Tentamen i Fasta tillståndets fysik (FFY012/FYP330)

Tid: em, 2022-06-10

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, Chalmersgodkänd 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!

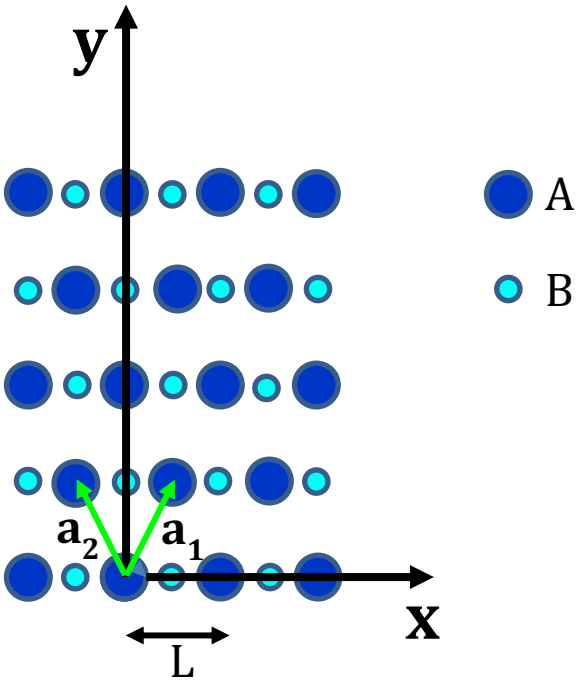
Uppgift 1

Figur 1 visar ett tvådimensionellt gitter i reella rummet bestående av atomerna A och B. Längdskalan uttryckt i L är markerad i figuren.

a) Är enhetscellen som spänns upp av vektorerna a_1 och a_2 i Figur 1 konventionell eller primitiv? **(2p)**

b) Rita in linjerna som beskrivs av Miller index (12) och (03) i Figur 1. **(2p)**

c) Ange enhetscellens enhetsvektorer i koordinatsystemet i Figur 1, ange basen för strukturen, ange enhetsvektorerna för det reciproka gittret, rita det reciproka gittret och ange kantlängderna i det reciproka gittrets enhetscell uttryckt i L. **(16p)**



Figur 1.

(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 kubisk struktur.

a. Ta fram uttrycket för strukturfaktorn för den kubiska enhetscellen för ett material som består av 50% atomprocent guldatomer och 50% silveratomer och där atomerna är slumpvis placerade i positionerna (0,0,0), (½, ½, 0), (½,0, ½) och (0, ½,½) uttryckt i formfaktorerna för guld, f_{Au}, och silver, f_{Ag}. Ange villkoret på Millerindex hkl för att erhålla diffraktion. **(10p)**

b. Ett röntgendiffraktogram, för ett pulver av en kubisk struktur, upptaget med CuK_{α}- strålning (λ=1.548 Å), ger följande Bragg-vinklar:

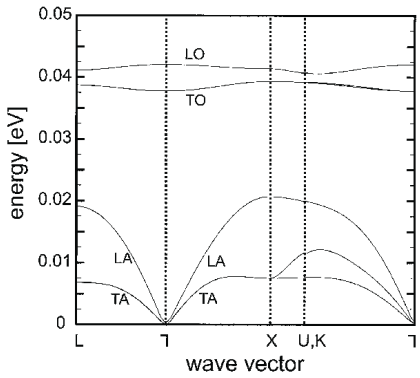
   20.27° 29.33° 36.87° 43.85° 50.77° 57.76° 66.41° 78.45°

   Är strukturen en BCC, FCC eller SC? Motivera svaret och beräkna gitterparametern. **(10p)**

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

Uppgift 3

Figur 2 nedan visar fonon-dispersionsrelationen för ett ämne.

