p)**

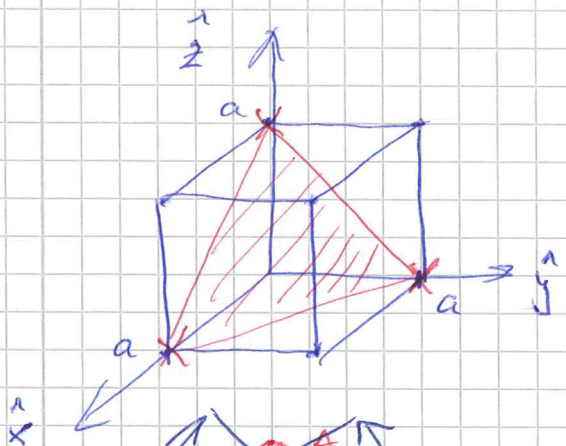
d. En annan halvledare är anisotrop. Den har ett valensband vars topp (maximala energin) finns vid $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. I närheten av $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ kan energibandet beskrivas med
$E(\mathbf{k}) = E_0 \exp( - a (k_x^2+k_y^2) - b\, k_z^2 )$
där $E_0 = 3$ eV, $a = 4$ Å$^2$ och $b = 3$ Å$^2$. Inversa effektiva hålmassan $1/m_h^*$ är en matris, bestäm matrisen i $\mathbf{k} = 0$ i enheter av fria elektronmassan $m_e$. **(5p)**

# Uppgift 1



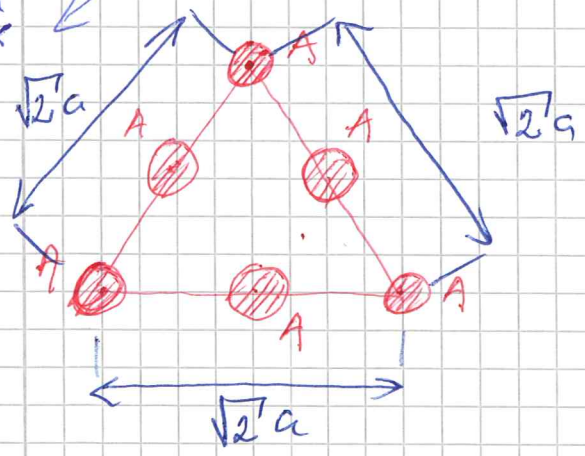

En FCC-kristall har en kubisk enhetscell med gitterkoordinaterna
(0,0,0) (½,½,0)
(½,0,½) (0,½,½)

Basen i detta fallet är
A i (0,0,0)

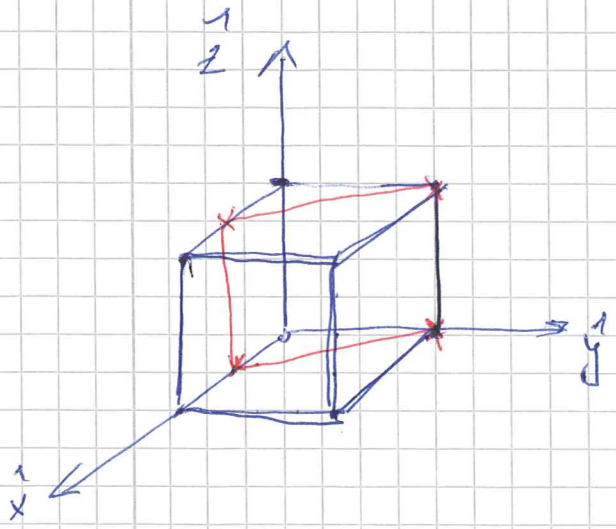



## (111)-planet

Planet skär $\hat{x}$-, $\hat{y}$- och $\hat{z}$-axlarna i punkterna a längs varje axel.



