



NTNU – Trondheim
Norwegian University of
Science and Technology

Department of physics

Examination paper for TFY4220 Solid State Physics

Academic contact during examination: Randi Holmestad

Phone: 48170066

Examination date: 28 May 2013

Examination time (from-to): 09.00 to 13.00

Permitted examination support material:

C (simple calculator, English dictionary, Rottmann formulas book).

Other information:

Language: English (page 2-5) / Bokmål (page 6-9) / Nynorsk (page 10-13)

Number of pages: 13 (including front page)

Number of pages enclosed: 0

Problems made by Randi Holmestad and Jostein Bø Fløystad.

Checked by:

Date

Signature

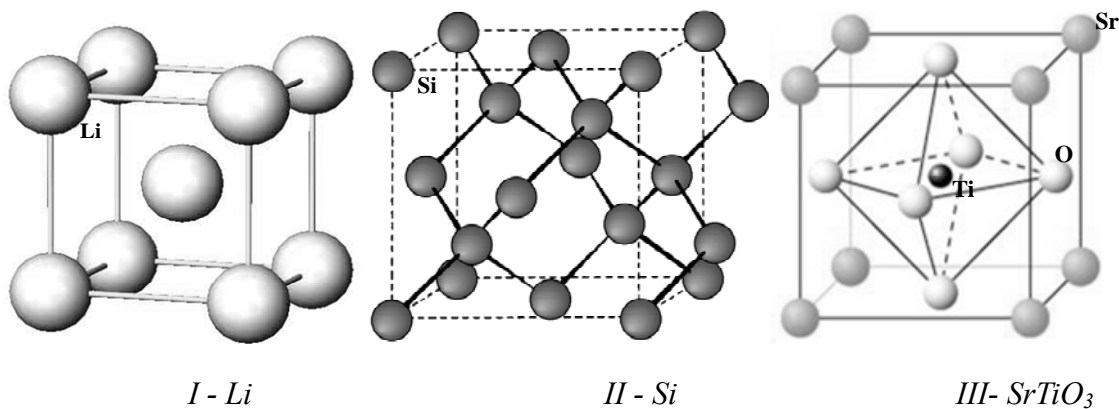
Problem 1 (15%) Introductory Questions

Keep your answers to this problem brief!

- Explain the Ewald construction for diffraction of X-rays, neutrons or electrons from a (mono) crystalline material.
- How does the resistance of a semiconductor (typically) change as a function of temperature, and why? Will this be different if the material is doped? Explain.
- Describe qualitatively the physical origin of electronic energy bands in solids. How can one experimentally determine the energy gap in a semiconductor?
- What is meant by the effective mass and how can it be related to the dispersion relation for the electrons?

Problem 2 (30%) Structure and Diffraction

a)

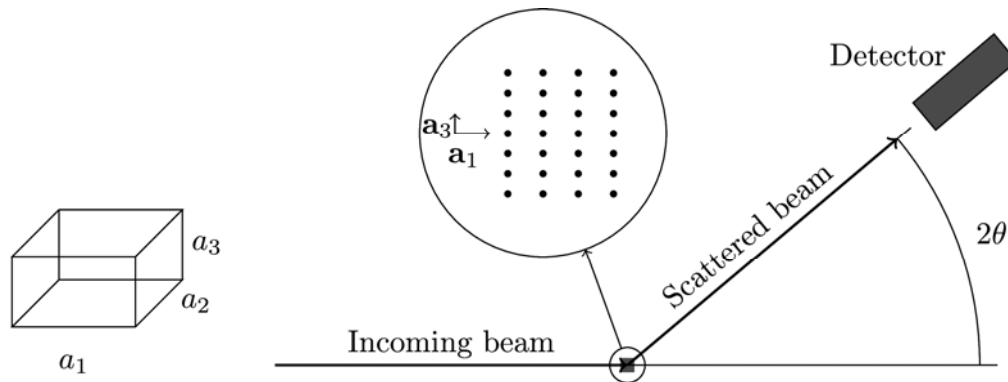


The figures above show the structure of three different materials. I is Lithium, II is Silicon and III is Strontium titanate. Specify the Bravais lattice and the basis in each case (you can draw the figure and indicate the atoms belonging to the basis or write down the coordinates). For each case, how many atoms does the basis contain?

b) We are performing an X-ray diffraction experiment on a single crystal of orthorhombic epsomite, which has a unit cell measuring $a_1 = 11.99 \text{ \AA}$, $a_2 = 11.86 \text{ \AA}$ and $a_3 = 6.858 \text{ \AA}$, in the experimental geometry shown below. No reflections are extinct in orthorhombic epsomite.

