Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet
Fakultet for naturvitenskap og teknologi
Institutt for fysikk

Bokmål

Faglig kontakt under eksamen:
Navn: Randi Holmestad
Tlf.: 93880 / 48170066

EKSAMEN I FAG TFY4220 Faste stoffers fysikk
Mandag 30. Mai 2011
Tid: 9.00 – 13.00
Norsk bokmål tekst (English text after Norwegian text)

Antall sider: 4 (+ 4 for English text)
Frist for resultat: 20.06.2011

Tillatte hjelpemidler:
Alternativ C (enkel kalkulator, Engelsk ordbok, Rottmann formler).

Vekting på hver oppgave (som brukes ved karaktersetting) er gitt i parentes.

Oppgave 1 (20%) Introduksjonsspørsmål

Svar kort på denne oppgaven!

a) Forklar begrepene (1) primitiv enhetscelle (2) krystallsystem, og (3) Bravaisgitter. Hvor mange krystallsystemer og Bravaisgitter finnes i 3 dimensjoner?

b) Hva er et fonon? Hva er forskjellen mellom optiske og akustiske fononmoder? For en gitt bølgelengde og *s* atomer i basis, hvor mange optiske og akustiske moder er det i en 3-dimensjonal krystall?

c) Hvilke egenskaper kan beskrives ved hjelp av fri-elektronmodellen?

d) Forklar forskjellen på metall, halvleder og isolator med utgangspunkt i båndstruktur-betraktninger. For halvledere øker elektrisk ledningsevne med temperatur, mens for metaller avtar elektrisk ledningsevne med temperatur. Gi en kort forklaring på dette.

Oppgave 2 (25%) Struktur og diffraksjon

I denne oppgaven ser vi på elastisk røntgenspredning på krystaller.

a) Forklar hva en resiprok gittervektor $\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ er. Vis at betingelsen for konstruktiv interferens (Laues interferensbetingelse) er $\vec{k} - \vec{k}\,' = \vec{G}_{hkl}$. Definer alle involverte størrelser.

b) Kall vinkelen mellom $\vec{k}$ og $\vec{k}\,'$ for 2θ. Finn uttrykk for $\sin^2\theta$ for oppfylt Braggbetingelse, uttrykt ved indeksene *h*, *k*, *l* og gitterparameteren *a* for en kubisk krystall. Definer alle involverte størrelser. Du kan få bruk for formelen $\cos(2\theta) = 1 - 2\sin^2\theta$.

c) Det er gjort Debye-Scherrer opptak av Mg_2Si som har en kubisk enhetscelle. Følgende linjer er observert med CuKα stråling, med λ= 1.542 Å.

Linje nr	1	2	3	4	5
$\sin^2\theta$	0.0433	0.0580	0.1173	0.1611	0.1756

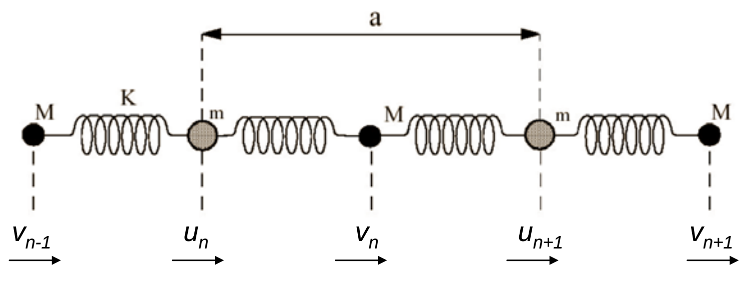
Indiser linjene, dvs. bestem mulige indekser *h*, *k*, *l*, og bruk linje nummer 4 og 5 til å bestemme gitterparameteren. Benytt de observerte utslokningene og angi Bravaisgittertype. (Tips: Utslokte (hkl) reflekser for *bcc* er de med *h*+*k*+*l*= oddetall, for *fcc* er det de med blandede indekser (både partall og oddetall) som er utslokte.)

En kubisk krystall med to atomtyper A og B, med sammensetning AB, har følgende atomposisjoner: A: 000
B: ½ ½ ½

d) Tegn enhetscella og gi Bravaisgittertype. Angi eventuell utslokningsregel, og begrunn svaret. Over en kritsk temperatur T_c kan vi anta at det er perfekt statistisk uorden mellom atomposisjonene. Hva blir da Bravaisgittertypen for $T>T_c$? Vil en observere systematiske utslokninger i røntgenopptak for $T>T_c$? Finn svaret ved å utlede uttrykk for strukturfaktoren.

