

Tentamen i Materialfysik, IF1602, 2012-10-19

Tillåtna hjälpmedel: miniräknare, läroböckerna Serway och Hook & Hall eller ekvivalenta alternativ, (t.ex. Halliday/Resnick istället för Serway, Kittel, Rosenberg eller Myers istället för Hook & Hall) dock max 2 böcker, utskrivna versioner av boken är också OK, föreläsningssammanfattningar från kurshemsidan, formelsamling (Tefyma/Beta/Physics Handbook), en egengjord sammanfattning av kursen på högst ett A4-blad. Inga anteckningar i böckerna.

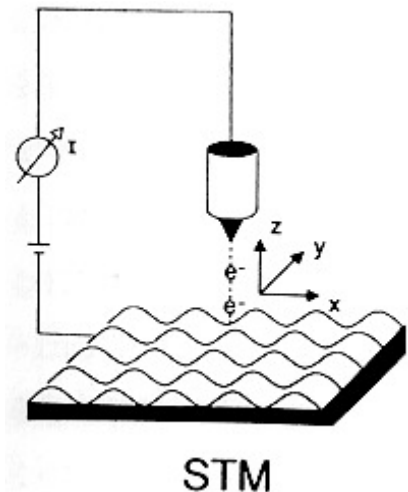
*Rita tydliga figurer, motivera använda samband antingen genom egen härledning eller hänvisning till boken och förklara beteckningar. Lösningar med enbart ekvationer utan förklaring ger poängavdrag. Läs igenom uppgifterna noggrant innan ni börjar räkna och **om ni har problem, fråga!***

Rätt löst uppgift ger 4p, maximal totalpoäng är 24.

Betygsgränser: 19.5 p ger betyg A, 17.5-19.0 p ger betyg B, 14.5-17.0 p ger betyg C, 11.0-14.0 p ger betyg D, 8–10.5 ger betyg Fx med rätt till komplettering, som efter lyckad komplettering blir betyg E

- 1) Ytors atomära geometri och elektronstruktur kan studeras med sveptunnelmikroskopi (STM). Man sätter en smal metallnål så nära sin provyta att elektroner kan tunnla mellan provyta och nål och en tunnelström uppstår (se figur till höger). Tunnelströmmen beror på avståndet L mellan ytatomer och nål. I vårt exempel mäter man i s.k. konstant-ström-mod, dvs man reglerar avståndet mellan nålen och ytan så att en konstant ström erhålls. Den bild man sen ser är de förändringar i z -koordinat man tvingar nålen att göra för att få konstant ström.

Vi har en yta med två olika sorters atomer, palladium och jod. Elektrontätheten på palladium är 3 gånger högre än på jod. Vilken höjdskillnad mäter man upp? Antag att den effektiva tunnelbarriären $U-E = 3.0$ eV (4p)



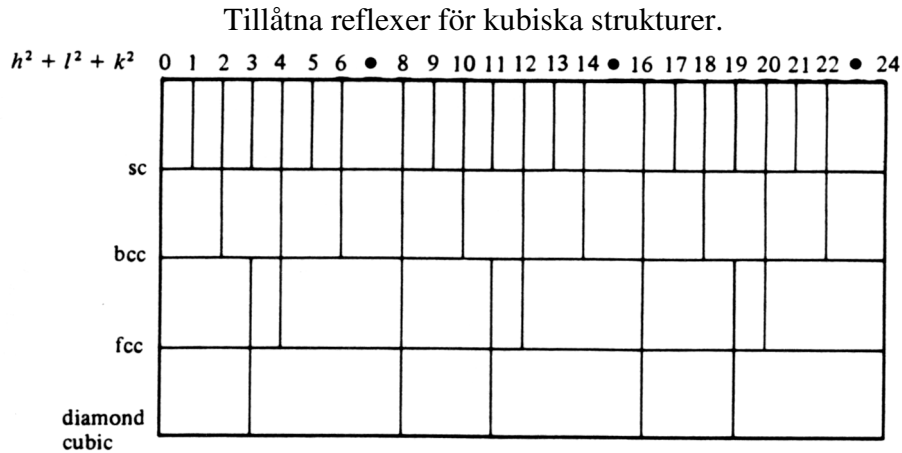
- 2) För att göra IR-kameror med hög termisk känslighet och hög rumsupplösning måste man göra väldigt små IR-detektorer som ligger i ett fint mönster, där varje detektor är en pixel i IR-bilden. Ett framgångsrikt recept är kvantprickar. Hur stora ska dessa prickar vara för att fungera bra som detektorer för $5 \mu\text{m}$ våglängd?

