

Tentamen i Fasta tillståndets fysik (TIF400/FFY012/FYP330)

Tid: em, 2025-01-17

Examinator: Mattias Thuvander (3322)

Lärare vid tentamen:

Frågorna 1 och 2, Julia Maibach (031 772 1258)

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!

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

Uppgift 1

Krom (Cr) har ett bcc-gitter med en gitterkonstant på $a = 2,91 \text{ \AA}$. I den konventionella enhetscellen finns två atomer i $(0,0,0)$ och $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ och gittervektorerna beskrivs med $\vec{a} = a\hat{x}$, $\vec{b} = a\hat{y}$, $\vec{c} = a\hat{z}$.

- a) Rita konventionella enhetscellen med markerade koordinataxlar x, y, z och rita även den primitiva enhetscellen (tips: du kan behöva ta med atomer från angränsande enhetsceller). Ange gittervektorerna för den primitiva enhetscellen som en funktion av a.

(8 p)

- b) Beräkna atomradien för Cr. Antag att atomerna är hårda sfärer.

(5 p)

- c) Rita det reciproka gittret (baserad på konventionella enhetscellen). Markera enhetscellen och koordinataxlar x, y och z. Ange kantlängden på enhetscellen uttryckt i a. Skriv Miller-indexet för de 8 gitterpunkter som är närmast (000) i yz planet.

(7 p)

Uppgift 2

Antag att Du har en Polonium enkristall av SC struktur med gitterkonstanten $a = 3,36 \text{ \AA}$. Du studerar den med röntgenstrålning (våglängd $1,54 \text{ \AA}$) och elektronstrålning (våglängd $2,51 \text{ pm}$). Strålningen faller längs $[0-31]$ i båda fallen.

- a) Konstruera Ewaldsfären för röntgendiffraktion och rita Ewaldsfären som skär yz-planet. Ritar du Ewaldsfären i det reciproka eller i det reella rummet? Vilka villkor måste vara uppfyllda och för vilka (hkl) i yz-planet erhålls diffraktion?

(9 p)

- b) Beräkna längden på vågvektorn $\mathbf{k}$ för elektronerna i förhållande till reciproka gittervektorn. Rita Ewaldsfären för samma infallsriktning för elektrondiffraktion. För vilka (hkl) i yz-planet erhålls diffraktion?

(5 p)

- c) Beskriva hur röntgendiffraktionsexperimentet kan förändras för att få diffraktion från (022) planskaran.

(6 p)

Uppgift 3

- a) Vi har ett 2D kvadratisk gitter med gitterkonstant $3,14 \text{ \AA}$. Rita upp det reciproka gittret och markera 1:a och 2:a Brillouinzon.

(5 p)

- b) I gittret i a) har en gittersvängning vågvektorn $\mathbf{k}=[5,7; 2,5] \text{ \AA}^{-1}$. Ange motsvarande vågvektor i 1:a Brillouinzon.

(5 p)

- c) I ett experiment på en kristall med SC struktur och gitterkonstant $3,0 \text{ \AA}$ har de inkommande neutronerna vågvektorn $\mathbf{k}_{\text{in}}=[4,9; 0; 0] \text{ \AA}^{-1}$. Efter interaktion med en fonon har den utgående neutronen vågvektorn $\mathbf{k}_{\text{ut}}=[4,7; 0,9; 0] \text{ \AA}^{-1}$. Vilken vågvektor hade fononen (i 1:a Brillouinzon)? Skapades eller förintades fononen? Rita en figur med vågvektorerna.

(5 p)

- d) Vilken vinkelfrekvens hade fononen i uppgift c)?

(5 p)

Uppgift 4

Blochvågor i en dimension

- a) För en kristall med gitterkonstant a ska du ange vilka av nedanstående funktioner som är Blochvågor. För varje funktion ska du motivera ditt svar.

- (1) $f_k(x) = \exp(i a x) \sin(\pi x/a)$
- (2) $f_k(x) = \exp(i a x) \sin(2 \pi x/a)$
- (3) $f_k(x) = \exp(i k x) \sin(\pi x/a)$
- (4) $f_k(x) = \exp(i k x) \sin(2 \pi x/a)$

(10p)

- b) För de mer generella Blochvågfunktionerna $\Psi_k(x)$ som vi introducerade i kursen (och kurslitteraturen), vilken periodicitet uppfyller (för 1 dimension)

- (1) $\Psi_k(x)$?
- (2) $|\Psi_k(x)|^2$?