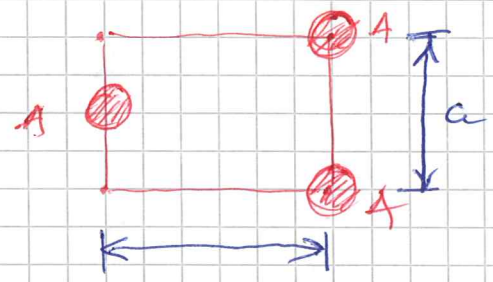

(111)-planet med markeringar för atomerna i planet




## (210)-planet

Planet skär $\hat{x}$-, $\hat{y}$- och $\hat{z}$-axlarna i punkterna

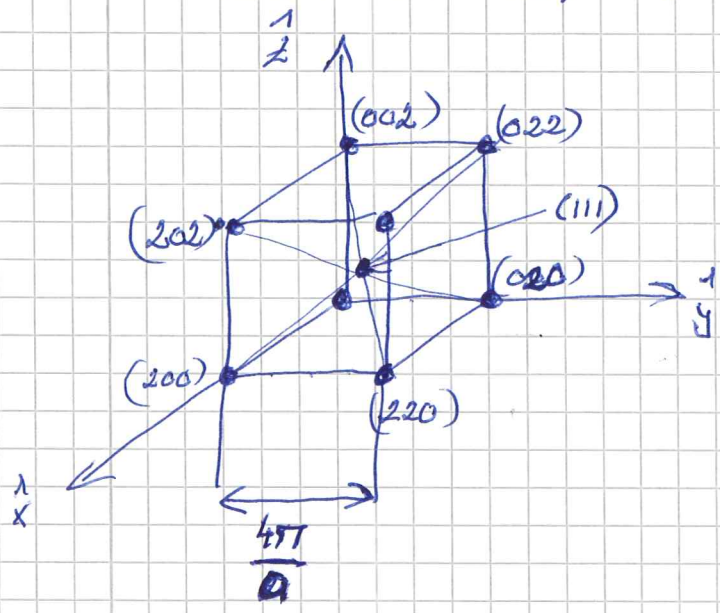
$\frac{a}{2}$, $a$ och $\infty$.




$$\sqrt{a^2 + \left(\frac{1}{2}\right)a^2} = \sqrt{\frac{5}{4}} \cdot a$$

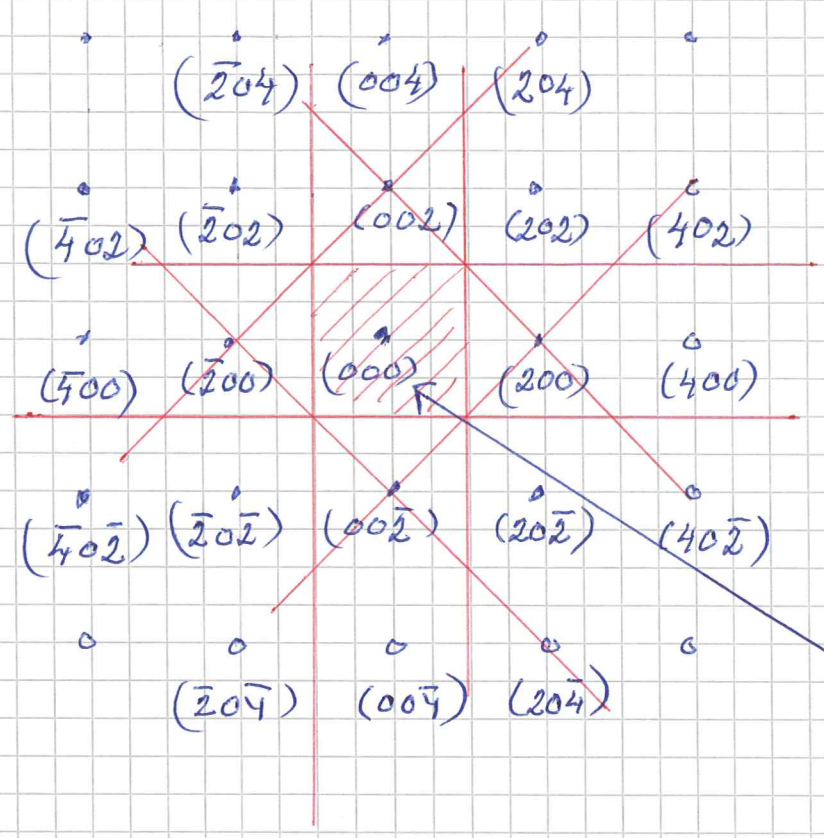
(210)-planet med markeringar för atomerna i planet.

b Det reciproka gittret för en FCC i reella rummet blir ett BCC-gitter.




