Tentamen i Fasta tillståndets fysik (FFY012/FYP330)

Tid: fm, 2024-01-12

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, gradskiva, 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.

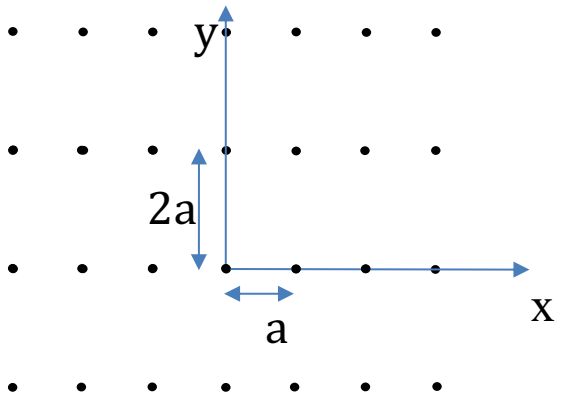
Skriv tydligt och motivera dina svar.

Lycka till!

Uppgift 1

a) Markera en primitiv enhetscell i gittret i reella rummet i Figur 1 och ange gittervektorerna $\mathbf{a}_1$ och $\mathbf{a}_2$ uttryckta i a, **x** och **y** där a är 0.3 nm**.** Beräkna de reciproka gittervektorerna $\mathbf{b}_1$ och $\mathbf{b}_2$ uttryckta i a, **x** och **y** genom att använda villkoren för relationen mellan gittervektorer i reella och reciproka rummet samt rita det reciproka gittret och markera punkterna med Miller-index (10) och (11). Beräkna längden på G-vektorn för (11). **(15p)**

b) Markera en Wigner-Seitz-cell i gittret i Figur 1. Förklara hur Du tar fram cellen. **(5p)**



Figur 1. Ett gitter i reella rummet.

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

Uppgift 2

Rent järn, Fe, har en BCC-struktur upp till 912 °C. Vid högre temperaturer är FCC den stabila kristallstrukturen. Vid rumstemperatur har järn gitterparametern a=0.287 nm. Antag att ett diffraktogram tas upp med CuK_α-strålning (λ=1.548 Å).

a) Beräkna Braggvinklarna för topparna i diffraktogrammet för järn vid rumstemperatur och ange Miller-index för respektive topp. **(10p)**

b) Beräkna strukturfaktorn S_{hkl} för FCC-strukturen uttryckt i formfaktorn för järn, f_{Fe}, och ange villkoren på hkl för att diffraktion skall erhållas. Anta att formfaktorn f_{Fe} är proportionell mot atomnumret, Z. **(10p)**

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

Uppgift 3

a) Betrakta den en-dimensionella modellen för gittersvängningar med en atom i basen. Vilket fysikaliskt faktum är anledningen till att vi inför periodiska randvillkor? **(5 p)**

b) Visa, i en dimension, att periodiska randvillkor leder till villkor på vågvektorn k för gittersvängningar. **(5 p)**

c) Betrakta ett tre-dimensionellt enkelt kubiskt gitter, med gitterparameter *a*. Kristallen är kubisk och består av *N* atomer. Hur stor blir tillståndstätheten i k-rummet för longitudinella svängningar, uttryckt i *a* och *N*? **(5 p)**

d) Härled tillståndstätheten g(*w*) från tillståndstätheten i k-rummet (för fallet i c) i w-rummet (*w* = vinkelfrekvens) för Debye-modellen? Rita funktionen g(*w*). **(5 p)**

Uppgift 4

En odopad halvledare har bandstrukturen som visas i figuren. På k-axeln är symmetripunkterna L, Γ och X angivet, och energins nollpunkt har satts till valensbandets topp. Halvledaren har kristallstrukturen zinc-blende, med positionerna för symmetripunkterna

L = (2π/a) (½,½,½),
Γ = (2π/a) (0,0,0), och
X = (2π/a) (1,0,0),
där gitterkonstanten är a = 5,65 Å.