Motivera.

(5p)

- c) Antag att för Blochvågen i fråga b) är $\Psi_{k=\pi/a}(x = x_0) = A$, där A är ett komplext värde. Vilket värde har $\Psi_{k=\pi/a}$ i motsvarande punkt i angränsande enhetsceller, dvs i $x = x_0 - a$ och i $x = x_0 + a$?

(5p)

Uppgift 5

Halvledare

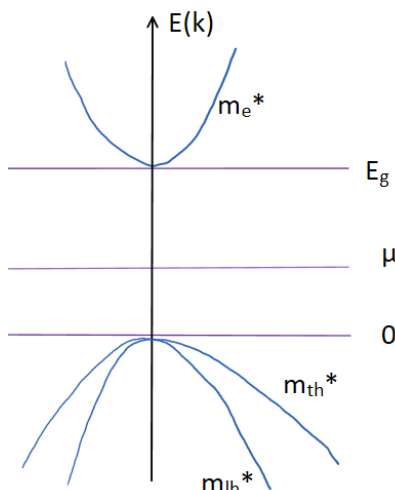
a) Ett antal halvledare dopas. Gör en egen bedömning av dopningen: n-typ, p-typ, eller inget?

- (i) germanium dopas med arsenik
- (ii) kisel dopas med germanium
- (iii) germanium dopas med indium
- (iv) indiumantimonid (InSb) dopas med kisel i enstaka av antimonens atompositioner
- (v) galliumnitrid (GaN) dopas med magnesium i enstaka av galliums atompositioner

Glöm inte att motivera dina svar!

(5p)

b) Betrakta en halvledare med ett ledningsband och två valensband, skissat i figuren, med lätta och tunga hål. Elektron- och hål-effektivmassorna är markerade i figuren och antas ha värdena $m_e^* = 1,2 m_e$, $m_{lh}^* = 0,6 m_e$, och $m_{th}^* = 1,0 m_e$. Halvledaren har bandgapet 1,5 eV.



Visa att om systemet är odopat kan den kemiska potentialen skrivas som

$$\mu = E_g/2 + \frac{1}{2} k_B T \ln M$$

där $M = \{(m_{lh}^*)^{3/2} + (m_{th}^*)^{3/2}\} / (m_e^*)^{3/2}$, och bestäm elektron-tätheten n och håltätheterna för lätta och tunga hål, p_{lh} och p_{th} vid temperaturen $T = 300$ K.

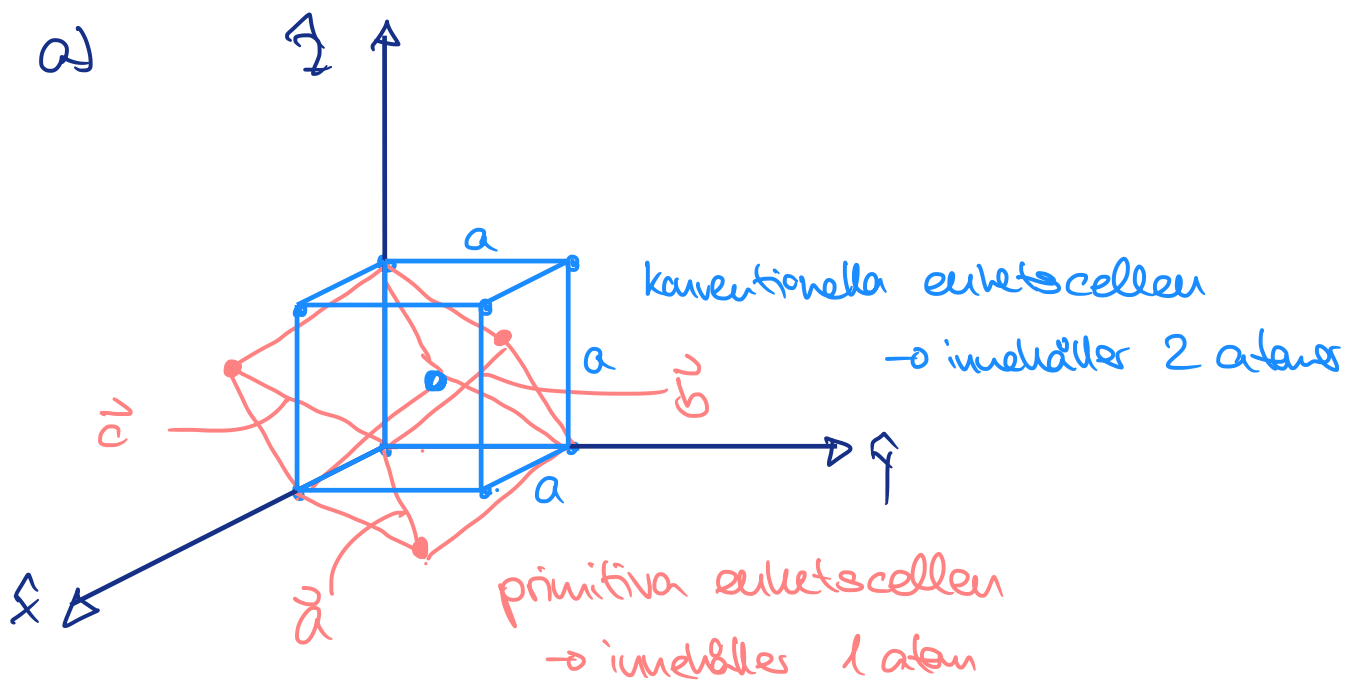
(10p)