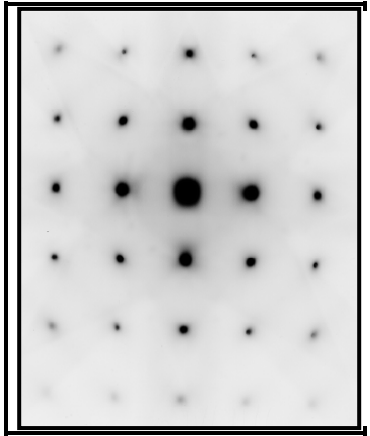
1) Calculate the Bragg angle 2θ for the 100 reflection using Bragg's law for an X-ray wavelength of 1.54 \AA . Explain why the 100 reflection is the reflection with the smallest 2θ angle.

2) After the detector is moved to the correct 2θ angle for the 100 reflection, the detector still reports zero intensity, so there is no diffraction. Draw the Ewald sphere (two dimensions is sufficient; use only the \vec{b}_1 and \vec{b}_3 axes) and explain why! What must be changed in the experiment to measure the diffraction of the 100 reflection?



Unit cell of orthorhombic epsomite (left) and experimental X-ray scattering setup (right), with the orientation of the atomic columns of the crystal indicated (inset).

c)



TEM zone axis diffraction pattern of aluminium.

The figure shows a zone axis diffraction pattern from a single crystal area in aluminium taken in the transmission electron microscope (TEM). Aluminium has an fcc structure. Explain why we can observe several diffraction spots simultaneously. Index the diffraction pattern and determine the zone axis. Explain the steps you use in the indexing.

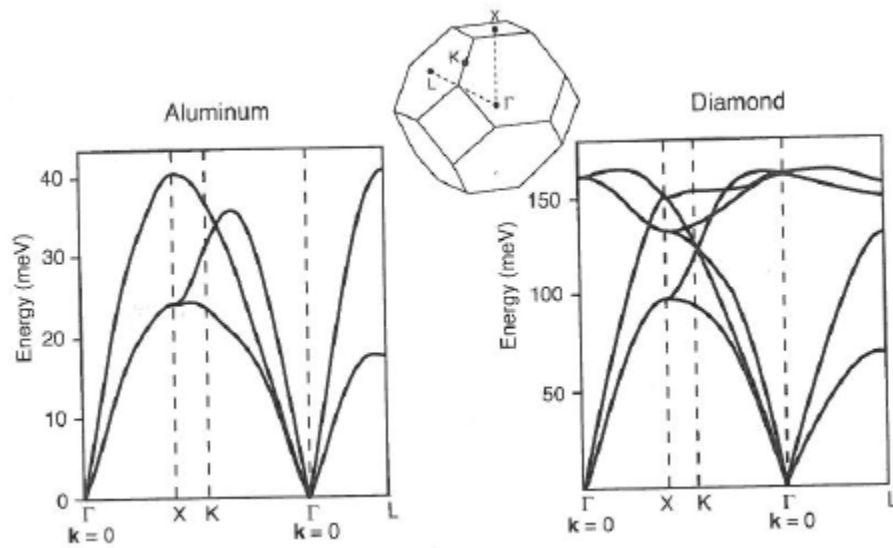
Problem 3 (30%) Phonons

a) We will study a linear lattice with a two-atomic basis. The lattice constant is a , and the distance between atoms is $a/2$. The atoms have masses M_1 and M_2 . The force constant between nearest neighbors is C for the longitudinal oscillation (parallel to the chain). The dispersion relation is then given by:

$$\omega^2 = C \left[\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2} \cdot \sin^2 \frac{Ka}{2}} \right]$$

1) Make a sketch of the dispersion relation given above.