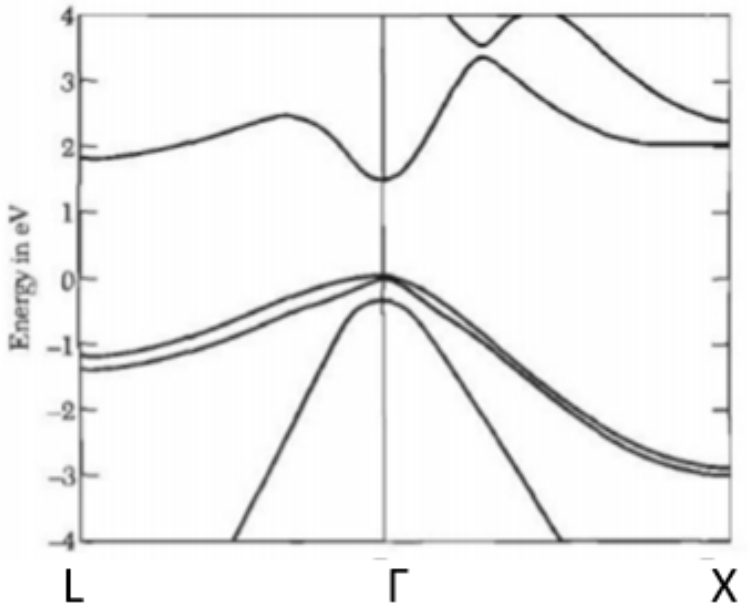
a) Använd figuren för att estimera bandgapet E_g. Estimera också effektivmassan för elektroner i botten av ledningsbandet, m_e^*, och för hål i toppen av valensbandet, m_h^*, i enheter av fria elektronens massa m_e. Det räcker här att betrakta valensbandet närmast gapet, även om närliggande valensband i praktiken också bidrar till halvledarens beteende, och du kan även ignorera att effektivmassorna är aningen anisotropa (alltså lite olika höger och vänster om Γ-punkten). **(5p)**

Om det känns som att några av dina svar i a) inte är realistiska, eller om du inte lyckats beräkna frågorna i a), kan du göra rimliga antaganden för värden på E_g, m_e^*, och m_h^* för att besvara frågorna b) - d), skriv då dessa antaganden tydligt.

b) Bestäm för denna intrinsiska halvledare elektrontätheten n_i, håltätheten p_i samt kemiska potentialen μ vid rumstemperatur. Bestäm konduktiviteten σ_i om mobiliteten för elektroner och hål är $\mu_e = 0{,}80$ $m^2/(Vs)$ och $\mu_h = 0{,}03$ $m^2/(Vs)$. **(5p)**

c) Halvledaren n-dopas med donatortätheten $n_d = 2 \cdot 10^{23}$ m^{-3}. Vad blir tätheten av elektroner i ledningsbandet, n, och hål valensbandet, p, om den dopade halvledaren är i extrinsiska regimen (temperaturområdet) vid rumstemperatur? Bestäm konduktiviteten σ_d för dopade halvledaren, om vi antar att mobiliteterna för det dopade materialet är 10 % av mobiliteterna för det odopade materialet (i fråga b). **(5p)**

d) Estimera dopningsnivåns position under ledningsbandet när relative dielektriska konstanten för halvledaren är $\varepsilon_r = 13$. **(5p)**



Uppgift 5

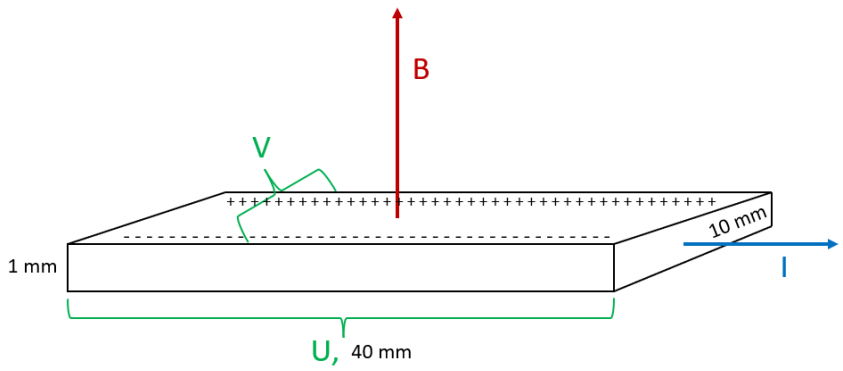
En tunn bit dopad halvledare lägg i ett magnetfält med B = 0,3 T vinkelrät mot ytan, se figur, och det leds en ström på I = 10 mA igenom halvledaren. Halvledaren har dimensionerna som angivet i figuren. Vi antar att halvledaren domineras av en typ av laddningsbärare, elektroner eller hål. Magnetfält och ström ger upphov till spänningen V = 5 mV över halvledaren, med upphopning av laddningar i de två sidorna, som illustrerat.

