

Tentamen i Fasta tillståndets fysik (TIF400/FYP330)

Tid: em, 2024-08-24

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 kubisk struktur med kantlängden $a=4.1 \text{ \AA}$. Placera in basen som beskrivs av atom A i $(0,0,0)$ och atom B i $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ och $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

- a) Rita enhetscellen med markerade koordinataxlar x , y och z samt rita in atomerna. Markera (211) - och (110) -planen. **(5p)**
- b) Ta fram uttrycket för de reciproka enhetsvektorerna samt rita det reciproka gittret och markera koordinataxlarna x , y , z samt indexera de 8 gitterpunkter som är närmast origo. Ange kantlängderna på enhetscellen i det reciproka gittret. Redovisa hur Du tar fram enhetsvektorerna. **(10p)**
- c) Beräkna packningstätheten uttryckt i atomer per ytenhet, nm^2 , för (111) -planen. **(5p)**

(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 FCC-struktur. Kantlängden på enhetscellen är $4.08 \text{ \AA}$.

Du studerar materialet med röntgenstrålning med våglängden $1.54 \text{ \AA}$ och med elektronstrålning med våglängden 2.51 pm . Strålningen faller in längs $[0-2-1]$ i båda fallen.

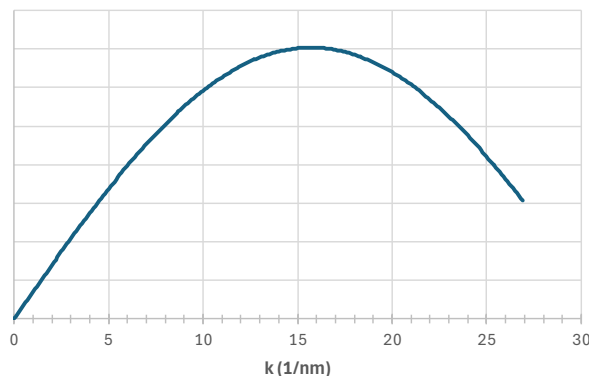
- Konstruera Ewald sfären för båda fallen med korrekt längd och riktning på $\mathbf{k}$ -vektorer och rita cirklarna där Ewald sfären skär yz -planet. Har Du ritat sfärerna i det reella rummet eller reciproka rummet? **(10p)**
- Indexera punkterna närmast origo i yz -planet. Du skall rita och indexera minst 12 stycken punkter. **(5p)**
- Vilket villkor skall vara uppfyllt för diffraktion? För vilka (hkl) i yz -planet erhålls diffraktion för de två strålningarna med denna infallsriktningen? **(5p)**

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

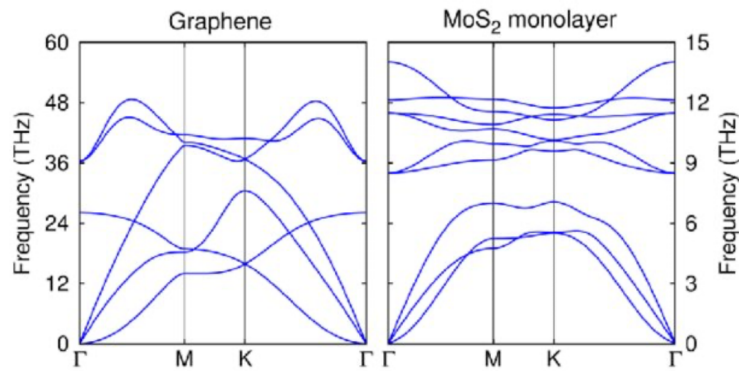
Uppgift 3

I figuren nedan visas (en del av) dispersionsrelationen för nickel (Ni). Tyvärr finns det inte någon information på y-axeln.

- Använd den en-dimensionella modellen för gittersvängningar samt informationen i figuren och att ljudhastigheten för Ni är 4970 m/s för att bestämma fjäderkonstanten. Atomvikten för Ni är $58,7 \text{ u}$. **(10 p)**



- Figuren nedan visar dispersionsrelationer för grafen och MoS_2 , som båda är 2D-material. Hur många atomer finns det i den primitiva enhetscellen för de två materialen? **(4 p)**



