



**NTNU – Trondheim**  
Norwegian University of  
Science and Technology

Department of physics

## **Examination paper for TFY4220 Solid State Physics**

**Academic contact during exam: Randi Holmestad**

**Phone: 48170066**

**Examination date: 29. May 2015**

**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 2-6) / Bokmål (page 7-11) / Nynorsk (page 12-16)**

**Number of pages: 16 (including front page)**

**Number of pages enclosed: 0**

**Checked by:**

---

Date

Signature

**Problem 1 (15%) Introductory questions**

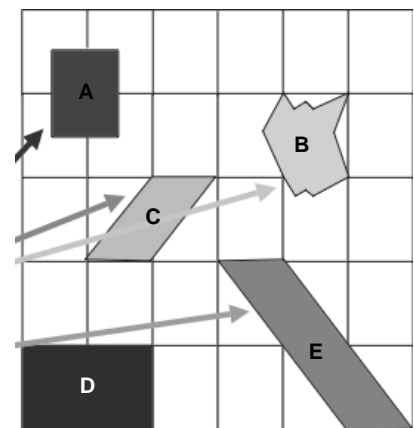
Keep your answers to this problem brief!

- In the lab you did an X-ray diffraction experiment. Explain why it is advantageous to use a powder material for these measurements rather than a single crystal.
- List and compare the properties of materials with metallic, covalent and ionic bonding. Give at least one example of materials having each type of bonding.
- Assume an n-type doped semiconductor (e.g. Si or Ge). Sketch and explain briefly how the mobile electron concentration depends on temperature.
- Describe the free electron model. Which properties are well explained by this model? Give examples. Which properties cannot be well described by this model? Give examples of materials we can apply this model to.

**Problem 2 (15%) Multiple choices**

Only one answer should be chosen for each question. Wrong or several answers give zero points. No explanation or reasoning should be given. You can circle the right answer and hand this in with the rest of your exam answers.

- What structures have the highest packing fraction?
  - fcc and hcp
  - bcc and hcp
  - fcc and bcc
  - all (fcc, bcc, hcp)
- Which of the cells in the figure to the right is a Wigner-Seitz cell?
  - A and D
  - A
  - A, B and C
  - All
- What do we mean by the first Brillouin zone?
  - A volume in the real space with the least lattice points
  - The Wigner Seitz cell
  - The Bravais lattice in the reciprocal space
  - The Wigner Seitz cell in the reciprocal space
- ~~What determines the intensity in an allowed diffracted spot?~~
  - ~~The basis in the lattice structure~~
  - ~~The orientation of the sample and the Bravais lattice structure~~
  - ~~The orientation of the sample and the basis in the lattice structure~~
  - ~~All three above — orientation, Bravais lattice and basis~~



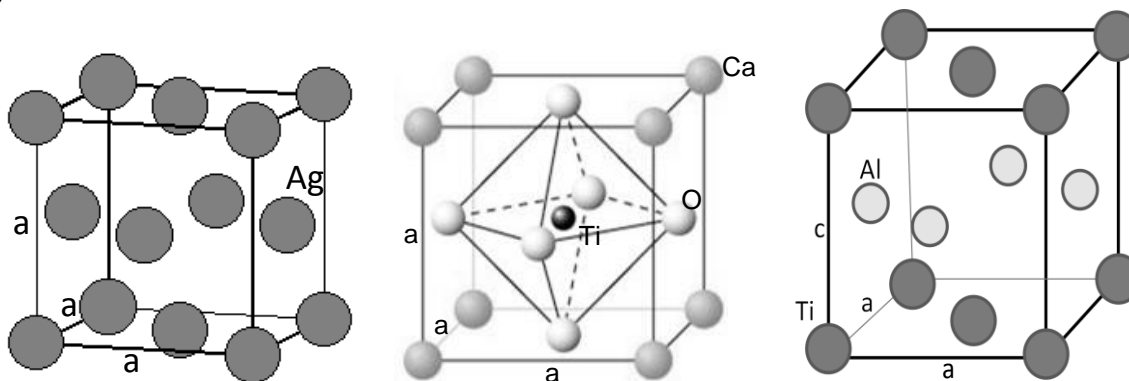
Question 2 about Wigner-Seitz cell

Question removed!

5. What determines the number of dispersion curves for phonons?
- the mass of the atoms
  - number of different atoms in the basis
  - the number of atoms in the basis
  - the space group of the crystal
6. Pure silicon doped with phosphorus is
- amorphous
  - a p-type conductor
  - an n-type conductor
  - an insulator
7. What experiment is best to find the phonon dispersion curves?
- acoustic wave scattering
  - electron diffraction
  - X-ray diffraction
  - inelastic neutron scattering
8. What is a Bloch wave?
- an exponential function centered around each lattice point
  - a plane wave multiplied by a periodic function
  - an ordinary plane wave
  - a linear wave with phase periodic with the lattice
9. What is the Fermi sphere?
- A sphere in real space for all electrons with the Fermi energy at  $T=0$
  - Electrons with the Fermi energy making a sphere in k-space
  - A sphere of electrons in the crystal moving with speed  $v_F$
  - A sphere of electrons with constant speed and temperature
10. A typical size of a Fermi energy in metals is
- $< 1$  eV
  - 2-10 eV
  - given by Planck's constant
  - always  $>10$  eV

### Problem 3 (25%) Structure and diffraction

a)



