



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: Saturday 28. May 2016

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 2-7) / Bokmål (page 8-13) / Nynorsk (page 14-19)

Number of pages: 19 (including front page)

Number of pages enclosed: 0

Checked by:

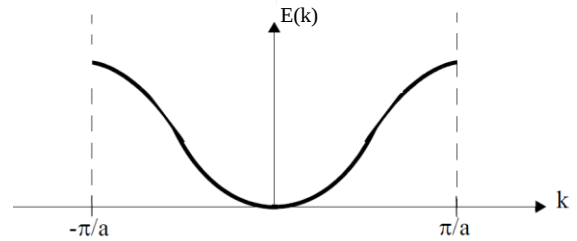
Date

Signature

Problem 1 (20%) Introductory questions

Keep your answers to this problem brief!

- A typical interatomic potential is described by the Lennard-Jones potential. Sketch this potential, and explain the origin of the two terms it is made of.
- What do we mean by energy bands? What is the cause of energy gaps in materials? What properties of the material are determined by the electronic structure?
- What is meant by the Fermi energy? What is the Fermi surface and when is this concept interesting? Also explain what the chemical potential (Fermi level) in a material is.
- Explain what we mean by the effective mass and when this concept is useful. Sketch qualitatively the effective electron mass corresponding to the electron band shown in the figure.

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

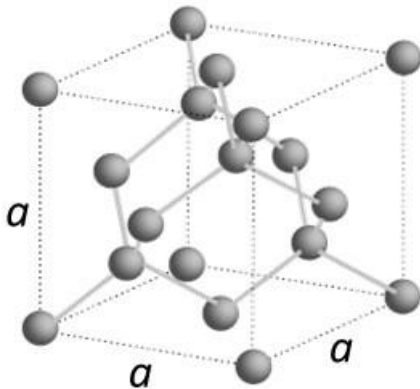
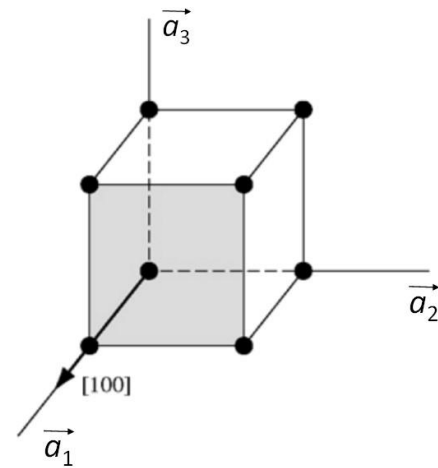
Only one answer is correct, and only one answer should be chosen for each question. Wrong or several answers give zero points. No explanation or reasoning should be given. You can circle the right answer and hand this in with the rest of your exam answers.

- What structure has the highest packing fraction?
 - Diamond structure
 - Body-centered cubic with one atom in basis
 - Face-centered cubic with one atom in basis
 - Perovskite structure
- What is the reciprocal lattice of a body centered cubic (bcc) lattice?
 - Body centered tetragonal
 - Face centered cubic (fcc)
 - Body centered cubic (bcc)
 - Hexagonal closed packed (hcp)
- What is meant by the first Brillouin zone?
 - The Bravais lattice in the reciprocal space
 - The Wigner Seitz cell
 - The largest volume possible in the reciprocal space with the least lattice points
 - The Wigner Seitz cell in the reciprocal space
- What is the assumption in the Debye model for phonons?
 - That we have a linear dispersion relation up to a cut-off frequency
 - That the temperature is very high
 - That we just have one unit cell
 - That all phonons have the same frequency

5. Where is $E(k)$ for electrons in real crystals most different from $E(k)$ for free electrons?
- For high electron energies
 - In certain high symmetry directions in the reciprocal space
 - Far away from the ions in the real space
 - At and close to the Brillouin zone boundaries in the reciprocal space
6. What is a Bloch wave?
- An exponential function centered around each lattice points
 - A linear wave with phase periodic with the lattice
 - A plane wave multiplied by a periodic function
 - An ordinary plane wave
7. The distribution of electrons in the conduction band is given by
- (density of quantum states) $\times$ (energy of a state)
 - (density of quantum states) $\times$ (probability a state is occupied)
 - (energy of quantum states) $\times$ (probability a state is occupied)
 - (energy of quantum states) $\times$ (chemical potential of a state)
8. Consider an ideal intrinsic semiconductor in thermal equilibrium. No external forces or fields are applied to this semiconductor. Let n denote the concentration of electrons in the conduction band while p denotes the number of holes in the valence band. In an ideal intrinsic semiconductor at room temperature, we have
- $n = p$
 - $n \approx p$ (but $p \neq n$)
 - $n \ll p$
 - $n \gg p$
9. Dopant atoms, when added to an intrinsic semiconductor,
- introduce quantum states that are close to the edges of the forbidden band.
 - introduce quantum states that are near the center of the forbidden band.
 - increase the energy of electrons in the valence band.
 - increase the energy of electrons in the conduction band.
10. Copper is diamagnetic because
- free electrons dominate magnetic properties
 - 3d electrons in filled bands (closed shells) dominate magnetic properties
 - unpaired spin from the free electrons dominate magnetic properties
 - wrong - copper is not diamagnetic, but paramagnetic because of the free electrons

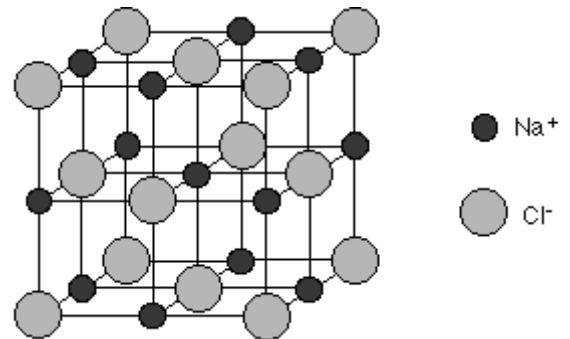
Problem 3 (25%) Structure and diffraction

- a) The figure shows the (100) crystal plane (grey) and [100] direction of the simple cubic lattice. In a similar way, sketch the (311) plane and the [311] direction. Given that the lattice constant of the simple cubic lattice is a , calculate the distance between the nearest (311) planes.