c)

Halvledaren i fråga b) n-dopas nu med donatortätheten $n_d = 10^{16} \text{ m}^{-3}$. Antag att alla donatoratomer är joniserade med 1 elektron vid temperaturen $T = 300$ K, och visa att då är halvledaren i den extrinsiska regimen (alltså att $n \gg p_{lh} + p_{th}$).

(5p)

Uppgift 1



$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$: gittervektorer för primitiva enhetscellen

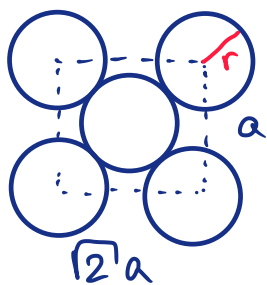
$$\vec{a} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

$$\vec{b} = \frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{c} = \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

b) Atomradien för Cr:

→ från mest tätpackade plan: (110)



$$r + 2r + r = \sqrt{(2a)^2 + a^2} = \sqrt{2a^2 + a^2}$$

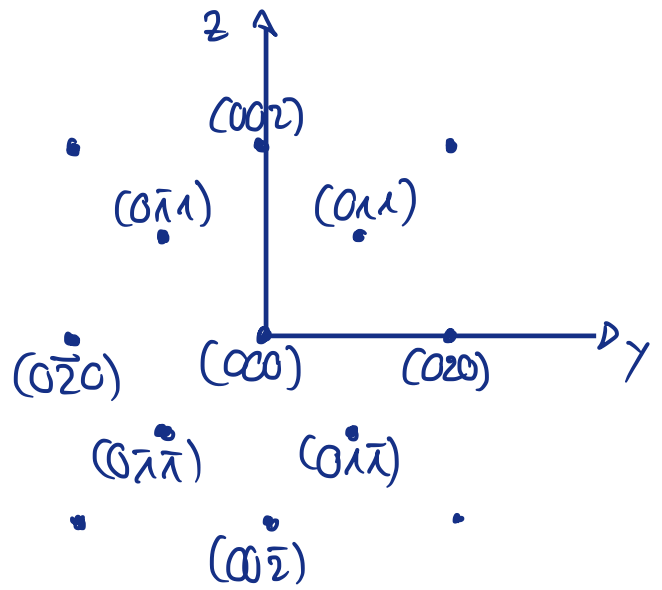
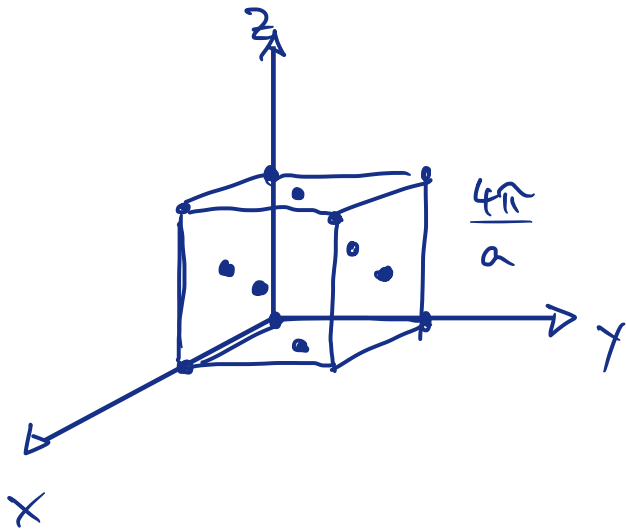
$$\rightarrow 4r = \sqrt{3}a$$

