Tentamen i Fasta tillståndets fysik (TIF400/FYP330)

Tid: fm, 2024-04-03

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

Antag att Du har en BCC-struktur med kantlängden a=3.16 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 (110)-planet och gör en separat skiss av planet med markeringar för atomerna. Beräkna packningstätheten för (110)-planet uttryckt atomer per nm^2. **(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 Wigner-Seitz cellen i xz-planet. Ange Miller index för de fyra punkterna närmast origo 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·55 och f_{Cl} =

$C \cdot 17$ där C är en konstant. Lista Miller index för de tre kortaste planavstånden där villkoret för diffraktion är uppfyllt. **(10p)**

b. Du studerar materialet med röntgenstrålning med våglängden 1.54 Å och elektronstrålning med våglängden 2.51 pm. Strålningen faller in längs [02-1] 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) Rita ett rektangulärt 2D-gitter med sidorna 3 Å (x-riktning) och 4 Å (y-riktning). **(2p)**

b) Rita det reciproka gittret. **(5p)**

c) Markera första och andra Brillouin-zon. Rita noggrant så att de geometriska formerna tydligt syns. **(5 p)**

d) Rita vågvektorn k=[3,4 ; 1,2] $Å^{-1}$ och bestäm vektorn i första Brillouin-zon som har samma fysikaliska mening gällande gittersvängningar. Rita denna vågvektor, och ange den med siffror. **(8 p)**

Uppgift 4

Vi ska här fokusera på intrinsiska (odopade) halvledare.

a) Visa att om valens- och ledningsband har samma effektivmassa, $m_e^* = m_h^*$, då är kemiska potentialen mitt i bandgapet, $\mu = E_g/2$. **(5p)**

b) Visa att om R är resistansen i en cylinder med tvärsnittsarea A och längd L, då är sambandet mellan resistans och konduktivitet σ givet vid $R = L/(A\sigma)$. **(5p)**

c) För ett prov med odopad germanium mäts följande resistanser vid olika temperaturer T:

T(K)	310	321	339	360	383	405	434
R(Ω)	13.5	9.10	4.95	2.41	1.22	0.74	0.37

Antag att mobiliteten för elektron och hål (μ_e och μ_h) ej beror på temperaturen, och att vi kan försumma temperaturberoendet för elektrontätheten *bortsett* från den dominerande (exponentiella) faktorn.
Beskriv hur energigapet kan bestämmas ur en simpel (linjär) graf, rita grafen hörande till ovanstående mätvärden, och bestäm E_g. **(10p)**

Uppgift 5

I en halvledare beskrivs ledningsbandet (i 3D) kring botten i **k** = 0 som

$$E(\mathbf{k}) = A \{1 - \exp(- a k_x^2 - b k_y^2 - b k_z^2)\}$$

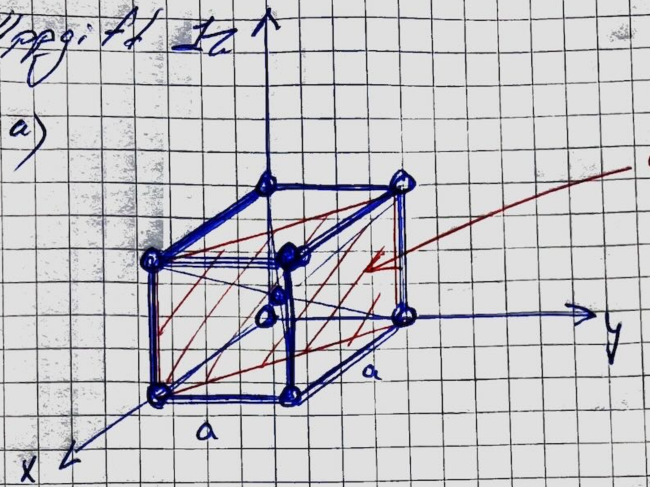
där A, a och b, med $a \neq b$, är positiva konstanter i SI enheter och $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$.

a) Skissa ledningsbandet (utan värden men med positiva konstanter) kring **k** = 0 i en av dimensionerna. **(5p)**
b) Bestäm den inverse effektiva massan i **k** = 0. **(15p)**

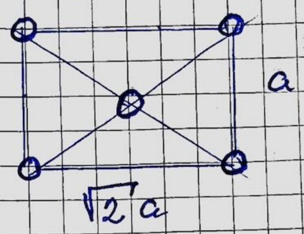
Uppgift 1a

a)

