

**PROBLEMSAMLING FÖR
KONDENSERADE MATERIENS FYSIK del I**

1. Kristallstruktur

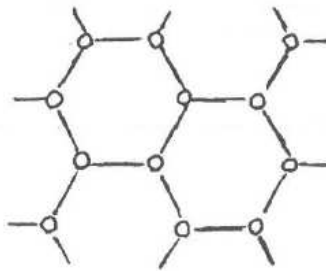
1-1. Koppar har fcc-struktur och densiteten 8.93 g/cm^3 . Beräkna med hjälp härav

- Kantlängden i den konventionella enhetscellen.
- Avståndet mellan närmaste grannar
- Volymen hos en primitiv enhetscell.

1-2. Gitterkonstanten hos diamant är 3.56 \AA . Beräkna avståndet mellan a) närmaste grannar, b) näst närmaste grannar.

1-3. a) Punkterna (o) i figuren bildar ett två-dimensionellt, regelbundet, hexagonalt mönster. Ge en kort, klar motivering till varför punkterna *ej* utgör ett Bravais-gitter.

b) Anta att punkterna representerar identiska atomer; figuren visar alltså en tvådimensionell kristallstruktur. Ange primitiva basvektorer och en primitiv enhetscell. Hur många atomer innehåller basen?



1-4. Aluminium har en viss typ av kristallstruktur och en viss densitet.

- Ange dessa, och beräkna från dem kantlängden i enhetscellen.
- Om aluminiumatomerna betraktas som sfärer, med en radie så stor att närmaste grannar precis tangerar varandra, hur stor andel av en aluminiumkristalls totala volym upptas då av dessa sfärer?

1-5. Kobolt har i sin stabila form vid rumstemperatur en hexagonal tätpackad struktur (hcp). Vid högre temperatur antar kobolt en enkel fcc-struktur.

- Härled volymen hos den primitiva cellen i hcp-strukturen, uttryckt i gitterparametrarna a och c .
- Antag att densiteten för kobolt är densamma i de båda strukturerna (hcp och fcc). Vad blir då gitterparametern a' i fcc-strukturen, om man i hcp-strukturen har $a = 2.51 \text{ \AA}$ och $c = 4.07 \text{ \AA}$?

1-6. Kisel har densiteten 2.33 g/cm^3 . Antag att kiselatomerna kan betraktas som hårda sfärer med en radie sådan att atomerna i en kiselkristall precis rör vid sina närmaste grannar. Om man kunde arrangera om kiselatomerna till en tätpackad kristall, låt säga med enkel fcc-struktur, vilken densitet skulle en sådan kristall få?

1-7) För kristallint järn vid rumstemperatur, beräkna

- avståndet mellan (101)-plan
- avståndet mellan kristallplan vinkelräta mot [100].

1-8) Ett s.k. ortorombiskt gitter har de fundamentala gittervektorerna

$$\mathbf{a} = a\mathbf{x}_e$$

$$\mathbf{b} = b\mathbf{y}_e$$

$$\mathbf{c} = c\mathbf{z}_e$$

där $\mathbf{x}_e, \mathbf{y}_e, \mathbf{z}_e$ är de cartesiska enhetsvektorerna, och där $a \neq b \neq c$. Härled en formel uttryckt i a, b, c, h, k, l för avståndet mellan successiva kristallplan med Millerindex (hkl).

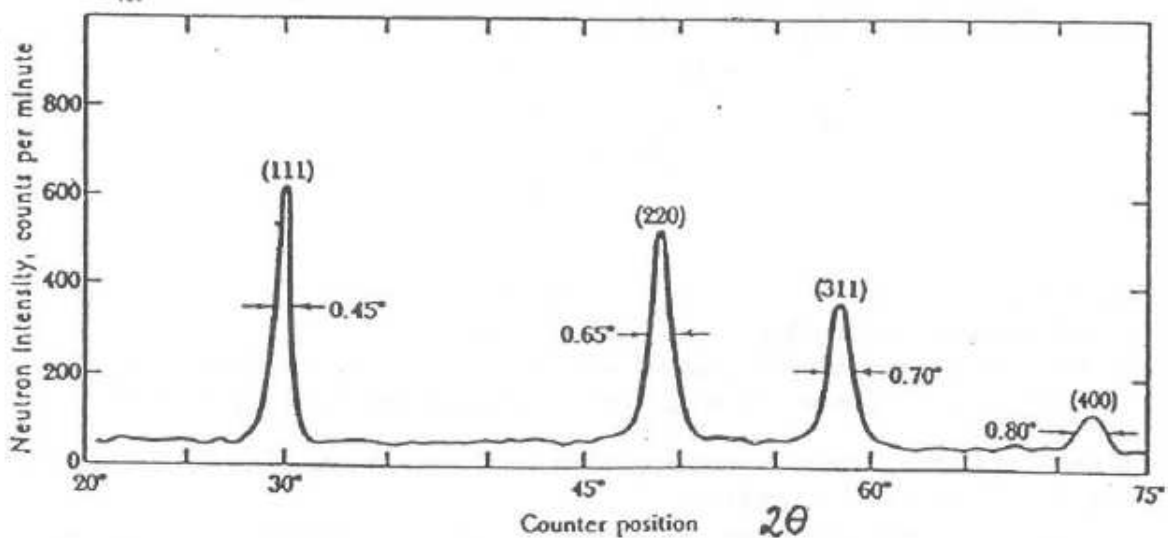
Diffraction

2-1. a) I ett experiment med röntgendiffraktion undersöktes monokristallint nickel. Röntgenstrålningens våglängd var 0.586 \AA . Första ordningens spektrum för (111)-planen hittades vid glansvinkeln 8.29° . Beräkna härav gitterkonstanten.

b) Beräkna den största våglängd man kan använda, om man med hjälp av röntgenstrålning vill bestämma gitterkonstanten hos nickel.