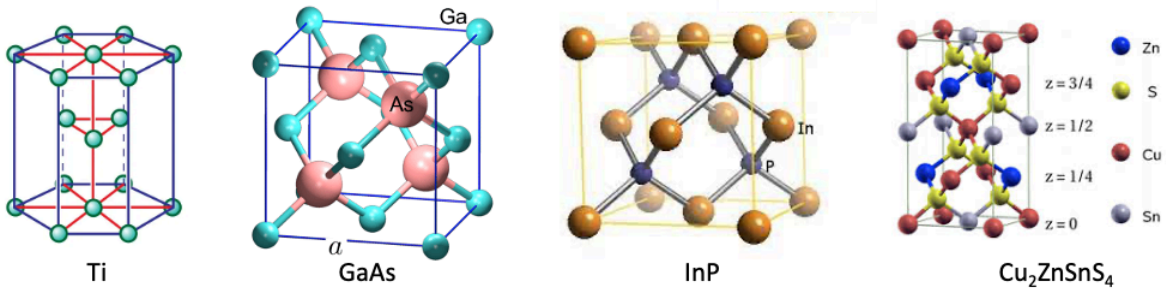


Figur 2.

a) Vad betyder LO, TO, LA och TA? **(4p)**

b) Vilket av de fyra ämnena i Figur 3 nedan bör det vara som har dispersionsrelationen i figuren ovan? Motivera ditt svar.

(8p)



Figur 3.

c) Beskriv kristallstrukturen för GaAs med Bravais-gitter och bas (de blåa linjerna markerar en kub).

(4p)

d) Om kublängden för GaAs ovan är 5,65 Å, hur stor volym har den primitiva enhetscellen?

(4p)

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

Uppgift 4

I en simpel kubisk två-dimensionell kristall, med gitterkonstant a, ges elektronernas energi E(**k**) i tight-binding-modellen av växelverkanskonstanten t_1 mellan de närmsta atomerna och t_2 mellan de näst-närmsta atomerna.

a) Rita upp kristallen, bestäm (rita och skriv uttryck) vektorerna mellan en atom och de relevanta grannarna, och indikera i ritningen vilken växelverkanskonstant som gäller. **(5p)**

b) Bestäm E(**k**). Uttrycket ska skrivas med reella funktioner. **(5p)**

c) Antag nu att $t_2=t_1/2$. För små värden av |**k**| ska du bestämma effektivmassan (i denna ska bland annat ingå gitterkonstanten a och växelverkningskonstanten t_1). **(10p)**

Uppgift 5 Halvledare

Hall-koefficienten i koppar uppmäts till

$R_H = - 0{,}55 \cdot 10^{-10}$ Vm/AT

a) Är laddningsbärarna i huvudsak elektroner eller hål? **(5p)**

b) Antag att det bara finns en typ av laddningsbärare. Beräkna tätheten av laddningsbäraren. **(5p)**