a) Beräkna Hall-koefficienten R_H och avgör om laddningsbärarna är elektroner eller hål. **(5p)**

b) Beräkna dominerande laddningsbärarens täthet under antagandet att endast en av de två typerna bidrar till Halleffekten. Värdera rimligheten i det värde du får: är det ett typiskt värde för en dopad halvledare? **(5p)**

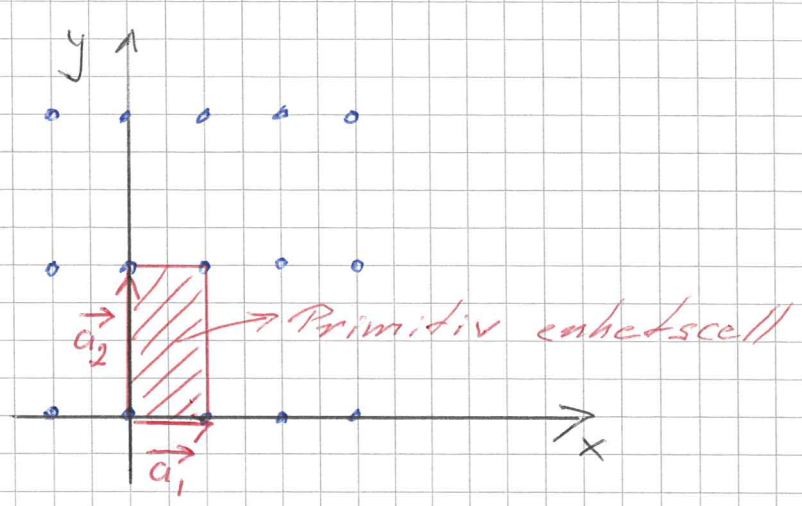
c) I strömmens riktning uppstår en spänning U = 100 mV. Bestäm resistiviteten ρ. **(5p)**

d) Bestäm mobiliteten μ av laddningsbärarna. **(5p)**



Uppgift 1

a



$\vec{a_1} = a\hat{x}$, $\vec{a_2} = 2a\hat{y}$

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

Detta ger 1) $\vec{b_1} \cdot \vec{a_1} = 2\pi$

$$(b_{1x}\hat{x} + b_{1y}\hat{y}) \cdot a\hat{x} = 2\pi$$
$$b_{1x} \cdot a = 2\pi$$
$$b_{1x} = \frac{2\pi}{a}$$

2) $\vec{b_1} \cdot \vec{a_2} = 0$

$$(b_{1x}\hat{x} + b_{1y}\hat{y}) 2a\hat{y} = 0$$
$$b_{1y} \cdot 2a = 0$$
$$b_{1y} = 0$$

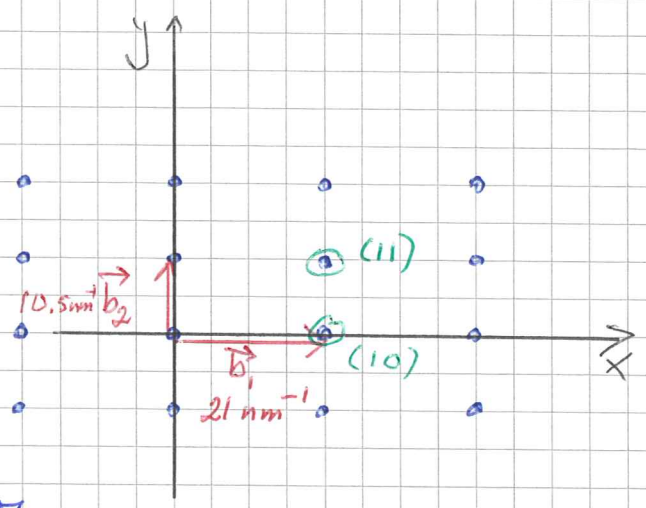
3) $\vec{b_2} \cdot \vec{a_1} = 0$

$$(b_{2x}\hat{x} + b_{2y}\hat{y}) \cdot a\hat{x} = 0$$
$$b_{2x} \cdot a = 0$$
$$b_{2x} = 0$$

