Háskóli Íslands | | Haust 2017
Raunvísindadeild
Eðlisfræði

Eðlisfræði þéttefnis I

Lokapróf

12. Desember 2017 kl. 13:30 – 16:30

Leyfileg hjálpargögn eru skriffæri, vasareiknir og eintak af kennslubók(um) (ein eða fleiri):

- Harald Ibach and Hans Lüth, *Solid-State Physics: An Introduction to Principles of Materials Science*, 4th ed., Springer-Verlag, 2009
- Steven H. Simon, *The Oxford Solid State Basics*, Oxford University Press, 2013
- Charles Kittel, *Introduction to Solid State Physcis*, John Wiley & Sons
- Neil W. Ashcroft and N. David Mermin, *Solid State Physics*, Brooks Cole, 1976
- M. Ali Omar, Elementary Solid State Physics: Principles and Applications, Addison-Wesley

en engar glósur eða dæmi.

1. **Kristallsgerð og eðlismassi – Crystal structure and density** (8)

   Járn (56 g/mól) má finna bæði sem miðjusetinn tening (bcc) og sem hliðarsetinn tening (fcc) og ræðst af hitistigi hvor formgerðin kemur fram. Við gerum ráð fyrir að líta megi á atóm sem harðar kúlur af radía R sem er hinn sami fyrir báða fasa og er þannig að sérhver kúla rétt snerti næstu granna.

   (a) Hvert er hlutfall eðlismassa þessara tveggja fasa ?

   (b) Í bcc fasanum hefur járn eðlismassann 7900 kg m^{-3}. Hver er þá grindarfastinn ?

   Iron (56 g/mole) can be found under both body centered cubic (bcc) and face centered cubic (fcc) depending on temperature. We will assume each atom can be modeled as a hard sphere the radius R of which is the same in both phases and is such that each sphere just touches its direct neighbors.

   (a) What is the ratio of densities between the two phases ?

   (b) In its bcc phase, iron has a mass density of 7900 kg m^{-3} . What is the conventional lattice constant ?

2. **Barium titanate** (24)

   Barium titanate $BaTiO_3$ hefur fasa með formgerð þar sem Barium (Ba; 137 g mol^{-1}) atóm eru á hornum teningsins með títan atóm (Ti; 48 g mol^{-1}) í miðjunni og súrefnis atóm (O; 16 g mol^{-1}) í miðju hverrar hliðar teningsins. Í þessum fasa er eðlismassi barium titanite $\rho = 6.02$ g cm^{-3}. Röntgengeislum af bylgjulengd $\lambda = 0.154$ nm er beint að barium titanate púðri í Debye-Scherrer tilraun. Avogadro talan er $N = 6.02 \times 10^{23}$ mol^{-1}.

(a) Lýsið formgerðinni, segið hver grindin og grunnurinn eru og reiknið grindarfastann.

(b) Reiknið Bragg hornin fyrir fyrstu fjóra toppana sem fram koma í Debye-Scherrer tilrauninni

(c) Gerum ráð fyrir að formstuðlar frumeinda séu fastar með $f_{\mathrm{Ba}} = 7f_{\mathrm{O}}$ og $f_{\mathrm{Ti}} = 3f_{\mathrm{O}}$, og finnið samband styrks milli fyrstu fjögurra toppanna.

Barium Titanate $BaTiO_3$ has a phase with a structure in which the Barium (Ba; 137 g mol^{-1}) atoms are at the corners of a cube with a titanium (Ti; 48 g mol^{-1}) atom at the center and oxygen (O; 16 g mol^{-1}) atoms at the center of each face of the cube. In this phase, barium titanate has a mass density $\rho = 6.02$ g cm^{-3} . Barium titanate powder is exposed to X-rays with a wavelength $\lambda = 0.154$ nm in a Debye-Scherrer experiment. The Avogadro number is $N = 6.02 \times 10^{23}$ mol^{-1}.

(a) Describe the structure, specifying the lattice and basis and calculate the lattice constant.

(b) Calculate the Bragg deflection angles for the first four peaks that appear in the Debye-Scherrer experiment.

(c) Assuming the atomic form factors are constant with $f_{\mathrm{Ba}} = 7f_{\mathrm{O}}$ and $f_{\mathrm{Ti}} = 3f_{\mathrm{O}}$, establish the intensity relationship between the first four peaks.

3. **Debye hitastig – Debye temperature** (18)

Þú hefur einnar atóma teningsgrind með grindarfasta $a = 3$ Å og hljóðhraða $c_{\mathrm{s}} = 10^3$ m/s.

(a) Hvert er Debye hitastigið, Θ_{D} ? (Gefðu tölugildi í gráðum.)

(b) Segjum að þú ætlir að gera tilraun með varmarýmd grindarinnar á bili sem er full skammtað (þ. e. jafnvel hljóðhættirnir eru "frystir út"). Tækin sem þú hefur geta farið niður að hitastigi fljótandi helíns (4 K). Hve lítið þarf sýnið að vera ? Gefa skal svarið í fjölda atóma. Uppástunga: Fyrir endanlegt sýni eru leyfðir bylgjuvigrar strjálir. Þú ert að leita að minnsta, bylgjuvigri sem er ekki núll, sem gefur lægsta örvaða orkustig kristallsins. Tengdu þessa orku við varmaorku til að leysa þetta dæmi.