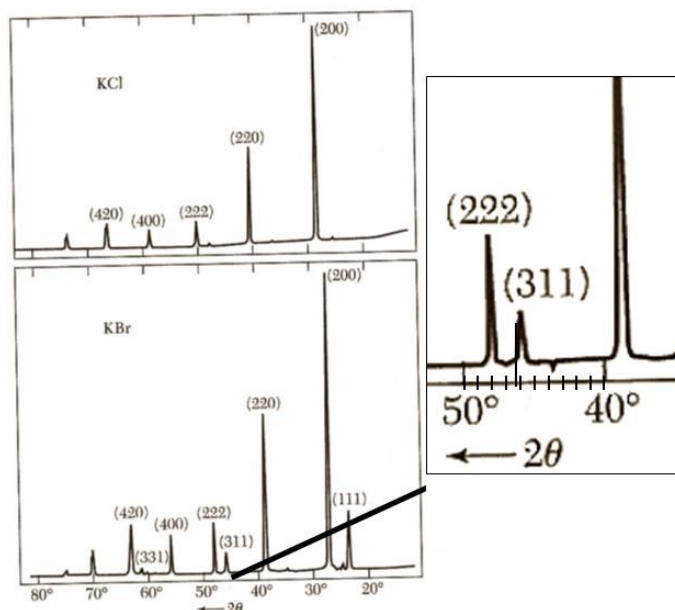
- b) Silicon crystallizes in the diamond structure with lattice constant a , as shown in the figure. If silicon atoms are modeled as touching spheres, what is their radius? In this case, what fraction of space in a silicon crystal is filled with silicon atoms? How many first and how many second nearest neighbor atoms does each silicon atom have?

- c) The figure shows a unit cell of the rock salt structure, here shown for NaCl. Specify the Bravais lattice and the basis (you can draw the figure and indicate the atoms belonging to the basis or write down the coordinates). How many atoms (ions) does the unit cell and the basis contain?



- d) Determine the structure factor and find the extinction rules for NaCl. The structure factor is given by $S_G = F_{hkl} = \sum_j f_j \exp(-i\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}_j)$.

- e) The two compounds KCl and KBr have the rock salt structure as shown in c). The figure shows diffractograms from these two powders. Comment on why these two are different. If needed you can use the period table shown under.



Adapted from C. Kittel, 8th Edition, Wiley (2004)

- f) The lattice parameter of KBr is 6.598 Å. Estimate the wave length used in the experiment in the figure above. Tips; use the enlarged part of the diffractogram to read out the scattering angle.

Periodic table:

		Periodic table.																		
		Group																		
		I	II											III	IV	V	VI	VII	VIII	
1		1 H																		2 He
2		3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	
3		11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	
4		19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr	
5		37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe	
6		55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn	
7		87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo	
8		119 Uun																		
		* Lanthanides			57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	
		** Actinides			89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr	

Problem 4 (20%) Phonons

The figure under shows the phonon dispersion relation along some high symmetry directions in a fcc structure (squares are experiments and lines are calculated). The right figure illustrates the corresponding directions in the first Brillouin zone.

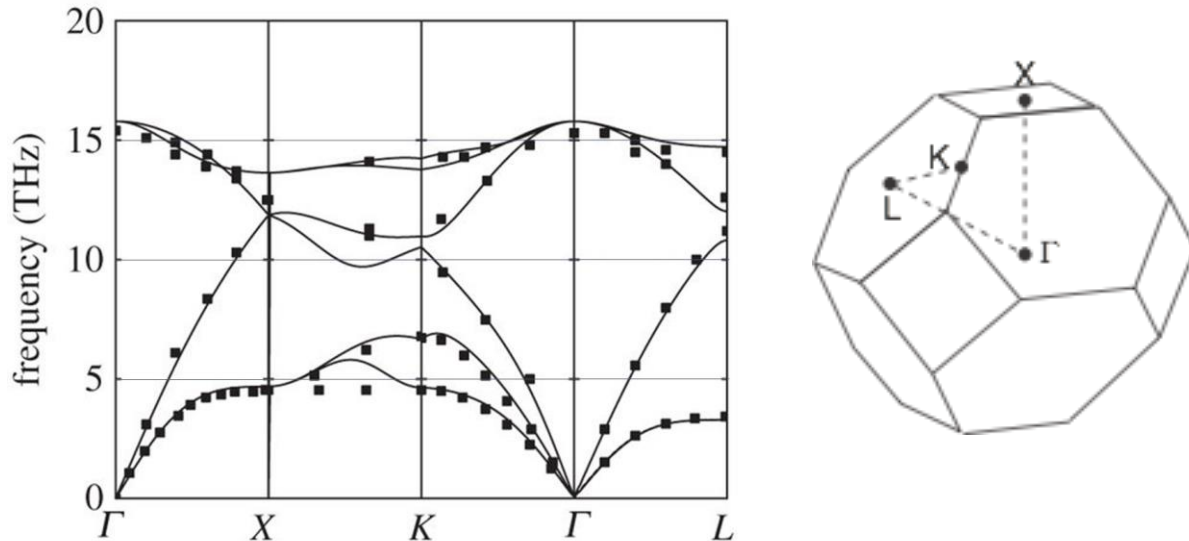


Figure from Tomas et al *Proc. R. Soc. (2014) A* **470**: 20140371.