4) $\vec{b_2} \cdot \vec{a_2} = 2\pi$

$$(b_{2x}\hat{x} + b_{2y}\hat{y}) \cdot 2a\hat{y} = 2\pi$$
$$b_{2y}\, 2a = 2\pi$$
$$b_{2y} = \frac{\pi}{a}$$

Reciproka rummet



$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$$

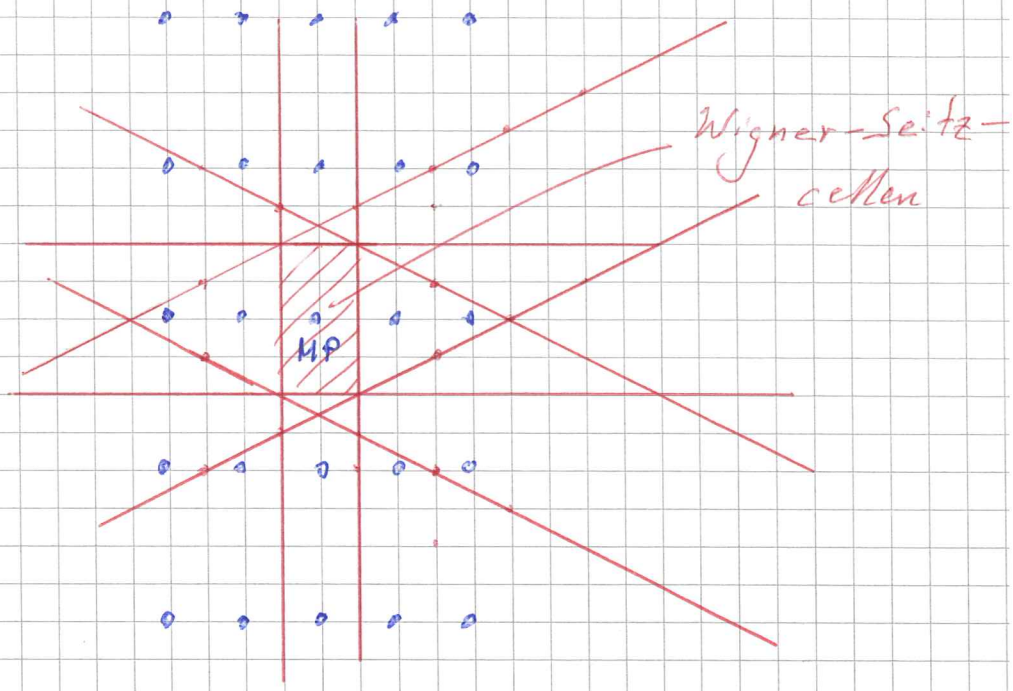
$$\vec{b}_2 = \frac{\pi}{a}\hat{y}$$

Längden på G_{11}-vektorn är

$$\sqrt{\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{a}\right)^2} = \frac{\pi}{a}\cdot\sqrt{5} = 23\ nm^{-1}$$

b) Wigner-Seitz-cell erhålls via följande steg

1. Välj en gitterpunkt som mittpunkt, MP
2. Dra en linje från MP till den närmaste gitterpunkten.
3. Dra en linje $\perp$ till linjen i 2 vid ~~p~~ halva avståndet från MP
4. Dra en linje från MP till nästa närma gitter punkt.
5. Dra en linje $\perp$ till linjen i 4 vid halva avståndet från MP
6. Upprepa 4 & 5. tills dess att linjerna i 5 hamnar utanför Wigner-Seitz-cellen