I - Silver

II - Perovskite

III - Titanium aluminide

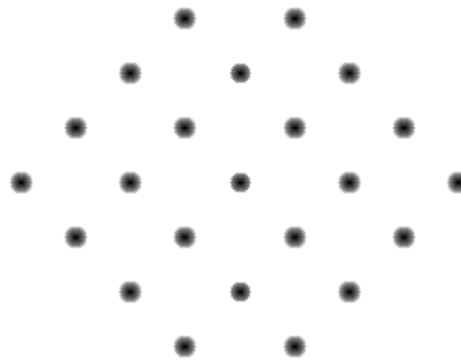
The figures above show the structure of three different materials. *I* is silver metal, *II* shows a perovskite structure and *III* is the intermetallic compound titanium aluminide. Specify the Bravais lattice and the basis in each case (you can draw the figure and indicate the atoms belonging to the basis or write down the coordinates). For each case, how many atoms does the basis contain?

b) Determine the structure factor and find the extinction rules for silver (structure *I* above).

$$\text{The structure factor is given by } S_G = F_{hkl} = \sum_j f_j \exp(-i\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}_j).$$

Write down the three lowest reflections for Ag, and sort them according to the intensity in the reflections. Explain your answer.

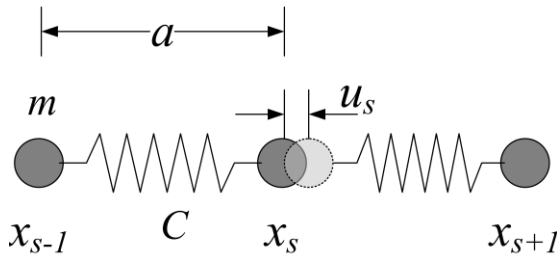
c) The figure to the right shows a simulated TEM zone axis pattern from a material with similar structure as silver (structure *I* above). The zone axis is [001]. Index the reflections in the pattern, and indicate where (if any) you would have found the systematically extinct reflections.



Simulated TEM diffraction pattern

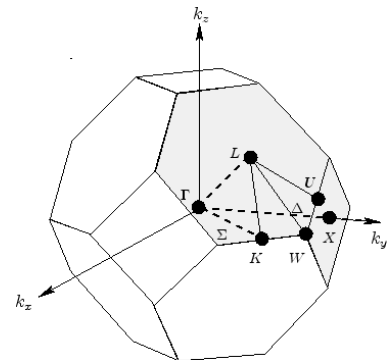
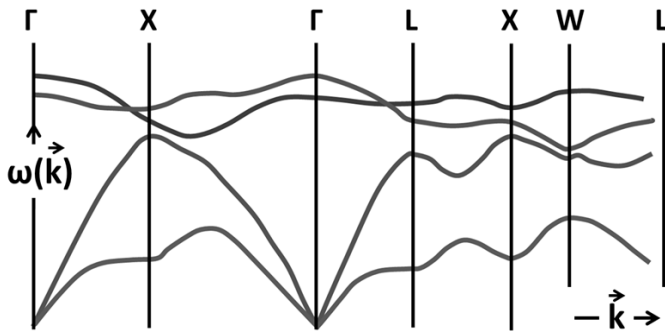
d) Structure *II* shows the unit cell of a mineral perovskite. What is the chemical formula for this material? Explain. Discuss extinction rules for this structure (You do not need to derive them).

**Problem 4 (25%) Phonons**



*One dimensional chain of atoms*

- Derive the wave dispersion relation for the lattice in a linear one-dimensional chain of equidistant identical atoms with mass  $m$  that vibrate along the chain as shown in the figure above. Assume that the interaction takes place only between the nearest neighbors, that the distance between neighbor atoms is  $a$  and that the harmonic spring stiffness (spring constant) is  $C$ . (Tips; Set up Newton's law for one atom, assume Hooke's law is valid, set in harmonic wave solutions.)
- Sketch the phonon dispersion relation. Show that all possible waves can be described by the wave vectors in a  $2\pi/a$  long interval. Show that and explain why the group velocity is zero for  $k = \pi/a$ .
- Assume that the chain is 1 cm long,  $a = 3 \text{ \AA}$  and the maximum phonon frequency  $\omega_{\max} = 10^{13} \text{ rad/s}$ . Derive how many longitudinal waves have their frequency in the range between  $10^{11} \text{ rad/s}$  and  $10^{12} \text{ rad/s}$ ? Explain.
- Explain qualitatively, through a simple diagram, how the dispersion relation would change if every second atom in the chain was replaced by atoms with a higher mass.
- Below is the phonon dispersion relation in different directions in the Brillouin zone for GaAs. Explain qualitatively what you see in the graph. Answer short.