- Explain and point out the concepts involved - for example, wave vector k and acoustic and optical phonon modes. What can you tell about this structure based on the figure?
- Given that the lattice parameter of the material is $5.43 \text{ \AA}$, can you from the figure estimate the sound velocity (phonon group velocity) for longitudinal and transversal acoustic waves along the principle axes in a single crystal of the material? Explain which branch is longitudinal and which is transversal (and why).
- Use the figure of the phonon dispersion relation to make a qualitative sketch of the density of states $D(\omega)$. Explain the two models we have used for phonons by drawing $D(\omega)$ for these two models in the same sketch.
- Explain what Umklapp processes are, and why and how they are a major contribution to the thermal resistivity in materials.

Problem 5 (20%) Electrons – and semiconductors

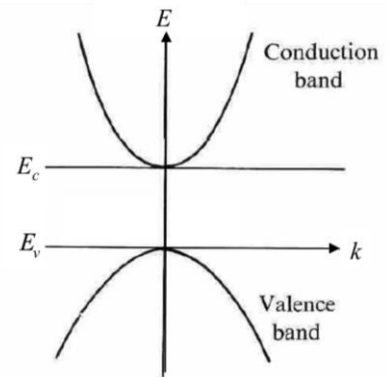
- a) Start from the expression for the energy $E(k)$ for free electrons and show that the density of states (number of states per energy unit) $D(E)$ in the 3D free electron model is given by

$$D(E) = CE^{1/2}$$

Determine the proportionality constant C . Assume in the derivation that $T = 0$.

Tip: Find the volume in k -space occupied by one state and find from this the Fermi wave vector; put this expression into the expression for the energy and find $D(E)$.

- b) We are now looking at an intrinsic semiconductor at a temperature $T > 0$. Assume that the bottom of the conduction band has the shape of a parabola as shown in the figure, and set up an expression for the density of states in the conduction band $D_c(E)$ with the lowest energy in the conduction band equal to E_c .



- c) Derive the concentration n of electrons in the conduction band for this intrinsic semiconductor. Also give the concentration p of holes in the valence band. Define the band gap $E_g = E_c - E_v$ and find an expression for the chemical potential.
- d) Assume that the intrinsic semiconductor above is in group IV in the periodic system, and that we introduce group V atoms as impurities (dopants). Explain shortly what happens in this system (to for example the concentration of the charge carriers and the chemical potential). What means do we have to influence the value of the parameter E_g of semiconductors? In other words - how can we change the band gap?

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

$$f_e(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1} \cdot \mu \text{ is the chemical potential (or Fermi level).}$$

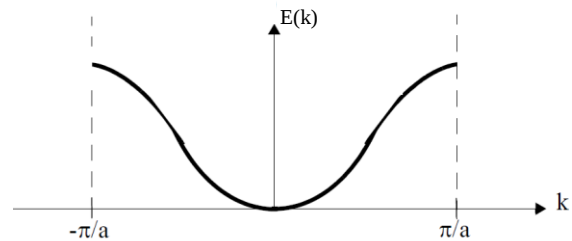
Useful integral: $\int_0^\infty u^{\frac{1}{2}} e^{-u} du = \sqrt{\pi} / 2$

BOKMÅL:

Oppgave 1 (20%) Introduksjonsspørsmål

Svar kort i denne oppgaven!

- En typisk interatomær vekselvirkning er beskrevet av Lennard-Jones-potensialet. Skisser dette potensialet, og forklar opprinnelsen til de to delene det er satt sammen av.
- Hva mener vi med energibånd? Hva er årsaken til energigap i materialer? Hvilke av materialets egenskaper bestemmes av elektronstrukturen?
- Hva mener vi med Fermienergi? Hva er en Fermiflate og når er dette konseptet interessant? Forklar også hva det kjemiske potensialet (Fermi-nivå) i et materiale er.
- Forklar hva vi mener med den effektive massen, og når dette konseptet er nyttig. Skisser kvalitativt den effektive elektronmassen som tilsvarer elektronbåndet vist i figuren.



Oppgave 2 (15%) Flervalgsoppgave

Bare ett svar er riktig, og bare ett svar skal velges for hvert spørsmål. Feil eller flere svar gir null poeng. Ingen forklaring eller resonnement skal gis. Du kan sirkle rundt det rette svaret, og levere dette inn med resten av eksamensbesvarelsen.

- Hva slags struktur har høyest pakkefraksjon?
 - Diamantstrukturen
 - Romsentrert kubisk (bcc) struktur med ett atom i basis
 - Flatesentrert kubisk (fcc) struktur med ett atom i basis
 - Perovskittstrukturen
- Hva er det resiproke gitteret til et romsentret kubisk (bcc) gitter?
 - Romsentrert tetragonalt
 - Flatesentrert kubisk (fcc)
 - Romsentrert kubisk (bcc)
 - Heksagonal tetteste kulepakning (hcp)
- Hva menes med første Brillouinsone?
 - Bravaisgitteret i det resiproke rommet
 - Wigner-Seitz cellen
 - Det størst mulige volumet i det resiproke gitteret med minst mulig gitterpunkter
 - Wigner-Seitz cellen i det resiproke gitteret

4. Hva er forutsetningen i Debye-modellen for fononer?

- a) At vi har en lineær dispersjonsrelasjon opp til en gitt cut-off frekvens
- b) At temperaturen er meget høy
- c) At vi bare har en enhetscelle
- d) At alle fononer har samme frekvens

5. Hvor er $E(k)$ for elektroner i reelle krystaller mest forskjellige fra $E(k)$ for frie elektroner?

- a) For høye elektronenergier
- b) I visse høysymmetri retninger i det resiproke rommet
- c) Langt borte fra ionene i det reelle rommet
- d) Ved og i nærheten av Brillouinsonegrenser i det resiproke rommet

6. Hva er en Blochbølge?

- a) En eksponentiell funksjon sentrert rundt hvert gitterpunkt
- b) En lineær bølge med fase periodisk med gitteret
- c) En planbølge multiplisert med en periodisk funksjon
- d) En vanlig planbølge