2-2. En smal stråle av elektroner med kinetisk energi $\approx 100 \text{ keV}$ får infalla vinkelrätt mot ett mycket tunt kopparfolie. Elektronernas de Broglie-våglängd är 0.04 \AA . Den genom foliet transmitterade elektronstrålen får därefter träffa en fluorescerande skärm på ett avstånd = 25 cm från foliet. På skärmen kan man då iaktta ett träffmönster bestående av koncentriska cirklar. Beräkna radien hos den minsta cirkeln. (Visa att denna cirkel är den minsta.)

2-3. Nedanstående figur visar ett diffraktionsmönster erhållet med en stråle av neutroner spridd mot pulvriserad diamant. Beräkna neutronernas kinetiska energi.



Neutron diffraction pattern for powdered diamond. (After C. Bacon.)

2-4. Beräkna strukturfaktorn för CsCl vid spridning mot (100)-plan. Antag att de atomära formfaktorerna uppfyller sambandet $f_{Cs^+} = 3f_{Cl^-}$. Uttryck svaret i f_{Cl^-} .

2-5. Beräkna den geometriska strukturfaktorn för en monoatomär kristall med hexagonal tätpackad struktur (hcp).

2-6. Röntgendiffraktion har använts bl a för att studera DNA-molekyler. Som enkel modell kan vi anta en *endimensionell* kristall (schematiskt exemplifierad i nedanstående figur a) med fundamental vektor \mathbf{a} , dvs med gitterpunkter $\mathbf{R}_n = n \cdot \mathbf{a}$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, där $a = |\mathbf{a}|$ är gitterkonstanten. Basen utgörs av N atomer i positionerna $\mathbf{R}_n + \mathbf{d}_j$, $j = 1, 2, 3, \dots N$. Atomerna i basen har respektive atomära formfaktorer

$$f_j(\Delta\mathbf{k}) = \int F_j(\mathbf{r}) e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} dV$$

för $j = 1, 2, 3, \dots, N$, där $F_j(\mathbf{r})$ är proportionell mot elektondensiteten i atom nr j .

a) Visa att spridningsamplituden $\alpha(\Delta\mathbf{k})$ kan skrivas som produkten av en faktor $(\sum_n e^{-in\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}})$ och en strukturfaktor $S(\Delta\mathbf{k})$; ange strukturfaktorn.

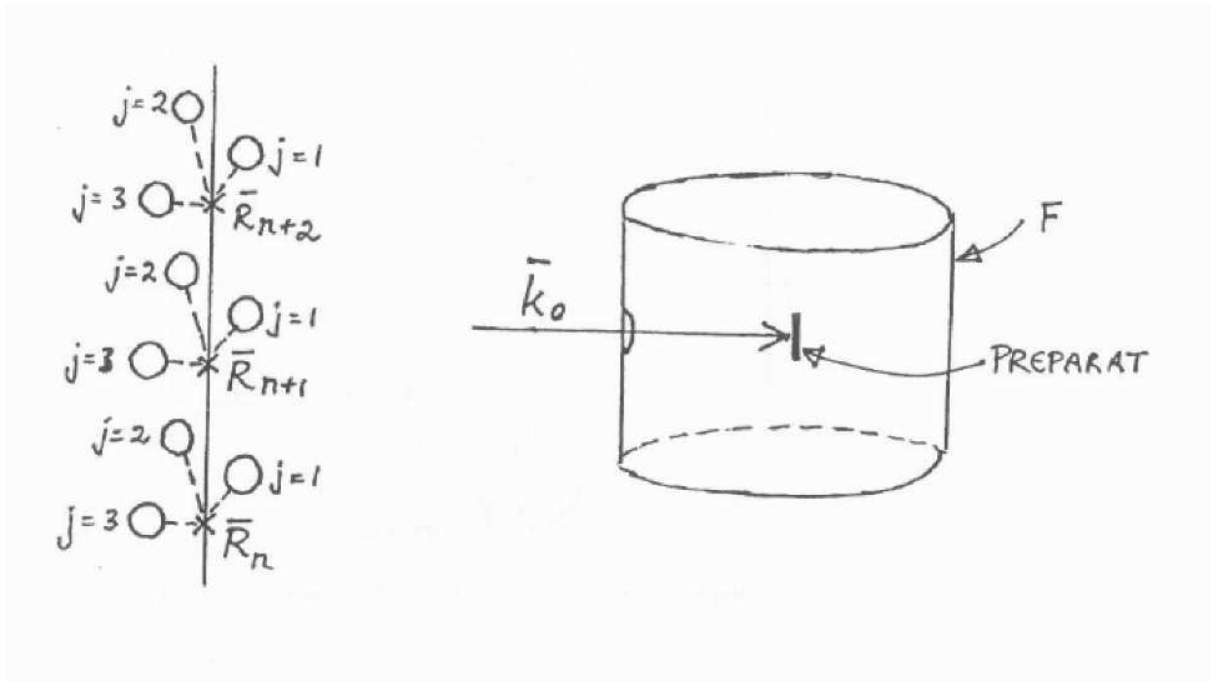
b) Antag att röntgenstrålning med våglängden λ infaller vinkelrätt mot kristallen (vinkelrätt mot \mathbf{a}). Visa med hjälp av utsagan i (a) att konstruktiv interferens erhålles då

$$a \cos \theta = J\lambda$$

där $J = \text{heltal}$, och där θ är vinkeln mellan vektorn \mathbf{a} och den spridda strålningens riktning. Bortse från strukturfaktorns inverkan.

c) Härled formeln $a \cos \theta = J\lambda$ med ett enkelt geometriskt argument. (Jmfr elementära härledningen av Braggs formel.)

d) Ett experimentellt arrangemang kan se ut som i figur b, nedan. En fotografisk film (F) i form av en cylinder omger preparatet (en liten fiber) som är placerad mitt i cylindern och orienterad så att vektorn \mathbf{a} är parallell med cylinderns symmetriaxel. Infallande strålning markeras med vektorn \mathbf{k}_0 . Antyd (med en enkel skiss) hur diffraktionsmönstret som erhålles på filmen bör se ut (i stora drag).

