

TENTAMEN I FASTA TILLSTÅNDETS FYSIK F3/KF3 – FFY011

Tid: 2012-03-07, kl. 08.30

Lokal: M₇salen

Hjälpmedel: Physics Handbook, egen formelsamling på ett A4 blad (fram och baksidan), typgodkänd räknare eller annan räknare i fickformat dock utan inprogrammerad text eller ekvationer av intresse för tentan.

Kursbetyget är baserat på summan av tentamenspoängen +40% av duggapoängen. Gränserna är: $10p \leq 3 < 14p$, $14p \leq 4 < 17p$, $5 \geq 17p$. Granskningen: 22/3, kl 12-13, i F5002.

Examinatorer:

Igor Zoric

tel: 3371, 0708 30 47 25

Mats Granath

tel: 031 786 9026, 0766 229026

Uppgift 1

1) SrTiO_3 kristallstruktur (perovskitstruktur) visas i Fig.1.

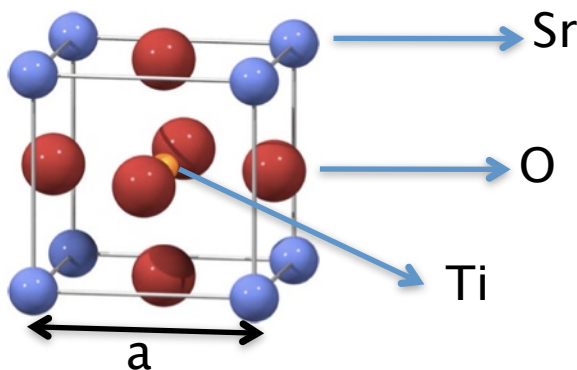


Fig. 1. SrTiO_3 kristallstruktur

- Bestäm basen utifrån ett enkelt kubiskt gitter (gitterparameter a anses vara känd) (1p).
- Beräkna basens strukturfaktor samt tag reda på villkor (för (h,k,l)) som leder till starka respektive svaga intensiteten hos diffraktionsmaxima om atomära spridningsfaktorer för Sr (f_{Sr}), Ti (f_{Ti}) och O (f_{O}) är kända (3p).

Uppgift 2

- 1mm^3 kristallin argon (FCC struktur, $a=5,31\text{\AA}$, molmassa $M=40\text{gram/mol}$) befinner sig vid $T=1^\circ\text{K}$. Kristallin argon har Debye-temperaturen $\Theta_D=94\text{K}$ och

densiteten $1,77\text{gr/cm}^3$. Figuren nedan visar dispersionsrelationen för transversella och longitudinella akustiska fononer, för kristallin Ar, i $[100]$ riktningen i Brillouin-zonen, tagen från neutronspridningsexperiment av D. N. Batchelder et al. (J. Phys. C6, 249, 1970). Parametern q/q_{max} i figuren är ett reducerat fononvågtalet där 1 motsvarar avståndet till Brillouin-zonkanten i $[100]$ riktningen ($2\pi/a$).

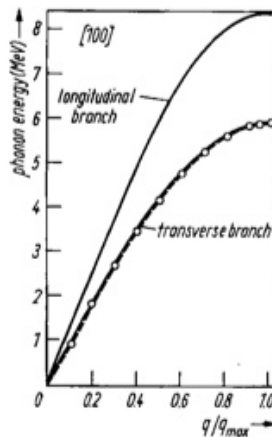


Fig.2. Dispersionsrelationen (fononenergi i meV vs. reducerad fononvågtalet) för akustiska fononer i kristallin argon (D. N. Batchelder et al., J. Phys. C6, 249, 1970). Parametern q/q_{max} i figuren är ett reducerat fononvågtalet där 1 motsvarar avståndet till Brillouin-zonkanten i $[100]$ -riktningen ($2\pi/a$).

- Beräkna värmekapacitiveteten för kristallin argon (J/K mol) vid 1K med hjälp av Debye-modellen (1p).
- Beräkna ljudhastigheten för longitudinella akustiska ljudvågor i kristallin argon. (1,5p).
- Beräkna värmeledningsförmågan för ert Ar prov vid $T=1\text{K}$. Antag att bara longitudinella akustiska fononer bidrar till värmeledningen och att deras fria medelväglängd begränsas av provets ytor (1,5p).