*Phonon dispersion relations in GaAs*

**Problem 5 (20%) Free-electron model**

- a) We will now study  $N$  free electrons in a cube with side edge  $L$ . Assume periodic boundary conditions and that the temperature is  $T = 0$ . Determine the density of the  $k$ -values in  $k$ -space. Define the Fermi energy  $E_F$  and show that the expression for the Fermi wave

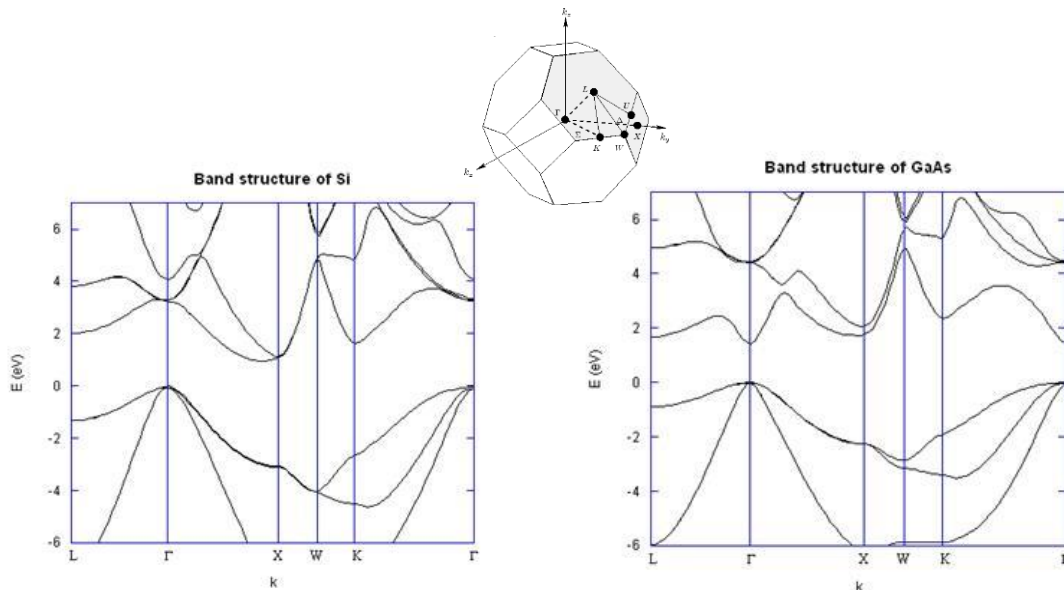
$$\text{vector can be written as } k_F = \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \text{ with volume } V = L^3.$$

Find the density of states (the number of states per energy unit)  $D(E)$  in three dimensions.

- b) Sketch a figure that shows  $D(E)$  for  $T=0$  as found above.

Now suppose that the temperature is  $T > 0$ . Sketch in the same figure the number of occupied states as a function of  $E$ . Explain why the two curves are different, and estimate the typical extend of the region where the differences are most pronounced.

- c) The figure under shows calculated band structures for Si and GaAs. Explain what these curves show, point out the similarities and the differences for the two materials. Point out and comment on the eventual band gaps. Keep it brief!



Calculated band structures for Si and GaAs

Given:

The energy-wave vector dispersion relation for free electrons is  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ .

The probability that an orbital at energy  $E$  is occupied in an ideal Fermi gas in thermal equilibrium at temperature  $T$  is given by the Fermi-Dirac distribution  $f_e(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$ .

## BOKMÅL:

### Oppgave 1 (15%) Introduksjonsspørsmål

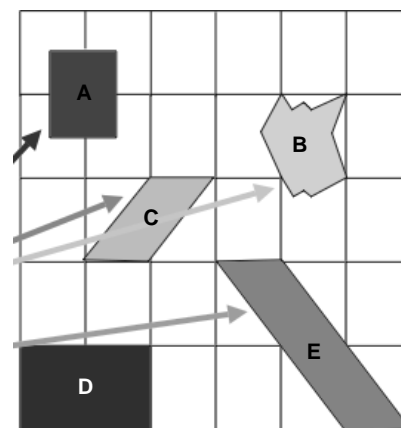
Svar kort på disse spørsmålene!

- I laben gjorde du / fikk data fra et røntgendiffraksjonseksperiment. Forklar hvorfor det var fordelaktig å bruke et pulver som materiale for disse målinger istedenfor en enkrystall.
- Oppgi og sammenlign egenskapene til materialer med metallisk, kovalent og ionisk binding. Gi minst ett eksempel på materialer som har denne typen bindinger.
- Anta at vi har en n-type dopet halvleder (f.eks Si eller Ge). Skisser og forklar kort hvordan elektronkonsentrasjonen avhenger av temperatur.
- Beskriv fri-elektron modellen. Hvilke egenskaper kan vi beskrive med denne modellen? Gi eksempler. Hvilke egenskaper kan ikke godt beskrives av denne modellen? Gi eksempler på materialer vi kan bruke denne modellen på.

### Oppgave 2 (15%) Flervalgsoppgave

Velg kun et svar for hvert spørsmål. Feil eller flere svar gir null poeng. Det skal ikke gis noen forklaring eller resonnement. Du kan sirkle det rette svaret, og levere dette inn med resten av besvarelsen.