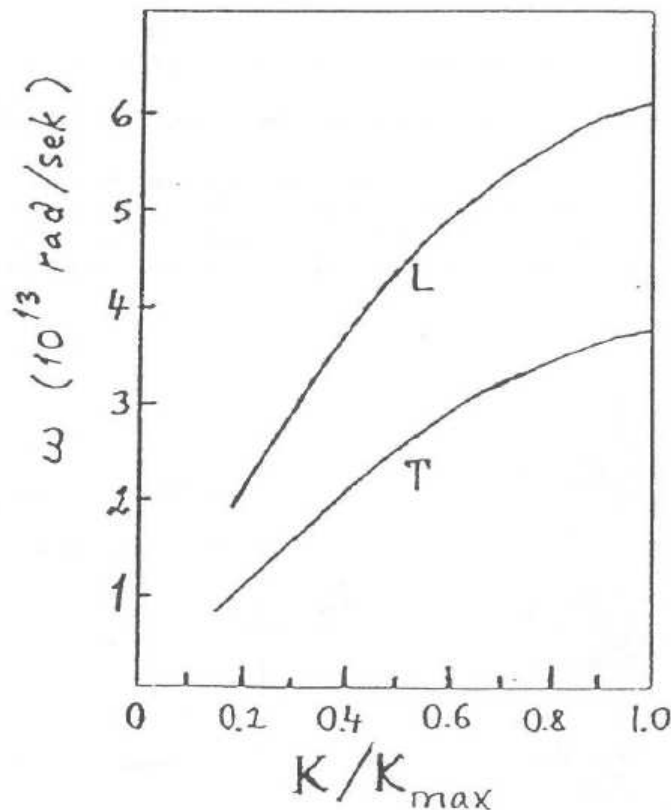


Gitterdynamik - dispersionsrelationer

3-1. Dispersionskurvor för gittervibrationer redovisas vanligen inom 1:a Brillouin-zonen, dvs med vågtal $k \leq k_{max}$. Beräkna k_{max} (\AA^{-1}) för a) riktningen [100] i CsCl, b) riktningen [111] i nickel.

3-2. I koppar fortplantas (under vissa geometriska förhållanden) långvågiga longitudinella gittervibrationer (dvs ljud) med en hastighet av ca 4700 m/s. Uppskatta med ledning härav den maximala frekvensen ω_{max} hos longitudinella gittervibrationer i [100]-riktningen i koppar, och skissera dispersionsrelationen $\omega = \omega(k)$ för dessa vibrationer i ett diagram. Använd en modell med växelverkan endast mellan närmaste kristallplan.

3-3. Nedanstående figur visar fonondispersionspektrum för aluminium i [100]-riktningen. Beräkna, med grafisk hjälp av figuren, grupp-hastigheten hos fononer med frekvensen $\omega = 3 \cdot 10^{13}$ rad/s för den longitudinella respektive den transversella grenen.



3-4. a) Konstruera grafiskt en dispersionsrelation för longitudinella gittervibrationer i en endimensionell, linjär kristall med 4 atomer per primitiv cell och med växelverkan endast mellan närmaste grannar, genom att utgå från dispersionsrelationen för en monoatomär, endimensionell kristall, varvid krafter, massor och avstånd först antas oförändrade. Redovisa resultatet som ett skisserat diagram i det reducerade schemat. Markera akustiska och optiska grenar. Hur många grenar fås av vardera sorten?

b) Antag att den högsta frekvensen hos de longitudinella gittervibrationerna i den ursprungliga, monoatomära kristallen är ω_{max} . Beräkna den högsta frekvens som, vid den 1:a Brillouin-zonens gräns, erhålles i den nya kristallen (med 4 atomer per primitiv cell).

c) Antag nu att de fyra atomerna i den primitiva cellen skiljer sig fysikaliskt från varandra, t.ex. genom att ha något olika massor. Rita kvalitativt det ungefärliga utseende som dispersionsrelationen för de longitudinella gittervibrationerna torde få i det reducerade schemat.

3-5. En endimensionell, monoatomär kristall har gitterkonstanten a och atommassan M . Vi betraktar harmoniska gittersvängningar i denna kristall.

a) Antag att två (godtyckligt valda) atomer i kristallen växelverkar endast om avståndet mellan deras jämviktslägen är mindre än ett visst maximalt avstånd (d_{max}). Visa att detta leder till en linjär dispersionsrelation $\omega \propto k$ vid långa våglängder ($\lambda \rightarrow \infty$).

b) Antag att två (godtyckligt valda) atomer i kristallen påverkar varandra med en kraft, vilken som vanligt (som i Hookes lag) är proportionell mot deras relativa förskjutning. Antag nu att fjäderkonstanten är *omvänt proportionell mot kvadraten på avståndet mellan deras jämviktslägen*. Härled, med hjälp av Fourierserien

$$\frac{x}{2}(\pi - \frac{x}{2}) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} (1 - \cos nx), 0 \leq x \leq 2\pi,$$

ett slutet algebraiskt uttryck för dispersionsrelationen. Visa, att vid långa våglängder ($\lambda \rightarrow \infty$) fås $\omega \propto \sqrt{k}$.

c) Diskutera dina slutsatser beträffande de interatomära krafterna i verkliga kristaller, med ledning av empiriska data och resultaten i (a) och (b).

Gitterdynamik - värmekapacitet, fononer.