Uppgift 2

a) Braggvinklar för järn vid rumstemperatur.
kristallstrukturen är BCC vid rumstemperatur.
För BCC erhålls diffraktion om h+k+l är ett jämnt tal. Intensitetstoppar erhålls vid Braggvinklar, θ_B, som ges av Braggs lag

$$2 d_{hkl} \sin\theta_B = \lambda$$

där d_{hkl} är planavstånd $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$
λ är våglängd

hkl	$h^2+k^2+l^2$	d_{hkl} (nm)	θ_B (°)
110	2	0.2029	22.4
200	4	0.1435	32.6
211	6	0.1172	41.3
220	8	0.1015	49.7
310	10	0.09064	58.6
222	12	0.08285	69.1
⋮			

b) Strukturfaktorn S_{hkl} ges av

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

$f_j = C \cdot 26$

FCC $\Rightarrow$ järnatomer i $(0,0,0)$
$(1/2, 1/2, 0)$
$(1/2, 0, 1/2)$
$(0, 1/2, 1/2)$

$$S_{hkl} = f_{Fe}\left(1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)}\right)$$

$= \begin{cases} 4 \cdot C \cdot 26 = 104 \cdot C & \text{om } h,k,l \text{ alla jämna eller alla udda} \\ 0 & \text{annars} \end{cases}$

③ a) Kedjan är ändlig.

b) Periodiska randvillkor: $u_n(t) = u_{N+n}(t)$

så $u e^{i(kan - \omega t)} = u e^{i(kan + kL - \omega t)}$

$\rightarrow e^{ikL} = 1$

$\therefore k = \frac{2\pi}{L} m = \frac{2\pi}{aN} m$, m = heltal

här är u = utslag
a = gitterparameter
N = antal atomer i kedjan
L = längden på kedjan

i första Brillouinzon är $k \leq \frac{\pi}{a}$

c) Tillståndstätheten i k-rummet blir

$g_k = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 = N\left(\frac{a}{2\pi}\right)^3$, eftersom $N = \frac{L^3}{a^3}$.

Detta gäller för en gren.

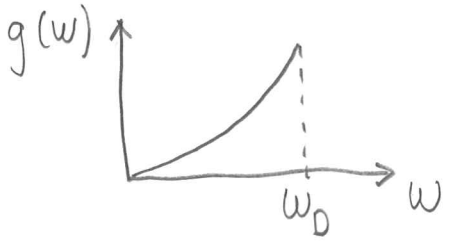
d) Debye $\rightarrow \omega = vk$ för $\omega < \omega_D$

v = våghastigheten.

För en gren gäller att $g(\omega)d\omega = g(k)d^3k$

så $g(\omega) = g(k)\frac{d^3k}{d\omega} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot 4\pi k^2 \frac{dk}{d\omega} = \frac{L^3}{2\pi^2 v^3}\omega^2 = \frac{Na^3}{2\pi^2 v^3}\omega^2$

för $\omega < \omega_D$



Uppgift 4

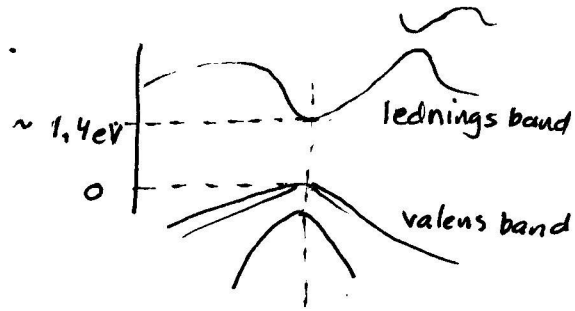
Halvledare, odopad (intrinsisk). Finns figur m. bandstruktur mellan L och Γ, och mellan Γ och X.

Positioner i k-rummet L, Γ, X:

$L = (2\pi/a)(1/2, 1/2, 1/2)$, $\Gamma = (2\pi/a)(0,0,0)$, $X = (2\pi/a)(1,0,0)$.

a) Bestäm E_g: Avläser position av ledningsbandets botten minus valensbandets topp (som har energi noll).

$$E_g \approx \underline{1{,}4\,eV}$$



Bestäm m_e^*/m_e & m_h^*/m_e i lednings- & valensbandets botten/topp.