Oppgave 3 (25%) Fononer

Basis i et endimensjonalt gitter med gitterkonstant *a* består av to atomer med masse *M* og *m*, som vist på figuren. Vi skal studere longitudinale bølger og anta vekselvirkning kun mellom nærmeste naboer og at vi har harmoniske krefter. Kraftkonstanten er *K* for den longitudinale svingingen (parallelt med kjeden).

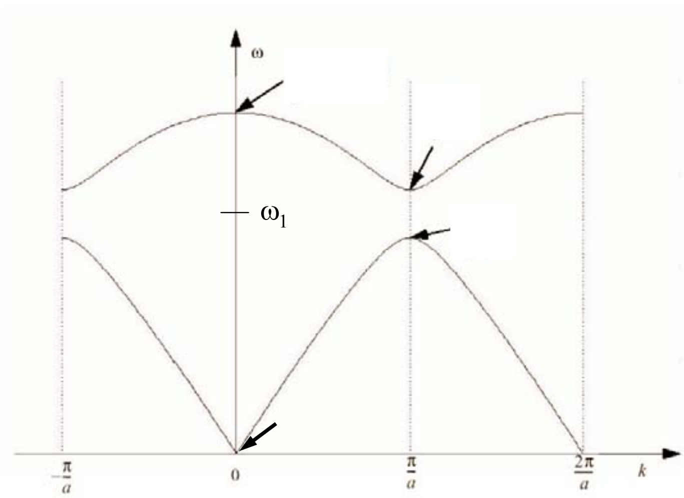


a) Skriv opp bevegelseslikningene for utsvingene u_n og v_n. Anta så en bølgeløsning med utsving lik $u_n = u \cdot e^{i(nka-\omega t)}$ og $v_n = v \cdot e^{i(nka-\omega t)}$.

Vis at dispersjonsrelasjonen blir

$$\omega^2 = \frac{K(m+M)}{mM}\left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} \cdot \sin^2 \frac{ka}{2}}\right]$$

b) Plottet av ω som funksjon av k vil se omtrent slik ut:



Finn uttrykk for de to svingefrekvensene for lange bølger ($k \rightarrow 0$) og på Brillouin-sonegrensa ($k = \frac{\pi}{a}$), markert med piler i figuren. Finn gruppehastigheten for de to modene for lange bølger. Hva skjer hvis materialet utsettes for bølger med frekvens lik ω_1?

c) La nå $M = m$. Hva blir uttrykket for frekvensene du fant i forrige oppgave, og hvordan vil figuren se ut? Forklar hva som skjer.

d) Beskriv en metode for eksperimentelt å bestemme lydhastigheten i ioniske materialer.

Oppgave 4 (30%) Fri-elektronmodell, energibånd og halvledere

a) Gi en kort og kvalitativ beskrivelse av fri-elektronmodellen. Sett opp utrykket for energien $E(k)$. Vis at tetthet av tilstander (antall tilstander per energienhet) $D(E)$ i 3 dimensjoner er gitt ved

$$D(E) = CE^{1/2}$$

og finn proporsjonalitetskonstanten C. Anta i utledningen at T=0.

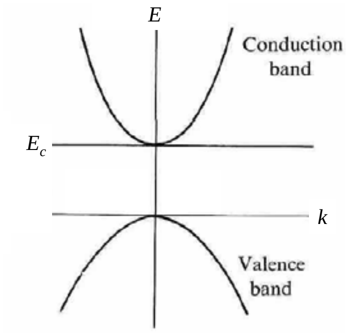
Tips: I grunntilstanden vil systemet med N elektroner og volum $V=L^3$ okkupere tilstander med lavest mulig energi etter Pauli-prinsippet. Finn uttrykk for volumet i k-rommet okkupert av en tilstand og finn fra dette bølgevektoren til Fermi-flata k_F ; sett dette uttrykket inn i uttrykket for energien og finn $D(E)$.

b) Skisser elektron båndstruktur *E*(*k)* for et endimensjonalt system med gitterparameter *a* når en antar 'tomt gitter tilnærmelsen'('empty lattice approximation'). Plott de tre laveste energibåndene med *k* langs horisontal akse og *E* langs loddrett akse. Forklar og skissér de tre forskjellige framstillingene som er vanlig å bruke når en skal plotte *E(k)*.

c) Vi innfører nå et svakt periodisk potensial i systemet beskrevet i b). Forklar kvalitativt gangen i utledningen vi nå følger for å finne *E*(*k)*, oppgi viktige antakelser vi gjør og skisser hvordan kurvene i b) vil se ut med et svakt periodisk potensial

d) Forklar hva som menes med intrinsisk og ekstrinsisk halvleder. Hva menes med n og p doping?
Ved studier av halvledere innfører vi ofte begrepet effektiv masse. Sett opp uttrykket for effektiv masse og forklar.