7. Fordelingen av elektroner i ledningsbåndet er gitt ved

- a) (tetthet av kvantetilstander) $\times$ (energi av en tilstand)
- b) (tetthet av kvantetilstander) $\times$ (sannsynlighet for at en tilstand er okkupert)
- c) (energi av kvantetilstander) $\times$ (sannsynlighet for at en tilstand er okkupert)
- d) (energi av kvantetilstander) $\times$ (kjemisk potensial av en tilstand)

8. Anta at vi har en ideell intrinsikk halvleder i termisk likevekt. Det er ingen ytre krefter eller felt påtrykt denne halvlederen. La n være konsentrasjonen av elektroner i ledningsbåndet, mens p angir hullkonsentrasjon i valensbåndet. I en ideell intrinsikk halvleder ved romtemperatur, har vi at

- a) $n = p$
- b) $n \approx p$ (men $p \neq n$)
- c) $n \ll p$
- d) $n \gg p$

9. Når vi introduserer dopeatomer, i en intrinsikk halvleder,

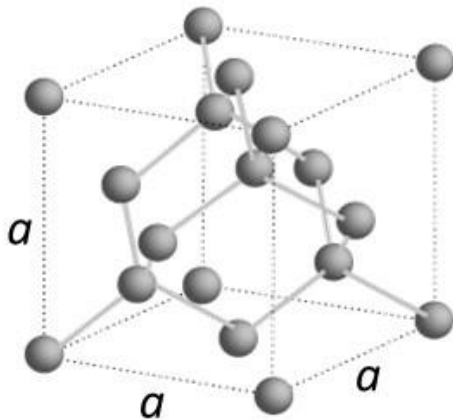
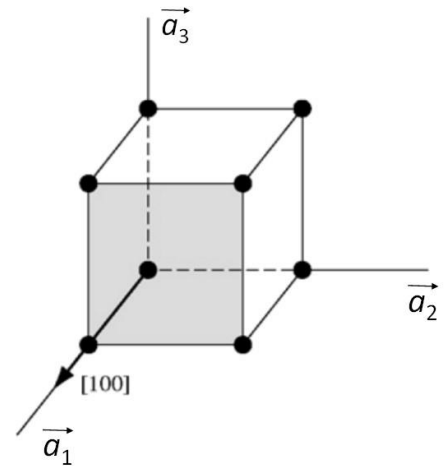
- a) innfører vi kvantetilstander som er nær kantene av det forbudte båndet.
- b) innfører vi kvantetilstander som er nær sentrum av det forbudte båndet.
- c) øker vi energien til elektronene i valensbåndet.
- d) øker vi energien til elektronene i ledningsbåndet.

10. Kobber er diamagnetisk fordi

- a) frie elektroner dominerer magnetiske egenskaper
- b) 3d elektroner i fylte bånd (lukkede skall) dominerer magnetiske egenskaper
- c) uparede spinn fra de frie elektronene dominerer magnetiske egenskaper
- d) feil - kobber er ikke diamagnetisk, men paramagnetisk på grunn av frie elektroner

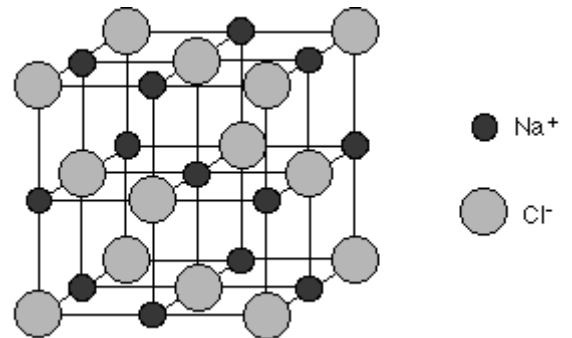
Oppgave 3 (25%) Struktur og diffraksjon

- a) Figuren viser krystallplanet (100) (i grått) og [100]-retningen i et enkelt kubisk gitter. På lignende måte, skisser (311) planet og [311] retningen. Gitt at gitterkonstanten for den enkle kubiske cella er a , beregn avstanden mellom nærmeste (311) plan.



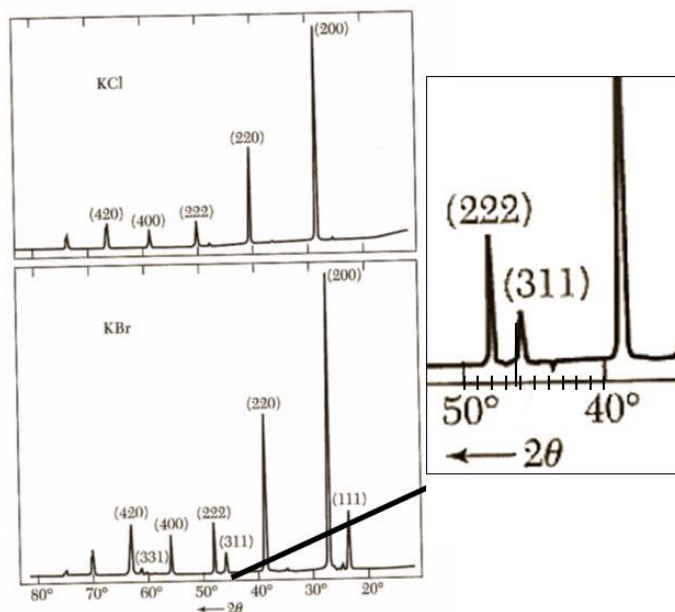
- b) Silisium krystalliserer i diamantstrukturen med en gitterkonstant a , som vist i figuren. Hvis silisiumatomene modelleres som kuler som akkurat berører hverandre, hva er radien deres? I dette tilfellet, hvor stor fraksjon av rommet er fylt med silisiumatomer? Hvor mange nærmeste og hvor mange andre nærmeste naboatomer har hvert silisiumatom?

- c) Figuren viser en enhetscelle av 'rocksalt' (stensalt) strukturen, her vist for NaCl. Angi Bravaisgitteret og basis for denne strukturen (du kan tegne figuren og vise atomene som tilhører basis eller skrive ned koordinatene). Hvor mange atomer (ioner) inneholder enhetscellen og basis?