- Hvilke strukturer har høyest pakkefraksjon?
  - fcc og hcp
  - bcc og hcp
  - fcc og bcc
  - alle (fcc, bcc, hcp)
- Hvilke av cellene i figuren til høyre er en Wigner-Seitz celle?
  - A og D
  - A
  - A, B og C
  - Alle
- Hva mener vi med første Brillouin sone?
  - Volumet i det reelle rommet med minst gitterpunkter
  - Wigner-Seitz cella
  - Bravaisgitteret i det resiproke rommet
  - Wigner-Seitz cella i resiproke rommet
- Hva bestemmer intensiteten i en tillatt diffraksjonsspot?
  - Basisen i gitterstrukturen
  - Orientering av prøven og Bravais-gitter av strukturen
  - Orienteringen av prøven og basis i gitterstrukturen
  - Alle de tre ovenfor - orientering, Bravaisgitter og basis



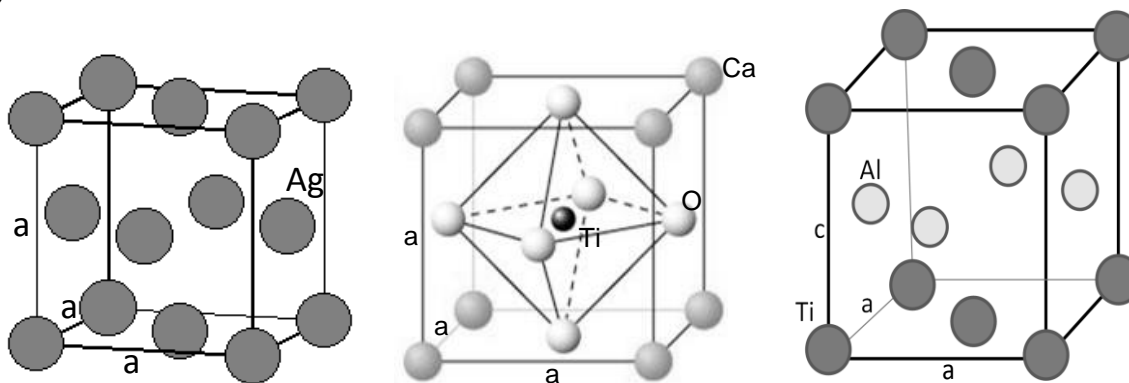
Spørsmål 2 om Wigner-Seitz celle

5. Hva bestemmer antall grener i dispersjonsrelasjonen for fononer?
- massen av atomene
  - antall forskjellige atomer i basis
  - antall atomer i basis
  - romgruppen av krystallen
6. Rent silisium dopet med fosfor er
- amorft
  - p-type leder
  - n-type leder
  - en isolator
7. Hva slags eksperimenter er best for å finne fonon dispersjonskurver?
- lydbølgespredning
  - elektrondiffraksjon
  - Røntgendiffraksjon
  - uelastisk nøytronspredning
8. Hva er en Bloch-bølge?
- en eksponentialfunksjon sentrert rundt gitterpunkter
  - en planbølge multiplisert med en periodisk funksjon
  - en vanlig planbølge
  - en lineær bølge med fase som er periodisk med gitteret
9. Hva er Fermikula?
- Ei kule i det reelle rommet for alle elektroner med Fermienergi ved  $T = 0$
  - Elektroner med Fermienergien som lager ei kule i k-rommet
  - Ei kule av elektroner i krystallen som beveger seg med hastighet  $v_F$
  - Ei kule av elektroner med konstant hastighet og temperatur
10. En typisk størrelse på en Fermienergien i metaller er
- $< 1$  eV
  - 2-10 eV
  - gitt av Planck's konstant
  - alltid  $> 10$  eV



### Oppgave 3 (25%) Struktur og diffraksjon

a)



I - Sølv

II - Perovskitt

III - Titanaluminid

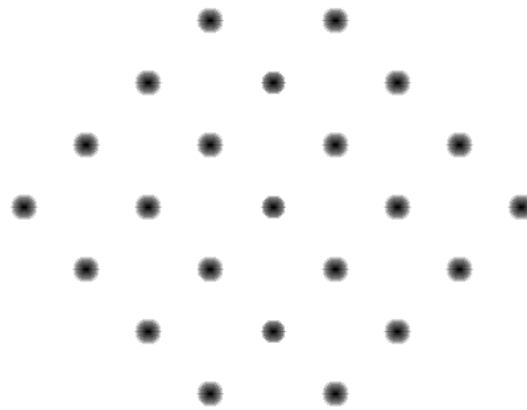
Figurene ovenfor viser strukturen av tre forskjellige materialer. *I* er sølv, *II* viser en perovskittstruktur og *III* er titanaluminid. Spesifiser Bravaisgitteret og basisen i hvert enkelt tilfelle (du kan tegne figuren og vise atomene som tilhører basis eller skrive ned koordinater i enhetscella).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

b) Bestem strukturfaktoren og finn utsløkningsregler for sølv (struktur *I* ovenfor).

$$\text{Strukturfaktoren er gitt ved } S_G = F_{hkl} = \sum_j f_j \exp(-i\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}_j)$$

Skriv opp de tre laveste refleksene for Ag, og sorter dem i henhold til intensiteten. Begrunn svaret.

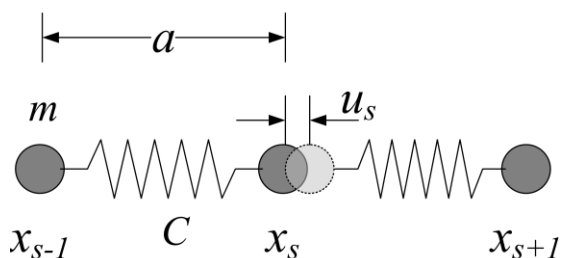
c) Figuren til høyre viser et simulert TEM soneakse diffraksjonsmønster av et materiale med samme struktur som sølv (figur *I* over). Soneaksen er [001]. Indiser dette diffraksjons-bildet, og indiker hvor (hvis noen) du ville sett de forbudte refleksene.