$$r = \frac{\sqrt{3}}{4}a = \frac{\sqrt{3}}{4} \cdot 2.91 \text{ Å}$$

$$= 1.26 \text{ Å}$$

c)

reciproke gitter till bcc är fcc



Uppgift 2

SC struktur

$$a = 3.36 \text{ \AA}$$

$$\lambda(\text{x-ray}) = 1.54 \text{ \AA}$$

$$\lambda(e^-) = 2.51 \text{ pm}$$

a) Ewald sfären ritas i det reciproka rummet

Reciproka gitter till SC är SC.

Gitterkonstanten b i reciproka rummet ges av $\frac{2\pi}{a}$

$$b = \frac{2\pi}{a} = 1.87 \text{ \AA}^{-1} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = 4.08 \text{ \AA}^{-1}$$

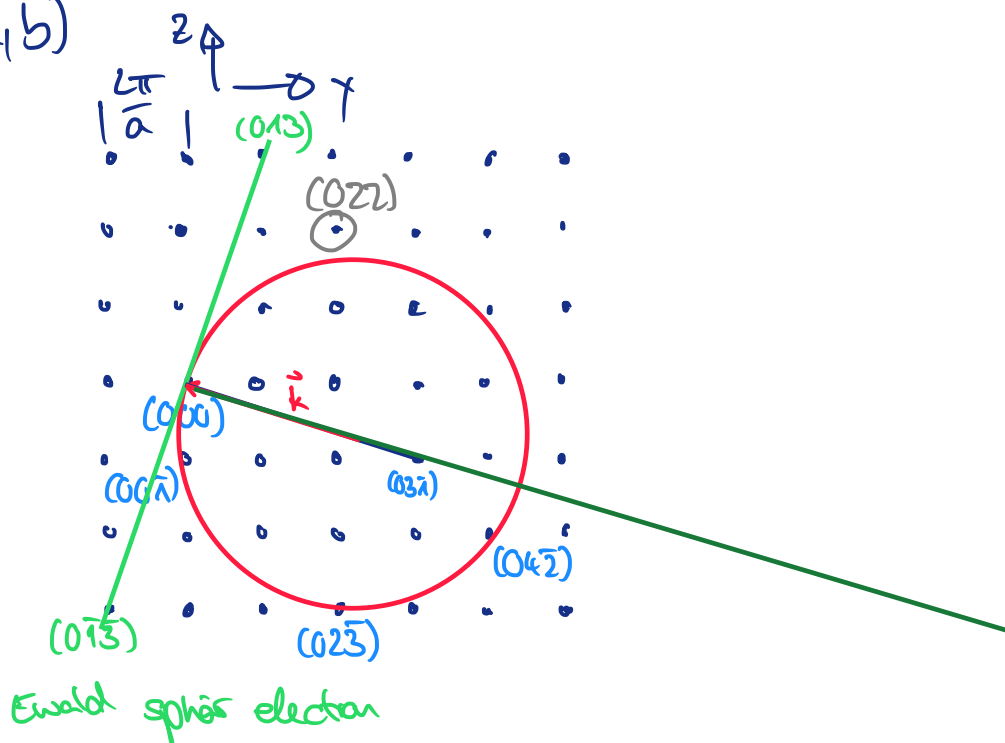
x-ray: vågvektens längd uttryckt i antal längder av

$$b = \frac{4.08}{1.87} = 2.18$$

$$\text{Eller i } |\vec{G}_{022}| = \sqrt{\left(-3 \cdot \frac{2\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{10} = 5.91 \text{ \AA}^{-1}$$

$$\text{x-ray } k = 4.08 \text{ \AA}^{-1} \rightarrow k \text{ som funktion } \vec{G} = \frac{4.08}{5.91} \approx 0.69$$