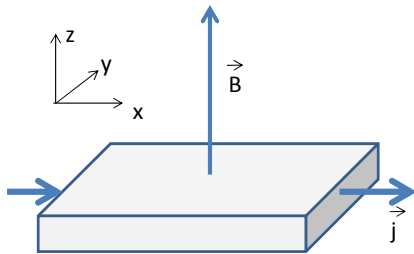
- 2) Explain what is meant by acoustic and optical modes, and comment on what happens in the long wave ($K \rightarrow 0$) and at the Brillouin zone boundary ($K = \frac{\pi}{a}$).
- b) We now let $M_1 = M_2 = m$. We define $b = a/2$ as the distance between atoms with mass m . The total length of the atomic chain is $L = Nb$ where N is the number of atoms.
- 1) Explain how the new dispersion relation differs from the one studied in a). Can we excite phonon states in this material by absorbing a single photon? Explain why/why not.
 - 2) In k -space, the distance between each phonon state is $\Delta K = \frac{2\pi}{L}$. Find the density of states $D(\omega)$ as a function of frequency.
- c) Describe a method for experimental determination of speed of sound in ionic materials. What is a typical order of magnitude of the sound velocities in solids?
- d) The figure under shows the phonon dispersion in aluminium (fcc structure) and diamond (diamond structure) along several directions in the reciprocal space. The inset shows the Brillouin zone, which has the same shape for both materials. Point out the differences in the two graphs and explain why they are different.



Problem 4 (25%) Free-electron model and semiconductors

- a) Using the nearly free electron model and assuming a weak potential, show that the electron density of states for a two dimensional crystal of dimensions $L \times L$ with a square lattice with lattice constant a is constant as a function of energy, $D_\varepsilon(\varepsilon) = C$ and determine the constant C .
- b) What is the definition of the term *Fermi energy*? Starting from the expression for the density of states given in a), find an expression for the Fermi energy ε_F for a metal in two dimensions with n electrons per unit area.

c)



- 1) What is the Hall effect? Show that the Hall coefficient $R = \frac{E_y}{j_x B_z}$, where \vec{E} is the electric field, \vec{B} the magnetic field, and \vec{j} the current density, is given by $R = -\frac{1}{en}$ when the charge carriers are electrons with number density n and charge $-e$.
- 2) Derive a general expression for the Hall coefficient R when both negative and positive charge carriers are present, with number density n and p , respectively. The absolute value of the charge of the carriers is e . Assume the two types of charge carriers have mobilities μ_e and μ_h .

Hint: The drift velocity \vec{v} of a charge carrier is related to the force \vec{F} acting on it by $\mu\vec{F} = e\vec{v}$, where μ is the mobility.

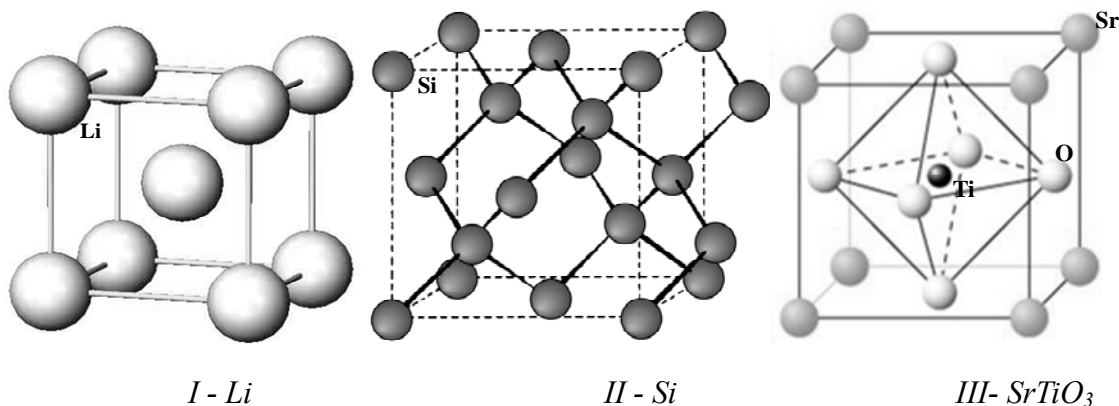
BOKMÅL:**Oppgave 1 (15%) Introduksjonsspørsmål**

Svar kort på disse spørsmålene!

- Forklar Ewald-konstruksjonen for diffraksjon av røntgen, nøytroner eller elektroner fra et (mono) krystallinsk materiale.
- Hvordan varierer motstanden av en halvleder (typisk) som funksjon av temperaturen, og hvorfor? Vil dette være annerledes hvis materialet er dopet? Forklar.
- Beskriv kvalitativt den fysiske opprinnelsen til energibånd i faste stoffer. Hvordan kan man eksperimentelt bestemme båndgap i en halvleder?
- Hva menes med effektiv masse og hvordan er denne relatert til dispersjonsrelasjonen for elektronene?