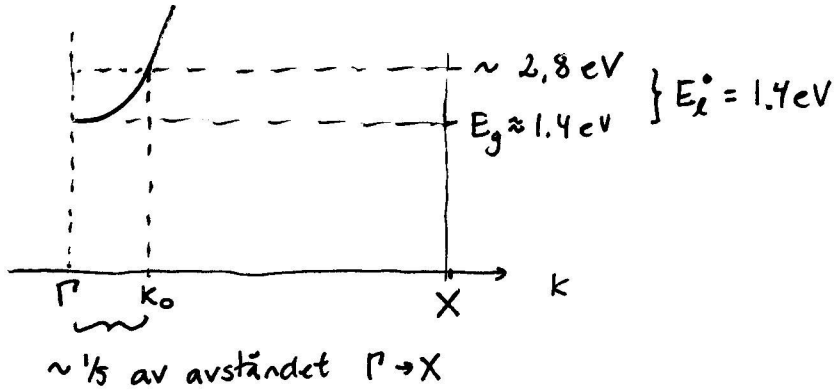
Nära botten/topp vet vi att (med $E_v = 0$)

$$E_\ell \approx ck^2 + E_g$$

$$E_v \approx -bk^2$$

där c & b måste bestämmas. Jag väljer att räkna på kurven höger om Γ.

Skiss ledningsband:



Vi får:

$$c = \frac{E_\ell - E_g}{k^2}$$

$$k_0 \cong \frac{1}{5}\left|X - \Gamma\right| = \frac{1}{5}\frac{2\pi}{a}\left|\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix}\right| = \frac{2\pi}{5a}$$

dvs $c = E_\ell^0 / k_0^2 = E_\ell^0 \left(\frac{5a}{2\pi}\right)^2$ (kan beräknas numeriskt men inget behov här).

$$\frac{1}{m_e^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{2c}{\hbar^2} \quad \text{dvs}$$

"Trick" ta ena ħ i Js, andra i eVs.

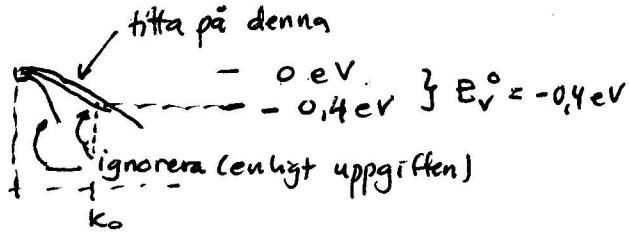
$$\frac{m_e^*}{m_e} = \frac{\hbar^2}{2c\,m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{E_\ell^0}\left(\frac{2\pi}{5a}\right)^2 = \frac{1{,}05\cdot10^{-34}\,Js \cdot 6{,}58\cdot10^{-16}\,eVs\,(2\pi)^2}{2\cdot 9{,}11\cdot10^{-31}\,kg \cdot 1{,}4\,eV\,(5\cdot 5{,}65\cdot10^{-10}\,m)^2}$$

$= 0{,}13$ Check enheter: $\frac{Js\,\cancel{eVs}}{kg\,\cancel{eV}\,m^2} = \frac{kg\,m^2}{s^2}\frac{s^2}{kg\,m^2} = 1$ OK!

$$\underline{m_e^* \approx 0{,}13\,m_e}$$

(allt mellan 0,05 och 0,25 accepteras med rätta argument)

pss avläsas för valensbandet :



$$b = \frac{-E_v^0}{k_0^2} = -E_v^0 \left(\frac{5a}{2\pi}\right)^2$$

och

$$\frac{1}{m_h^*} = -\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{2b}{\hbar^2}$$

dvs $\frac{m_h^*}{m_e} = \frac{\hbar^2}{m_e 2b} = \frac{\hbar^2}{2m_e(-E_v^0)}\left(\frac{2\pi}{5a}\right)^2 = \dots = 0{,}47$

dvs $\underline{m_h^* \approx 0{,}47 m_e}$ (allt mellan 0,3 och 0,7 accepteras m. rätta argument)

Om vi tittat vänster om Γ är skalan på k-axeln annorlunda eftersom

$$|\Gamma - L| = \frac{2\pi}{a}\left|\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix}\right| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3\cdot\left(\frac{1}{2}\right)^2} = \frac{2\pi}{a}\frac{\sqrt{3}}{2}.$$

Även kurverna är lite annorlunda. Ger alltså lite andra resultat.