Uppgift 3

En intrinsisk halvledare med direkt gap har ett valensband med energi $\epsilon_{\vec{k}} = E_v - b|\vec{k}|^2$ och ledningsband med energi $\epsilon_{\vec{k}} = E_c + a|\vec{k}|^2$, där $E_v = 6.0\text{eV}$, $E_c = 5.5\text{eV}$, $a = 5.0\text{eV}\cdot\text{\AA}^2$ och $b = 3.0\text{eV}\cdot\text{\AA}^2$.

- Vid $T = 300\text{K}$, beräkna elektrongasens kemiska potential μ (2p) och
- totala antalet laddningsbärare $n + p$. (2p)

Uppgift 4

I en fälteffekttransistor kan en effektivt två-dimensionell elektrongas skapas. Den två-dimensionella elektrontätheten är $n = 10^{11}\text{cm}^{-2}$, och energispektrat är $\frac{\hbar^2}{2m^*}|\vec{k}|^2$ med effektiv massa $m^* = 0.1m_e$ (där m_e är den fria elektronmassan), och där $\vec{k} = (k_x, k_y)$.

- Visa att tillståndstätheten i energirummet för en två-dimensionell elektrongas ges av $D(\epsilon) = \frac{L^2 m^*}{\pi^2 \hbar^2}$. (Där systemet har storlek $L \times L = L^2$) (1p)
- Beräkna Fermienergin ϵ_F . (2p)
- Antag att det två-dimensionella gittret är kvadratisk med gitterkonstant $a = 5\text{\AA}$. Skissa fermiytan i första Brillouin-zonen. (Utgående från fria elektronmodellen med given effektiv massa.) (1p)

Uppgift 5

Man kan visa att den generella formen på vågfunktionen i en periodisk gitterpotential ges av Blochformen $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$ där $u_{\vec{k}}$ är en funktion med samma periodicitet som gittret.

- Visa att detta innebär följande uttryck $\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ där \vec{T} är en godtycklig gittervektor. (1p)
- I tight-binding modellen ges vågfunktionen av $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_j e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \varphi(\vec{r} - \vec{r}_j)$ där summan är över alla gitterpunkter \vec{r}_j och φ är en lokaliserad vågfunktion. Visa att denna uppfyller Blochvillkoret så som skrivet i deluppgift (a). (1p)
- Härled uttrycket för energin $\epsilon_{\vec{k}}$ för ett b.c.c. gitter med konventionell enhetscell a^3 under förutsättning att endast närmaste grannatomer i gittret har ett överlapp $\langle \varphi_i | H | \varphi_j \rangle = -\gamma$. (2p)

Ledning: svaret är $\epsilon_{\vec{k}} = -2\gamma[\cos a(k_x + k_y + k_z)/2 + \cos a(k_x + k_y - k_z)/2 + \cos a(k_x - k_y + k_z)/2 + \cos a(-k_x + k_y + k_z)/2] = -8\gamma \cos(ak_x/2) \cos(ak_y/2) \cos(ak_z/2)$. (Dvs, det finns två ekvivalenta former.)

Lycka till!

Igor och Mats

① a) Kristall = kubiskt gitter + bas

Basen består av 5-atomer

$$Sr: (0, 0, 0)$$

$$Ti: (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$$

$$O: a(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}), a(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0), a(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$$

$$b) S(hkl) = \sum_j f_j e^{-i\vec{G} \cdot \vec{R}_j} \quad \text{där } \vec{G}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(hkl)$$

$$\Rightarrow S(hkl) = f_{Sr} + f_{Ti} e^{-i\pi(h+k+l)} + f_o e^{-i\pi(h+k)} + f_o e^{-i\pi(h+l)} + f_o e^{-i\pi(k+l)}$$

$$\Rightarrow a) \text{ alla } h, k, l \text{ jämna} \quad S = f_{Sr} + f_{Ti} + 3f_o$$

$$b) h, k, l; \text{ två jämna, en odd} \quad S = f_{Sr} - f_{Ti} - f_o$$

$$c) h, k, l; \text{ två odda, en jämn} \quad S = f_{Sr} + f_{Ti} - f_o$$

$$d) \text{ alla } h, k, l \text{ odda} \quad S = f_{Sr} - f_{Ti} + 3f_o$$

Relativa intensiteter kan uppskattas utifrån kända värden att

$$f \propto Z$$

$$Z_{Sr} = 38, \quad Z_{Ti} = 22, \quad Z_O = 8$$

\Rightarrow alt. a ser max. intensitet.
alt. d ser min. intensitet.