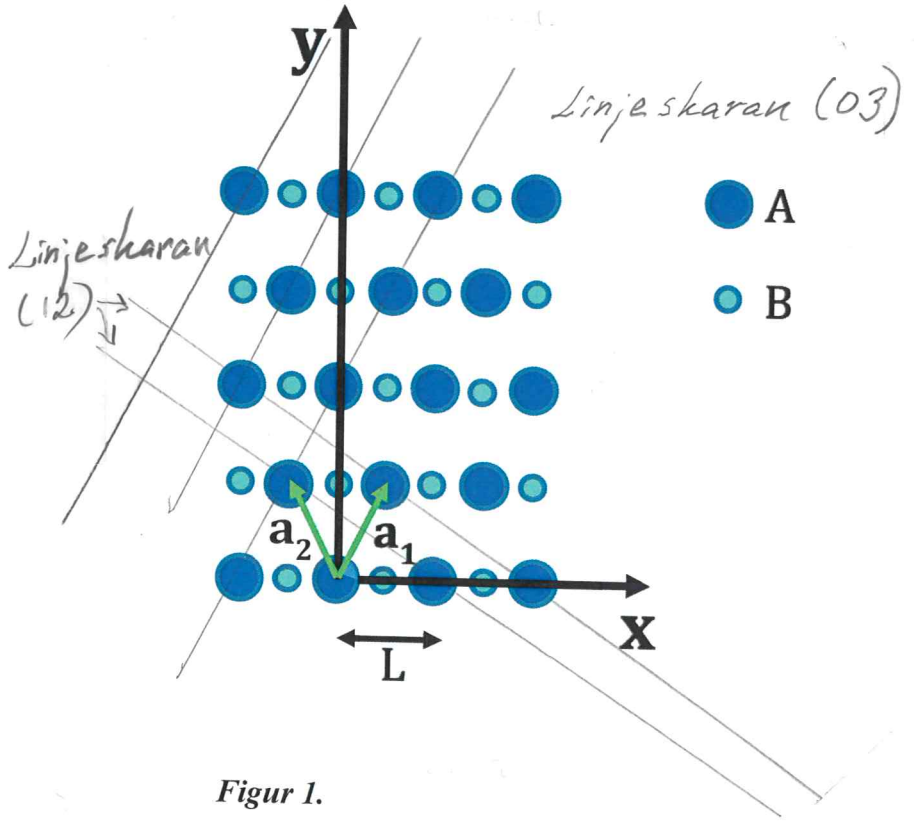
Den intrinsiska halvledare InSb har ett bandgap på 0,18 eV, och effektivmassan av elektron och hål är $m_e^* = 0{,}015\ m_e$ och $m_h^* = 0{,}39\ m_e$.

c) Beräkna laddningstätheterna n och p vid temperaturerna T = 100 K och 300 K. Beräkna också den kemiska potentialen vid de två temperaturerna. **(10p)**

Uppgift 1

a) Gittrets enhetscell för de markerade enhetsvektorerna har en gitterpunkt. Detta innebär att det är en primitiv enhetscell.

b)



Figur 1.

c) Basen är A i (0,0) och B i (1/2, 1/2)

Gittervektorerna är

$$\vec{a}_1 = L\left(\frac{1}{2}\hat{x} + \hat{y}\right)$$

$$\vec{a}_2 = L\left(-\frac{1}{2}\hat{x} + \hat{y}\right)$$

Reciproka gitrets enhetsvektorer $\vec{b_1}$ och $\vec{b_2}$ ges av

$$\vec{b_i} \cdot \vec{a_j} = 2\pi \delta_{ij} \quad \text{där} \quad \begin{cases} \delta_{ij} = 1 & \text{om } i = j \\ \delta_{ij} = 0 & \text{om } i \neq j \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} (b_{1x}\hat{x} + b_{1y}\hat{y})\left(L\left(\frac{1}{2}\hat{x} + \hat{y}\right)\right) = 2\pi \\ (b_{1x}\hat{x} + b_{1y}\hat{y})\left(L\left(-\frac{1}{2}\hat{x} + \hat{y}\right)\right) = 0 \\ (b_{2x}\hat{x} + b_{2y}\hat{y})\left(L\left(\frac{1}{2}\hat{x} + \hat{y}\right)\right) = 0 \\ (b_{2x}\hat{x} + b_{2y}\hat{y})\left(L\left(-\frac{1}{2}\hat{x} + \hat{y}\right)\right) = 2\pi \end{cases}$$

$$(b_{1x}\hat{x} + b_{1y}\hat{y})\left(L\left(-\frac{1}{2}\hat{x} + \hat{y}\right)\right) = 0$$

$$\Rightarrow b_{1x} \cdot \frac{1}{2}L = b_{1y} \cdot L \Rightarrow \underline{\underline{b_{1x} = 2b_{1y}}}$$

$$(b_{2x}\hat{x} + b_{2y}\hat{y})\left(L\left(\frac{1}{2}\hat{x} + y\right)\right) = 0$$