[Materialet är GaAs som har $m_e^* \approx 0{,}067\, m_e$ och $m_h^* \approx 0{,}45\, m_e$, och vi fortsätter här med dessa värden – men hade absolut kunnat fortsätta med svaren från a). $E_g \approx 1.42$ eV vid 300 K]

b) Intrinsisk dvs

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

$T = 300$ K dvs $k_B T \approx 0{,}026$ eV. Sätt in, med m_e^*, m_h^*, E_g från [ ]-parentesen ovan,

$$n_i = p_i = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{0{,}026\,\text{eV}\; 9{,}11\cdot10^{-31}\,\text{kg}}{6{,}58\cdot10^{-16}\,\text{eVs}\; 1{,}05\cdot10^{-34}\,\text{Js}}\right)^{3/2}(0{,}067\cdot0{,}45)^{3/4}$$

$$\times\, e^{-1{,}42\,\text{eV}/2\cdot0{,}026\,\text{eV}}$$

$$= \underline{1{,}4\cdot10^{13}\,\text{m}^{-3}}$$

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

$= \text{m}^{-3}$ OK!

b) fortsatt Kemiska potentialen

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

$$= 0 + \frac{1}{2}\cdot 1.42\,eV + \frac{3}{4}\,0{,}026\,eV\ln\left(\frac{0{,}45}{0{,}067}\right)$$

$$= \underline{0.75\,eV}$$

Konduktivitet med $\mu_e = 0{,}80\ m^2/Vs$, $\mu_h = 0{,}03\,m^2/Vs$

$$\sigma_i = en_i\mu_e + ep_i\mu_h$$

$$= en_i(\mu_e + \mu_h)$$

$$= 1{,}6\cdot 10^{-19}\,C\ \ 1{,}4\cdot 10^{13}\,m^{-3}\ (0{,}80+0{,}03)\,m^2/Vs$$

$$= \underline{1{,}9\cdot 10^{-6}(\Omega m)^{-1}}$$

enheter: $\frac{C}{m^3}\frac{m^2}{Vs} = \frac{1}{\Omega m}$

$$\frac{C}{s}\frac{1}{V} = \frac{A}{V} = \frac{1}{\Omega}$$

c) Dopas med $n_d = 2\cdot 10^{23}\,m^{-3}$.

$T = 300\,K$ är i extrinsiska regimen dvs $n_d^+ = n_d$ (alla donorer joniserade).

Bestäm n & p.

Laddningsbevarning ger att $n = n_d^+ + p = n_d + p \approx n_d$

$n_d \sim 10^{23}\,m^{-3}$

$p < p_i \sim 10^{13}\,m^{-3}$

Alt. 1: sätt $\underline{n} = n_d + p \approx n_d \underline{= 2\cdot 10^{23}\,m^{-3}}$

Har också att $n_ip_i = np$ (forts. T=300K)

dvs $n_i^2 \approx n_dp$

dvs $p \approx n_i^2/n_d = (1{,}4\cdot 10^{13}\,m^{-3})^2/2\cdot 10^{23}\,m^{-3}$

$$= \underline{980\,m^{-3}}$$

Alt. 2: $n = n_d + p$

$n_i^2 = np = (n_d+p)p = p^2 + n_dp$ lösa ut p

"−"-lösning ger negativ p ↯

$$p = \frac{1}{2}\left(-n_d \pm \sqrt{n_d^2 - 4\cdot 1\cdot(-n_i^2)}\right) = \frac{1}{2}n_d\left(-1 \pm \sqrt{1 + 4n_i^2/n_d}\right)$$

$$\approx \frac{1}{2}n_d\left(-1 \pm \left(1 + \frac{1}{2}4n_i^2/n_d\right)\right) = \frac{1}{2}n_d\,2n_i^2/n_d = \underline{n_i^2/n_d}$$ som Alt. 1.

c) fortsatt, $\mu_{e,h}^{dopad} = 0.1\,\mu_{e,h}$.