(110)-planet



(110)-planet



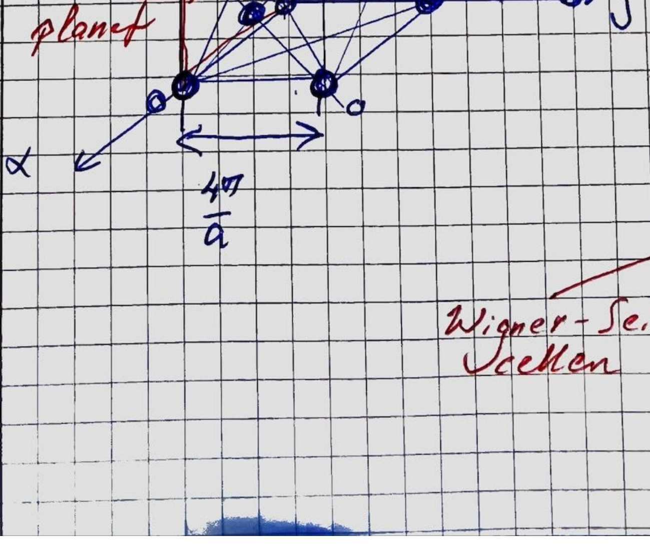
Area: $\sqrt{2}\, a^2$

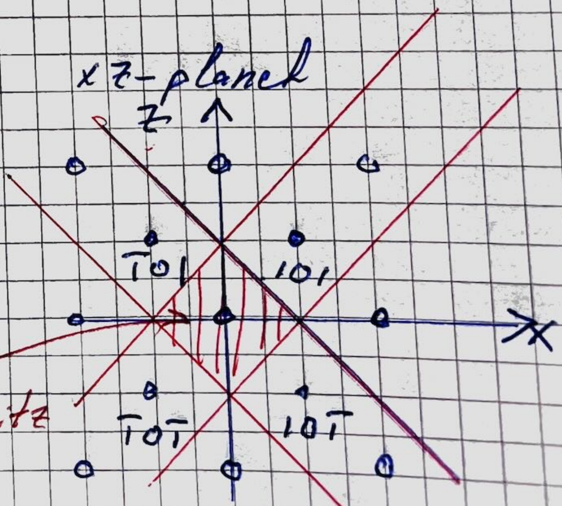
Antal atomer: 2

Packningsdäthet: $\dfrac{2}{\sqrt{2}\, a^2} = \dfrac{\sqrt{2}}{0.316^2}$ atomer/nm^2