Simulert TEM diffraksjonsmønster

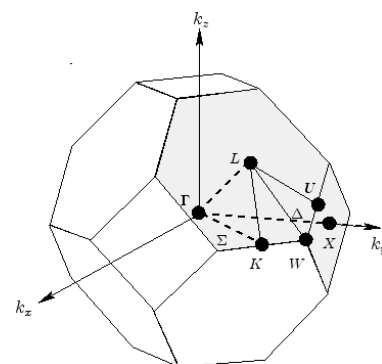
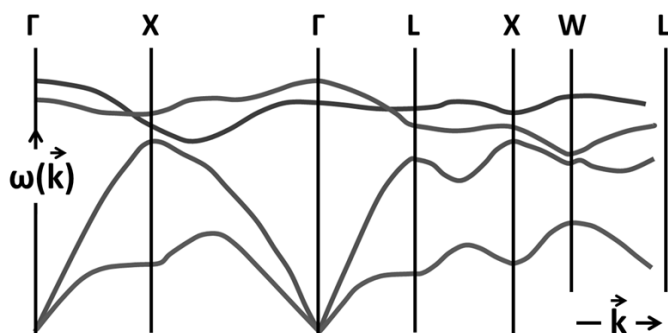
d) Struktur *II* over viser enhetscellen for mineralet perovskitt. Hva er den kjemiske formelen for dette materialet? Forklar. Diskuter utsløkningsreglene for denne strukturen (Du trenger ikke å utlede dem).

## Oppgave 4 (25%) Foner



Endimensjonal kjede av atomer

- Utled dispersjonsrelasjonen for gitteret i en lineær endimensjonal kjede av ekvidistante identiske atomer med masse  $m$  som vibrerer langs kjeden, som vist i figuren ovenfor. Anta at interaksjonen skjer bare mellom nærmeste naboer, at avstanden mellom nabo-atomer er  $a$ , og at den harmoniske fjærstivheten (fjærkonstanten) er  $C$ . (Tips; Sett opp Newtons lov for ett atom, anta at Hooke's lov gjelder, sett inn harmoniske bølgeløsninger.)
- Skisser fonon dispersjonsrelasjonen. Vis at alle mulige bølger kan beskrives ved bølgevektorer i et  $2\pi/a$  langt intervall. Vis at og forklar hvorfor gruppehastigheten er null for  $k = \pi/a$ .
- Anta at kjeden er 1 cm lang,  $a = 3 \text{ \AA}$ , og den maksimale fononfrekvensen  $\omega_{\max} = 10^{13} \text{ rad/s}$ . Utled antallet longitudinale bølger som har frekvens i området mellom  $10^{11} \text{ rad/s}$  og  $10^{12} \text{ rad/s}$ . Forklar.
- Forklar kvalitativt, gjennom en enkel figur, hvordan dispersjonsrelasjonen vil endre seg dersom annethvert atom i kjeden erstattes med atomer med større masse.
- Nedenfor er fonon dispersjonsrelasjonen i ulike retninger i første Brillouinsone for GaAs. Forklar kvalitativt hva du ser i grafen. Svar kort.



Dispersjonsrelasjon for fononer i GaAs

### Oppgave 5 (20%) Frielektronmodell

- a) Vi vil nå undersøke  $N$  frie elektroner i en terning med sidekant  $L$ . Anta periodiske grensebetingelser, og at temperaturen er  $T = 0$ . Bestem tetthet av  $k$ -verdier i  $k$ -rommet. Definer Fermienergien  $E_F$  og vis at uttrykket for Fermi-bølgevektoren kan skrives som

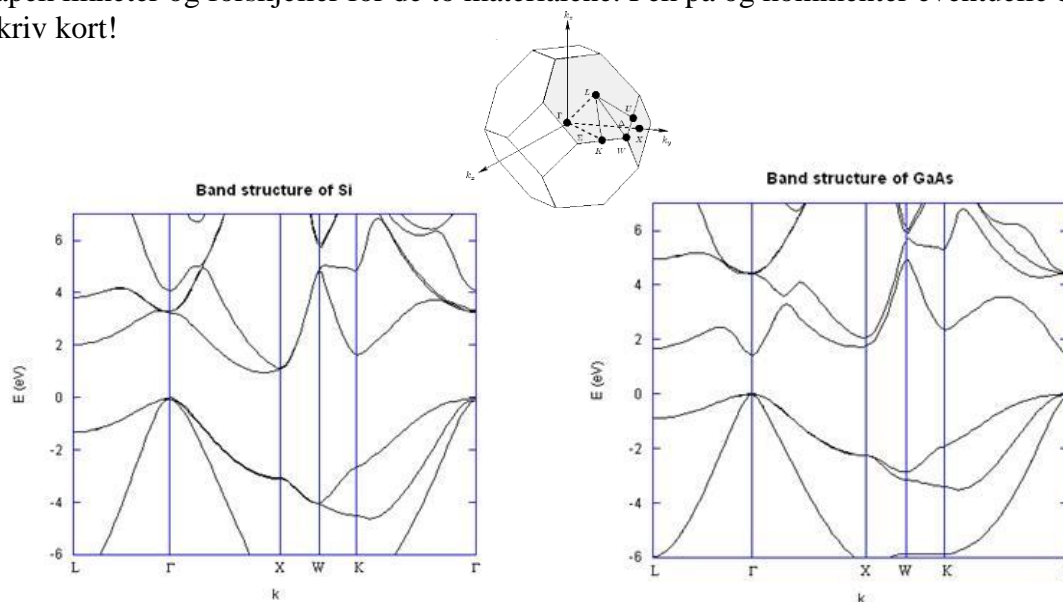
$$k_F = \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \text{ med volum } V = L^3.$$

Finn tetthet av tilstander (antall tilstander pr energienhet)  $D(E)$  i tre dimensjoner.