4-1. Betrakta en endimensionell, monoatomär kristall bestående av N atomer ($N \gg 1$). Anta, att växelverkan endast förekommer mellan närmaste grannar, och att endast longitudinella svängningar sker. Visa att det exakta uttrycket för gitterbidraget till den termiska energin vid temperaturen T ges av

$$U = \int_0^{\omega_{max}} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \cdot \frac{2N}{\pi\sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}} d\omega$$

4-2. Gör en approximativ beräkning av Debye-temperaturen θ för koppar med hjälp av följande uppgifter. Anta att gränshastigheten ω_D motsvaras av en minsta våglängd $\lambda = 2d$ där d är avståndet mellan närmaste grannar i kristallen. Koppar har fcc-struktur med gitterkonstanten $a = 3.6 \text{ \AA}$. Ljudhastigheten i koppar antas vara 3560 m/s .

4-3. Värmekapaciteten C_v hos silver har uppmätts vid låga temperaturer med följande resultat: Beräkna ett

T (K)	C_v (mJ/mol.K)
3.12	6.92
2.26	3.40
1.62	1.85
1.32	1.28

värde på Debye-temperaturen för silver med hjälp av ovanstående mätvärden.

4-4. Betrakta en hypotetisk en-dimensionell kristall med längden L . Använd Debye-modellen för att visa att värmekapaciteten vid låga absoluta temperaturer T är proportionell mot T .

4-5. Anta att ledningselektronernas fria medelväglängd i kollisionerna med fononerna i en metall är omvänt proportionell mot antalet fononer per volymsenhet. Visa att detta enligt Debye-modellen borde innebära att resistiviteten är proportionell mot temperaturen vid temperaturer mycket $T \gg \theta$.

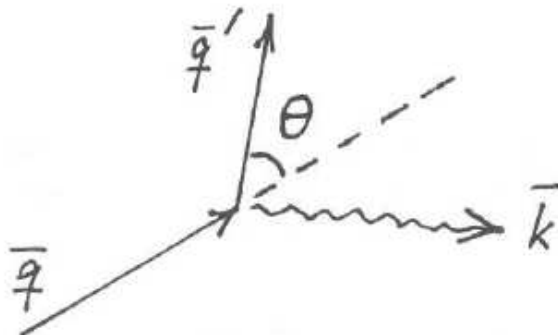
4-6. Inelastisk spridning av fotoner (t.ex. synligt ljus, s.k. Brillouin-spridning) mot en kristall innebär att fononer skapas eller annihileras. En sådan process ses i nedanstående figur, där \mathbf{q} och \mathbf{q}' är vågvektorerna för den infallande respektive den spridda fotonen, medan \mathbf{k} är vågvektorn för den skapade fononen. Vinkeln mellan infallande och spridd ljus är θ .

Fotonernas fashastighet i kristallen är c/n , där c är ljushastigheten i vacuum och n brytningsindex. Fononernas fashastighet antas vara $v =$ ljudhastigheten. Vidare antas att fononens energi är försumbar jämfört med fotonenergierna.

Visa att

$$\Omega = \frac{2n\omega}{c} \sin(\theta/2)$$

där ω är den infallande fotonens frekvens och Ω fononens frekvens. # 4-7. Hörbart ljud antas ha frekvenser



ca 20 - 20 000 Hz. I metallisk koppar är ljudhastigheten 3560 m/s och gitterkonstanten 3.61 Å. Använd dessa data för att kvalitativt förklara varför ljud fortplantar sig i koppar mycket fortare än värme sprids.

Fri elektrongas.

5-1. Beräkna ledningselektronernas fria medelvåglängd i silver vid rumstemperatur. Fria elektron-approximationen antas vara tillämpbar.

5-2. Vad blir Fermi-energin för legeringen CuZn, om vi antar att antalet atomer per volymsenhet är detsamma som i ren Cu?

5-3. För den fria elektrongasen (Fermigasen) i 3 dimensioner gäller som bekant att

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$$

där E_F är Fermi-energin och n antalet elektroner per volymsenhet.

Härled motsvarande uttryck $E_F = E_F(n)$ för en tvådimensionell Fermigas. Här är n antalet elektroner per ytenhet. Ledning: Betrakta gasen som innesluten i en kvadrat med ytan $A = L^2$ och tillämpa periodiska randvillkor.

5-4. a) Visa att den genomsnittliga energin E_{av} hos elektronerna i en fri, degenererad elektrongas ges av

$$E_{av} = \frac{3}{5} E_F$$

b) Betrakta en bit koppar i form av en kub med kantlängden 1 cm. Antag att man lyckas komprimera kuben så att dess kantlängd blir 0.99 cm. Hur mycket energi åtgår för detta, om vi beaktar *endast* den energi som åtgår för att komprimera gasen av ledningselektroner?

Varje kopparatom antas bidra med 1 ledningselektron, och ledningselektronerna antas utgöra en fri, degenererad elektrongas. I normal koppar är $E_F = 7$ eV.

c) Har den beräknade energin åtgått till en ökning av kinetisk eller potentiell energi, eller till båda?

5-5. Antag (felaktigt) att ledningselektronerna i en metall åtlöder Maxwell-Boltzmann-statistik, liksom molekylerna i en klassisk ideal gas. Antag vidare att den elektriska resistansen beror på att elektronerna kolliderar med innerskaljonerna (ion cores) i metallen, och att den fria medelvåglängden för dessa kollisioner är konstant och \approx avståndet mellan närmaste grannar (atomer). Elektronen antas spridd i helt slumpmässig riktning i en sådan kollision.