2. b)



k-vektor för $\lambda = 2.51 \text{ pm} \rightarrow k = 2.50 \text{ pm}^{-1}$

electroner: vågvektens längd uttryckt i antal längder av b

$$= \frac{\cancel{2\pi}}{2.51 \cdot 10^{-2} \text{ Å}} \cdot \frac{a}{\cancel{2\pi}} = \frac{3.36 \text{ Å}}{2.51 \cdot 10^{-2} \text{ Å}} = 133.86$$

eller $|\vec{G}|$:

$$= \frac{\frac{2\pi}{2.51 \cdot 10^{-2} \text{ Å}}}{\frac{2\pi \cdot \sqrt{10}}{a}} = \frac{\cancel{2\pi}}{2.51 \cdot 10^{-2} \text{ Å}} \cdot \frac{a}{\cancel{2\pi} \sqrt{10}} = \frac{a}{2.51 \cdot 10^{-2} \text{ Å} \cdot \sqrt{10}} \approx 42.33$$

För $\lambda = 1.54 \text{ Å}$ skär Ewald sfären $(00\bar{1})$, $(02\bar{3})$, och $(04\bar{2})$

$\rightarrow$ enkel kubisk struktur $\rightarrow$ inga villkor

$\rightarrow$ alla reflexer syns

För $\lambda = 2.51 \text{ pm}$ skär Ewald sfären $(0\bar{1}\bar{3})$, (013) , (026) , $(0\bar{2}\bar{6})$...

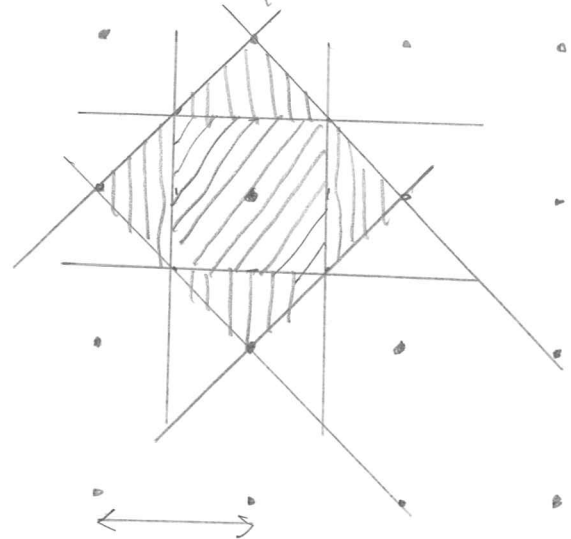
c) För att få diffraction från (022) planskivan kan man:

- 1) använda röntgenljus med kortare våglängd
(ger större Ewald sfär eftersom $k \propto \frac{1}{\lambda}$)
- 2) ändra riktnigen på den infallande röntgenstrålen
(Flytta röntgenkällan)
- 3) rotera provet i förhållande till inkommande röntgenstrålen
så att den reciproka gitterpunkten (022) skär Ewald sfären

③ ^{a)} reelt

$$\vec{a} = 3,14 \text{ \AA}$$

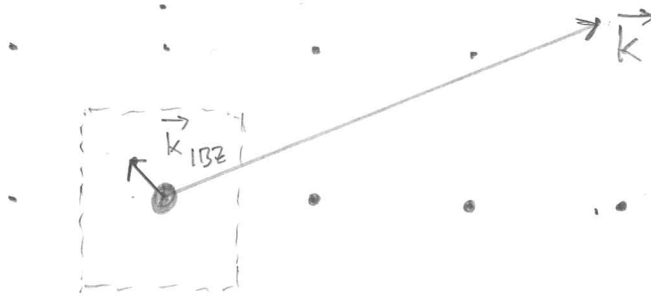
Reciprökt



$$b = \frac{2\pi}{a} = 2 \text{ \AA}^{-1}$$

▨ 1: BZ
▩ 2: BZ

b)



$$\vec{k} = [5,7 ; 2,5] \text{ \AA}^{-1}$$

$$\vec{k}_{132} = \vec{k} + \vec{G}_{hk} = [5,7 ; 2,5] + [h \cdot 2 ; k \cdot 2] =$$

$$= [5,7 - 6 ; 2,5 - 2] = \underline{\underline{[-0,3 ; 0,5] \text{ \AA}^{-1}}}$$

