

Solution to written exam in SOLID STATE PHYSICS F7045T

Examination date: 2017-10-20

The solutions are just suggestions. They may contain several alternative routes.

- Natrium har bcc struktur med $a = 4.2906 \text{ \AA}$. reciproka gittret är då fcc med kantlängden $\frac{4\pi}{a}$ (se figur formelsamling). Punkten Γ ligger i origo punkten H ligger på ytan av enhetskuben. Avståndet mellan Γ och punkten N är den kortaste sträckan. Dess längd är $\frac{\pi}{a}\sqrt{2} = 1.035 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$
 - Fermisfären har en radie som ges av $k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{1/3} = \left(\frac{3\pi^2 \cdot 2}{4.2906^3} 10^{30}\right)^{1/3} = 0.9084 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$ Vi ser att $0.9084 < 1.035$ dvs Fermisfären skär ej 1 BZ, $0.9084/1.035 = 87.8 \%$.
- $C_v = C_v^{el} + C_v^f$. Plotta C_v/T mot T^2 detta blir en rät linje enligt: Fotonbidraget $C_v = \frac{12\pi^4}{5} N k_B \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 = AT^3$. Elektronbidraget är linjärt (γT) i temperaturen $C_v^{el} = \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F}$, $T_F = E_F/k_B$ Plotta $\frac{C_v}{T} = \frac{12\pi^4}{5\Theta^3} N k_B T^2 + \frac{\pi^2 N k_B^2}{2E_F}$ ur lutningen (0.0030075) fås $\Theta_D = 87\text{K}$ och ur skärningspunkten (0.001989) med y-axeln fås $E_F = 1.9 \text{ eV} = 3.0 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.
 - $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}$ kalium är bcc med $a = 5.225 \text{ \AA}$. ($k_F = 7.45 \cdot 10^9$). Effektiva massan ges av $m = \frac{\hbar^2}{2\epsilon_F} \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} = \frac{(1.055 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 1.9 \cdot 1.601 \cdot 10^{-19}} \left(\frac{3\pi^2 \cdot 2}{(5.225 \cdot 10^{-10})^3}\right)^{\frac{2}{3}} = 1.0174667 \cdot 10^{-30} \text{ kg} = 1.117 m_0$
- Använd Braggs lag för att bestämma miller indexen (hkl) för topparna. $d = \lambda/(2 \sin(\beta/2))$ där d är plan avståndet och $\beta/2 = \theta$. Vidare har vi för planavståndet $\left(\frac{d_{hkl}}{a}\right)^2 = \frac{1}{h^2+k^2+l^2}$ där a är enhetskubens kantlängd (ej känd). Följande tabell görs upp för att bestämma $h^2 + k^2 + l^2$ för topparna. Våglängden för $K_\alpha = 1,542 \text{ \AA}$. Det kan vara svårt att avgöra vilken topp som är först i spektrat. Vi satsar till att börja med att den första är den kraftiga toppen vid 31 grader. De två första försöken (f1 och f2 i tabellen) visar att det blir ingen ordning på siffrorna. Tredje försöket (f3) där fungerar det.

(β)	27.50	31.04	45.60	56.58	66.34	75.36	84.06
$(\theta = \beta/2)$	13.75	15.52	22.80	28.29	33.17	37.68	42.03
d	3.2438	2.8814	1.9896	1.6268	1.4092	1.2613	1.1516
$1/d^2$	0.095038	0.12045	0.25262	0.37786	0.50356	0.62858	0.75404
f1 $x = 2/0.12045$		2.0000	4.1946	6.2741			
f2 $x = 3/0.12045$		3.0000	6.2919	9.4112			
f3 $x = 3/0.095038$	3.0000	3.8021	7.9741	11.9276	15.8955		
<i>integers</i>	3	4	8	12	16		

Sista raden i tabellen ger de sökta heltalen $h^2 + k^2 + l^2$.

En analys av strukturfaktorn för de 4 kubiska gittren ger (räkningar erfordras se tex Kittel) ger 4 serier av tillåtna (hkl) index. För fcc är denna serie:

(hkl)	111	220	311	222	400	331	422	511	333
$h^2 + k^2 + l^2$	3	8	11	12	16	19	24	27	27

Vi ser att det saknas ett plan, det som ger 11 dvs 311 reflexionen. En inspektion av spektrat ser man att det finns en svag topp vid $\beta = 54.00$. En analys ger $d = 1.69827$ och $1/d^2 = 0.34672$ för att ge 10.945 vilket motsvarar den saknade linjen i tabellen. Så pulvret består av ett material med fcc struktur. Att två linjer syns så svagt beror på att det finns flera atomer i den primitiva cellen.

Även a låter sig bestämmas till $\sqrt{3} \cdot 3.2438 = 5.616 \text{ \AA}$ (tabell 5.6402 \AA), det frågas dock ej efter denna uppgift, provet bestod av NaCl ett material med fcc struktur och 2 atomer i den primitiva cellen.

4. Konduktiviteten ges av $\sigma = e(n\mu_e + p\mu_h)$. Sb har fem valenselektroner vilket betyder att det är en donator. Eftersom alla donatoratomer är joniserade blir neutralitetsvillkoret $n = p + N_d$.

Massverkans lag ger $np = n_i^2$. Detta ger $n^2 - N_d n - n_i^2 = 0$, där

$n_i = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} e^{-E_g/2k_B T} = 1.9 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$. Ur detta erhålls $n = 1.0 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$ och $p = 3.6 \cdot 10^{17} \text{ m}^{-3}$. Eftersom $p \ll n$ och $\mu_h < \mu_e$ kan hålets bidrag till konduktiviteten försummas och man får $\sigma \approx en\mu_e = 21 (\Omega\text{m})^{-1}$.

5. (a) $E_d = -\frac{m_e e^4}{2\epsilon_r \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} = 6.6 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$.

(b) $r = \frac{\epsilon_r \hbar^2}{m_e e^2} 4\pi\epsilon_0 = 650 \text{ \AA}$.

(c) Överlappet blir betydande om koncentrationen $N_d \sim \frac{1}{(2r)^3} \approx 10^{21} \text{ m}^{-3}$.

(d) I likhet med hur atomära nivåer bildar band då atomer sammanförs till en kristall kommer donator nivåerna att bilda band då koncentrationen blir så stor att de lokala banorna överlappar.