För en FCC-struktur i reella rummet gäller att villkoret $h, k, l$ skall vara antingen udda eller jämna för att diffraktera intensitet skall erhållas.

xz planet



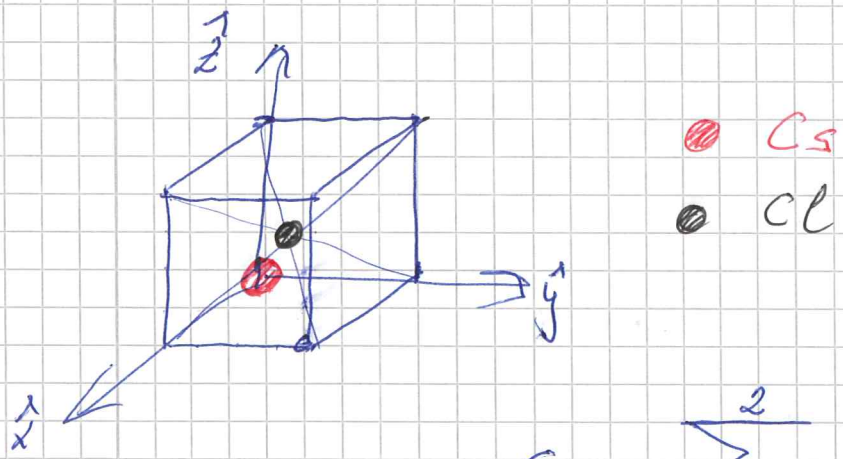

med (hkl) markerade

Wigner-Seitz cellen i xz-planet i det reciproka gittret. Den första Brillouinzonen är Wigner-Seitz cellen i det reciproka gittret.

## Uppgift 2

a En enkel kubisk struktur med basen Cs i (0,0,0) och Cl i (1/2, 1/2, 1/2)

Detta innebär att gitterkoordinaten är (0,0,0) och att Cs i (0,0,0) och Cl i (1/2, 1/2, 1/2) placeras in i enhetscellen




$$S_{hkl} = \sum_{j=1}^{2} f_j \, e^{-i\pi \cdot G \cdot r_j}$$

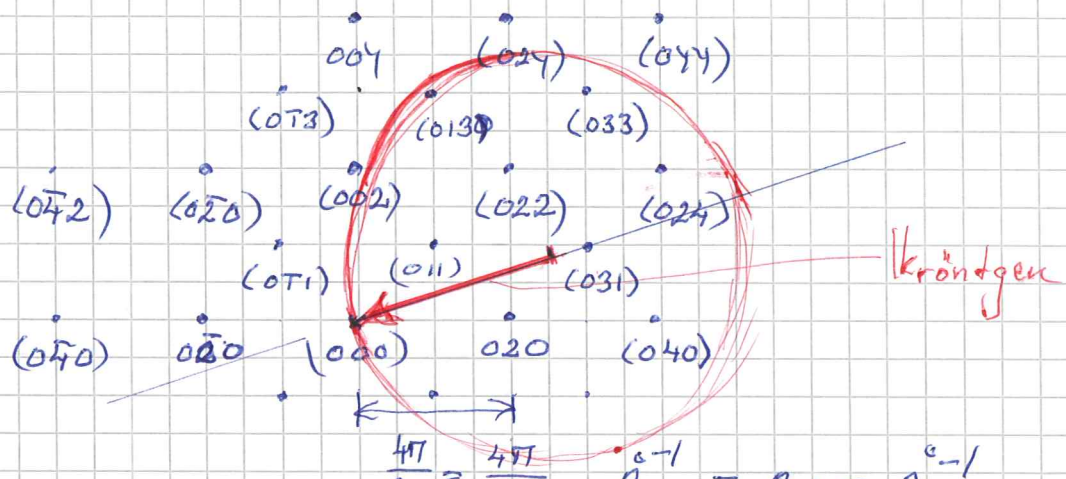
$$= f_{Cs} + f_{Cl} \, e^{-i\pi(h+k+l)}$$