$$(h = -3, k = 1)$$

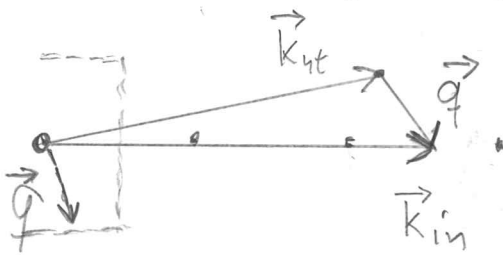
$$c) \vec{q}_{\text{fonon}} = \vec{k}_{\text{in}} - \vec{k}_{\text{ut}} = [4.9; 0; 0] - [4.7; 0.9; 0] = [0.2; -0.9; 0] \text{ \AA}^{-1}$$

$$|\vec{b}| = \frac{2\pi}{a} = \frac{2 \cdot \pi}{3.0} = 2.09 \text{ \AA}^{-1}$$

Kortaste avståndet till BZ-gränsen är $\frac{\pi}{a} = 1.05 \text{ \AA}^{-1}$

$$|\vec{q}_{\text{fonon}}| = \sqrt{0.2^2 + 0.9^2} = 0.92 \text{ \AA}^{-1} < 1.05 \text{ \AA}^{-1},$$

alltså i 1 BZ



$$|\vec{k}_{\text{in}}| = 4.9 \text{ \AA}^{-1}, \quad |\vec{k}_{\text{ut}}| = (4.7^2 + 0.9^2)^{1/2} = 4.79 \text{ \AA}^{-1}$$

$\vec{k}$ har blivit kortare, energin har minskat, så fononen har skapats.

$$d) \omega_q = \frac{\hbar}{2M} (k_{\text{in}}^2 - k_{\text{ut}}^2), \quad \hbar = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$M = 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\omega_q = \frac{1.05 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27}} \left((4.9 \cdot 10^{10})^2 - (4.79 \cdot 10^{10})^2 \right) =$$

$$= 3.4 \cdot 10^{-8} (1.1 \cdot 10^{20}) = 3.49 \cdot 10^{12} = \underline{\underline{3.5 \text{ THz}}}$$

Uppgift 4 Blochvågor

a) Blochvågor kan skrivas $\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$

där $u_k(x)$ är periodisk med samma period som underliggande potentialen, dvs längd a här.

(1) och (2) uppfyllar ej fas-villkoret (e^{ikx}).

(1) och (3) uppfyllar ej att $\sin(\dots)$ ska vara periodisk i a .

(4) uppfyllar båda villkoren och är en Blochvåg, (1)-(3) är ej.

b) $\psi_k(x)$ är periodisk endast över "den stora boxen" med längd $L \gg a$ på vilken vi definierat vårt k -gitter, med minsta avstånd $\Delta k = \frac{2\pi}{L}$.

$|\psi_k(x)|^2$ är periodisk över samma längd som potentialen (här: a), eftersom fasens bidrag blir 1, $|e^{ikx}|^2 = 1$.

Den är alltså periodisk i a (och därmed också i L som är ett stort (!) heltal gånger a).

c) $\psi_{k=\pi/a}(x_0) = A$

$$\begin{aligned} \psi_{k=\pi/a}(x_0 \pm a) &= e^{\pm ika} e^{ikx_0} u_k(x_0 \pm a) \Big|_{k=\pi/a} \\ &= \underbrace{e^{\pm i\pi}}_{-1} e^{ikx_0} \underbrace{u_k(x_0)}_{\text{periodisk i } a} \downarrow \\ &= -e^{ikx_0} u_k(x_0) = -\psi_{k=\pi/a}(x_0) \\ &= \underline{\underline{-A.}} \end{aligned}$$

a) (i) Ge dopas med As. As 5 valens elektroner, Ge 4 valens el.

$\Rightarrow$ överskott av elektroner $\Rightarrow$ n-dopning

(ii) Si (4 valens) dopas med Ge (4 valens)

$\Rightarrow$ samma antal elektroner i struktur, ingen dopningseffekt

(iii) Ge (4 valens) dopas med In (3 valens)

$\Rightarrow$ saknas elektroner $\Rightarrow$ p-dopning

(iv) In Sb (Sb 5 valens) dopas i Sb-positioner med Si (4 valens)

$\Rightarrow$ saknas elektroner $\Rightarrow$ p-dopning

(v) GaN (Ga 3 valens) dopas i Ga positioner med Mg (2 valens)

$\Rightarrow$ saknas elektroner $\Rightarrow$ p-dopning

b) Från undervisning/litteraturen har vi att

$$n(T, \mu) = N_e e^{-(E_g - \mu)/k_B T}$$

$$p(T, \mu) = N_h e^{-\mu/k_B T}$$

$$\text{med } N_e = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m_e^* k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2}, \quad N_h = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m_h^* k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$$

alternativt från Physics Handbook

$$n = n_0 e^{-(E_g - \mu)/k_B T}$$

$$p = p_0 e^{-\mu/k_B T}$$

$$\text{med } \left[\frac{n_0}{p_0} \right] = 4.83 \cdot 10^{21} T^{3/2} \left(\frac{m_{e,h}^*}{m_e} \right)^{3/2} \quad \left(\text{vilket säkert är samma} \right)$$

$\leftarrow$ med T i Kelvin, och n_0, p_0 i m^{-3} .