- b) Tegn en figur som viser  $D(E)$  for  $T = 0$  som funnet over.

Anta nå at temperaturen er  $T > 0$ . Skisser i samme figur antall okkuperte tilstander som funksjon av  $E$ . Forklar hvorfor de to kurvene er forskjellige, og estimer typisk utstrekning på området hvor forskjellene er størst.

- c) Figuren under viser beregnet båndstruktur for Si og GaAs. Forklar hva disse kurvene viser og påpek likheter og forskjeller for de to materialene. Pek på og kommenter eventuelle båndgap. Skriv kort!



Beregnete båndstrukturer for Si og GaAs

#### Oppgitt:

Energi-bølgevektor dispersjonsrelasjon for frie elektroner er  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ .

Sannsynligheten for at en orbital med energi  $E$  er okkupert i en ideell Fermi-gass i termisk

likevekt ved temperatur  $T$  er gitt ved Fermi-Dirac fordelinga  $f_e(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$

## NYNORSK:

### Oppgåve 1 (15%) Introduksjonsspørsmål

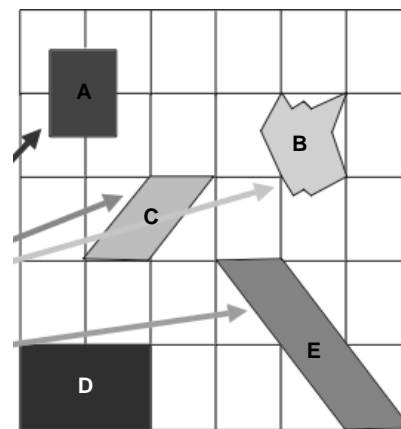
Svar kort på disse spørsmåla!

- I laben gjorde du / fikk data frå eit røntgen diffraksjonseksperiment. Forklar kvifor det var smart å bruke eit pulver som materiale for desse målingane istadenfor ein einkrystall.
- Oppgje og samanlikn eigenskapane til materialer med metallisk, kovalent og ionisk binding. Gje minst eit eksempel på materialar som har denne typen bindingar.
- Anta at vi har en n-type dopa halvleder (f.eks Si eller Ge). Skisser og forklar kort korleis elektronkonsentrasjonen avhenger av temperatur.
- Fortel om fri-elektron modellen. Kva slags eigenskaper kan vi forklare med den modellen? Gje høve. Kva slags eigenskaper kan ein ikkje godt beskrive med denne modellen? Gje høve på materiale vi kan bruke denne modellen på.

### Oppgåve 2 (15%) Fleirvalsoppgåve

Vel berre eit svar på kvart spørsmål. Feil eller fleire svar vil gje null poeng. Du skal ikkje gje nokon forklaring eller resonnement. Du kan sirkle inn det riktige svaret, og levere dette inn med resten av svaret.

- Kva slags strukturar har høgast pakkefraksjon?
  - fcc og hcp
  - bcc og hcp
  - fcc og bcc
  - alle (fcc, bcc, hcp)
- Kven av cellene i figuren til høyre er ei Wigner-Seitz celle?
  - A og D
  - A
  - A, B og C
  - Alle
- Kva meiner vi med første Brillouin sone?
  - Volumet i det reelle rommet med minst gitterpunkter
  - Wigner-Seitz cella
  - Bravaisgitteret i det resiproke rommet
  - Wigner-Seitz cella i resiproke rommet
- Kva bestemmer intensiteten i ein tilleten diffraksjonsspot?
  - Basisen i gitterstrukturen
  - Orientering av prøva og Bravaisgitter av strukturen
  - Orienteringa av prøva og basis i gitterstrukturen
  - Alle de tre ovanfor - orientering, Bravaisgitter og basis