Oppgave 2 (30%) Struktur og diffraksjon

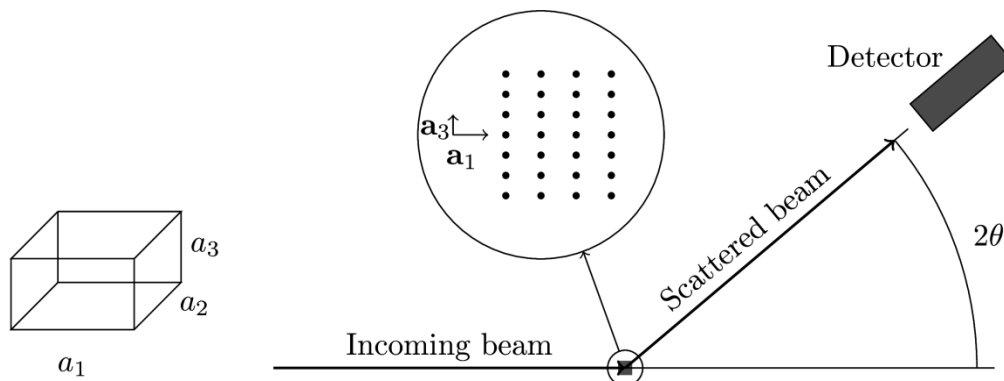
a)



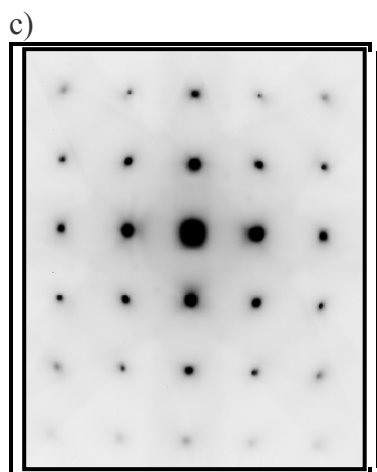
Figurene ovenfor viser strukturen av tre forskjellige materialer. I er Litium, II er Silisium og III er Strontiumtitanat. Spesifiser Bravaisgitteret og basisen i hvert enkelt tilfelle (du kan tegne figuren og vise atomene som tilhører basis eller skrive ned koordinater). For hvert tilfelle, hvor mange atomer er det i basis?

b) Vi utfører et røntgendiffraksjonseksperiment på en enkrystall av ortorombisk epsomitt, som har en enhetscelle som måler $a_1 = 11,99 \text{ \AA}$, $a_2 = 11,86 \text{ \AA}$ og $a_3 = 6,858 \text{ \AA}$ i den eksperimentelle geometrien som er vist nedenfor. Ingen refleksjoner er utslokt i ortorombisk epsomitt.

- Beregn braggvinkelen 2θ for 100 refleksjonen ved hjelp av Braggs lov for en røntgen bølglengde på $1,54 \text{ \AA}$. Forklar hvorfor 100 refleksjonen er den refleksjonen med den minste 2θ vinkelen.
- Etter at detektoren er flyttet til den korrekte 2θ vinkelen for 100 refleksjonen, er det fortsatt null intensitet på detektoren, slik at det ikke er noen diffraksjon. Tegn Ewald kula (to dimensjoner er tilstrekkelig, bruk \vec{b}_1 og \vec{b}_3 aksene) og forklar hvorfor! Hva må endres i eksperimentet for å måle diffraksjon fra 100 refleksjonen?



Enhetscelle av ortorombisk epsomitt (til venstre) og eksperimentelt røntgenspredningsoppsett (til høyre), med orientering av atomkolonnene i krystallen angitt (innfelt).



TEM soneakse diffraksjonsbilde fra aluminium.

Figuren viser et soneakse diffraksjonsbilde fra et enkrystall-område i aluminium tatt i transmisjonselektronmikroskopet (TEM). Aluminium har en fcc struktur. Forklar hvorfor vi kan observere flere diffraksjonsreflekser samtidig. Indekser diffraksjonsmønsteret og bestem soneaksen. Forklar fremgangsmåten du bruker for indeksering.