- d) Bestem strukturfaktoren og finn utslokningsreglene for NaCl. Strukturfaktoren er gitt ved
- $$S_G = F_{hkl} = \sum_j f_j \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_j).$$

- e) De to forbindelsene KCl og KBr har rocksalt-strukturen som vist i c). Figuren viser diffraktogrammene fra disse to pulverne. Kommenter forskjellen og forklar hvorfor disse to er forskjellige. Om nødvendig kan du bruke periodesystemet under.



Adapted from C. Kittel, 8th Edition, Wiley (2004)

- f) Gitterparameteren til KBr er 6,598 Å. Anslå bølgelengden som er brukt i forsøket i figuren over. Tips; bruk den forstørrede delen av diffraktogrammet for å lese ut spredningsvinkelen.

Periodesystemet:

Periodsystemet.

		Group																				
		I	II													III	IV	V	VI	VII	VIII	
1		1 H																				2 He
2		3 Li	4 Be													5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	
3		11 Na	12 Mg													13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	
4		19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr			
5		37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe			
6		55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn			
7		87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo			
8		119 Uun																				
		* Lanthanides		57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu				
		** Actinides		89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr				

Oppgave 4 (20%) Foner

Figuren under viser fonon dispersjonsrelasjonen i noen høysymmetri-retninger i en fcc struktur (punktene er eksperimenter og linjene er beregnet). Figuren til høyre viser de tilsvarende retningene i den første Brillouinsona.

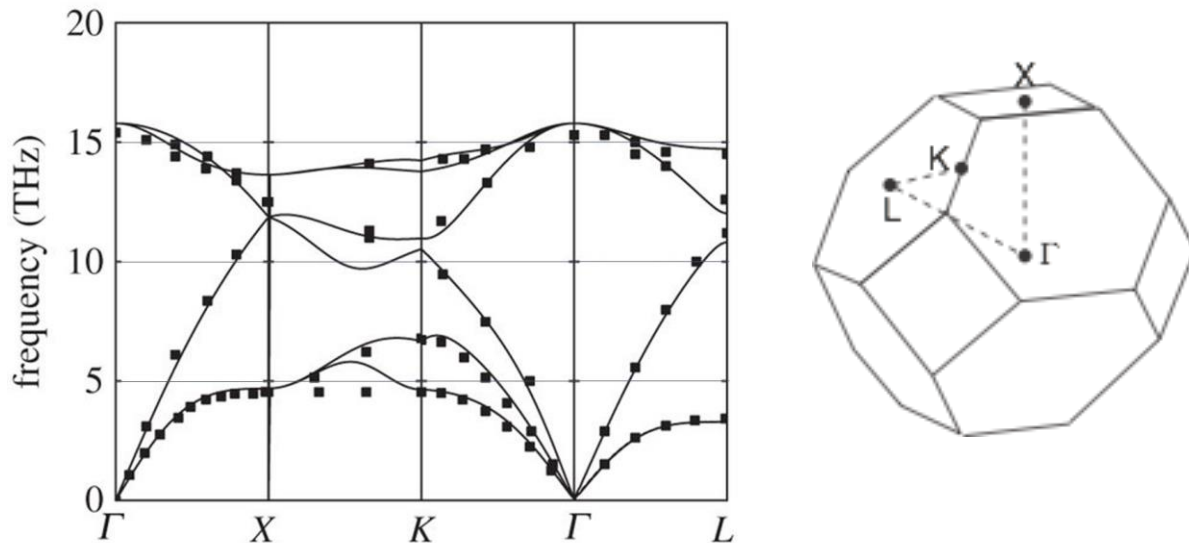


Figure from Tomas et al *Proc. R. Soc. (2014) A* **470**: 20140371.

- Forklar og pek på begrepene involvert- for eksempel bølgevektor k og akustiske og optiske fononmoder. Hva kan du si om denne strukturen basert på figuren?
- Gitt at gitterparameteren til materialet er $5.43 \text{ \AA}$, kan du fra figuren estimere lyd hastigheten (fonongruppehastigheten) for longitudinale og transversale akustiske bølger langs hovedaksene i en enkrystall av materialet? Forklar hvilken gren som er longitudinal og hvilken som er transversal (og hvorfor).
- Bruk figuren av fonondispersjonsrelasjonen til å lage en kvalitativ skisse av tilstandstetthet $D(\omega)$. Forklar de to modellene vi har brukt for fononer ved å tegne $D(\omega)$ for disse to modellene i samme skisse.
- Forklar hva Umklappprosesser er, og hvorfor og hvordan de er et viktig bidrag til termisk resistivitet i et materiale.

Oppgave 5 (20%) Elektroner – og halvledere

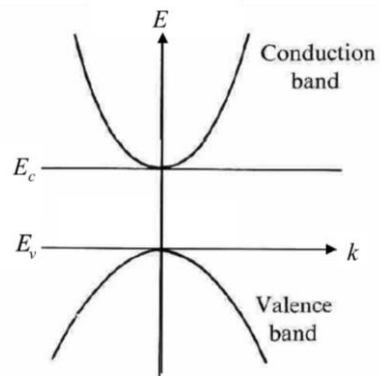
- a) Start fra uttrykket for energi $E(k)$ for frie elektroner og vis at tilstandstetthet (antall tilstander per energienhet) $D(E)$ i 3D er gitt ved

$$D(E) = CE^{1/2}$$

Bestem proporsjonalitetskonstanten C . Anta i utledningen at $T = 0$.

Tips: Finn volumet i k -rommet okkupert av en tilstand og finn fra denne Fermi bølgevektoren; sett dette uttrykket inn i uttrykket for energi og finn $D(E)$.

- b) Vi ser nå på en intrinsikk halvleder ved en temperatur $T > 0$. Anta at bunnen av ledningsbåndet har form av en parabel som vist i figuren, og sett opp et uttrykk for tettheten av tilstander i ledningsbåndet $D_c(E)$ med lavest energi lik E_c .