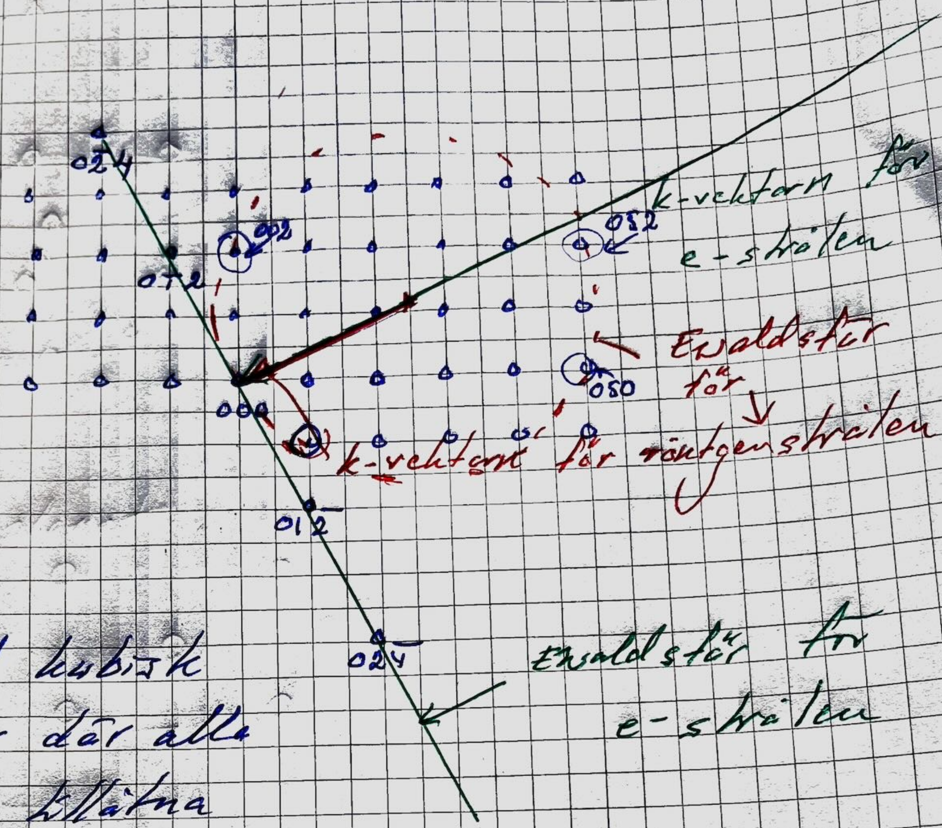
$= 14.2$ atomer/mm^2

b)





Uppgift 2 b



Enkel kubisk struktur där alla hkl är tillåtna

$|k_{e^-}| >> |G_{02\bar{1}}|$ ⇒ Ewaldsfären är i princip ett plan. Diffraktion erhålles för $(01\bar{2})$, $(0\bar{1}2)$, $(02\bar{4})$, $(0\bar{2}4)$ ... planen

$$\frac{|k_{röntgen}|}{|G_{010}|} = \frac{\frac{2\pi}{1.54}}{\frac{2\pi}{4.119}} = \frac{4.119}{1.54} = 2.675$$

För röntgen erhålls diffraktion enligt skiss för (002) (052) och (050) planen

Uppgift 2a

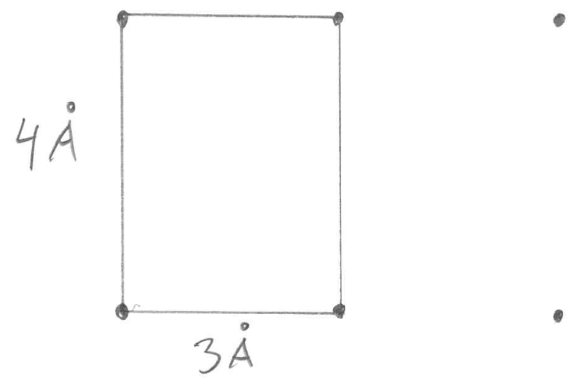
Enkel kubisk struktur med basen Cs i (0, 0, 0) och Cl atom i (1/2,1/2,1/2)

detta ger

$S_{hkl} = \sum_{j=1}^{2} f_j\, e^{-i\boldsymbol{\pi G}\,\boldsymbol{r}_j} = f_{Cs} + f_{Cl}e^{-i\pi 1/2(h+k+l)}$

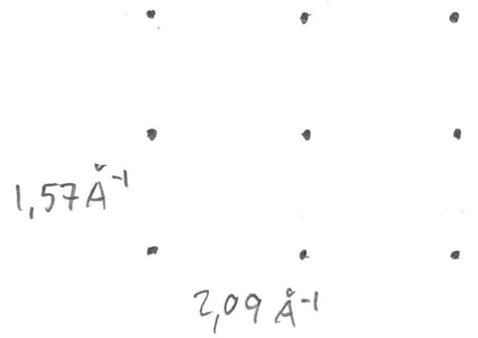
som är f_{Cs} + f_{Cl} = C (55+17)= 72C om h+k+l är ett jämnt tal
f_{Cs} - f_{Cl} = C (55-17) = 38C om h+k+l är ett udda tal

③ a)