Oppgave 3 (30%) Foner

a) Vi vil studere et lineært gitter med to atomer i basis. Gitterkonstanten er a , og avstanden mellom atomene er $a/2$. Atomene har masser M_1 and M_2 . Kraftkonstanten mellom nærmeste naboer er C for longitudinale oscillasjoner (parallelt med kjeden). Dispersjonsrelasjonen er da gitt ved:

$$\omega^2 = C \left[\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2} \cdot \sin^2 \frac{Ka}{2}} \right]$$

1) Lag en skisse av dispersjonsrelasjonen gitt ovenfor.

2) Forklar hva som menes med akustiske og optiske moder, og kommenter hva som skjer ved lang bølglengde ($K \rightarrow 0$) og på Brillouinsonegrensen ($K = \frac{\pi}{a}$).

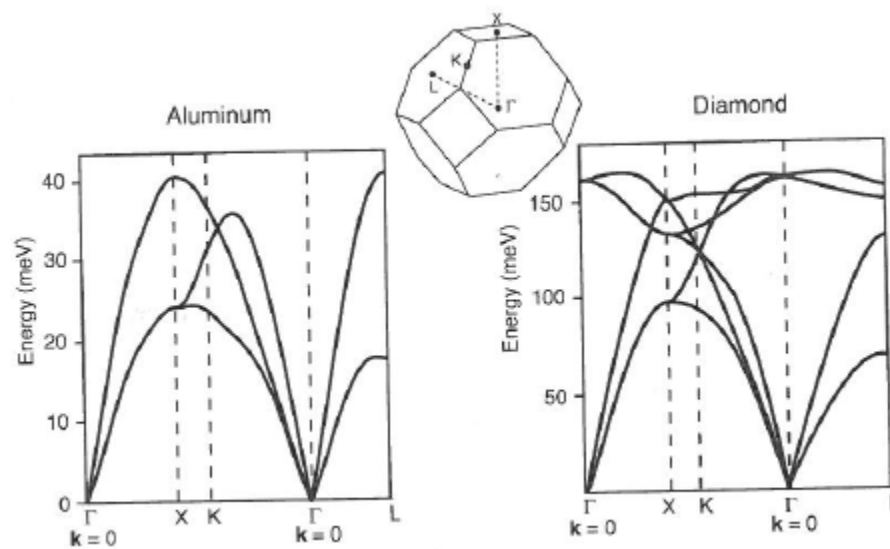
b) Vi lar nå $M_1 = M_2 = m$. Vi definerer $b=a/2$ som avstanden mellom atomer med masse m . Den totale lengden av atomkjeden er $L = Nb$ der N er antall atomer.

1) Forklar hvordan den nye dispersjonsrelasjonen er forskjellig fra den vi studerte i a). Kan vi eksitere fononmoder i dette materialet ved å absorbere ett enkelt foton? Forklar hvorfor / hvorfor ikke.

2) I k -rommet er avstanden mellom hver fononmode lik $\Delta K = \frac{2\pi}{L}$. Finn tettheten av tilstander $D(\omega)$ som funksjon av frekvensen.

c) Beskriv en metode for eksperimentell bestemmelse av lydshastigheten i ioniske materialer. Hva er en typisk størrelsesorden på lydshastigheter i faste stoffer?

d) Figuren under viser fonondispersjonen i aluminium (fcc struktur) og diamant (diamantstruktur) langs flere retninger i det resiproke rommet. Figuren i midten viser Brillouinsonen, som har den samme formen for begge materialene. Påpek forskjellene i de to grafene og forklar hvorfor de er forskjellige.

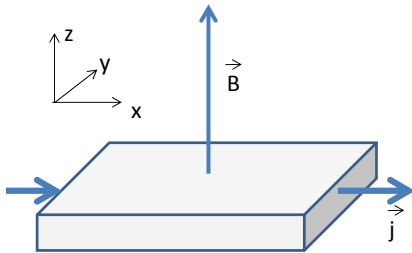


Oppgave 4 (25%) Frielektronmodell og halvledere

a) Ved å bruke nesten fri-elektronmodellen og anta et svakt potensial, vis at tilstandstettheten for elektroner i en todimensjonal krystall med dimensjoner $L \times L$ med et kvadratisk gitter og gitterkonstant a er konstant som funksjon av energi, $D_e(\varepsilon) = C$ og finn konstanten C .