Antag att gropen är 4 eV djup. Använd den oändligt djupa gropen för att beräkna elektronernas energinivåer i gropen. Det finns flera lösningar, motivera. (3p)

Finns det någon fördel med någon av lösningarna? (1p)

- 3) Si och Ge har båda indirekt bandgap, men man kan genom att legera de två atomslagen få kvantprickar med direkt bandgap, som är bättre för optiska tillämpningar. Kvantprickarna växer på ett Si(100)-substrat. Prickarnas kristallplan ligger parallellt med substratets plan. Här har en $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ blandning med $x = 0.25$ använts.

Vilken är den första Braggvinkeln i en röntgendiffraktionsmätning ($\lambda=1.54 \text{ \AA}$)? (4p)
Antag att gitterparametern varierar linjärt med x .



	E_G (eV)	a (Å)	μ_e (m^2/Vs)	μ_h (m^2/Vs)	m_e^* (m_e)	m_h^* (m_e)	ϵ	n_i (300K), m^{-3}
Si	1.12	5.43	0.13	0.048	0.43	0.54	11.7	$2 \cdot 10^{16}$
Ge	0.67	5.66	0.38	0.18	0.12	0.32	16	$2 \cdot 10^{19}$

- 4) Antag att SiGe-kvantprickar ska användas som detektor vid 100 K. För att kyla leds värme från kvantprickarna genom substratet. Gör en enkel uppskattning av vilket av Si och Ge som leder värme bättre? (4p)

Lite siffror: $\theta_D(\text{Si})=645\text{K}$, $\theta_D(\text{Ge})=360\text{K}$, $v_s(\text{Si})=8433 \text{ m/s}$, $v_s(\text{Ge})=5400 \text{ m/s}$.

Antag att den medelfria väglängden för värmeledande partiklar är densamma i de två materialen.

- 5) Man kan genom att dopa en halvledare minska ledningsförmågan för små dopkoncentrationer. Här gäller det att dopa Si för minsta möjliga ledningsförmåga. Föreslå dopämne och dopkoncentration. Motivering krävs. (4p)

- 6) En odopad halvledare har elektronband enligt uttrycken nedan:

$$\epsilon_V(k) = \cos(2ka) + \cos(ka) - 2$$

$$\epsilon_C(k) = \sin(ka) + 2$$

- a) Vad är halvledarens optiska bandgap? (1.5 p)
b) Beräkna Fermivåns position i bandgapet vid 300K (2.5 p)

Lösningar

- 1) Vi vet att tunnlingssannolikheten $T = e^{-2CL}$, där L är avståndet mellan nål och yta och

$$C = \frac{\sqrt{2m_e(U-E)}}{\hbar} = 8.87 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}.$$

Tunnlingsströmmen $I \approx nT$ (det är inte helt rätt, men ungefär)

Här jobbar vi i konstant strömmod så strömmen över Pd = strömmen över jod, dvs

$$I_I = n_I T_I = n_I e^{-2CL_I} = n_{Pd} e^{-2CL_{Pd}} = I_{Pd} \text{ som kan skrivas om}$$

$$\frac{n_{Pd}}{n_I} = \frac{e^{-2CL_I}}{e^{-2CL_{Pd}}} = e^{-2C(L_I - L_{Pd})}$$

Logaritmera och lös ut $(L_I - L_{Pd})$

$$\ln\left(\frac{n_{Pd}}{n_I}\right) = -2C(L_I - L_{Pd})$$

$$(L_I - L_{Pd}) = \frac{\ln 3}{-2C} = -0.62 \text{ \AA}$$

Dvs Pd atomens ser ut att ligga 0.62 Å högre än jodatomen.

- 2) För att IR-ljus ska absorberas och detekteras av våra kvantstrukturer ska de i kvantgropen bundna elektronerna lyftas upp till kanten av gropen, varifrån de sen transporteras bort i det omgivande materialets ledningsband.

Om brunnen är 4.0 eV djup ges elektronens energi i gropen av

$$1) U - E_n = hf = \frac{hc}{\lambda} = 0.248 \text{ eV}$$

$$\text{Elektronenergin ges av } 2) E_n = \frac{h^2}{8m_e L^2} n^2$$

Input 2) i 1) och lös ut L

$$L_n = \frac{h}{\sqrt{8m_e(U - E_n)}} n = 1.232 \cdot n \text{ nm}$$

Här finns fler lösningar, beroende på vilket n man använder, t.ex.

$$L_1 = 1.232 \text{ nm}$$

$$L_2 = 2.462 \text{ nm}$$

$$L_3 = 3.696 \text{ nm}$$

Med ökande bredd finns fler nivåer i varje grop och man kan även mäta kortare våglängder samtidigt. Om man bara vill mäta 5 μm, bör man alltså välja L_1 , annars kan man med fördel välja någon annan av lösningarna. Ett eventuellt problem är att med $L = 1.23 \text{ nm}$ ryms bara 3-4 atomer i brunnen, och det relativa felet om man gör gropen en atom för tunn eller för tjock kan vara ganska stort. Dvs en bredare brunn är att föredra.