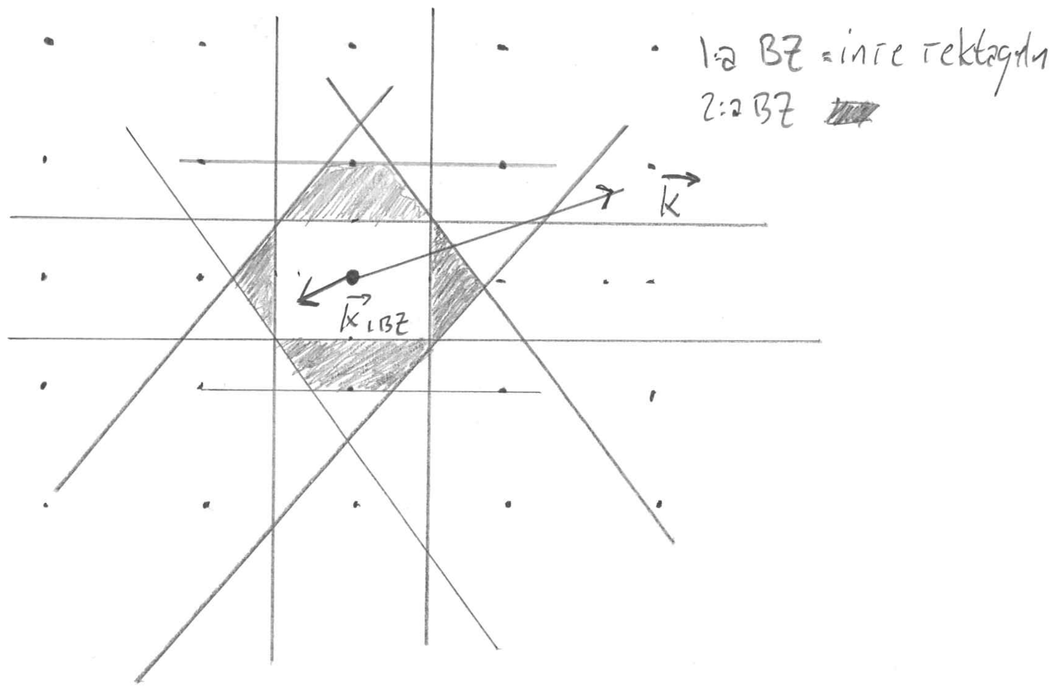


b) $\vec{a}_1 = 3\hat{x}$ (Å) $\rightarrow$ $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3}\hat{x} = 2{,}09\,\hat{x}$ (Å^{-1})

$\vec{a}_2 = 4\hat{y}$ (Å) $\quad$ $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{4}\hat{y} = 1{,}57\,\hat{y}$ (Å^{-1})



c)



d) $\vec{k} = 3{,}4\,\hat{x} + 1{,}2\,\hat{y}$ Å^{-1}

$\vec{k}_{1BZ} = (3{,}4 - 2\cdot 2{,}09)\hat{x} + (1{,}2 - 1{,}57)\hat{y} = -0{,}78\,\hat{x} - 0{,}37\,\hat{y}$ (Å^{-1})

$\vec{k}_{1BZ} = \vec{k} - 2\vec{b}_1 - \vec{b}_2$

Uppgift 4 Odopad halvledare

a) om $m_e^* = m_h^*$ är $\mu = E_g/2$:

För odopade halvledare är

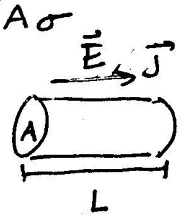
$$\mu = E_V + \frac{1}{2} E_g + \frac{3}{4} k_B T \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right)$$

här: $\ln \frac{m_h^*}{m_e^*} = \ln 1 = 0$ dvs $\mu = E_V + \frac{1}{2} E_g$,

antag att valensbandets topp (som vanligt) är nollpunkt för energin,

då är $\underline{\mu = \frac{1}{2} E_g}$.

b) Visa $R = L/A\sigma$



För uniformt fält över längden L är potentialen $V = E \cdot L$

Strömtätheten j ges av $j = \frac{I}{A}$ där I är strömmen genom cylindern.

Konduktiviteten är definerat vid $j = \sigma E$

Ohm's lag säger $V = RI$.

Ur detta fås $R = \frac{V}{I} = \frac{EL}{jA} = \underline{\frac{L}{\sigma A}}$.

c) För odopad halvledare gäller att

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

Vi har också för konduktiviteten att

- $\sigma = en\mu_e + ep\mu_h$ generellt, där $\mu_{e,h}$ är mobiliteten för elektron och hål. Med givna förutsättningar har vi

- $\sigma = en(\mu_e + \mu_h)$ där endast n beror på T

och $R = \frac{L}{A} \sigma^{-1} = \frac{L}{Ae(\mu_e + \mu_h)} \frac{1}{n}$

Ta naturliga logaritmen på båda sidor

$$\ln R = \ln\left(\frac{L}{A\,e(\mu_e+\mu_h)}\right) - \ln(n)$$

I $n(T)$ antar vi (enligt uppgiften) att T-beroendet i $(\ldots)^{3/2}$-faktorn i n kan försummas. Skriv därför

$$\ln(n) = \ln\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\underbrace{\frac{k_B T}{\pi\hbar^2}}_{\text{ignorera T-beroendet}}\right)^{3/2}(m_e^* m_h^*)^{3/4}\right) - \frac{E_g}{2}\underbrace{\frac{1}{k_B T}}_{\text{enda T-beroendet}}$$