$$= \begin{cases} f_{Cs} + f_{Cl} & \text{om } h+k+l \text{ är ett jämnt tal} \\ f_{Cs} - f_{Cl} & \text{annars} \end{cases}$$

$$= \begin{cases} 1.72 & \text{om } h+k+l \text{ är ett jämnt tal} \\ 1.38 & \text{annars} \end{cases}$$

b

konstruktionen av Ewaldsfären görs i reciproka rummet




$$\frac{4\pi}{a} = \frac{4\pi}{4.119}\ \text{Å}^{-1} = 3.05\ \text{Å}^{-1}$$

Längden på k-vektorn för röntgen är

$$k = \frac{2\pi}{\lambda_{röntgen}} = \frac{2\pi}{1.54}\ \text{Å}^{-1} = 4.08\ \text{Å}^{-1}$$

k-vektorns längd uttrycht i antal längder av $G_{020} = \frac{4.08}{3.05} = 1.34$

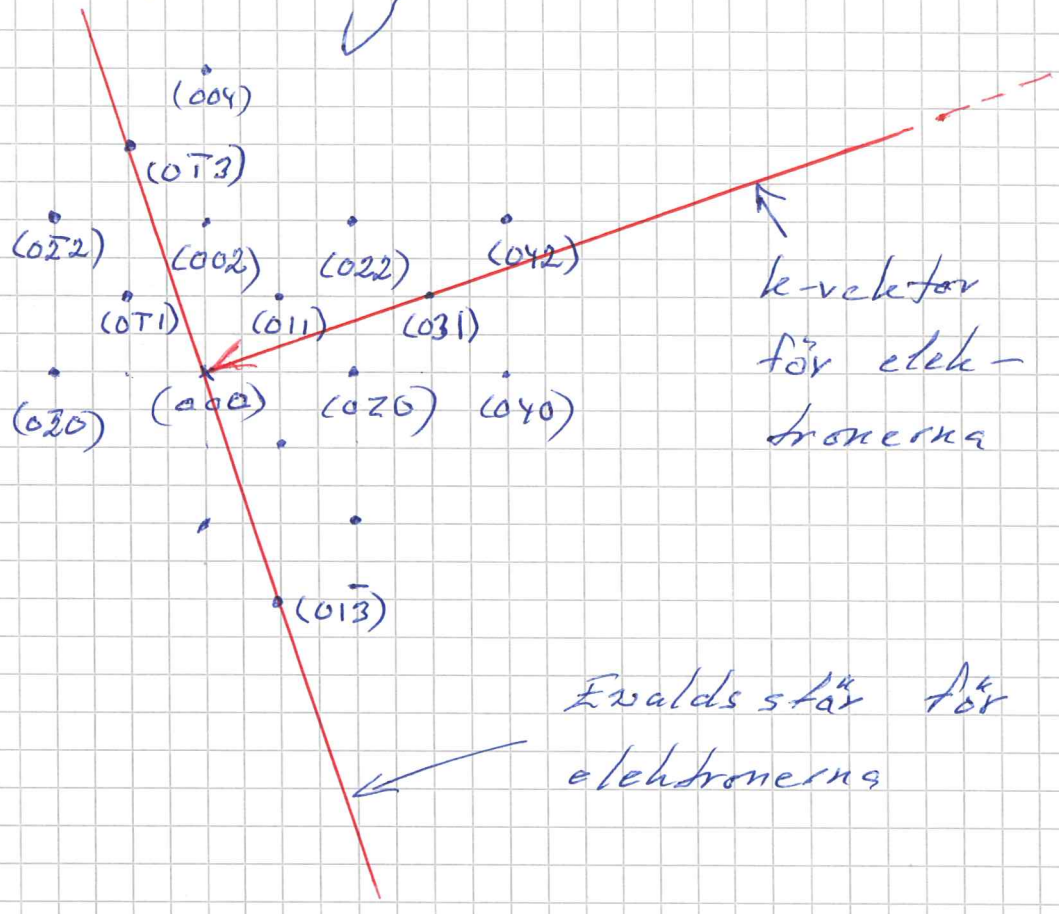
Diffrakterad intensitet erhålles ~~om~~ där Ewaldssfären skär en reciprok gitterpunkt.