e)



Vi ser nå på en intrinsisk halvleder. Anta at bunnen av ledningsbåndet har form som en parabel som vist på figuren, og sett opp et utrykk for tilstandstettheten *D(E*) med laveste energi i ledningsbåndet lik E_c. Videre har vi at sannsynligheten for at energinivået er okkupert ved temperaturen *T* er gitt ved Fermi-Dirac fordelingen:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1} \approx e^{-(E-\mu)/k_B T}$$ hvor μ er Fermi-nivået.

Hva ligger bak tilnærmelsen i likningen over?
Finn konsentrasjonen *n* av elektroner i ledningsbåndet.

Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet
Faculty of natural sciences
Department of Physics

English

Contact during exam:
Name: Randi Holmestad
Phone: 93880 / 48170066

EXAM IN COURSE TFY4220 Solid State Physics
Monday 30. May 2011
Time: 9.00 – 13.00
English text (Norwegian text in front)

Number of pages: 4 (+ 4 for English text)
Deadline for result: 20.06.2011

Weight on each problem (used for marking) is given in parentheses.

Allowed utilities:
Alternative C (simple calculator, English dictionary, Rottmann formulas book).

Problem 1 (20%) Introductory Questions

Reply brief on this task!

a) Explain the terms (1) primitive unit cell (2) crystal system, and (3) Bravais lattice. How many crystal systems and Bravais lattices exist in 3 dimensions?

b) What is a phonon? What is the difference between optical and acoustic phonon modes? For a given wavelength and with s atoms in the basis, how many optical and acoustical modes are there in a 3 dimensional crystal?

c) Which properties can be described using the free-electron model?

d) Explain the difference between metal, semiconductor and insulator on the basis of band structure considerations. For semiconductors electrical conductivity increases with temperature, while for metals it decreases with temperature. Give a brief explanation on this.

Problem 2 (25%) Structure and Diffraction

In this problem we will look at X-ray elastic scattering from crystals.

a) Explain what a reciprocal lattice vector $\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ is. Show that the condition for constructive interference (Laues interference condition) is $\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G}_{hkl}$. Define all symbols involved.

b) The angle between $\vec{k}$ and $\vec{k}'$ is 2θ. Find the expression for $\sin^2\theta$ when Braggs law is fulfilled, expressed by the indices *h*, *k*, *l* and the lattice parameter *a* for a cubic crystal. Define all symbols involved. You may need the formula $\cos(2\theta) = 1 - 2\sin^2\theta$.

c) A Debye-Scherrer experiment of Mg_2Si, which has a cubic unit cell, has been done. The following lines are observed with CuKα radiation, with λ = 1.542 Å

Line no	1	2	3	4	5
$\sin^2\theta$	0.0433	0.0580	0.1173	0.1611	0.1756

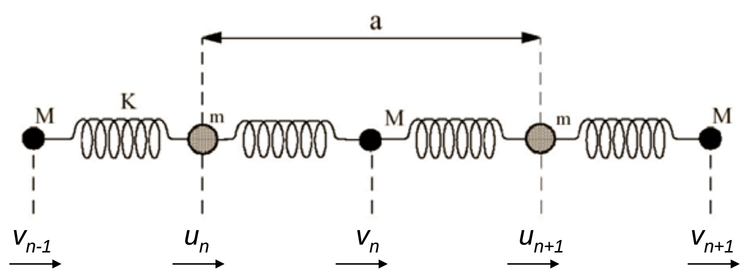
Index the lines, ie, determine the possible indices *h*, *k*, *l*, and use line numbers 4 and 5 to determine the lattice parameter. Use the observed extinctions to determine the Bravais lattice type. (Tip: Extinct (hkl) reflections for *bcc* are those with *h*+*k*+*l*=odd integers, for *fcc* those with mixed indices (partly even and partly odd) are extinct.)

A cubic crystal with two atom types A and B and composition AB, has the following atom positions: A: 000
B: ½ ½ ½

d) Draw the unit cell and give Bravais lattice type. Find the extinction rules, if any, and explain your answer. Above a critical temperature T_c, we can assume that it is perfect statistical disorder between atomic positions. What is then Bravais lattice type for $T>T_c$? Can we observe systematic extinctions in an x-ray recording for $T>T_c$? Find the answer by deriving the expression for the structure factor.