Laddningsneutralitet ger oss med ovan insatt att:

$$n = p_{lh} + p_{th}$$

$$\Downarrow N_e e^{-(E_g - \mu)/k_B T} = (N_{lh} + N_{th}) e^{-\mu/k_B T}$$

$$\Downarrow (m_e^*)^{3/2} e^{-(E_g - \mu)/k_B T} = \left((m_{lh}^*)^{3/2} + (m_{th}^*)^{3/2} \right) e^{-\mu/k_B T}$$

$$\Downarrow \mu = \frac{1}{2} E_g + \frac{1}{2} k_B T \ln \left(\frac{m_{lh}^{*3/2} + m_{th}^{*3/2}}{m_e^{*3/2}} \right)$$

5b) fortsätt . Bestäm n , p_{eh} , p_{th} vid $T = 300\text{K}$. $m_e^* = 1,2 m_e$
 $E_g = 1,5\text{V}$. $m_{eh}^* = 0,6 m_e$
 $m_{th}^* = 1,0 m_e$

Trä sätt att räkna: Insätt direkt i uttrycken på förrasidan, eller

$$n(p_{eh} + p_{th}) = N_e(N_{eh} + N_{th}) e^{-E_g/k_B T}$$

$$= (4.83 \cdot 10^{21})^2 T^3 \left(\frac{m_e^*}{m_e}\right)^{3/2} \left(\left(\frac{m_{eh}^*}{m_e}\right)^{3/2} + \left(\frac{m_{th}^*}{m_e}\right)^{3/2} \right) e^{-E_g/k_B T}$$

Eftersom $n = p_{eh} + p_{th}$ (intrinsisk) har vi

$$n = \sqrt{n(p_{eh} + p_{th})} = 4.83 \cdot 10^{21} T^{3/2} 1,2^{3/4} (0,6^{3/2} + 1)^{1/2} e^{-\frac{1}{2} E_g/k_B T}$$

$$= 4.83 \cdot 10^{21} 300^{3/2} 1,2^{3/4} (0,6^{3/2} + 1)^{1/2} e^{-1,5/0,026 \cdot 2}$$

$$= \underline{1.03 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-3}}$$

och $p_{eh} + p_{th} = n$ dvs $\frac{p_{eh}}{p_{eh} + p_{th}} = \frac{(m_{eh}^*)^{3/2}}{(m_{eh}^*)^{3/2} + (m_{th}^*)^{3/2}} = \frac{0,6^{3/2}}{0,6^{3/2} + 1}$

$$\approx 0,3173$$

dvs $p_{eh} \approx 0,3173 n = \underline{3.26 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-3}}$

$p_{th} \approx (1 - 0,3173) n = \underline{7.02 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-3}}$

c) Doping med $n_d = 10^{16} \text{ m}^{-3}$, antag $n_d^+ = n_d$ vid $T = 300\text{K}$

Dopad $n \cdot p = \text{odopad } n \cdot p = n_i^2 = (1,03 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-3})^2$

dvs $(p_{eh} + p_{th})_{\text{dep.}} (n_{\text{dep}} + n_d^+) = n_i^2$

$$(p_{eh} + p_{th})_{\text{dep.}} = \frac{n_i^2}{n_{\text{dep}} + n_d^+} < \frac{n_i^2}{n_d^+} \approx \frac{10^{13 \cdot 2}}{10^{16}} \text{ m}^{-3} = 10^{10} \text{ m}^{-3}$$

alltså är

$$n_{\text{total}}^{\text{dep.}} \approx n_d^+ = 10^{16} \text{ m}^{-3} \gg 10^{10} \text{ m}^{-3} > (p_{eh} + p_{th})_{\text{dep.}}$$

$\rightarrow$ extrinsiskt