2) a) pga $T \ll \theta$ vi kan räkna C_V från Debye modellen som:

$$C_V = \frac{12\pi^4}{5} N_A k_B \left(\frac{T}{\theta}\right)^3$$

där $T = 10\text{K}$ i vårt fall, $\theta = 940\text{K}$, $N_A \equiv$ Avogadro tal, k_B är Boltzmann konstant.

$$C_V = 0.00279 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$$

$$b) \quad v = \frac{d\omega}{dq} \approx \frac{\omega}{q} = \frac{\hbar\omega}{\hbar q} \approx \frac{50 \text{ meV}}{\hbar \cdot 0.4 \cdot \frac{2\pi}{a}}$$

$$v = \frac{5 \cdot 10^{-3} \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}}{6.62 \cdot 10^{-34} \cdot 0.4 \cdot \frac{2\pi}{5.31 \cdot 10^{-10}}} = 255 \text{ m/s}$$

$$c) \quad K = \frac{1}{3} C v l$$

$$C = \frac{Cv}{H/\rho} = 119.9 \frac{\text{J}}{\text{K m}^3}$$

$$K = \frac{1}{3} 119.9 \frac{\text{J}}{\text{K m}^3} \cdot 255 \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot 10^{-3} \text{ m} = \underline{\underline{10.19 \frac{\text{J}}{\text{K m s}}}}$$

(Obs : Experimentellt värde $K_{Ar}(\Gamma=1^0K) \approx 7 \text{ J/(K m s)}$)



Uppgift 3

Kemisk potential ges av

$$a) \quad \mu = \frac{1}{2} E_g + \frac{3}{2} k_B T \ln \frac{3}{3 \times 15^4} \quad (\text{ur P.H.})$$

(med avscende på toppen av valensbandet)
 E_v

vi behöver effektiva massor:

$$\text{vi har} \quad \epsilon_R = E_c + a k^2 = E_c + \frac{\hbar^2}{2 m_e^*} k^2$$

$$\text{och} \quad \epsilon_R = E_v - b k^2 = E_v - \frac{\hbar^2}{2 m_v^*} k^2$$

$$\text{dus} \quad \frac{m_e^*}{m_e} = \frac{\left(\frac{\hbar^2}{2b}\right)}{\left(\frac{\hbar^2}{2a}\right)} = \frac{a}{b}$$

$$\therefore \mu \approx \frac{1}{2} (6.0 - 5.5) \text{ eV} + \frac{3}{2} k_B \frac{16}{\pi} \cdot 300 \text{ K} \ln \frac{1}{15^4} \approx 0.27 \text{ eV}$$

(eller $\mu \approx 5.77 \text{ eV}$ m.a.p. nollnivån given i uppgiften!)

$$b) \quad \text{intrinsisk} \Rightarrow n = p = \sqrt{n_i p_i} \approx 4.83 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3/2} \cdot \left(\frac{m_e^* m_v^*}{m_e^2}\right)^{3/4}$$

$$\cdot e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} = \frac{1}{3^2} \quad (\text{ur P.H.})$$

$$\approx \frac{3 \times 3}{2 \times 2} = \frac{2 \frac{\hbar^2}{b} \cdot \frac{\hbar^2}{2a}}{m_e^2} = \frac{\left(\frac{\hbar^2}{m_e}\right)^2}{a b} \approx 3.84 \text{ eV}^2$$

$$\approx 0.98$$

$$\therefore n = p \approx 1.5 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3} = 1.5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$$