- c) Utled konsentrasjonen n av elektroner i ledningsbåndet for denne intrinsikke halvlederen. Oppgi også konsentrasjonen p av hull i valensbåndet. Definer båndgapet $E_g = E_c - E_v$ og finn et uttrykk for det kjemiske potensialet.
- d) Anta at den intrinsikke halvlederen ovenfor er i gruppe IV i det periodiske system, og at vi introduserer gruppe V atomer som forurensninger (doping). Forklar kort hva som skjer i dette systemet (for eksempel med konsentrasjonen av ladningsbærere og det kjemiske potensialet). Hva slags måter har vi for å påvirke verdien av parameteren E_g i halvledere? Med andre ord - hvordan kan vi endre båndgapet?

Oppgitt:

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

Sannsynligheten for at en orbital ved energi E er okkupert i en ideell Fermigass i termisk likevekt

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

μ er det kjemiske potensialet (eller Fermi-nivået).

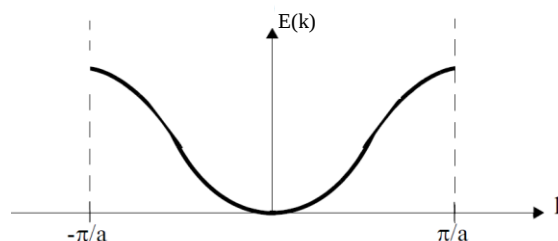
Nyttig integral: $\int_0^\infty u^{\frac{1}{2}} e^{-u} du = \sqrt{\pi} / 2$

NYNORSK:

Oppgåve 1 (20%) Introduksjonsspørsmål

Svar kort i denne oppgåva!

- Ei typisk interatomær vekselvirkning kan forklarast av Lennard-Jones-potensialet. Skisser dette potensialet, og forklar opphavet til dei to delane det er satt saman av.
- Kva meiner vi med energiband? Kva er årsaken til energigap i materiale? Kva slags eigenskapar for materialet vert bestemt av elektronstrukturen?
- Kva meiner vi med Fermienergi? Kva er ei Fermiflate og når er dette konseptet interessant? Forklar og kva det kjemiske potensialet (Fermi-nivå) i eit materiale er.
- Forklar kva vi meiner med den effektive massa, og når dette konseptet er nyttig. Skisser kvalitativt den effektive elektronmassa som svarar til elektronbandet vist i figuren.



Oppgåve 2 (15%) Fleirvalsoppgåve

Berre eitt svar er riktig, og berre eitt svar skal veljast for kvart spørsmål. Feil eller fleire svar gjer null poeng. Ingen forklaring eller resonnement skal gis. Du kan sirkle rundt det riktige svaret, og levere dette inn med resten av eksamenen.

- Kva slags struktur har den høgaste pakkefraksjonen?
 - Diamantstrukturen
 - Romsentrert kubisk (bcc) struktur med eit atom i basis
 - Flatesentrert kubisk (fcc) struktur med eit atom i basis
 - Perovskittstrukturen
- Kva er det resiproke gitteret til eit romsentret kubisk (bcc) gitter?
 - Romsentrert tetragonalt
 - Flatesentrert kubisk (fcc)
 - Romsentrert kubisk (bcc)
 - Heksagonal tettaste kulepakning (hcp)
- Kva meiner vi med første Brillouinsone?
 - Bravaisgitteret i det resiproke rommet
 - Wigner-Seitz cella
 - Det størst volumet mulig i det resiproke gitteret med minst mulig gitterpunkter
 - Wigner-Seitz cella i det resiproke gitteret

4. Kva er føresetnaden i Debye-modellen for fononar?

- a) At vi har ein lineær dispersjonsrelasjon opp til ein gitt cut-off frekvens
- b) At temperaturen er veldig høg
- c) At vi berre har ei enhetscelle
- d) At alle fononar har same frekvens

5. Kor er $E(k)$ for elektronar i reelle krystallar mest forskjellige frå $E(k)$ for frie elektron?

- a) For høge elektronenergier
- b) I visse høgsymmetri retningar i det resiproke rommet
- c) Langt borte frå ionene i det reelle rommet
- d) Ved og i nærleiken av Brillouinsonegrenser i det resiproke rommet

6. Kva er ei Blochbølge?

- a) ein eksponentiell funksjon sentrert rundt kvart gitterpunkt
- b) ei lineær bølge med fase periodisk med gitteret
- c) ei planbølge multiplisert med ein periodisk funksjon
- d) ei vanlig planbølge

7. Fordelinga av elektronar i leiingsbandet er gitt ved

- a) (tetthet av kvantetilstander) $\times$ (energi av ein tilstand)
- b) (tetthet av kvantetilstander) $\times$ (sannsynlighet for at ein tilstand er okkupert)
- c) (energi av kvantetilstander) $\times$ (sannsynlighet for at ein tilstand er okkupert)
- d) (energi av kvantetilstander) $\times$ (kjemisk potensial av ein tilstand)

8. Anta at vi har ein ideell intrinsikk halvleder i termisk likevekt. Det er ingen ytre krefter eller felt påtrykka denne halvleiaren. La n være konsentrasjonen av elektronar i leiingsbandet, mens p angir hullkonsentrasjon i valensbandet. I ein ideell intrinsikk halvleiar ved romtemperatur, har vi at