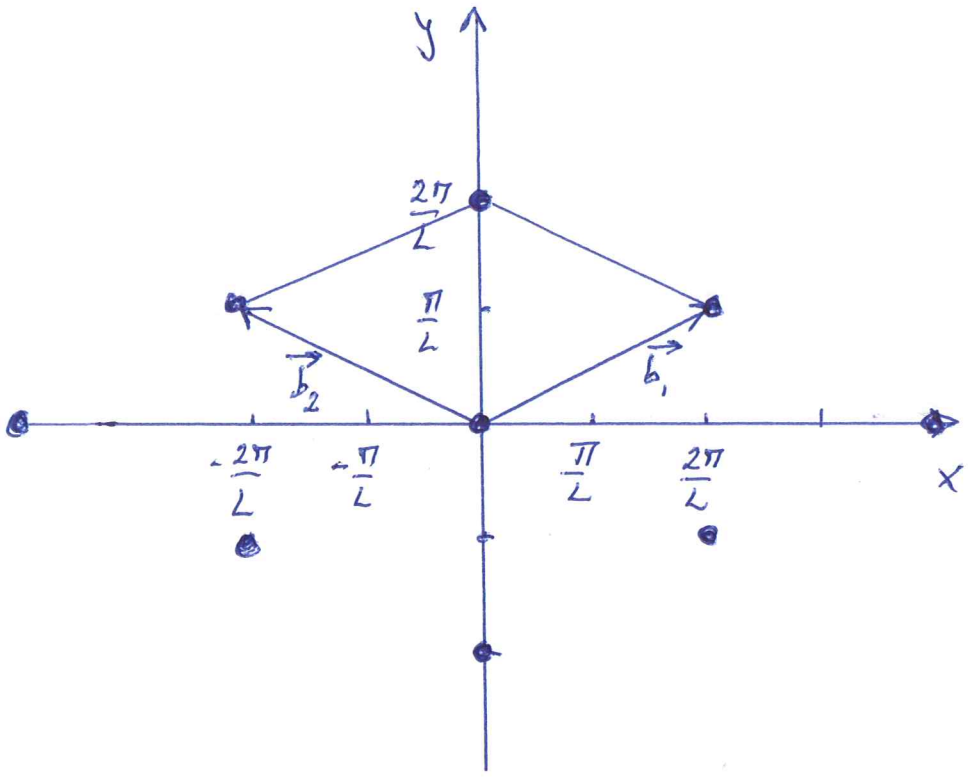
$$\Rightarrow b_{2x} \cdot L\frac{1}{2} = -L b_{2y} \Rightarrow \underline{\underline{b_{2x} = -2b_{2y}}}$$

$$(b_{1x}\hat{x} + b_{1y}\hat{y})\left(L\left(\frac{1}{2}\hat{x} + \hat{y}\right)\right) = 2\pi$$

$$\Rightarrow 2b_{1y} \cdot L\frac{1}{2} + b_{1y} \cdot L = 2\pi \Rightarrow \underline{\underline{b_{1y} = \frac{\pi}{L}}} \Rightarrow \underline{\underline{b_{1x} = \frac{2\pi}{L}}}$$

$$(b_{2x}\hat{x} + b_{2y}\hat{y})\left(L\left(-\frac{1}{2}\hat{x} + \hat{y}\right)\right) = 2\pi$$

$$\Rightarrow -2b_{2y} \cdot L\left(-\frac{1}{2}\right) + L b_{2y} = 2\pi \Rightarrow b_{2y} = \frac{\pi}{L} \Rightarrow b_{2x} = -\frac{2\pi}{L}$$



Uppgift 2 a) Slumpvis fördelade guld- och silveratomer i (0,0,0), (½,½,0), (½,0,½) och (0,½,½).

Detta innebär ett fcc-gitter med basen (0,0,0), (½,½,0), (½,0,½) och (0,½,½).

I basen placeras motsvarigheter till en atom med $f = 0.50 \cdot f_{Au} + 0.50 \cdot f_{Ag}$.