Uppgift 4

a) i k-rummet antal tillstånd i $d^2k = 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \cdot d^2k$
 $= \frac{L^2}{2\pi^2} d^2k$

i ϵ -rummet $\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2$, $d\epsilon = \frac{\hbar^2}{m^*} k dk$

$$D(\epsilon)d\epsilon = \int \frac{1}{2\pi^2} d^2k = \frac{L^2}{2\pi^2} \cdot 2\pi k dk =$$

$$= \frac{L^2}{\pi} \frac{1}{\hbar^2} d\epsilon$$

b) ϵ_F ges av $N = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon)d\epsilon = \frac{L^2}{\pi} \frac{1}{\hbar^2} \epsilon_F$
 antal elektroner

$$\therefore \epsilon_F = \frac{2}{L^2} \cdot \pi \frac{\hbar^2}{m^*} = n \cdot \pi \frac{\hbar^2}{m^*} =$$

$$= n \cdot 2\pi \frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot \frac{1}{(m^*/m_e)}$$

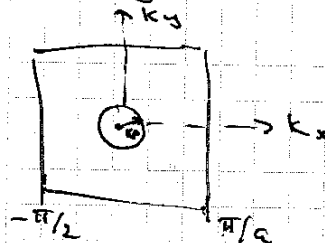
$$\approx 3.84 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^2 \text{ enligt uppg. 3}$$

$$= 3.84 \text{ eV} \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$$

$$\approx 2.4 \text{ meV}$$

c) $k_F: \frac{\hbar^2}{2m^*} k_F^2 = \epsilon_F$ $k_F = \sqrt{\frac{\epsilon_F}{\frac{\hbar^2}{2m^*}}} \approx 0.025 \frac{1}{\text{\AA}}$
 att jämför med kanten $\pi/2$ i.B.Z. $\frac{\pi}{a} \approx 0.62 \frac{1}{\text{\AA}}$

\therefore varför Fermiytan är långt ifrån kanten, en liteninkel



Uppgift 5

a) $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$

$$\begin{aligned} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{T}) &= e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{T})} u_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{T}) = \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}} \underbrace{(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}))}_{=\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})} \quad \text{u.s.v.} \end{aligned}$$

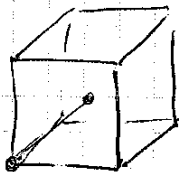
b) $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_j e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \psi(\vec{r}-\vec{r}_j)$

$$\begin{aligned} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{T}) &= \sum_j e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \psi(\vec{r}+\vec{T}-\vec{r}_j) = \\ &= \left[\text{byt } \vec{r}_j \text{ mot } \vec{r}'_j = \vec{r}_j - \vec{T} \right] = \\ &= \sum_{j'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}'_j + \vec{T})} \psi(\vec{r}-\vec{r}'_j) = \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}} \underbrace{\sum_{j'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'_j} \psi(\vec{r}-\vec{r}'_j)}_{=\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})} \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad \text{u.s.v.} \end{aligned}$$

[j' är bara ett index
summan är över alla atomer]

c) Tight-bindingmodellen:

$$\begin{aligned} \epsilon_{\vec{k}} &= \frac{1}{N} \sum_{j,m} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_m)} \langle e_j | H | e_m \rangle \\ &= -\gamma \text{ om } j \text{ och } m \text{ n\u00e4rmsta grannar, b.c.c.} \end{aligned}$$



Varje atom har 8 n\u00e4rmsta grannar,
i. $\frac{a}{2} (\pm 1, \pm 1, \pm 1)$

$$\begin{aligned} \epsilon_{\vec{k}} &= -\gamma \left[e^{i\frac{a}{2}(k_x+k_y+k_z)} + e^{i\frac{a}{2}(-k_x+k_y+k_z)} + e^{i\frac{a}{2}(k_x-k_y+k_z)} \right. \\ &\quad \left. + e^{i\frac{a}{2}k_x} + e^{-i\frac{a}{2}k_x} \right] \left(e^{i\frac{a}{2}k_y} + e^{-i\frac{a}{2}k_y} \right) \left(e^{i\frac{a}{2}k_z} + e^{-i\frac{a}{2}k_z} \right) = \\ &= -8\gamma \cos\frac{1}{2}ak_x \cos\frac{1}{2}ak_y \cos\frac{1}{2}ak_z \end{aligned}$$