b) Hva er definisjonen av *Fermienergien*? Start fra uttrykket for tettheten av tilstander som er gitt i a) og finn et uttrykk for Fermienergien ε_F for et metall i to dimensjoner med n elektroner per arealenheter.

c)



1) Hva er Hall-effekt? Vis at Hall-koeffisienten $R = \frac{E_y}{j_x B_z}$, hvor \vec{E} er det elektriske feltet,

\vec{B} det magnetiske feltet, og \vec{j} strømtettheten, er gitt av $R = -\frac{1}{en}$ når ladningsbærerne er elektroner med antallstetthet n og ladning $-e$.

2) Utled et generelt uttrykk for Hall-koeffisienten R når både negative og positive ladningsbærere er til stede, med tettheter lik henholdsvis n og p . Absoluttverdien av ladningen på ladningsbærerne er e . Anta at de to typene ladningsbærere har mobiliteter μ_e og μ_h .

Hint: Driftshastighet \vec{v} av en ladningsbærer er relatert til kraften \vec{F} som virker på den ved $\mu\vec{F} = e\vec{v}$, hvor μ er mobiliteten.

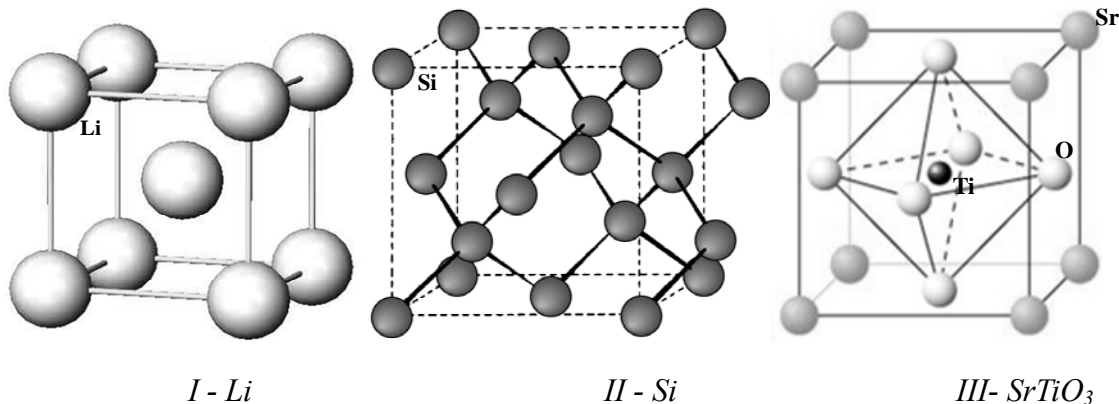
NYNORSK:**Oppgåve 1 (15%) Introduksjonsspørsmål**

Du skal svare kort på desse spørsmåla!

- Forklar Ewald-konstruksjonen for diffraksjon av røntgen, nøytron eller elektron frå eit (mono) krystallinsk materiale.
- Korleis varierer motstanden av ein halvleiar (typisk) som funksjon av temperaturen, og kvifor? Ville dette vore annleis om materialet var dopa? Forklar.
- Skildr kvalitativt det fysiske opphavet til energiband i faste stoff. Korleis kan vi eksperimentelt finne energigap i ein halvleder?
- Kva meiner vi med effektiv masse og korleis er denne relatert til dispersjonsrelasjonen for elektron?

Oppgåve 2 (30%) Struktur og diffraksjon

a)



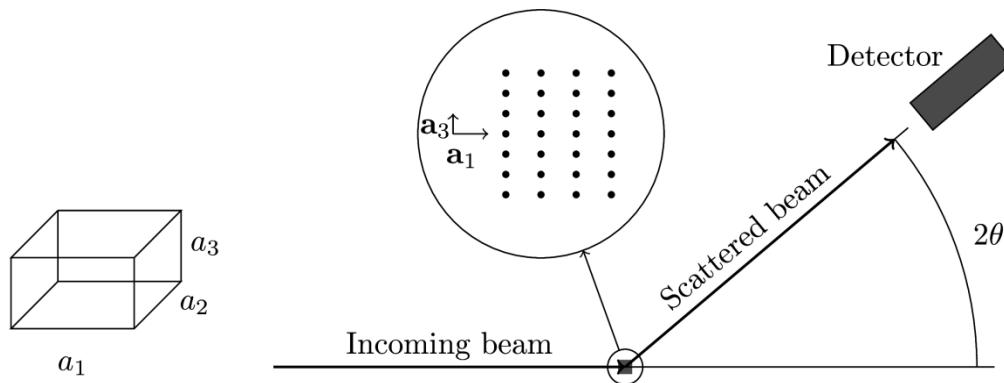
Figurane over viser strukturen av tre ulike material. I er Litium, II er Silisium og III er Strontiumtitanat. Spesifiser Bravaisgitteret og basisen i kvart av dei tre tilfella (du kan teikne figuren og vise atoma som tilhøyrar basis eller skrive ned koordinatar). For kvart tilfelle, kor mange atom er det i basis?