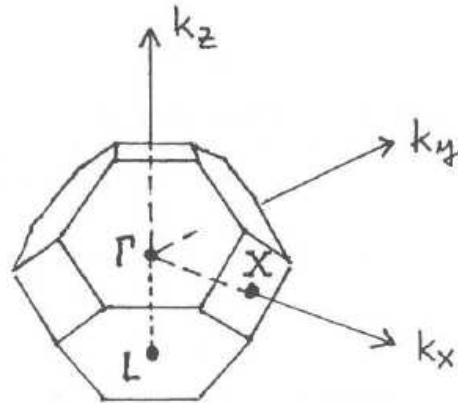
a) Visa att denna modell bör leda till en resistivitet som är proportionell mot \sqrt{T} , där T är absoluta temperaturen.

b) Hur stämmer detta med experimentella data? Diskutera kortfattat det typiska temperaturberoendet hos (icke supraledande) metallers resistivitet och dess orsaker.

5-6. I normal koppar vid rumstemperatur spelar närvaron av defekter i gittret endast en liten roll vad beträffar metallens resistivitet. Antag att man på något sätt (t.ex. genom neutronbestrålning) ökar antalet defekter per volymsenhet så mycket att resistiviteten vid rumstemperatur blir dubbelt så stor som normalt. Uppskatta den medelvåglängd λ (dvs transportmedelvåglängd) som man då bör ha för spridning av ledningselektronerna mot *defekterna* i gittret.

Bandteori.

- # 6-1. Betrakta en endimensionell elektrongas i en periodisk potential $U(x)$ med perioden $= a$. Elektrongasens täthet är $4/a$ elektroner per längdenhet. Vi antar det tomma gittrets approximation. a) Skissera i en figur relationen $E = E(k)$ mellan elektronenergi E och kristallvägtal k . Använd det reducerade schemat och upprita $E = E(k)$ upp t.o.m. 3:e bandet. Markera vad som är det 1:a, 2:a och 3:e bandet.
- b) Beräkna värdet på Fermi-vågtal k_F . Vad blir detta vågtal, reducerat till 1:a Brillouin-zonen?
- c) Beräkna Fermi-energin E_F och markera dess läge i diagrammet från uppgift (a). # 6-2. Ovanstående figur



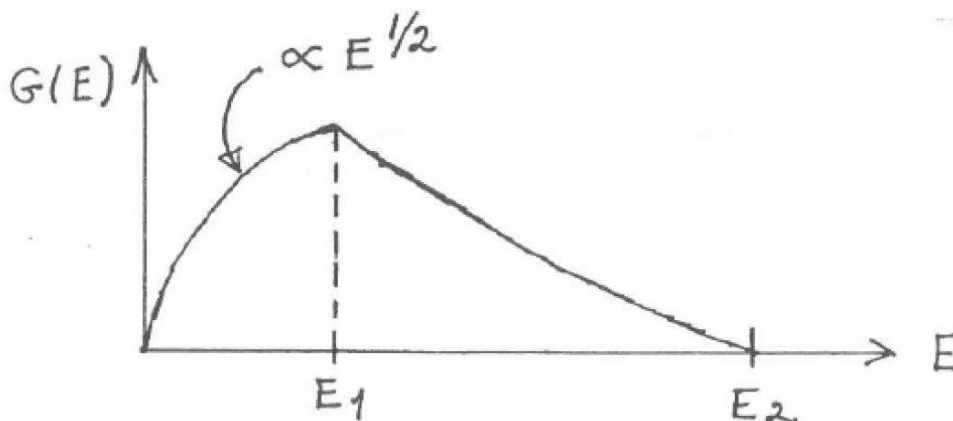
visar symmetripunkterna Γ , X och L i Brillouin-zonen för aluminium. Beräkna, i fria elektronapproximationen, energin hos elektrontillstånden i punkterna X och L för det första (lägsta) bandet. Energin hos tillståndet i zonens centrum Γ kan sättas $= 0$. Ange energierna i eV.

6-3. Betrakta ett kvadratisk (tvådimensionellt) gitter med gitterkonstanten $= a$. Använd det tomma gittrets approximation. Låt E_F vara Fermienergin.

- Vilket är det lägsta värde på E_F för vilket det första (lägsta) bandet är helt fyllt?
- Är, vid detta värde på E_F , det andra bandet tomt, delvis fyllt, eller helt fyllt?
- Antag att E_F är något lite större än i (a), men inte så stort att det andra bandet är helt fyllt. Finns då några fyllda tillstånd i *högre* band än det andra?

6-4) Betrakta valenselektronerna i en enkel kubisk kristall (sc) med gitterkonstanten a . Antalet elektrontillstånd i det lägsta bandet med energi mellan E och $E+dE$ ges då av en funktion $G(E)dE$ (=tillståndstätheten), vars utseende är *approximativt* skisserat i nedanstående figur. Fria elektronapproximationen antas.

- Förklara *kvalitativt* funktionens utseende.
- Ange värdena på energierna E_1 och E_2 .



6-5) Beräkna, i den fria elektronapproximationen, den *lägsta* energin i det *andra* (nästa lägsta) bandet i aluminium. Som referensenergi ($=0$) används den lägsta energin i det första (lägsta) bandet.

6-6) a) Visa, att för en enkel kubisk kristall (gitterkonstant a) kan man i fria elektronapproximationen skriva hela bandstrukturen som

$$E(\mathbf{k}) = E_0 \cdot [(\xi_x + n_1)^2 + (\xi_y + n_2)^2 + (\xi_z + n_3)^2]$$

där vektorn $\xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ är definierad som $\xi = (a/2\pi)\mathbf{k}$ och där n_1, n_2, n_3 är godtyckliga heltal. Beräkna energin E_0 .