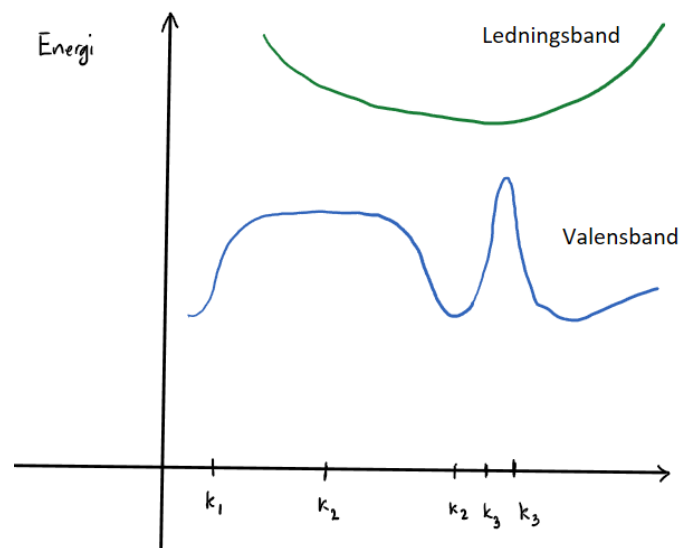
- c) Vilka fononenergies finns i MoS₂ uttryckt i eV? Observera att y-axeln är i frekvens, inte vinkelfrekvens.

(6 p)

Uppgift 4

- a) Inför begreppet hål, och ange i vilket sammanhang begreppet används. Beskriv var i nedanstående bandstruktur (vid vilket k-värde, vilken kurva) som hålmassan är som störst. Motivera!

(10p)



- b) Redogör för en enkel modell med vars hjälp man kan uppskatta energin för donatornivån ΔE_d jämfört med lägsta energin i ledningsbandet, och beräkna/estimera med hjälp av modellen värdet på ΔE_d för fosfordonatorer i kisel.

Fysikaliska värden som behövs för estimatet finns i Physics Handbook.

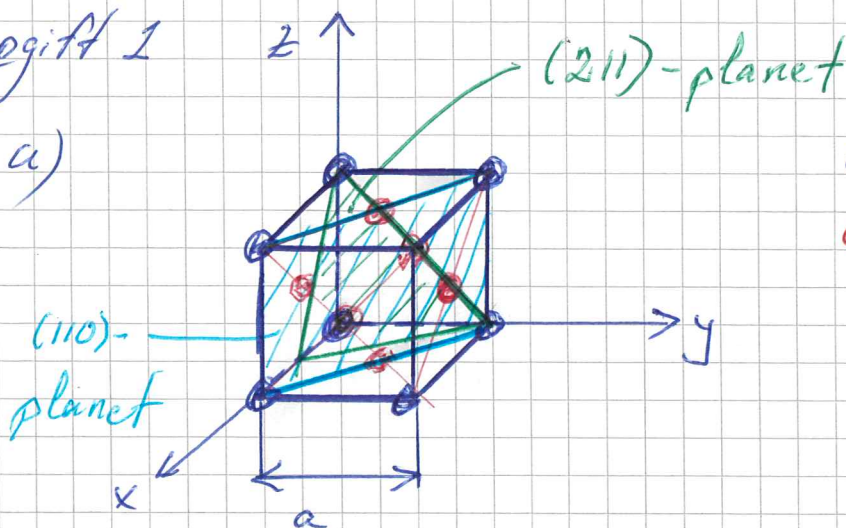
(10p)

Uppgift 5

- a) En simpel metall antags kan beskrivas med fri-elektron-modellen. Metallen har Fermitemperatur 160 000 K.
Bestäm värden på metallens Fermienergi, Fermivektor, och elektrontätheten.
(10p)
- b) Hur ser uttrycket för en Bloch-vågfunktion ut, i vilka sorters system används den, och vad är den viktigaste egenskap för en sådan vågfunktion. Motivera!
(10p)

Uppgift 1

a)



● A
● B

b)

Enhetsvektorer i reella rummet:

$$\vec{a}_1 = a \hat{x}$$

$$\vec{a}_2 = a \hat{y}$$

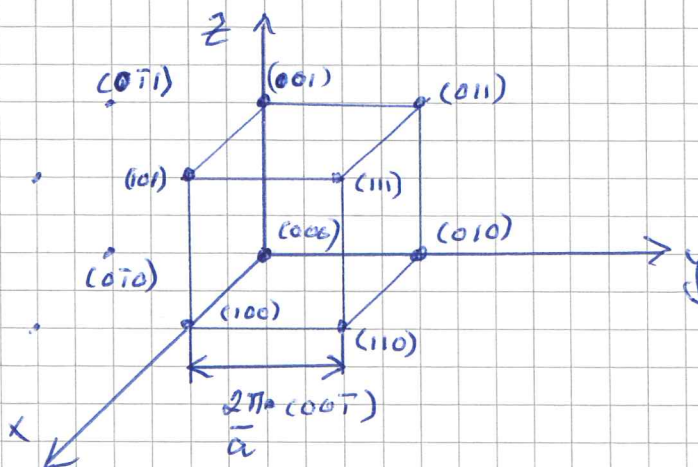
$$\vec{a}_3 = a \hat{z}$$

Reciproka enhetsvektorer:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a^3} \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{2\pi}{a} \hat{x}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a^3} \cdot \vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{y}$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a^3} \cdot \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{z}$$