- a) $n = p$
- b) $n \approx p$ (men $p \neq n$)
- c) $n \ll p$
- d) $n \gg p$

9. Når vi introduserer dopeatomar, i ein intrinsikk halvleiar,

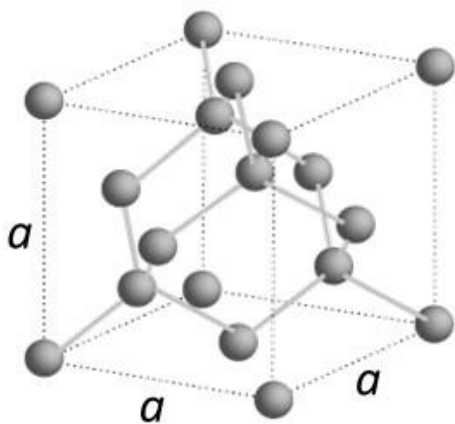
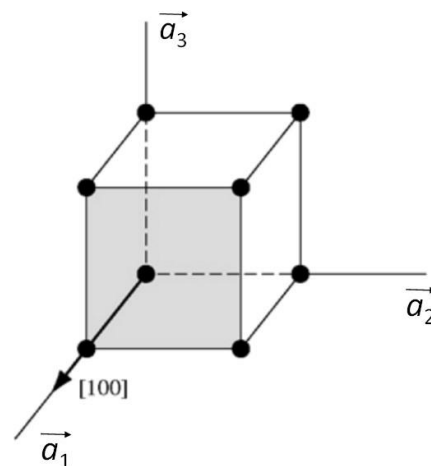
- a) innfører vi kvantetilstander som er nær kantane av det forbodne bandet.
- b) innfører vi kvantetilstander som er nær sentrum av det forbodne bandet.
- c) aukar vi energien til elektrona i valensbandet.
- d) aukar vi energien til elektrona i leiingsbandet.

10. Kopar er diamagnetisk fordi

- a) frie elektronar dominerer de magnetiske eigenskaper
- b) 3d elektronar i fylte band (lukka skal) dominerer magnetiske eigenskaper
- c) upara spinn frå dei frie elektrona dominerer magnetiske eigenskapar
- d) feil - kopar er ikkje diamagnetisk, men paramagnetisk på grunn av frie elektronar

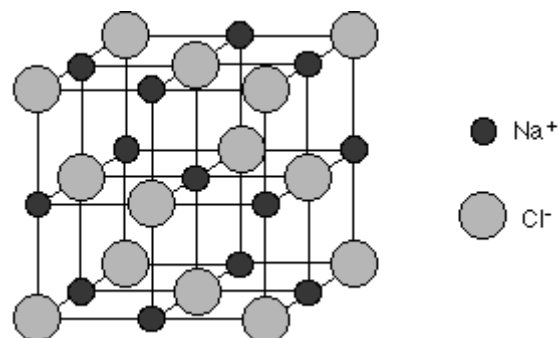
Oppgave 3 (25%) Struktur og diffraksjon

- a) Figuren viser krystallplanet (100) (i grått) og [100]-retninga i eit enkelt kubisk gitter. På same måte, skisser (311) planet og [311] retninga. Gitt at gitterkonstanten for den enkle kubiske cella er a , rekn ut avstanden mellom næraste (311) plan.



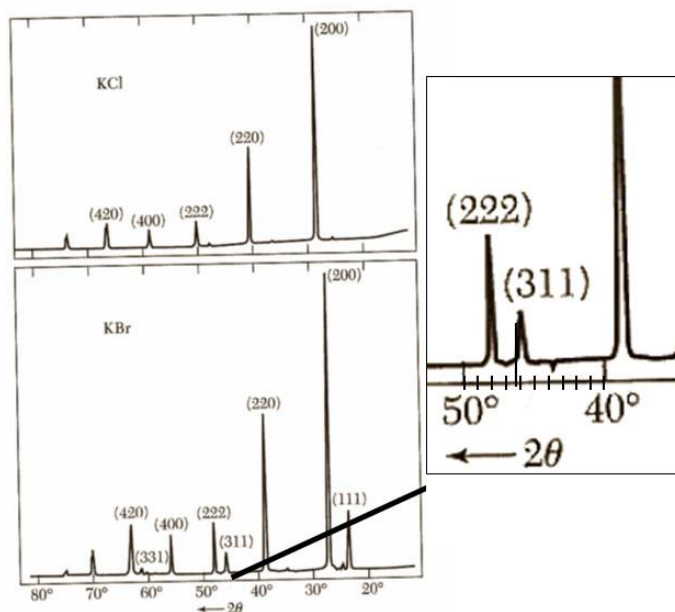
- b) Silisium krystalliserer i diamantstrukturen med ein gitterkonstant, som vist i figuren, a . Om silisiumatoma modelleres som kuler som akkurat røyrrar kvarandre, kva er radien deira? I dette tilfellet, kor stor fraksjon av rommet er fylt med silisiumatom? Kor mange nærmaste og kor mange andre-nærmaste naboatom har kvart silisiumatom?

- c) Figuren viser ei enhetscelle av 'rocksalt' (steinsalt) strukturen, her vist for NaCl. Angi Bravaisgitteret og basis for denne strukturen (du kan teikne figuren og vise atoma som høyrer til basis eller skrive ned koordinatane). Kor mange atomer (ioner) inneheld enhetscella og basis?



- d) Finn strukturfaktoren og finn utslukningsreglane for NaCl. Strukturfaktoren er gitt ved
- $$S_G = F_{hkl} = \sum_j f_j \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_j).$$

- e) Dei to sambindingane KCl og KBr har rocksalt-strukturen som vist i c). Figuren viser diffraktogrammene frå disse to pulvera. Kommenter forskjellen og kvifor desse to er forskjellige. Om nødvendig kan du bruke periodesystemet under.



Adapted from C. Kittel, 8th Edition, Wiley (2004)

- f) Gitterparameteren til KBr er 6,598 Å. Anslå bølglengda som er brukt i forsøket i figuren over. Tips; bruke den forstørta delen av diffraktogrammet for å lese ut spreiingsvinkelen.

Periodesystemet:

		Group																		
		I	II											III	IV	V	VI	VII	VIII	
1		1 H																		2 He
2		3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	
3		11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	
4		19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr	
5		37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe	
6		55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn	
7		87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo	
8		119 Uun																		
		* Lanthanides		57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu		
		** Actinides		89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr		

Oppg ve 4 (20%) Fonorar

Figuren under viser fonon dispersjonsrelasjonen i noen h gsymmetriretningar i ein fcc struktur (punkta er eksperimenter og linjene er rekna ut). Figuren til h yre viser dei tilsvarande retningar i den f rste Brillouinsona.