Strukturfaktorn

$$S_{hkl} = \sum_{j=1}^{4} f_j e^{-i2\pi \vec{G} \cdot \vec{r}_j} =$$

$$f + f e^{-i\pi(h+k)} + f e^{-i\pi(h+l)} + f e^{-i\pi(k+l)}$$

detta blir $\begin{cases} 4 \cdot (0.50 \cdot f_{Au} + 0.50 \cdot f_{Ag}) \text{ om } h,k,l \text{ alla udda eller alla jämna tal, dvs diffraktion intensitet är udda} \\ 0 \text{ om } h,k,l \text{ är en blandning av udda och jämna tal} \end{cases}$

b) Den minsta Braggvinkeln motsvarar det största planavståndet, dvs det lägsta värdet på $(h^2 + k^2 + l^2)$ enligt Braggs lag

$$2d_{hkl} \sin\theta = n\lambda$$

$$2\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \sin\theta = n\lambda$$

$$(h^2 + k^2 + l^2) = \frac{4a^2}{n^2\lambda^2} \sin^2\theta$$

Detta ger att $\sin^2\theta_1/\sin^2\theta_2 = \frac{\sqrt{h_1^2+k_1^2+l_1^2}}{\sqrt{h_2^2+k_2^2+l_2^2}}$

Nästa steg är att göra en lista över $\sin^2\theta_1/\sin^2\theta_n$ för de listade värdena

n	θ	$\sin^2\theta_1/\sin^2\theta_2$
1	20.27	1
2	29.33	0.5
3	36.87	0.333
4	43.85	0.25
5	50.77	0.20
6	57.76	0.168
7	66.41	0.142
8	78.45	0.125

Alla hkl är tillåtna för SC. Listan blir

n	hkl	$h_n^2 + k_n^2 + l_n^2$	$\frac{\sqrt{h_1^2+k_1^2+l_1^2}}{\sqrt{h_n^2+k_n^2+l_n^2}}$
1	100	1	1
2	110	2	0.5
3	111	3	0.33
4	200	4	0.25
5	210	5	0.20
6	211	6	0.167
7	300, 221	9	0.111
8	310	10	0.1

Motsvarande lista för tillåtna hkl för BCC (h + k + l är jämnt tal) är

n	hkl	$h_n^2 + k_n^2 + l_n^2$	$\frac{\sqrt{h_1^2+k_1^2+l_1^2}}{\sqrt{h_n^2+kn^2+ln^2}}$
1	110	2	1
2	200	4	0.5
3	211	6	0.33
4	220	8	0.25
5	310	10	0.2
6	222	12	0.167
7	321	14	0.143
8	400	16	0.125

Motsvarande lista för tillåtna hkl (alla udda eller alla jämna) för FCC är

n	hkl	$h_n^2 + k_n^2 + l_n^2$	$\frac{\sqrt{h_1^2+k_1^2+l_1^2}}{\sqrt{h_n^2+kn^2+ln^2}}$
1	111	3	1
2	200	4	0.75
3	220	8	0.375
4	311	11	0.273
5	222	12	0.25
6	400	16	0.185
7	331	19	0.158
8	420	20	0.15

En jämförelse med listan med Braggvinklarna visar ett detta är en BCC struktur. Braggs lag ger att

$$2\,\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}\sin\theta = n\,\lambda \text{ där } n = 1$$

$$a = \sqrt{1^2+1^2+0^2}\,\frac{1.548}{\sin\theta} = 3.16\ \text{Å}$$

③ a) LO = longitudinella optiska
TO = transversella optiska
LA = longitudinella akustiska
TA = transversella akustiska

b) Eftersom det finns både O och A, kan det inte vara Ti (enatomig bas). Det kan inte heller vara Cu_2ZnSnS_4 för den måste ha väldigt många optiska grenar. För att avgöra om det är GaAs eller InP, som har samma kristall-struktur, behöver vi betrakta de relativa massorna (kvoterna).