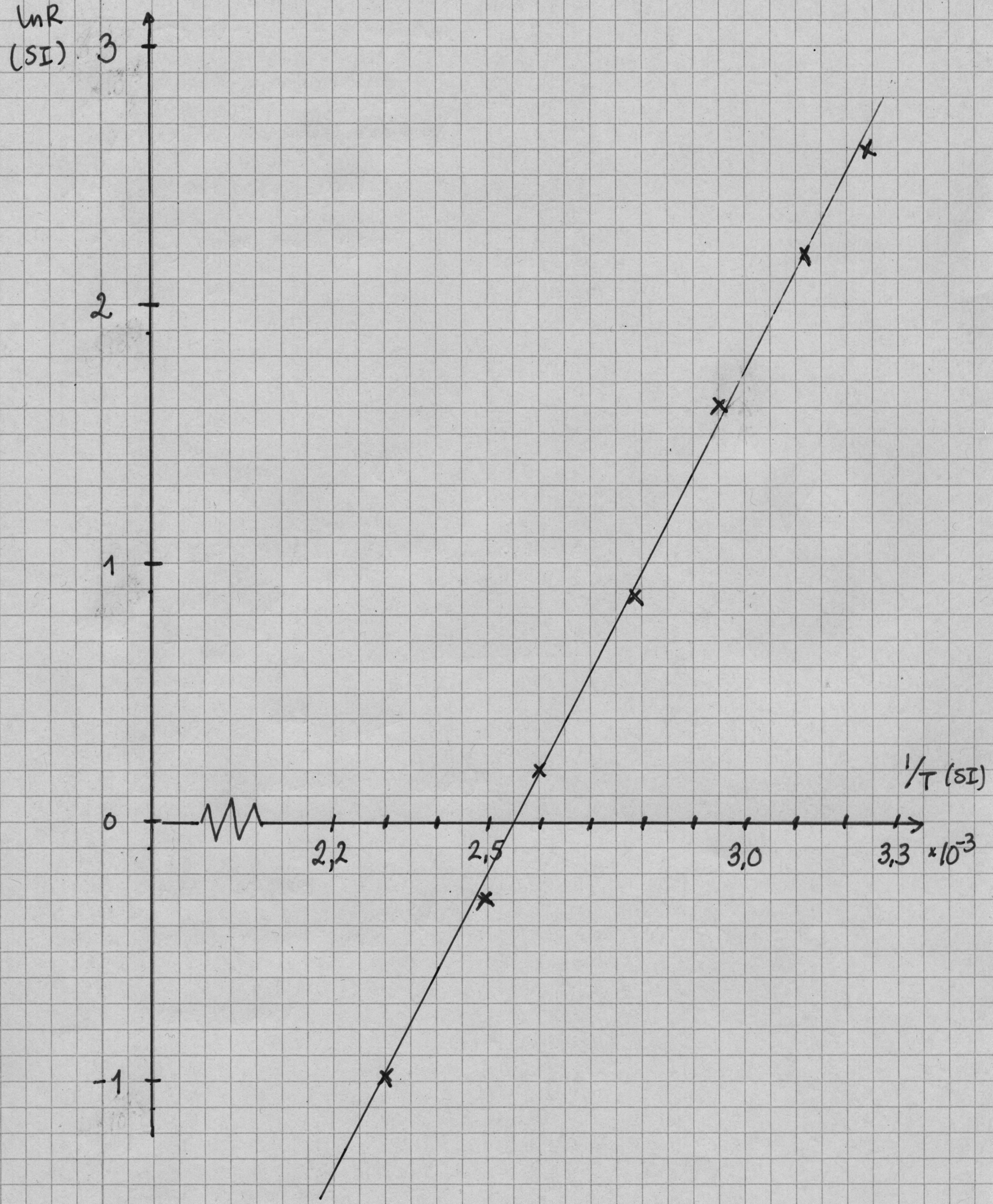
dvs

$$\ln R = \text{konstant} + \frac{E_g}{2}\frac{1}{k_B T}$$

Genom att plotta $\ln R$ mot $\frac{1}{T}$ fås en rät linje och lutningen $E_g/(2k_B)$ ger värdet på E_g.