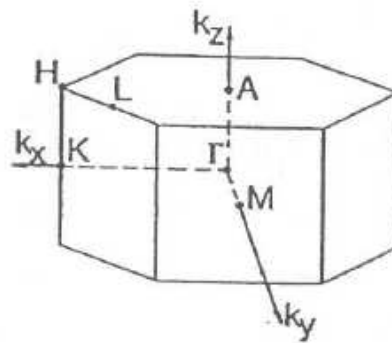
b) Antag att $a = 5.7 \text{ \AA}$. Beräkna de 4 lägsta energierna om \mathbf{k} , i det reducerade schemat, har längden $(\pi/2a)$ och är vinkelrät mot en sidoyta i enhetscellen.

6-7) Beryllium har hcp-struktur med gitterparametrarna $a = 2.27 \text{ \AA}$ och $c = 3.59 \text{ \AA}$. Första Brillouin-zonen för ett hexagonalt gitter återges i nedanstående figur. Antag fria elektronapproximationen.

a) Ange, med *utgångspunkt från ovan givna data*, och lämpliga beräkningar, huruvida någon eller några symmetripunkter i zonen ligger utanför Fermisfären; i så fall, vilka?

b) Beräkna Fermisfärens volym och Brillouin-zonens volym samt förhållandet mellan dem och förklara detta förhållande med utgångspunkt från Be-atomernas struktur och kristallstrukturen. Förklara, med hänsyn härtill, varför Be i fast tillstånd är en metall.

hexagonal
lattice



$$\Gamma : (0, 0, 0)$$

$$A : \frac{\pi}{c} (0, 0, 1)$$

$$K : \frac{4\pi}{3a} (1, 0, 0)$$

$$M : \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} (0, 1, 0)$$

Bloch-elektroners dynamik.

7-1. En endimensionell kristall med gitterkonstanten a innehåller precis a^{-1} elektroner per längdenhet. Det lägsta bandet har formen

$$E(k) = E_0 \cdot (1 - \cos(ka))$$

Visa att för elektronerna vid Fermiytan är den effektiva massan m^* oändligt stor. Diskutera innebörden av detta. Är kristallen mycket tung?

7-2. I en kristall med enkel kubisk struktur (sc) är enhetscellens kantlängd $= a$. Ett visst energiband ges av

$$E(\mathbf{k}) = -E_0 \cdot (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

En elektron befinner sig i tillståndet $\mathbf{k} = 0$ vid tidpunkten $t = 0$. Elektronen utsätts för ett homogent elektriskt fält med den konstanta fältstyrkan E_x i riktningen x .

a) Antag att elektronen har en godtycklig men någorlunda väldefinierad position $(x(0), y(0), z(0))$ vid tidpunkten $t = 0$. Beräkna dess position $(x(t), y(t), z(t))$ som funktion av tiden, om vi antar att vi kan bortse från mediets resistans.

b) Beräkna elektronens maximala förflyttning (cm) under antagande att $E_0 = 1$ eV och $E_x = 1$ V/cm. Kan man vänta sig att experimentellt iaktta en sådan här rörelse hos ledningselektroner? Om inte, varför inte? Om så, kan du ge ett exempel?

7-3. Ledningsbandet hos en hypotetisk enkel kubisk monoatomär kristall har formen $E(k) = Ak^2$ där $A = 10^{-38}$ J·m². Energitillstånden upp t.o.m. nivån $ka = (2\pi^2)^{1/3}$ är fyllda, där a är gitterkonstanten. Beräkna

- effektiva massan m^* för elektronerna vid Fermiytan, uttryckt i elektronmassan m .
- antalet ledningselektroner per atom.

7-4. a) I tight-binding-approximationen ges ett energiband i en enkel kubisk struktur med gitterkonstanten a av

$$E(\mathbf{k}) = -\alpha - 2\gamma \cdot (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

där α och γ är konstanter. Visa att en skalär effektiv massa kan definieras i mittpunkten av 1:a Brillouin-zonen, samt beräkna dess värde.

b) Inversen av den effektiva massan är i allmänhet inte en skalär utan måste representeras av en s.k. *tensor* (utseende: 3×3 matris) med komponenterna

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{\mu\nu} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_\mu \partial k_\nu}$$

där μ och ν är index som står för de cartesiska koordinaterna x , y och z . (Således har tensorn 9 komponenter $\mu\nu = xx, yy, zz, xy, xz, yz, yx, zx, zy$.) Antag nu att vi kan definiera en skalär effektiv massa m^* i en viss punkt \mathbf{k}_0 . Vad blir i så fall tensors komponenter?

c) I tight-binding-approximationen ges ett energiband i en fcc-kristall med gitterkonstanten a av

$$E(\mathbf{k}) = -\alpha - 8\gamma \cdot \cos(k_x a/2) \cdot \cos(k_y a/2) \cdot \cos(k_z a/2)$$

Visa huruvida vi har en skalär effektiv massa i punkten Γ i Brillouin-zonen. Beräkna i så fall dess värde. (Tips: resultatet från (b) kan användas.)

Halvledare - population av tillstånd.

(Anm. I nedanstående problem försummar vi genomgående spindegeneration i störnivåerna, dvs spindegenerationsfaktorerna g_d och g_a sätts = 1.)

8-1. Några exempel på bandgap E_g är diamant: 5.33 eV, kisel: 1.14 eV, germanium: 0.67 eV, galliumarsenid (GaAs): 1.4 eV. Vilken är den största våglängd λ_{max} som kan användas för att få optisk absorption genom excitation över bandgapet? Notera i vilken del av spektrum (UV, synligt, infrarött) λ_{max} ligger.

8-2. Vid direkt optisk absorption antas excitationen av en elektron ske vertikalt uppåt i bandstrukturen (se AM fig.28.4, s.567). Visa att detta är rimligt. (Ledning: excitationsenergin kan antas vara av storleksordningen 1 eV, och Brillouin-zonen har en utsträckning av storleksordningen π/a .)

8-3. Man observerar ett minimum i transmissionen av infrarött ljus genom bor-dopat kisel vid våglängden 31.2 μm . Beräkna läget hos motsvarande störnivå. Försöket måste utföras vid mycket låg temperatur (flytande helium) - varför?