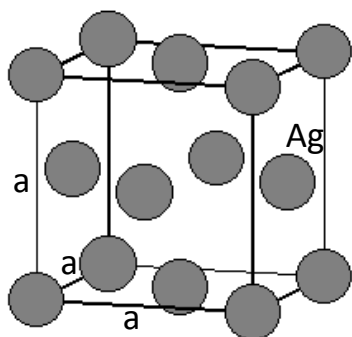


Spørsmål 2 om Wigner-Seitz celle

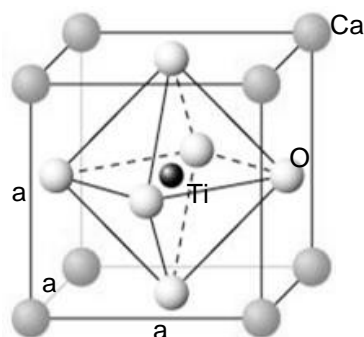
5. Kva bestemmer talet på greiner i dispersjonsrelasjonen for fononer?
- massen av atoma
  - talet på forskjellige atomer i basis
  - talet for atom i basis
  - romgruppa av krystallen
6. Reint silisium dopa med fosfor er
- amorft
  - p-type leder
  - n-type leder
  - en isolator
7. Kva slags eksperimenter er best for å finne fonon dispersjonskurver?
- lydbølgjespreiing
  - elektrondiffraksjon
  - Røntgendiffraksjon
  - uelastisk nøytronspreiing
8. Kva er ei Bloch-bølgje?
- ein eksponentialfunksjon sentrert rundt gitterpunkter
  - ei planbølgje multiplisert med en periodisk funksjon
  - ei vanlig planbølgje
  - ei lineær bølgje med fase som er periodisk med gitteret
9. Kva er Fermikula?
- Ei kule i det reelle rommet for alle elektron med Fermienergi ved  $T = 0$
  - Elektron med Fermienergien som lager ei kule i k-rommet
  - Ei kule av elektron i krystallen som beveger seg med hastighet  $v_F$
  - Ei kule av elektron med konstant hastighet og temperatur
10. Ein typisk størrelse på en Fermienergien i metaller er
- $< 1$  eV
  - 2-10 eV
  - gitt av Planck's konstant
  - alltid  $> 10$  eV

### Oppgave 3 (25%) Struktur og diffraksjon

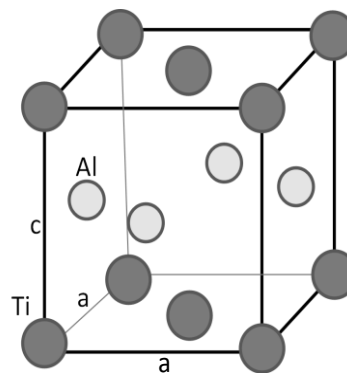
a)



I - Sølv



II - Perovskitt



III - Titanaluminid

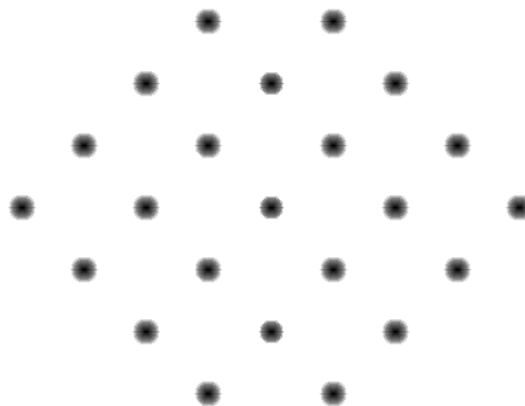
Figurane ovanfor viser strukturen av tre forskjellige materialar. *I* er sølv, *II* viser en perovskittstruktur og *III* er titanaluminid. Spesifiser Bravaisgitteret og basisen i kvart enkelt tilfelle (du kan tegne figuren og vise atoma som høyrer til basis eller skrive ned koordinatane i enhetscella). For kvart tilfelle, kor mange atom er det i basis?

b) Bestem strukturfaktoren og finn utsløkningsreglar for sølv (struktur *I* ovanfor).

$$\text{Strukturfaktoren er gitt ved } S_G = F_{hkl} = \sum_j f_j \exp(-i\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}_j)$$

Skriv opp de tre lågaste refleksane for Ag, og sorter dei i forhold til intensiteten. Grunnge svaret.

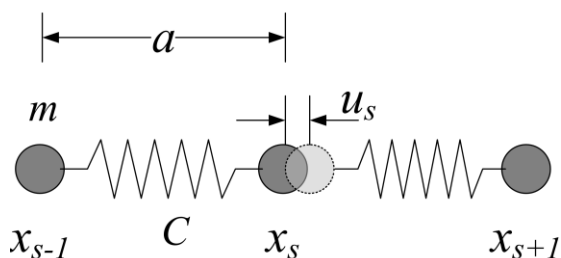
c) Figuren til høyre viser et simulert TEM soneakse diffraksjonsmønster av et materiale med same struktur som sølv (figur *I* over). Soneaksen er [001]. Indiser dette diffraksjons-bildet, og indiker hvor (hvis noen) du ville sett de ulovlege refleksane.



Simulert TEM diffraksjonsmønster

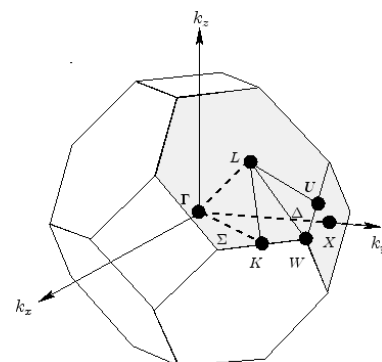
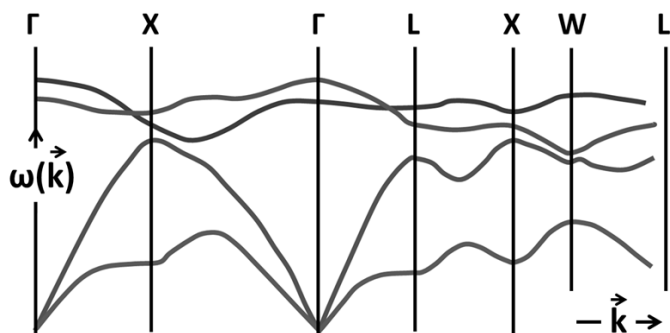
d) Struktur *II* over viser einhetscella for mineralet perovskitt. Hva er den kjemiske formelen for dette materialet? Forklar. Diskuter utsløkningsreglane for denne strukturen (Du trenger ikkje å utlede dem).