I detta fallet är det nära för (002). ~~men~~ ~~det~~ och (013)

Längden på k-vektorn för elektronerna är $k = \frac{2\pi}{\lambda_{elektroner}} = \frac{2\pi}{0.0251}\ \text{Å}^{-1} = 250\ \text{Å}^{-1}$

k-vektorns längd uttryckt i antal längder av $G_{020} = \frac{250}{3.05} = 82,0$

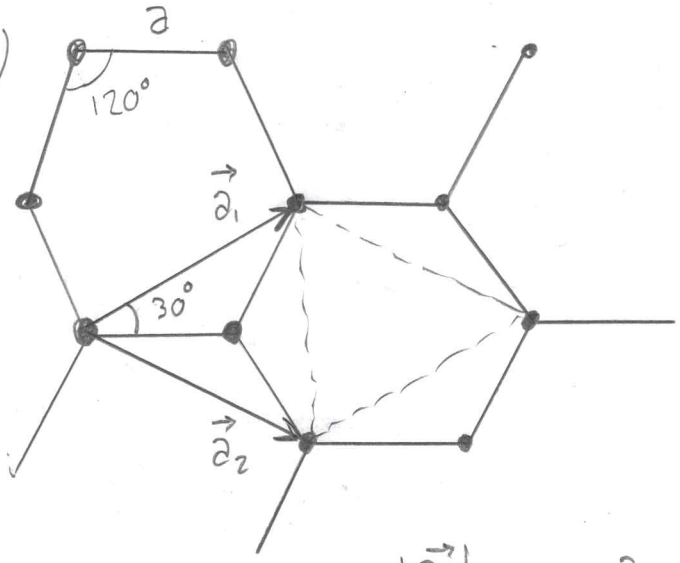
Ewalds stången blir ett plant snitt genom reciproka rummet vinkelrätt mot infallsriktningen




Diffraktion erhålles för (0$\bar{1}$3), (01$\bar{3}$), (0$\bar{2}$6), (02$\bar{6}$), (0$\bar{3}$9), (03$\bar{9}$) osv.

③ a) 6 grenar → $N = 6/3 = \underline{2 \text{ atomer}}$

b)




$a = 0{,}142$ nm

Sinussatsen: $\dfrac{|\vec{a}_1|}{\sin 120°} = \dfrac{a}{\sin 30°} \rightarrow |\vec{a}_1| = \dfrac{\sqrt{3}}{2} \cdot 2 \cdot 0{,}142 =$

$= 0{,}246$ nm

Arean ges av två liksidiga trianglar:

$$A = 2 \cdot \frac{|\vec{a}_1|^2 \cdot \sqrt{3}}{4} = \frac{(\sqrt{3}\,a)^2 \cdot \sqrt{3}}{2} = \frac{3\sqrt{3}}{2} \cdot 0{,}142^2 = \underline{0{,}0524 \text{ nm}^2}$$

(Detta är samma area som för en hexagon)

c) De optiska fononerna ges mest av det lätta ämnet, B i detta fall. T.ex är $\omega(0) = \left(2\gamma\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)\right)^{1/2}$ ungefär lika om $M_1 \gg M_2$.

d) Vi kan använda $\omega$ för $k=0$ ($\Gamma$) och BZ-gräns, t.ex. (t.ex W).