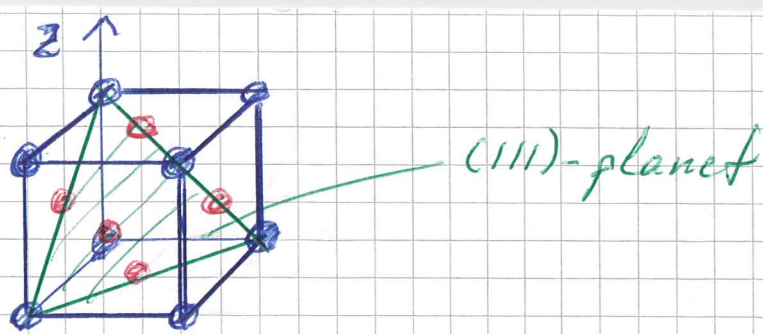


• reciprok
gitterpunkt

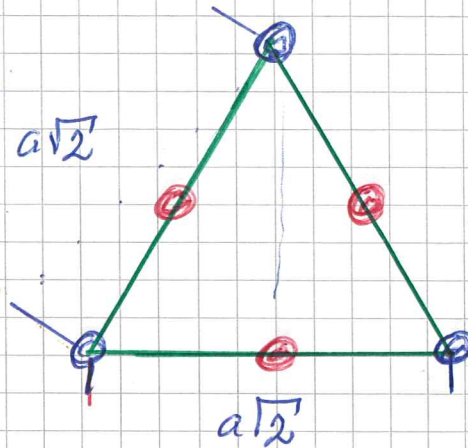
Gitterpunkter
närmast origo:

$(100), (010), (001),$
 $(\bar{1}00), (\bar{0}10), (\bar{0}0\bar{1})$
 $(110), (101), (011)$
 $(\bar{1}\bar{1}0), (\bar{1}0\bar{1}), (0\bar{1}\bar{1})$
 $(\bar{1}10), (\bar{1}01), (0\bar{1}1)$
 $(1\bar{1}0), (10\bar{1}), (01\bar{1})$

c)



(111)-planet



Antal atomer: $3 \cdot \frac{1}{2} + 3 \cdot \frac{1}{6} = 1.5 + 0.5 = 2$

Area: $\frac{1}{2} \cdot a\sqrt{2} \cdot \sqrt{a^2 \cdot 2 - \frac{1}{4} \cdot a^2 \cdot 2} =$