8-4. En halvledare av kisel är dopad med 10^{20} donatorer per m^3 . Donatornivån ligger 0.05 eV under ledningsbandkanten. Elektronernas effektiva massa antas = fria elektronmassan. De effektiva tillståndstätheterna i ledningsband och valensband antas lika, och bandgapet E_g antas = 1.12 eV.

a) Beräkna Fermi-nivåns läge relativt ledningsbandkanten för $T = 300$ K. Använd följande approximationer: I) Störnivån är fullständigt joniserad. II) Excitation över bandgapet kan försummas.

b) Visa att approximation (I) är berättigad genom att, med hjälp av svaret i (a), beräkna relativa andelen joniserade donatorer.

c) Visa att approximation (II) är berättigad genom att, med hjälp av svaret i (a), beräkna förhållandet n_i/n_c , där n_i är det intrinsiska värdet av elektronkoncentrationen n_c i ledningsbandet vid $T = 300$ K.

8-5. Visa att vid mycket låga temperaturer, sådana att endast en liten andel av donatorerna är joniserade, så är koncentrationen n_c av elektroner i ledningsbandet i en n-dopat halvledare given av

$$n_c \approx \sqrt{N_c N_d} \cdot e^{-E_d/2k_B T}$$

där N_c är effektiva tillståndstätheten och E_d avståndet från donatornivån till ledningsbandkanten.

8-6. En halvledare av germanium (bandgap = 0.67 eV, effektiva massor $m_c = 0.1m$ och $m_v = 0.3m$) har dopats med $1 \cdot 10^{20}$ arsenikatomer/ m^3 . Beräkna koncentrationen av elektroner i ledningsbandet vid 80° C. Temperaturen är relativt hög, och donatornivån är fullständigt joniserad.

8-7. En halvledare av kisel har dopats med 10^{20} arsenikatomer per m^3 . Beräkna Fermi-nivåns läge vid a) temperaturen 300 K, b) temperaturen 50 K. Data fås ur Physics Handbook.

8-8. En kiselkristall har dopats med 10^{21} arsenikatomer per m^3 . Vid vilken temperatur är 80 % av dessa arsenikatomer joniserade? Behövliga data för As-dopat kisel tas från Physics Handbook. Bestäm temperaturen med en numerisk noggrannhet ca ± 1 K.

8-9. En tunn skiva av kisel är dopad med $2 \cdot 10^{20}$ boratomer per m^3 . Man önskar studera absorptionen av infraröd strålning vid en frekvens som motsvarar energiskillnaden mellan störnivån och valensbandkanten. Vi antar att absorptionskoefficienten μ ges av $\mu = \sigma \cdot n'$ där σ är ett temperaturoberoende tvärsnitt för fotoabsorption och n' är antalet lediga tillstånd per volymenhet i störnivån.

Frågan är huruvida kiselskivan bör kylas till temperaturen hos flytande helium (4.2 K) eller om det räcker med kylning till flytande kväve (77 K). Beräkna därför förhållandet mellan μ vid 4.2 K och μ vid 77 K. Gör även en grov uppskattning av förhållandet mellan μ vid rumstemperatur och μ vid 77 K (kort motivering räcker).

Behövliga data för bor-dopat kisel kan hämtas från Physics Handbook.

Halvledare - transport av laddningsbärare

9-1. Mobiliteten hos elektroner och hål i en germaniumkristall anges vara $3600 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ respektive $1700 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Vid rumtemperatur är antalet elektroner per volymenhet i ledningsbandet $2.5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. Beräkna konduktiviteten, om kristallen ej är dopad.

9-2. Den elektriska ledningsförmågan hos en bor-dopad kiselkristall uppmättes till $20 (\Omega \text{ m})^{-1}$ vid rumtemperatur. Vid samma temperatur uppmättes Hall-koefficienten till $+9 \text{ cm}^3/\text{coulomb}$. Beräkna laddningsbärarnas mobilitet (s.k. Hall-mobilitet).

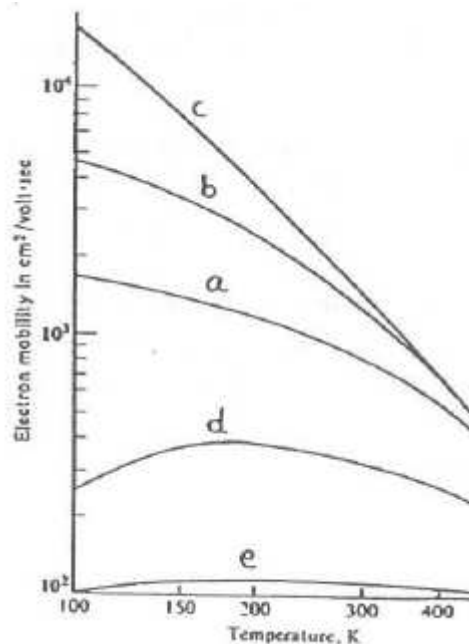
9-3. Genom en plan skiva av ett p-dopat halvledarmaterial appliceras ett elektriskt fält vinkelrätt mot skivan, så att potentialskillnaden mellan skivans båda ytor blir 10 mV . Temperaturen är 300° K . Beräkna förhållandet (> 1) mellan laddningsbärarkoncentrationerna (antal hål per volymenhet) vid de båda ytorna.

9-4. Konduktiviteten hos en intrinsisk halvledarkristall uppmättes som funktion av temperaturen. Resultatet ses i nedanstående tabell. Uppskatta från dessa data bandgapets storlek.

$\sigma (\Omega \text{ cm})^{-1}$	T (K)
0.367	350
0.755	400
2.19	450
4.92	500

9-5. En germaniumkristall vägande 100 g har dopats med $2.0 \mu\text{g}$ antimon. Vad blir konduktiviteten vid rumtemperatur? Från egenledning kan bortses. Gör i övrigt lämpliga approximationer.