Problem 3 (25%) Phonons

The basis in a one-dimensional lattice with a lattice constant *a* consists of two atoms of mass *M* and *m*, as shown in the figure. We will study the longitudinal waves and assume interaction only between nearest neighbours and that we have harmonic forces between atoms. The force constant is *K* for the longitudinal wave (parallel to the chain).

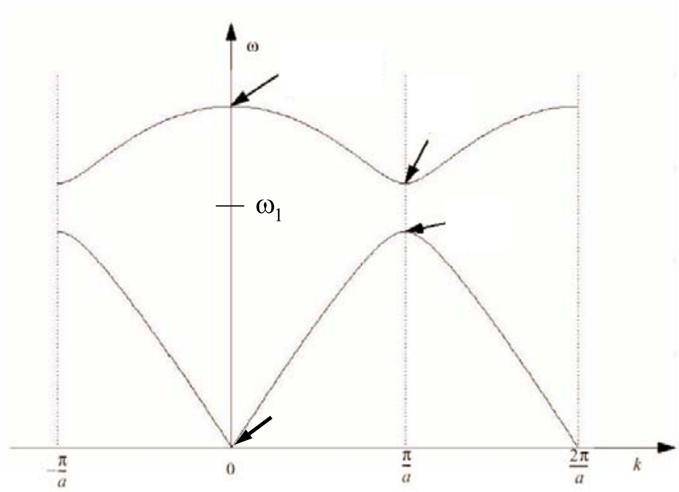


a) Write down the equations of motion for the displacements u_n og v_n. Assume that we have a wave solution of the form $u_n = u \cdot e^{i(nka-\omega t)}$ and $v_n = v \cdot e^{i(nka-\omega t)}$.

Show that the dispersion relation is given by

$$\omega^2 = \frac{K(m+M)}{mM}\left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} \cdot \sin^2 \frac{ka}{2}}\right]$$

b) The plot of ω as a function of k will look something like this:



Find expressions for the two frequencies with long waves (k → 0) and at the Brillouin zone boundary ($k = \frac{\pi}{a}$), all marked with arrows in the figure. Find the group velocity for the two modes when k → 0. What happens if the material is exposed to waves with a frequency equal to ω_1?

c) Now let $M = m$. What is now the expression for the frequencies you found in b), and how will the figure look like? Explain what happens.

d) Describe a method where you experimentally determine the speed of sound in ionic materials.

Problem 4 (30%) Free-electron model, energy bands and semiconductors

a) Give a brief and qualitative description of the free electron model. Put up the expression for the energy *E(k)*. Show that the density of states (number of states per energy unit) *D(E)* in three dimensions is given by

$$D(E) = CE^{1/2}$$

and find the proportionality constant *C*. Assume in the derivation that $T = 0$

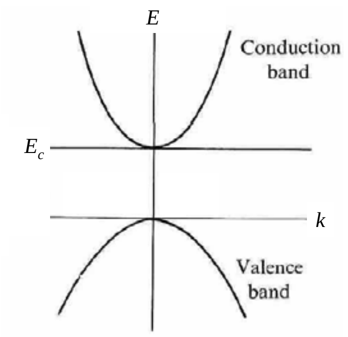
Tip: In the ground state the system with *N* electrons and volume $V=L^3$ will occupy the states with the lowest possible energy according to the Pauli principle. Find an expression for the volume in *k*-space occupied by one state and find from this the wave vector to the Fermi surface; put this expression into the expression for the energy and find *D(E)*.

b) Sketch the electron band structure $E(k)$ for a one-dimensional system with lattice parameter a assuming the 'empty lattice approximation'. Plot the three lowest energy bands with k along the horizontal axis and E along the vertical axis. Explain and sketch the three different representations that are commonly used when plotting $E(k)$.

c) We now introduce a weak periodic potential in the system described in b). Explain qualitatively the way to find $E(k)$, give important assumptions we make and indicate how the curves in b) will look like with a weak periodic potential

d) Explain what is meant by intrinsic and extrinsic semiconductors. What is meant by n and p doping?
In studies of semiconductors we often introduce the expression effective mass. What is the effective mass and explain.

e)



We are now looking at an intrinsic semiconductor. Assume that the bottom of the conduction band has the shape of a parabola as shown in the figure, and set up an expression for the density of states $D(E)$ with the lowest energy conduction band equal to E_c. Furthermore, we have that the probability that the energy level is occupied at temperature T is given by the Fermi-Dirac distribution:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_BT}+1} \approx e^{-(E-\mu)/k_BT}$$ where μ is the Fermi level.

What is behind the approximation of the equation above?
Find the concentration n of electrons in the conduction band.