## Oppgave 4 (25%) Foner



Endimensjonal kjede av atomer

- Utled dispersjonsrelasjonen for gitteret i en lineær eindimensjonal kjede av ekvidistante identiske atom med masse  $m$  som vibrerer langs kjeden, som vist i figuren ovenfor. Anta at interaksjonen skjer bare mellom de nærmeste naboer, at avstanden mellom nabo-atom er  $a$ , og at den harmoniske fjærstivheten (fjærkonstant) er  $C$ . (Tips; Sett opp Newtons lov for eit atom, anta at Hooke's lov gjelder, sett inn harmoniske bøljeløsninger.)
- Skisser fonon dispersjonsrelasjonen. Vis at alle mulige bølger kan beskrives ved bølgevektorer i et  $2\pi/a$  langt intervall. Vis at og forklar kvifor gruppehastigheten er null for  $k = \pi/a$ .
- Anta at kjeden er 1 cm lang,  $a = 3 \text{ \AA}$ , og den maksimale fononfrekvensen  $\omega_{\max} = 10^{13} \text{ rad/s}$ . Utled talet av longitudinale bølger som har frekvens i området mellom  $10^{11} \text{ rad/s}$  og  $10^{12} \text{ rad/s}$ . Forklar.
- Forklar kvalitativt, gjennom en enkel figur, korleis dispersjonsrelasjonen vil endre seg dersom annethvert atom i kjeden erstattes med atom med større masse.
- Nedanfor er fonon dispersjonsrelasjonen i ulike retningar i første Brillouinsone for GaAs. Forklar kvalitativt kva du ser i grafen. Svar kort.



Dispersjonsrelasjon for fononer i GaAs

### Oppgave 5 (20%) Frielektronmodell

- a) Vi vil nå undersøke  $N$  frie elektron i en terning med sidekant  $L$ . Anta periodiske grensebetingelser, og at temperaturen er  $T = 0$ . Bestem tetthet av  $k$ -verdier i  $k$ -rommet. Definer Fermienergien  $E_F$  og vis at uttrykket for Fermi-bølgevektoren kan skrives som

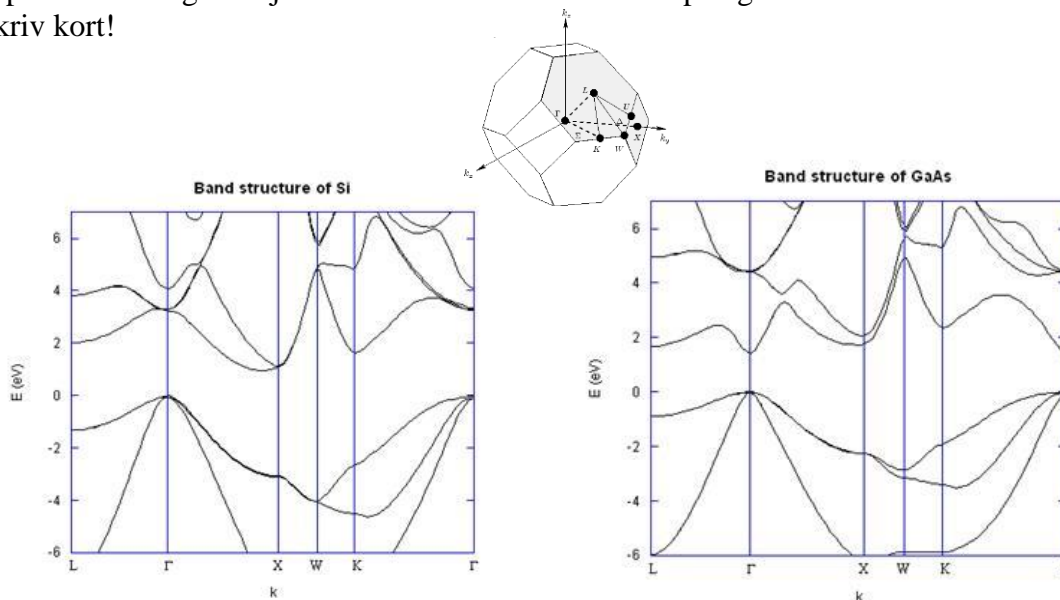
$$k_F = \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \text{ med volum } V = L^3.$$

Finn tetthet av tilstander (talet på tilstander pr energienhet)  $D(E)$  i tre dimensjoner.

- b) Teikn ein figur som viser  $D(E)$  for  $T = 0$  som funnet over.

Anta nå at temperaturen er  $T > 0$ . Skisser i same figur talet okkuperte tilstander som funksjon av  $E$ . Forklar kvifor de to kurvene er forskjellige, og estimer typisk utstrekning på området kor forskjellane er størst.

- c) Figuren under viser beregnet bandstruktur for Si og GaAs. Forklar kva disse kurvene viser og påpek likheter og forskjeller for de to materialene. Pek på og kommenter eventuelle bandgap. Skriv kort!



Berekna båndstrukturer for Si og GaAs

#### Oppgitt:

Energi-bølgevektor dispersjonsrelasjon for frie elektron er  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ .

Sannsynligheten for at en orbital med energi  $E$  er okkupert i en ideell Fermi-gass i termisk

likevekt ved temperatur  $T$  er gitt ved Fermi-Dirac fordelinga  $f_e(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$