$(M_1 > M_2)$

$(M_2 = M_B = 10{,}8\,u)$

i W: $\omega_{AW} = \sqrt{\dfrac{2\gamma}{M_1}} \rightarrow 2\gamma = \omega_{AW}^2 M_1$

i $\Gamma$: $\omega_{0\Gamma} = \sqrt{2\gamma\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)} = \sqrt{\omega_{AW}^2 + \frac{2\gamma}{M_2}}$

$$\omega_{0\Gamma}^2 = \omega_{AW}^2 + \frac{2\gamma}{M_2} = \omega_{AW}^2 + \omega_{AW}^2 \cdot \frac{M_1}{M_2} = \omega_{AW}^2\left(1 + \frac{M_1}{M_2}\right)$$

$$M_1 = M_2\left(\frac{\omega_{0\Gamma}^2}{\omega_{AW}^2} - 1\right) \overset{(a)}{=} 10{,}8\left(\frac{440^2}{190^2} - 1\right) = 47\,u$$

$$(b) \quad 10{,}8\left(\frac{450^2}{140^2} - 1\right) = 101\,u$$

Detta skulle ge Ti och Ru, men egentligen är det Zr (91u) och Hf (178u), modellen är inte så bra...

2022-03-17

## Uppgift 4

a) $He^3$ isotopen spinn ½, F-D-statistik. Beräkna Fermienergi och -temperatur inom frie-elektron-modellen. $\rho = 81\ kg/m^3$

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3}$$ Bestäm $n$ & $m$.

$$n = \frac{81\ kg/m^3}{3u}\ \frac{u}{kg} = \frac{81}{3}\ \frac{1}{1{,}66\cdot 10^{-27}}\ m^{-3} = 1{,}63\cdot 10^{28}\ m^{-3}$$

$$m = 3u = 3\cdot 1{,}66\cdot 10^{-27}\ kg$$

dvs $$\varepsilon_F = \frac{1{,}05\cdot 10^{-34}\ Js\ \cdot\ 6{,}58\cdot 10^{-16}\ eVs}{2\cdot 3\cdot 1{,}66\cdot 10^{-27}\ kg}\left(3\cdot\pi^2\cdot 1{,}63\cdot 10^{28}\ m^{-3}\right)^{2/3}$$

$$= \underline{0{,}43\ meV} \qquad (= 6{,}8\cdot 10^{-23}\ J)$$

Check på enheter: $$\frac{J\ eV\ s^2}{kg}\ m^{-3\cdot\frac{2}{3}} = eV\ \frac{kg\ m^2 s^{-2} s^2}{kg}\ m^{-2}$$
$$= eV \qquad \text{ok!}$$

$$T_F = \varepsilon_F / k_B = \frac{0{,}43\ meV}{8{,}62\ eV\ K^{-1}} = \underline{4{,}9\ K}$$

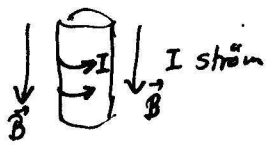
Sannolikhet tillstånd vid $\varepsilon_F + 1\ meV$ besatt vid 3K?

Ges av F-D-fördelningen. $k_B T = 0{,}26\ meV$ vid $T = 3K$

$$n_{FD}(\varepsilon = \varepsilon_F + 1\ meV,\ T = 3K) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\varepsilon_F)/k_B T} + 1}$$

$$= \frac{1}{e^{1\ meV/0{,}26\ meV} + 1} = 0{,}0209 \quad \text{dvs } \underline{2\%}$$

b) En diamagnet har $\chi_M < 0$ och i vanliga material är diamagnetismen $\chi_M \sim -10^{-5}$. I en supraledare skapas en ytström som precis tar ut magnetfältet så att det ser ut som att $\chi_M = -1$, men av helt andra orsaker (ytströmmen) än i vanliga material.