You have a monatomic cubic lattice of lattice spacing $a = 3$ Å and sound velocity $c_{\mathrm{s}} = 10^3$ m/s.

(a) What is the Debye temperature, Θ_{D} ? (Provide a numerical value in degrees.)

(b) Say you want to do a lattice heat-capacity experiment in the fully quantum- mechanical regime (i. e. even the acoustic modes have "frozen out"). Your apparatus is capable of reaching liquid-helium temperature (4 K). How small does your sample have to be ? Give the answer in atoms. Hint: Recall that for a finite sample, the allowed wavevectors are discrete. You are looking for the smallest, non-zero wavevector, as this will give you the lowest energy excitation of the crystal. Relate this energy to the thermal energy to solve the problem.

4. **Kristallsmætti 1D grindar – Crystal potential in 1D lattice** (9)

Gerum ráð fyrir að kristallsmætti í einvíðri grind samanstandi af rétthyrndum brunnum umhverfis atómin. Gerum ráð fyrir að dýpt brunnanna sé V_0 og að breidd þeirra sé $a/5$.

(a) Beita skal nánast frjálsa rafeinda líkanið til að reikna stærð fyrstu þriggja orkugeilanna. Berið saman stærð þessara orkugeila.

(b) Reiknið orkugeilar fyrir tilfellin þegar $V_0 = 6$ eV og $a = 4$ Å.

Suppose that the crystal potential in a one-dimensional lattice is composed of a series of rectangular wells which surround the atoms. Suppose the depth of each well is V_0 and its width $a/5$.

(a) Using the near free electron model, calculate the values of the first three energy gaps. Compare the magnitudes of these gaps.

(b) Evaluate these gaps for the case in which $V_0 = 6$ eV and $a = 4$ Å.

5. **Einstein og skammtafræði – Einstein and quantum theory** (8)

Lýsið hvernig Einstein notaði skammtafræði til að útskýra lághitahegðun varmarýmdar í þéttefni. Hafið svarið fleiri en fjórar setningar.

Describe how Einstein used quantum theory to explain the low-temperature behavior of the specific heat in solids. Use more than four sentences in your response.

6. **Varmarýmd $d-$víðs einangrara – Specific heat of a $d-$dimensional insulator** (18)

Gerum ráð fyrir $d-$víðum kristalli með tvístrunarsamband gefið sem $\omega = Ak^{\lambda}$ þar sem A og λ eru fastar. Setjum N sem fjölda grindarpunkta í sýninu.

(a) Reiknið hneppishraðann sem fall af k.

(b) Ef Debye hitastigið Θ_{D} er í réttu hlutfalli við N^{α} finnið þá α sem fall af λ og d.

(c) Ef ástandsþéttleiki hljóðeinda $D(\omega)$ er í réttu hlutfalli við ω^{β} þá skal finna β sem fall af λ og d.

(d) Ef að varmarýmdin C við lág hitastig er í réttu hlutfalli við T^{δ} finnið δ sem fall af λ og d. Ræðið niðurstöðurnar fyrir línulegt tvístrunarsamband með $d = 1$, 2, and 3.

Consider a $d-$dimensional crystal with the dispersion relation given as $\omega = Ak^{\lambda}$ where A and λ are constants. Let N be the number of lattice points in the sample.

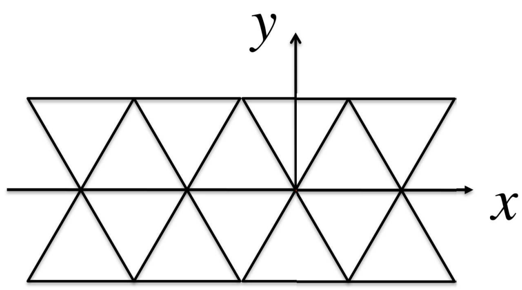
(a) Calculate group velocity in terms of k.

(b) If the Debye temperature Θ_{D} is proportional to N^{α}. Calculate α in terms of λ and d.

(c) If the phonon density of states $D(\omega)$ is proportional to ω^{β} calculate β in terms of λ and d.

(d) If the heat capacity C at low temperatures is proportional to T^{δ}. Calculate δ in terms of λ and d. Discuss your results for the particular case of linear dispersion relation, with $d = 1$, 2, and 3.

7. **Two-dimensional triangular lattice – reciprocal lattice** (9)



(a) Merkið inn grunngrindareiningu í þessari tvívíðu þríhyrningsgrind. Finnið grunn vigrana.

(b) Finnið grunn vigra nykurgrindarinnar.

(a) Identify the primitive unit cell of a two-dimensional triangular lattice. Find the basis vectors.

(b) Construct the basis vectors of the reciprocal unit cell.