b) Vi utfører eit røntgendiffraksjonseksperiment på ein einkrystall av ortorombisk epsomitt, som har ei enhetscelle som måler $a_1 = 11,99 \text{ \AA}$, $a_2 = 11,86 \text{ \AA}$ og $a_3 = 6,858 \text{ \AA}$ i den eksperimentelle geometrien som vist under. Ingen refleksar er utslokna i ortorombisk epsomitt.

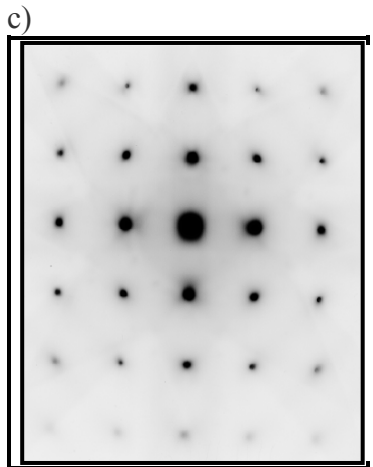
1) Berekn braggvinkelen 2θ for 100 refleksjonen ved hjelp av Braggs lov for ei røntgenbølgjelengd på $1,54 \text{ \AA}$. Forklar kvifor 100 refleksen er den refleksen med den minste 2θ vinkelen.

2) Etter at detektoren er flytta til den korrekte 2θ vinkelen for 100 refleksjonen, er det enno null intensitet på detektoren, slik at det ikkje er nokon diffraksjon. Teikn Ewald kula (to dimensjonar er tilstrekkeleg, bruk \vec{b}_1 og \vec{b}_3 aksane) og forklar kvifor! Kva må endrast i

eksperimentet for å måle diffraksjon frå 100 refleksen?



Enhetscelle av ortorombisk epsomitt (til venstre) og eksperimentelt røntgenspredningsoppsett (til høyre), med orientering av atomkolonnar i krystallen angitt (felt inn).



TEM soneakse diffraksjonsbilde frå aluminium.

Figuren viser eit soneakse diffraksjonsbilde frå eit einkrystallområde i aluminium tatt i transmisjonselektronmikroskopet (TEM). Aluminium har ein fcc struktur. Forklar kvifor vi kan observere fleire diffraksjonsrefleksar samtidig. Indekser diffraksjonsmønsteret og finn soneaksen. Forklar framgangsmåten du bruker for å indeksere.

Oppgåve 3 (30%) Foner

a) Vi vil studere eit lineært gitter med to atom i basis. Gitterkonstanten er a , og avstanden mellom atoma er $a/2$. Atoma har masser M_1 and M_2 . Kraftkonstanten mellom nærmaste naboar er C for longitudinale oscillasjonar (parallelt med kjeda).

Dispersjonsrelasjonen er da gitt ved:

$$\omega^2 = C \left[\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2} \cdot \sin^2 \frac{Ka}{2}} \right]$$

1) Lag ei skisse av dispersjonsrelasjonen gitt over.