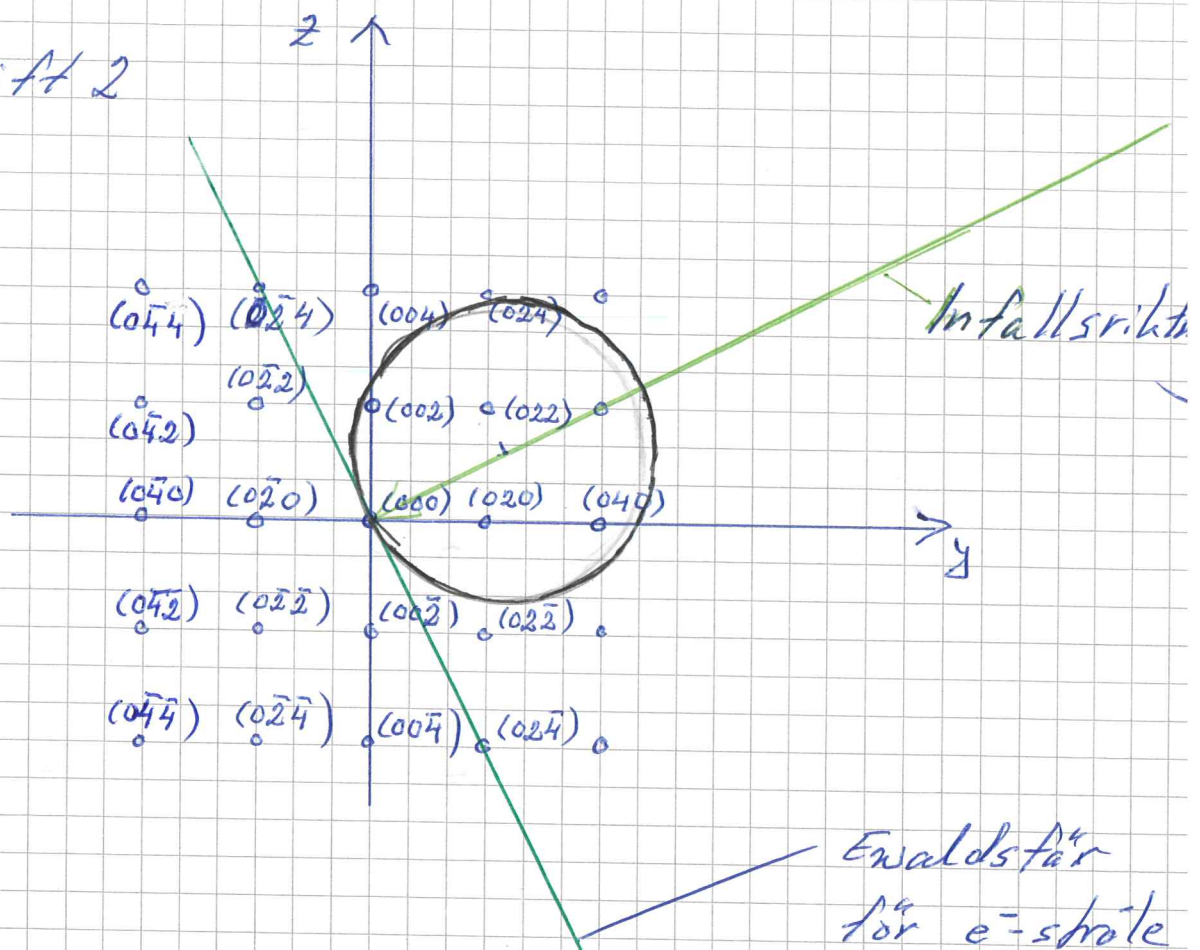
$= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot a \cdot \sqrt{\frac{3}{2} \cdot a^2} = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot a^2$

Packningstäthet = $\frac{2}{\frac{\sqrt{3}}{2} \cdot a^2} = \frac{4}{\sqrt{3}} \cdot \frac{1}{a^2} =$

$= \frac{4}{\sqrt{3}} \cdot \frac{1}{0.41^2} = 14 \text{ atomer/nm}^2$

Uppgift 2

a)



Ewaldsfären konstrueras i reciproka rummet

Radien för Ewaldsfären ges av $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

Våglängden för elektronstrålen är ~~2.51~~ 2.51 pm vilket medför att längden av $\vec{k}$ -vektorn för e^- -strålen är $\gg$ längden på g_{020} och g_{022} . Ewaldsfären blir då en linje, se figur, i yz -planet.

För röntgenstrålen gäller

$$\frac{\frac{2\pi}{\lambda_{\text{röntgen}}}}{\frac{2\pi}{d_{020}}} = \frac{4.08 \cdot \frac{1}{2}}{1.54} = 1.32$$

Radien på Ewaldsfären är $1.32 \cdot |g_{020}|$, se figur

b) Se figar i a)

c) När Ewaldsfären skär genom en reciprok gitterpunkt erhålles diffraction.

För e^- -strålen erhålles diffraction för (024) och $(0\bar{2}4)$.

För röntgenstrålen erhålles ingen diffraction enligt figar.

③ Från figuren (BZ-gränsen) ser vi att $k = \frac{\pi}{a} \approx 16 \text{ nm}^{-1}$

a) $\rightarrow a = \frac{\pi}{16} = 0,196 \text{ nm}$

$$v = a \sqrt{\frac{\gamma}{M}} \rightarrow \gamma = \frac{v^2}{a^2} M = \frac{4970^2}{(0,196 \cdot 10^{-9})^2} \cdot 58,7 \cdot 1,67 \cdot 10^{-27}$$

$$\underline{\underline{\gamma = 63 \text{ N/m}}}$$

b) Antal grenar för grafen = 6 $\rightarrow P = \frac{N}{3} = \underline{\underline{2}}$

Antal grenar för $\text{MoS}_2 = 9 \rightarrow P = \frac{N}{3} = \underline{\underline{3}}$

c) $E = \hbar \omega = \hbar f$

Vi har $0 < f < 7 \text{ THz}$ och $8,5 < f < 14 \text{ THz}$

$$E(7 \text{ THz}) = 6,626 \cdot 10^{-34} \cdot 7 \cdot 10^{12} \text{ J} = 4,6 \cdot 10^{-21} \text{ J} = 29 \text{ meV}$$

$$E(14 \text{ THz}) = 9,3 \cdot 10^{-21} \text{ J} = 58 \text{ meV}$$

$$E(8,5 \text{ THz}) = 5,6 \cdot 10^{-21} \text{ J} = 35 \text{ meV}$$

Snyggare med meV...