Konduktivitet $\sigma_d = en\,0.1\,\mu_e + ep\,0.1\,\mu_h$

$$= e \cdot 0{,}1\,(n\mu_e + p\mu_h)$$

$$= 1{,}6 \cdot 10^{-19}\,C \cdot 0{,}1\,(2 \cdot 10^{23}\;0{,}80 + 980 \cdot 0{,}03)\,m^{-3}\frac{m^2}{Vs}$$

$$= \underline{2{,}6 \cdot 10^3 (\Omega m)^{-1}}\;(\gg \sigma_i\;!)$$

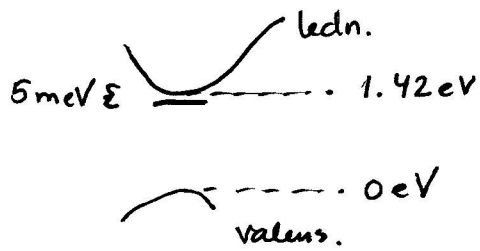
d) $\varepsilon_r = 13$ för halvledaren. Estimera E_d.

Väteatomen: Grundtillstånd $\quad E^H = -\dfrac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} = 13{,}6\,eV$

Ta $m_e \to m_e^*$

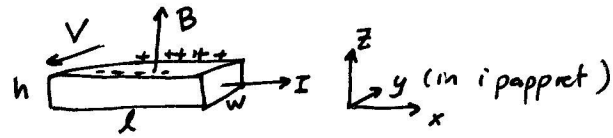
$\varepsilon_0 \to \varepsilon_r \varepsilon_0$

$$E_d \approx -\frac{m_e^* e^4}{8(\varepsilon_0\varepsilon_r)^2 h^2} = E^H \frac{m_e^*}{m_e}\frac{1}{\varepsilon_r^2} \approx 13{,}6\,eV\,\frac{0{,}067}{13^2} \approx \underline{5\,meV}$$



Uppgift 5

Hall koefficienten ges av $R_H = \frac{E_y}{j_x B_z} = \frac{1}{q n_q}$ när en laddningsbärare dominerar och x-y-z-koordinatsystemet är givet som här:



Vi har $h = 1\,mm$, $w = 10\,mm$, $\ell = 40\,mm$, $B = 0{,}3\,T$, $I = 10\,mA$, $V = 5\,mV$.

a) $R_H = ?$ $\quad E_y = -\frac{V}{w}$ (i negativ riktning, enligt fördelning av + & − i ritning)

$$j_x = \frac{I}{h \cdot w}$$

$$R_H = -\frac{V}{\cancel{w}} \frac{h \cdot \cancel{w}}{I} \frac{1}{B} = -\frac{5\,mV \cdot 1\,mm}{10\,mA \; 0{,}3\,T} = \underline{-1{,}7 \cdot 10^{-3} \; \frac{m^3}{C}}$$

Check enhet: $T = \frac{Vs}{m^2}$ dvs $\frac{Vm}{AT} = \frac{Vm\,m^2}{A\,Vs} = \frac{m^3}{As} = \frac{m^3}{C}$

Med $R_H < 0$ är laddningsbärarna elektroner ($q = -e$).

b) $n = ?$

$$n = -\frac{1}{R_H e} = -\frac{1}{(-1.7) \cdot 10^{-3} \frac{m^3}{C} \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19} C} = \underline{3{,}8 \cdot 10^{21} \; m^{-3}}$$

Detta är ett rimligt värde för dopning. Ungefär $10^{24}/m^{-3}$ är mycket hög dopning, omkring 10^{16} är realistisk täthet för odopad material, så någonstans däremellan är rimligt.

c) Resistiviteten $\rho = \frac{E_x}{j_x} = \frac{U/\ell}{I/hw} = \frac{100\,mV}{10\,mA} \frac{1\,mm \; 10\,mm}{40\,mm}$

$$= \underline{2{,}5 \cdot 10^{-3} \; \Omega m}$$

d) Mobilitet

$$\mu = \frac{R_H}{-\rho} = \frac{-1.7 \cdot 10^{-3} \; m^3/C}{-2{,}5 \cdot 10^{-3} \; \Omega m} = \underline{0{,}68 \; \frac{m^2}{Vs}}$$