$M_{Ga}/M_{As} \approx 70/75 = 0{,}93$; $\sqrt{0{,}93} = 0{,}96$

$M_P/M_{In} = 31/115 = 0{,}27$; $\sqrt{0{,}27} = 0{,}51$

Enligt 1D-modellen är ω_A/ω_O på BZ-gränsen $\approx \sqrt{m_1/m_2}$. I figuren är ω_A/ω_O mellan 0,25 och 0,5 vilket gör att det är mycket troligare att ämnet är <u>InP</u>.

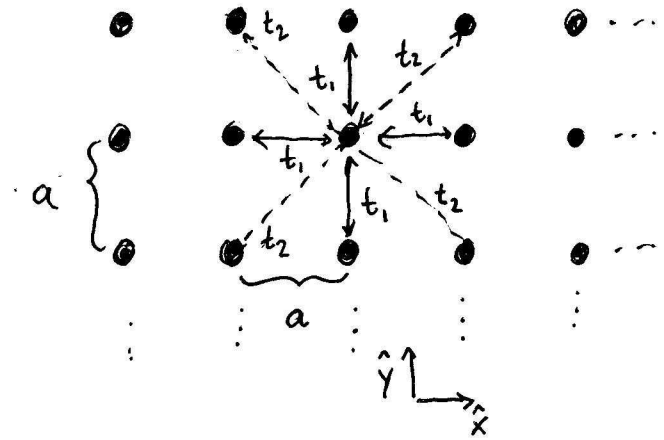
c) FCC med bas Ga i (0,0,0) och As i (1/4, 1/4, 1/4), (kallas också zinkblende-struktur).

d) Den konventionella enhetscellen har volymen a^3 och innehåller fyra Ga atomer, alltså har den primitiva cellen $V = a^3/4 =$
$= 5{,}65^3/4 = \underline{\underline{45{,}1\ Å^3}}$

22-06-09

Uppgift 4 Tight-binding modell i 2D, simpel kubisk, konstant t_1 (t_2) mellan närmsta (näst-närmsta) grannarna.

a)



Närmsta grannarna:

(antag atomen i origo)

$\vec{r} = a\hat{x}, a\hat{y}, -a\hat{x}, -a\hat{y}$

Näst-närmsta grannarna:

$\vec{r} = a(\hat{x}+\hat{y}), a(-\hat{x}+\hat{y}),$
$a(-\hat{x}-\hat{y}), a(\hat{x}-\hat{y}).$

b) $$E(\vec{k}) = \underbrace{E_n - \beta_n}_{\text{konstant}} - \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \gamma_n(\vec{R})$$ generellt

$\uparrow$ t_1 och t_2

$$= \text{konstant} - t_1\left\{e^{i\vec{k}\cdot a\hat{x}} + e^{i\vec{k}\cdot a\hat{y}} + e^{-i\vec{k}\cdot a\hat{x}} + e^{-i\vec{k}\cdot a\hat{y}}\right\}$$

$$- t_2\left\{e^{i\vec{k}\cdot a(\hat{x}+\hat{y})} + e^{i\vec{k}\cdot a(-\hat{x}+\hat{y})} + e^{i\vec{k}\cdot a(-\hat{x}-\hat{y})} + e^{i\vec{k}\cdot a(\hat{x}-\hat{y})}\right\}$$

$$= \text{konstant} - t_1\left\{2\cos(k_x a) + 2\cos(k_y a)\right\}$$

$$- t_2\left\{e^{ik_y a}\, 2\cos(k_x a) + e^{-ik_y a}\, 2\cos(k_x a)\right\}$$

$$= \text{konstant} - 2t_1\left\{\cos(k_x a) + \cos(k_y a)\right\}$$

$$- 4t_2 \cos(k_x a)\cos(k_y a).$$

c) Antag $t_2 = t_1/2$. Bestäm effektivmassan för små $|\vec{k}|$.