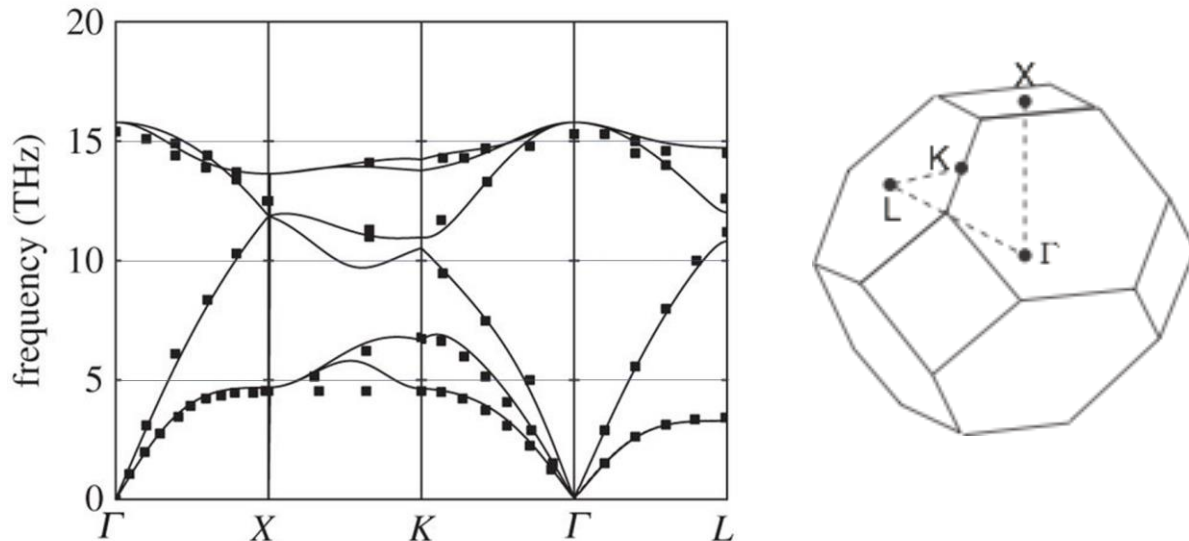


Figure from Tomas et al *Proc. R. Soc. (2014) A* **470**: 20140371.

- Forklar og peik p  begreper involvert- for eksempel b lgvektor k og akustiske og optiske fononmoder. Kva kan du fortelje om denne strukturen basert p  figuren?
- Gitt at gitterparameteren til materialet er 5.43  , kan du fr  figuren estimere lyd hastigheten (fonongruppehastigheten) for longitudinale og transversale akustiske b lger langs hovedaksane i ein einkrystall av materialet? Forklar kva slags grein som er longitudinal og kva slags som er transversal (og kvifor).
- Bruk figuren av fonondispersjonsrelasjonen til   lage ei kvalitativ skisse av tilstandstettleiken $D(\omega)$. Forklar dei to modellane vi har brukt for fononar ved   teikne $D(\omega)$ for disse to modellane i same skisse.
- Forklar kva Umklappprosessar er, og kvifor og korleis dei er ein viktig del av termisk resistivitet i et materiale.

Oppg ve 5 (20%) Elektronar – og halvlei rar

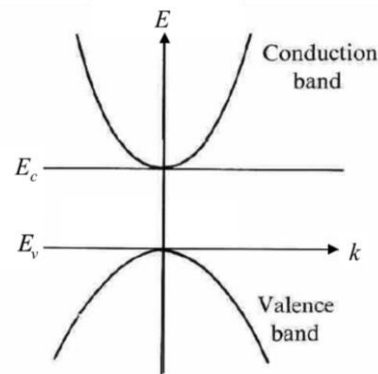
- e) Start fr  uttrykket for energi $E(k)$ for frie elektronar og vis at tilstandstetthet (talet p  tilstander per energieining) $D(E)$ i 3D er gitt ved

$$D(E) = CE^{1/2}$$

Finn proporsjonalitetskonstanten C . Anta i utledninga at $T = 0$.

Tips: Finn volumet i k -rommet okkupert av ein tilstand og finn fr  denne Fermi b lgjevекtor; sett dette uttrykket inn i uttrykket for energi og finn $D(E)$.

- f) Vi ser n  p  ein intrinsikk halvlei r ved ein temperatur $T > 0$. Anta at botn av leiingsbandet har form av ein parabel som vist i figuren, og set opp eit uttrykk for tettleiken av tilstander i leiingsbandet $D_c(E)$ med l gast energi lik E_c .



- g) Utled konsentrasjonen n av elektronar i leiingsbandet for denne intrinsikke halvlei ren. Gi ogs  konsentrasjonen p av hol i valensbandet. Definer bandgapet $E_g = E_c - E_v$ og finn eit uttrykk for det kjemiske potensialet.
- h) Anta at den intrinsikke halvlei ren ovanfor er i gruppe IV i det periodesystemet, og at vi introduserer gruppe V atom som forurensningar (doping). Forklar kort kva som skjer i dette systemet (for eksempel med konsentrasjonen av ladningsb rere og det kjemiske potensialet). Kva slags m tar har vi for   p virke verdien av parameteren E_g i halvlei re? Med andre ord - korleis kan vi endre bandgapet?

Oppgitt:

Energi-b lgjevекtor dispersjonsrelasjon for frie elektronar er $E = \hbar^2 k^2 / 2m$

Sannsynleghe ten for at ein orbital ved energi E er okkupert i ein ideell Fermigass i termisk

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

μ er det kjemiske potensialet (eller Fermi-niv et).

Nyttig integral: $\int_0^\infty u^{\frac{1}{2}} e^{-u} du = \sqrt{\pi} / 2$