2) Forklar kva som menes med akustiske og optiske moder, og kommenter kva som skjer på lang bølgjelengd ($K \rightarrow 0$) og på Brillouinsonegrensa ($K = \frac{\pi}{a}$)

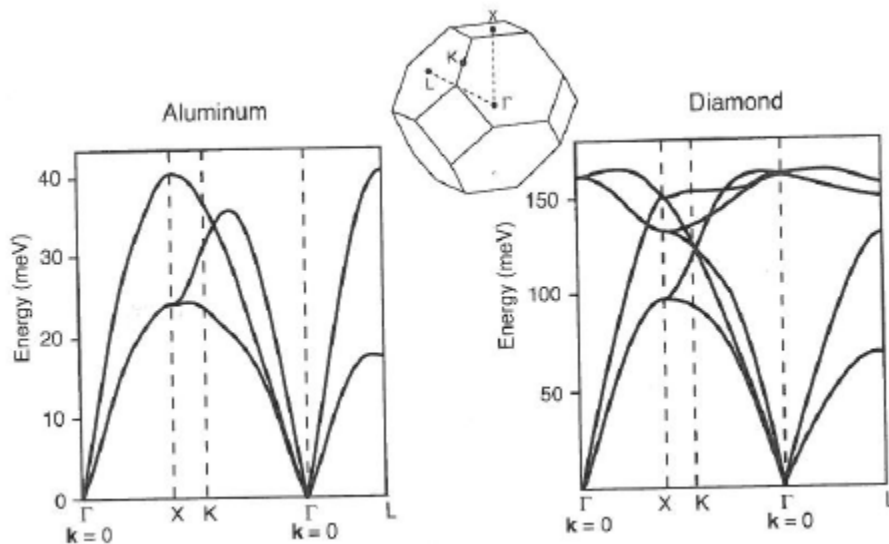
b) Vi let no $M_1 = M_2 = m$. Vi definerer $b=a/2$ som avstanden mellom atom med masse m . Den totale lengda av atomkjeda er $L = Nb$ der N er talet på atom.

1) Forklar korleis den nye dispersjonsrelasjonen er forskjellig frå den vi studerte i a). Kan vi eksitere fononmoder i dette materialet ved å absorbere eitt enkelt foton? Forklar kvifor/kvifor ikkje.

2) I k -rommet, er avstanden mellom kvar fononmode lik $\Delta K = \frac{2\pi}{L}$. Finn tettheten av tilstander $D(\omega)$ som ein funksjon av frekvensen.

c) Skildr ein metode for å eksperimentelt bestemme lydshastigheten i ioniske materialar. Kva er ein typisk storleiksorden på lydshastigheter i faste stoffer?

d) Figuren under viser fonondispersjonen i aluminium (fcc struktur) og diamant (diamantstruktur) langs fleire retningar i det resiproke rommet. Figuren i midten viser Brillouinsona, som har den same form for begge materiala. Pek på skilnadene i dei to grafane og forklar kvifor dei er forskjellige.

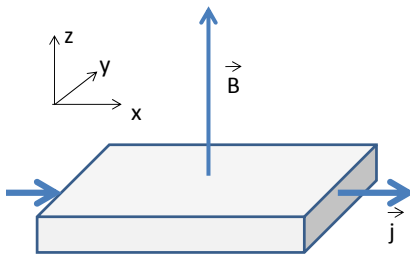


Oppg ve 4 (25%) Frielektronmodell og halvleiarar

a) Ved   nytte nesten fri-elektronmodellen og anta eit svakt potensial, vis at elektrontettheten av tilstander for ein todimensjonal krystall med dimensjoner $L \times L$ med eit kvadratisk gitter med gitterkonstant a er konstant som ein funksjon av energi, $D_z(\varepsilon) = C$ og finn konstanten C .

b) Kva er definisjonen av *Fermienergien*? Start fr  uttrykket for tettheten av tilstander som er gitt i a), finn eit uttrykk for Fermienergien ε_F for eit metall i to dimensjoner med n elektron per arealeining.

c)



1) Kva er Hall-effekt? Vis at Hall-koeffisienten $R = \frac{E_y}{j_x B_z}$, kor \vec{E} er det elektriske feltet, \vec{B} det magnetiske feltet, og \vec{j} str mtettheten, er gitt av $R = -\frac{1}{en}$ n r ladningsb rerne er elektron med antallstetthet n og ladning $-e$.

2) Utled eit generelt uttrykk for Hall-koeffisienten R n r b de negative og positive ladningsb rere er til stades, med tetthet henholdsvis n og p . Absoluttverdien av ladningsb rarane er e . Anta at dei to typene ladningsb rere har mobiliteter μ_e and μ_h .

Hint: Driftshastighet \vec{v} av ein ladningsb rar er relatert til krafta \vec{F} som verker p  den ved $\mu\vec{F} = e\vec{v}$, kor μ er mobiliteten.