Värden i SI:

T	1/T	R	ln R
310	$3.23\cdot10^{-3}$	13.5	2.60
321	3.12	9.10	2.21
339	2.95	4.95	1.60
360	2.78	2.41	0.88
383	2.61	1.22	0.20
405	2.47	0.74	-0.30
434	2.30	0.37	-0.99



Lutning $\frac{2,7 - (-1)}{(3,25 - 2,3) \cdot 10^{-3}} = 3,9 \cdot 10^3$ (SI)

Ur grafen får vi

$$\frac{E_g}{2k_B} = 3{,}9 \cdot 10^3 \quad (SI)$$

dvs

$$E_g = 2 \cdot k_B \cdot 3{,}9 \cdot 10^3 \; (SI)$$

$$= 2 \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 3{,}9 \cdot 10^3 \text{ J}$$

$$= \underline{1{,}07 \cdot 10^{-19}} \text{ J}$$

$$= \underline{0{,}67 \text{ eV}}$$

Uppgift 5. Halvledares ledningsband i 3D

$$E(\vec{k}) = A\left(1 - e^{-ak_x^2 - bk_y^2 - bk_z^2}\right)$$

$A, a \neq b$ konstanter > 0.

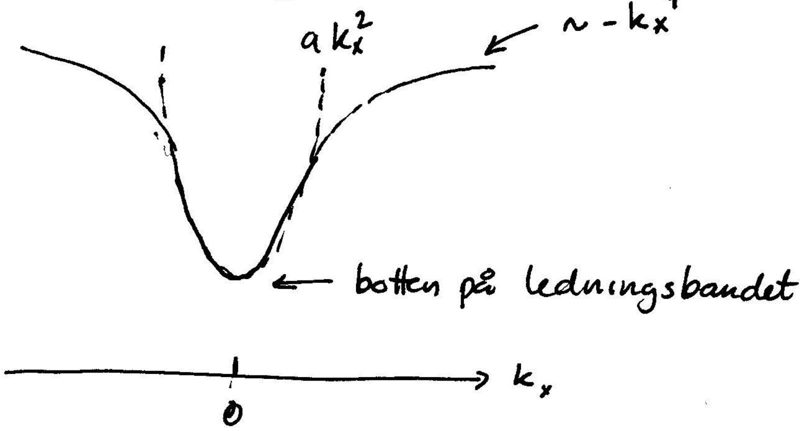
a) Skiss ledningsband:

$$E(k)/A \sim 1 - e^{-ak_x^2}$$

Taylorexpansion

$$\leftarrow \quad e^{-ak_x^2} \cong 1 - ak_x^2 + \frac{1}{2}a^2k_x^4 + \ldots$$

$$\sim ak_x^2 - \frac{1}{2}a^2k_x^4$$



b) (Inverse) effektiva massan i $\vec{k} = 0$:

$$\underline{\underline{\left(\frac{1}{m_e^*}\right)}} = \frac{1}{\hbar^2}\nabla_k^2 E(\vec{k})$$

Derivater:

$$\frac{\partial}{\partial k_x}E(\vec{k}) = -A\,e^{-ak_x^2 - bk_y^2 - bk_z^2}\,(-2ak_x)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial k_x^2}E(\vec{k}) = -A e^{\cdots}(-2ak_x)^2 - Ae^{\cdots}(-2a)$$

$$= -Ae^{\cdots}\left((-2ak_x)^2 - 2a\right)$$

$$\left.\frac{\partial^2}{\partial k_x^2}E(\vec{k})\right|_{\vec{k}=0} = A \cdot 1\,(0 + 2a) = 2aA$$

$$\frac{\partial^2}{\partial k_x \partial k_y}E(\vec{k}) = -A\,e^{\cdots}(-2ak_x)(-2bk_y) - Ae^{\cdots}\cdot 0$$

$$\left.\frac{\partial^2}{\partial k_x \partial k_y}E(\vec{k})\right|_{\vec{k}=0} = 0$$

pss för övriga

dvs

$$\underline{\underline{\left(\frac{1}{m_e^*}\right)}} = \frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} 2aA & 0 & 0 \\ 0 & 2bA & 0 \\ 0 & 0 & 2bA \end{pmatrix}$$

$$= \frac{2A}{\hbar^2}\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}$$

Anisotropisk!