Cooperpar = elektron med $\vec{k}$, spinn-upp & elektron m $-\vec{k}$, spinn ↓

dvs massa $= 2m_e = 1{,}8\cdot 10^{-30}\ kg$, laddning $2e$, spinn noll.

Uppgift 5 a) Odopad GaAs, R.T. Bestäm $n, p, \mu$. $E_g = 1{,}42\,eV$,

$m_e^* = 0{,}067\,m_e$, $m_h^* = 0{,}45\,m_e$.

Odopad: $n = p = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{k_B T}{\pi \hbar^2}\right)^{3/2} (m_e^* m_h^*)^{3/4} \, e^{-E_g/2k_BT}$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{0{,}026\,eV}{\pi \cdot 1{,}05\cdot 10^{-34}\,Js \; 6{,}58\cdot 10^{-16}\,eVs}\right)^{3/2} (0{,}45\cdot 0{,}067)^{3/4}$$

$$\cdot (9{,}11\cdot 10^{-31}\,kg)^{3/2} \, e^{-1{,}42\,eV/2\cdot 0{,}026\,eV}$$

$$= \underline{2{,}55\cdot 10^{12}\,m^{-3}}$$

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

$= m^{-3}$ ok!

$$\mu = E_V + \tfrac{1}{2}E_g + \tfrac{3}{4}k_BT \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right)$$

$$= E_V + \tfrac{1}{2}\cdot 1{,}42\,eV + \tfrac{3}{4}\cdot 0{,}026\,eV \ln\left(\frac{0{,}45\,\cancel{m_e}}{0{,}067\,\cancel{m_e}}\right)$$

$$= E_V \underline{+ 0{,}74\,eV}$$ dvs 0,74 eV över valensbandet

b) Konduktivitet $\sigma = en\mu_e + ep\mu_h$, $\mu_e = 0{,}85\,m^2/Vs$

$n=p$ $\quad = en(\mu_e + \mu_h)$ $\quad \mu_h = 0{,}04\,m^2/Vs$

$$= 2{,}55\cdot 10^{12}\,m^{-3} \cdot 1{,}6\cdot 10^{-19}\,C \; (0{,}85 + 0{,}04)\,m^2/Vs$$

$$= \underline{3{,}6\cdot 10^{-7}\,/\Omega m}$$ (mycket liten)

Check enheter: $m^{-3} C\, m^2 V^{-1} s^{-1} = m^{-1}\frac{C}{Vs} = m^{-1}\frac{A}{V} = \frac{1}{m\Omega}$

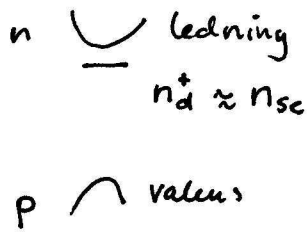
$C = As$ $\quad V = \Omega A$

5c) n-dopning av GaAs , As → Se , $n_{se} = 10^{23} m^{-3}$

Periodisk tabell (Physics Handbook) ger att As har 5 valenelektroner, Se har 6 valens-elektroner, dvs n-dopning.

$E^{se}_{jonisering} \approx 20$ meV.

Eftersom $E^{se}_{jonisering} < k_B T$ vid R.T. är troligen de flesta joniserade.




Extrinsiska regime, dvs $p \approx 0$ och $n \approx n_d^+$ (de flesta elektronerna i ledningsbandet kommer från donor-atomerna).

$$\underline{n \approx n_{se} = 10^{23} m^{-3}} \quad (n = n_{se} + p \text{ men } p \approx 10^{12} m^{-3})$$

Kemiska potentialen är nära donaternivån dvs

$$\mu \approx E_g - E^{se}_{jonisering} = 1{,}42 eV - 0{,}02 eV = \underline{1{,}40 eV}$$