Alltså $0 < E < 29 \text{ meV}$ och $35 \text{ meV} < E < 58 \text{ meV}$

Uppgift 4

- a) Hål introduceras i Hofmann kapitel 7 (Semiconductors), s. 134 i 2.edition.
Används i beskrivning av halvledare och är avsaknad av elektron i valensbandet, Hålmassan ges av följande uttryck (i 1dim)

$$\frac{1}{m_h^*} = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E(k)}{dk^2}$$

(OBS minus!) och största m_h^* finns där $\left| \frac{d^2 E(k)}{dk^2} \right|$ är som minst, dvs i området på valensbandskurven nära k_z .

- b) Genom att jämföra med vätes bindningsenergi kan energin ΔE_d estimeras, då det är energin som krävs för att dra loss den extra elektronen på P-atomet och lämna den i sjön av Si-lednings-elektroner. (joniseringsenergi)

Väte $E_0 = -\frac{m_e}{32\pi^2 \hbar^2} \frac{e^4}{\epsilon_0^2} = -1 \text{ Ry} = -13,6 \text{ eV}$

Coulomb i dielektrikum med $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$

$$F_{\text{Coul}} = -\frac{1}{\epsilon} \frac{q_1 q_2}{r^2} = -\frac{e^2}{\epsilon} \frac{1}{r^2}$$

$$\text{dvs } \frac{e^2}{\epsilon_0} \rightarrow \frac{e^2}{\epsilon} = \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{\epsilon_r}$$

Effektiv massa $m_e \rightarrow m_e^*$

dvs joniseringsenergi dopant

$$-\Delta E_d = E^{\text{dop}} = E^{\text{väte}} \frac{m_e^*}{m_e} \frac{1}{\epsilon_r}$$

För Si har vi i Physics Handbook (Tabell T8.5 i min utgåva)

$$m_e^* = 0,26 m_e$$

$$\epsilon_r = 11,9$$

$$\text{dvs } \Delta E_d = \underline{25 \text{ meV}}$$

Uppgift 5

a) Simpel metall, fri-elektron-modellen.

$$T_F = 1,6 \cdot 10^5 \text{ K}$$

$$\text{P.H.: } E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} = k_B T_F, \quad k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

$$E_F = k_B T_F = 8,6 \cdot 10^{-5} \text{ eV K}^{-1} \cdot 1,6 \cdot 10^5 \text{ K} = \underline{13,8 \text{ eV}}$$

$$k_F = \frac{1}{\hbar} (2m_e E_F)^{1/2} = (1,1 \cdot 10^{-34} \text{ J s})^{-1}$$

$$\times (2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 13,8 \text{ eV} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \frac{\text{J}}{\text{eV}})^{1/2}$$

$$\approx \underline{1,8 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}}$$

Enheter:

$$\frac{(\text{kg} \cdot \text{eV} \cdot \text{J/eV})^{1/2}}{\text{J s}} = \frac{(\text{kg}^2 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2})^{1/2}}{\text{J s}} = \frac{\text{kg m}}{\text{s}} \frac{\text{s}^2}{\text{kg m}^2 \text{ s}}$$

$$= \text{m}^{-1} \quad \text{OK.}$$

$$n = k_F^3 / 3\pi^2 \approx \underline{2 \cdot 10^{29} \text{ m}^{-3}}$$

b) Bloch vågfunktion : Används i periodiska potential.

Kan skrivas

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_k(\vec{r})$$

där $u_k(\vec{r})$ har samma periodicitet som potentialen, medan fasen $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ inte har den periodiciteten, och därmed ej $\psi_k(\vec{r})$.

Däremot har absolutkvadraten (elektronens sannolikhetsstäthet, dvs mätbar kvantitet i kvanten) samma periodicitet som potentialen

$$|\psi|^2 = \underbrace{|e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}|^2}_{=1} |u_k(\vec{r})|^2 = |u_k(\vec{r})|^2$$

Bloch vågfunktionerna beskriver elektronerna i det periodiska materialet (krySTALLGITTER), men vågfunktionen i sig är ingen observabel i kvantmekanisk mening och måste därför inte uppfylla periodiciteten.