8. **Stefnur í kristöllum – crystal directions** (6)

Hve margar stefnur tilheyra $\langle 100 \rangle$ fjölskyldunni ?

How many directions belong to the $\langle 100 \rangle$ family ?

1 Fastar

$$q = 1.602 \times 10^{-19} \quad \text{C}$$

$$\hbar = 1.0546 \times 10^{-34} \quad \text{Js}$$

$$m_{\text{e}} = 9.1096 \times 10^{-31} \quad \text{Js}$$

$$N_{\text{Av}} = 6.022 \times 10^{23} \quad \text{sameindir/mól}$$

$$k_{\text{B}} = 1.38 \times 10^{-23} \text{J/K} = 8.62 \times 10^{-5} \quad \text{eV/K}$$

$$\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-14} \quad \text{F/cm}$$

$$\epsilon_{\text{ox}}/\epsilon_0 = 3.9$$

$$\epsilon_{\text{Si}}/\epsilon_0 = 11.9$$

$$\epsilon_{\text{Ge}}/\epsilon_0 = 16$$

$$\epsilon_{\text{GaAs}}/\epsilon_0 = 13.1$$

Fyrir kísil við stofuhita:

$$n_{\text{i}} = 9.65 \times 10^{9} \quad \text{cm}^{-3}$$

Fyrir GaAs við stofuhita:

$$n_{\text{i}} = 2.25 \times 10^{9} \quad \text{cm}^{-3}$$

2 Hálfleiðarar

$$E_{\text{H}} = -\frac{m_{\text{e}} q^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{13.6}{n^2}$$

$$E_{\text{g}} = 1.17 - \frac{(4.73 \times 10^{-4})T^2}{(T + 636)} \qquad \text{kísill}$$

$$E_{\text{g}} = 1.52 - \frac{(5.4 \times 10^{-4})T^2}{(T + 204)} \qquad \text{GaAs}$$

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2}$$

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{\text{F}}}{kT}\right)}$$

$$n = \int_{\infty}^{E_{\text{c}}} f(E) N(E) dE$$

$$N(E) = 4\pi \left(\frac{2m^*}{h^2}\right)^{3/2} E^{1/2}$$

$$f(E) \approx \exp\left(-\frac{E - E_{\text{F}}}{kT}\right) \text{ ef } E - E_{\text{F}} > 3kT$$

$$f(E) \approx 1 - \exp\left(-\frac{E_{\text{F}} - E}{kT}\right) \text{ ef } E - E_{\text{F}} < 3kT$$

$$n \approx N_{\text{c}} \exp\left(-\frac{E_{\text{c}} - E_{\text{F}}}{kT}\right)$$

$$N_{\text{c}} = 2\left(\frac{2\pi m^* kT}{h^2}\right)^{3/2}$$

$$p \approx N_{\text{v}} \exp\left(-\frac{E_{\text{F}} - E_{\text{v}}}{kT}\right)$$

$$N_{\text{v}} = 2\left(\frac{2\pi m^* kT}{h^2}\right)^{3/2}$$

$$np = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) = n_i^2$$

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{kT}\right)$$

$$p = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{kT}\right)$$

$$E_c - E_F = kT \ln\left(\frac{N_c}{N_D}\right)$$

$$E_F - E_v = kT \ln\left(\frac{N_v}{N_A}\right)$$

$$np = n_i^2$$

Við stofuhita fyrir kísil

$$N_c = 2.8 \times 10^{19} \quad \mathrm{cm}^{-3}$$

$$N_v = 1.04 \times 10^{19} \quad \mathrm{cm}^{-3}$$

Við stofuhita fyrir GaAs

$$N_c = 4.7 \times 10^{17} \quad \mathrm{cm}^{-3}$$

$$N_v = 7 \times 10^{18} \quad \mathrm{cm}^{-3}$$

n-leiðandi hálfleiðari

$$n_n = \frac{1}{2}\left[N_D - N_A + \sqrt{(N_D - N_A)^2 + 4n_i^2}\right]$$

og

$$p_n = \frac{n_i^2}{n_n}$$

p-leiðandi hálfleiðari

$$p_p = \frac{1}{2}\left[N_A - N_D + \sqrt{(N_A - N_D)^2 + 4n_i^2}\right]$$

og

$$n_p = \frac{n_i^2}{p_p}$$

$$N_C = 2\left(\frac{m_e^* kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$N_V = 2\left(\frac{m_h^* kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$J = \sigma\mathcal{E}$$

$$\sigma = \frac{nq^2\tau}{m_n^*} \qquad [\Omega\mathrm{cm}]^{-1}$$

$$\sigma = qn\mu_n$$

$$\mu_n = \frac{q\tau}{m_n^*}$$

$$J = q(n\mu_n + p\mu_p)\mathcal{E} = \sigma\mathcal{E}$$

$$R = \frac{\rho L}{Wd} = \frac{L}{Wd}\frac{1}{\sigma}$$

3 Viðnám

$$R = \frac{\rho L}{A}$$

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = (q\mu_n n + q\mu_p p)$$

$$R = \frac{1}{G} = \frac{L}{W}\frac{1}{g}$$