$$E(\vec{k}) = \text{konstant} - 2t_1 \left\{ \cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_x a)\cos(k_y a) \right\}$$

$$\boxed{\cos\alpha \approx 1 - \tfrac{1}{2}\alpha^2} \qquad \text{för små } \alpha \qquad (\text{Taylor expansion})$$

$$E(\vec{k}) \approx \text{konstant} - 2t_1 \left\{ 1 - \tfrac{1}{2}(k_x a)^2 + 1 - \tfrac{1}{2}(k_y a)^2 + \left(1 - \tfrac{1}{2}(k_x a)^2\right)\left(1 - \tfrac{1}{2}(k_y a)^2\right) \right\}$$

$$= \underbrace{\text{konstant} - 6t_1}_{\text{konstant}'} + t_1 \left\{ (k_x a)^2 + (k_y a)^2 + (k_x a)^2 + (k_y a)^2 - \tfrac{1}{2} \cancel{k_x^2 k_y^2 a^4} \right\}$$

mindre orden i k

$$= \text{konstant}' + 2t_1 a^2 \left\{ k_x^2 + k_y^2 \right\}$$

$$= \text{konstant}' + 2t_1 a^2 k^2 \qquad , \quad k^2 = |\vec{k}|^2 = k_x^2 + k_y^2$$

Effektivmassa - eftersom $E(\vec{k})$-uttrycket är isotropt (samma i alla riktningar) blir effektivmassan samma i alla riktningar.

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{\mu\nu} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_\mu \partial k_\nu}$$

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{xx} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_x^2} = 2t_1 a^2 2 = 4t_1 a^2 = \left(\frac{1}{m^*}\right)_{yy}$$

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{xy} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_x \partial k_y} = 0$$

$$\underline{\underline{\frac{1}{m^*}}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} 4t_1 a^2$$

(svaret $\frac{1}{m^*} = 4t_1 a^2$, eller $m^* = \frac{1}{4t_1 a^2}$ godtas också)

Uppgift 5

Hall-koeffiurent $R_H = -0{,}55 \cdot 10^{-10} \frac{Vm}{AT}$

a) Om det huvudsakligen finns 1 typ av laddningsbärare ges R_H av

$$R_H = \frac{1}{q n_q}$$

Eftersom $n_q > 0$ ges tecken på R_H av laddningen q, dvs $q < 0$ här.
Då är laddningsbärarna <u>elektroner</u>.

b) Tätheten $n_q = n = (-e R_H)^{-1} = \left(-1{,}6 \cdot 10^{-19} C \; (-0{,}55 \cdot 10^{-10}) \frac{Vm}{AT}\right)^{-1}$

$$= \underline{1{,}1 \cdot 10^{29} \, m^{-3}} \qquad (1{,}1364\ldots)$$

enheter: $\frac{AT}{Vm} \frac{1}{C} = \frac{A\,Vs}{Vm\,m^2 C} = \frac{1}{m^3}$

$T = \frac{Vs}{m^2} \qquad A = \frac{C}{s}$

c) Intrinsisk halvledare InSb, $E_g = 0{,}18 eV$, $m_e^* = 0{,}015\, m_e$, $m_h^* = 0{,}39\, m_e$.
$n = p$ vid intrinsisk.

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

Sätt in värden <u>och</u> räkna rätt på enheterna (!), speciellt $eV \leftrightarrow J$ brukar skapa problem.

Kemiska potentialen för intrinsisk halvledare:

$$\mu = \frac{1}{2} E_g + \frac{3}{4} k_B T \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) \quad (+ E_{valens} \text{ men kan tas } = 0)$$

Med värden:

$T = 100\,K \qquad n = p = \underline{3{,}0 \cdot 10^{18}} \, m^{-3}, \quad \mu = \underline{0{,}11\, eV} = 1{,}78 \cdot 10^{-20} J$

$T = 300\,K \qquad n = p = \underline{1{,}65 \cdot 10^{22}} \, m^{-3}, \quad \mu = \underline{0{,}15\, eV} = 2{,}46 \cdot 10^{-20} J$