(OBS estimat). ⊛

⊛ OK svar för fullt poäng. Men går även att räkna

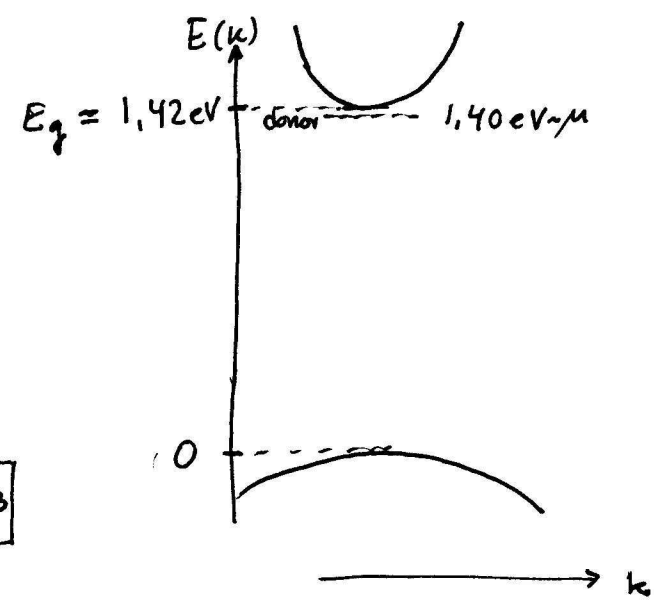
$$n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m_e^*}{\pi \hbar^2}\right)^{3/2} (k_B T)^{3/2} e^{-(E_g - \mu)/k_B T}$$

lösa ut $\mu$:

$$\mu = E_g + k_B T \ln\left(\sqrt{2}\, n \left(\frac{\pi \hbar^2}{m_e^* k_B T}\right)^{3/2}\right)$$

$$= E_g - 0{,}040 eV \text{ när } n \cong 10^{23}/m^3$$

dvs något lägre än donornivån ($E_g - 0{,}020 eV$) men rätt storleksordning.



5d) Halvledare med valensband

$$E(\vec{k}) = E_0 \exp\left(-a(k_x^2+k_y^2) - b k_z^2\right) \quad \text{nära } k \approx 0.$$

$E_0 = 3\,eV$, $a = 4\,\text{Å}^2$, $b = 3\,\text{Å}^2$.

Inversa hålmassan

OBS! Hål!

$$\left(\frac{1}{m_h^*}\right)_{ij} = -\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$$

Sätt $\gamma = -a(k_x^2+k_y^2) - b k_z^2$ (för att slippa skriva så mycket).

$$\frac{\partial E}{\partial k_x} = -2ak_x E_0 \exp(\gamma)$$

$$\left.\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2}\right|_{\vec{k}=0} = -2a E_0 \exp(\gamma) - 2ak_x(-2ak_x) E_0 \exp(\gamma)\Big|_{k=0} = -2aE_0$$

$$\left.\frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x}\right|_{k=0} = \left.\frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y}\right|_{\vec{k}=0} = -2ak_x(-2ak_y) E_0 \exp(\gamma)\Big|_{k=0} = 0$$

$$\left.\frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2}\right|_{\vec{k}=0} = [\text{p.s.s.}] = -2aE_0$$

På liknande sätt fås $\left.\frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2}\right|_{k=0} = -2bE_0$

och alla kryss-termer blir noll.

$$\frac{2aE_0}{\hbar^2} = 2\,\frac{4\cdot 10^{-20}\,m^2\,3\,eV}{1{,}05\cdot 10^{-34}\,Js\;6{,}6\cdot 10^{-16}\,eVs} = 3{,}46\cdot 10^{30}/kg = 3{,}2/m_e$$

$$\frac{2bE_0}{\hbar^2} = \ldots\; 3\cdot 10^{-20} \ldots = 2{,}4\;/m_e$$

dvs

$$\underline{\underline{\frac{1}{m_h^*}}} = \begin{bmatrix} 3{,}2 & 0 & 0 \\ 0 & 3{,}2 & 0 \\ 0 & 0 & 2{,}4 \end{bmatrix} \frac{1}{m_e}$$

(matris)