9-6. Nedanstående figur visar hur mobiliteten hos elektronerna i ledningsbandet i n-dopat kisel varierar med temperaturen. Varje kurva motsvarar en viss dopningsgrad $N_d = \text{antal donatorer per volymenhet}$. I figuren visas kurvor motsvarande $N_d = 10^{13}, 10^{16}, 10^{17}, 10^{18}$ samt $5 \cdot 10^{18}$ donatorer per cm^3 . Ange vilket värde på N_d som hör till kurva a, b, c, d och e. Motivera, kortfattat men klart, ditt svar. Förklara också kvalitativt skillnaden i utseende hos kurvorna: Varför har kurva d en extrempunkt (ett maximum) men inte kurva c?



Facit

- # 1-1) a) 3.615 Å ,b) 2.56 Å ,c) 11.81 Å³
 # 1-2) a) 1.54 Å ,b) 2.52 Å
 # 1-3) b) 2
 # 1-4) a) 4.05 Å , b) 74 %
 # 1-5) a) $\frac{\sqrt{3}}{2}a^2c$, b) $a' = 3.54$ Å
 # 1-6) 5.07 g/cm³
 # 1-7) a) 2.03 Å ,b) 1.44 Å
 # 1-8) $d(hkl) = (\sqrt{(h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2})^{-1}$
 # 2-1) a) 3.52 Å ,b) 4.06 Å
 # 2-2) 4.8 mm
 # 2-3) 0.069 eV
 # 2-4) $2 \cdot f_{Cl^-}$
 # 2-5) $S(hkl) = f + f \cdot \exp[-i2\pi(2h/3 + k/3 + l/2)]$
 # 2-6) a) Strukturfaktorn = $\sum_{j=1}^N f_j(\Delta\mathbf{k}) \exp(-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_j)$
 d) Tips om mönstret: formeln i (b) visar att vi har rotationssymmetri kring **a**.
 # 3-1) a) 0.764 Å⁻¹, b) 1.546 Å⁻¹
 # 3-2) $\omega_{max} \approx 5.2 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$, $k_{max} = 1.74 \text{ Å}^{-1}$
 # 3-3) Transv.gren: $\approx 2.25 \cdot 10^3 \text{ m/s}$, Long.gren: $\approx 5.2 \cdot 10^3 \text{ m/s}$ (ngt osäker grafisk avläsning)
 # 3-4) a) 1 akustisk, 3 optiska , b) $\approx 0.924\omega_{max}$
 # 3-5) b) $\omega = \sqrt{2C_1/M} \sqrt{(ka/2)(\pi - ka/2)}$
 # 4-2) $\approx 336 \text{ K}$
 # 4-3) $\theta = 230 \text{ K}$
 # 5-1) $\approx 520 \text{ Å}$
 # 5-2) 9.2 eV
 # 5-3) $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} 2\pi n$
 # 5-4) b): $7.21 \cdot 10^{21} \text{ eV} = 1156 \text{ J}$
 # 5-6) ca 400 Å
 # 6-1) b) $k_F = 2\pi/a$ (ej red.), =0 (red.), c) $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (2\pi/a)^2$
 # 6-2) X) 9.17 eV, L) 6.88 eV
 # 6-3) a) $\frac{\hbar^2}{2m} 2(\pi/a)^2$, b) delvis fyllt, c) ja
 # 6-4) $E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} (\pi/a)^2$, $E_2 = \frac{\hbar^2}{2m} (\sqrt{3}\pi/a)^2$
 # 6-5) 6.88 eV
 # 6-6) a) $E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (2\pi/a)^2$, b) 0.29 eV, 2.60 eV, 4.92 eV, 7.23 eV
 # 6-7) a) (H) är utanför Fermisfären, resten inuti. b) Fermisfärens volym = 30.96 Å^{-3} . Förhållandet = 2.
 # 7-2) a) $x(t) = (E_0/eE_x) \cos(eE_x at/\hbar)$, b) 1 cm (amplitud, oscillerande rörelse). Nej, 1 cm \gg vanliga transportmedelväglängder.
 # 7-3) a) 0.61, b) 2/3
 # 7-4) a) $m^* = \frac{\hbar^2}{2\gamma a^2}$
 b)

$$\begin{pmatrix} 1/m^* & 0 & 0 \\ 0 & 1/m^* & 0 \\ 0 & 0 & 1/m^* \end{pmatrix}$$

c) Ja, $m^* = (\hbar^2/2\gamma a^2)$

- # 8-1) 2330 Å , 10880 Å , 18520 Å , 8860 Å
 # 8-3) 0.04 eV över valensbandkanten.
 # 8-4) a) 0.32 eV under bandkanten, b) 0.99997, c) $9.3 \cdot 10^{-5}$
 # 8-6) $1.13 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-3}$
 # 8-7) a) 0.27 eV, b) 0.042 eV under ledningsbandkanten
 # 8-8) 106 K
 # 8-9) $\mu(4.2 \text{ K})/\mu(77 \text{ K}) \approx 8.4$, $\mu(\text{rumstemp})/\mu(77 \text{ K}) \approx 0$
 # 9-1) $2.1 (\Omega \text{ m})^{-1}$
 # 9-2) $1.8 \cdot 10^2 \text{ cm}^2/\text{Vs}$
 # 9-3) 1.47
 # 9-4) 0.65 eV. (Experimentell avvikelser från väntat beteende tycks föreligga vid lägsta temperaturen.)
 # 9-5) $32.0 (\Omega \text{ m})^{-1}$
 # 9-6) c) 10^{13} , b) 10^{16} , a) 10^{17} , d) 10^{18} , e) $5 \cdot 10^{18}$