- 3) Här ska vi som vanligt använda Braggs lag för att bestämma Braggvinkeln, what else?

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

Vi behöver en gitterparameter och den första observerbara (h,k,l) kombinationen. I den lilla tabellen under frågan ser vi att $a_{Si} = 5.43 \text{ \AA}$ och $a_{Ge} = 5.66 \text{ \AA}$. Om gitterparametern varierar linjärt med x och $x=0.25$ får vi

$$a(x) = a_{Si} + x \cdot (a_{Ge} - a_{Si}) = 5.43 + 0.25 \cdot (5.66 - 5.43) = 5.49 \text{ \AA}$$

Vilket (h,k,l) ska vi välja? Si och Ge har båda diamantstruktur, så även deras legeringar. Det innebär att alla h,k,l = udda eller alla h,k,l = jämna och $h+k+l=4n$, där n är ett heltal, syns. Precis som i den obligatoriska labben mäter vi på strukturer med ett visst plan (100) // ytan. Det innebär att endast spridningsvektorer // (100) syns. För diamant(100) innebär det (400), (800), (1200) etc. Den första är alltså (400).

Input i Bragg ger oss $\theta = 34.1^\circ$.

- 4) Värmeledning. Det kan medieras av elektroner och fononer. Si och Ge är båda halvledare. Koncentrationen av ledningselektroner är ganska låg jämfört med t.ex. en metall redan vid rumstemperatur. Vid 100 K är det ännu färre elektroner. Dvs elektronernas bidrag kan försummas i vårt fall.

Värmeledning ges av $K = \frac{1}{3} v C \ell$. För att dimensionerna ska stämma krävs att C ges i enheten $J/m^3 K$. v är ljudhastigheten i de två materialen, ℓ är den medelfria väglängden för fononerna.

Eftersom $100 < \theta_D$ kan fononernas värmekapacitet skrivas (det är på gränsen för Ge, men vi låter det passera).

$$C_g = \frac{12 N k_B \pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3$$

Det här blir i enheten J/atomantal·K, och vi måste korrigera för atomkoncentrationen, byt N mot $n=N/V$. Eftersom vi bara ska jämföra Si och Ge, kan vi ställa upp en kvot

$$\frac{K_{Si}}{K_{Ge}} = \frac{v_{Si} C_{Si} \ell_{Si}}{v_{Ge} C_{Ge} \ell_{Ge}} = \frac{v_{Si} \frac{12 n k_B \pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_D(Si)} \right)^3 \ell_{Si}}{v_{Ge} \frac{12 n k_B \pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_D(Ge)} \right)^3 \ell_{Ge}} = \frac{v_{Si} \frac{N_{Si}}{V_{Si}} \left(\frac{T}{\theta_D(Si)} \right)^3 \ell_{Si}}{v_{Ge} \frac{N_{Ge}}{V_{Ge}} \left(\frac{T}{\theta_D(Ge)} \right)^3 \ell_{Ge}}$$

$T=100K$ för både Si och Ge, $N_{Ge}=N_{Si}$, $\ell_{Ge} = \ell_{Si}$, så vi kan förkorta bort en del saker

$$\frac{K_{Si}}{K_{Ge}} = \frac{v_{Si} \frac{1}{V_{Si}} \left(\frac{1}{\theta_D(Si)} \right)^3}{v_{Ge} \frac{1}{V_{Ge}} \left(\frac{1}{\theta_D(Ge)} \right)^3} = \frac{v_{Si} V_{Ge} \left(\frac{\theta_D(Ge)}{\theta_D(Si)} \right)^3}{v_{Ge} V_{Si}} = \frac{8433 \cdot a_{Ge}^3 \left(\frac{360}{645} \right)^3}{5400 \cdot a_{Si}^3} = 0.30$$

Dvs Ge leder värme bättre än Si vid 100 K

- 5) Vi vet att en halvledares konduktivitet ges av 1) $\sigma = n\mu_e e + p\mu_h e$. När man dopar ett material med en sorts laddningsbärare kommer koncentrationen av den andra att minska. T.ex om man n-dopar kommer en del av dopelektronerna att falla ned i valensbandets hål, så de minskar. Om man håldopar kommer en del av de intrinsiska elektronerna att fångas av dopatomerna. Det som gäller är att 2) $np = n_i^2$, för både odopat och dopat.

Om vi utgår från en intrinsisk halvledare är ju laddningsbärarna $n=p$, men de med högre mobilitet bidrar mer till σ . För Si är $\mu_e > \mu_h$. För att minska σ ska vi alltså minska mängden elektroner, dvs håldopa med koncentrationen N_A .

Med 1) och 2) kan vi skriva $\sigma = \frac{n_i^2}{p} \mu_e e + p\mu_h e$. σ har minimum när $\frac{d\sigma}{dp} = 0$

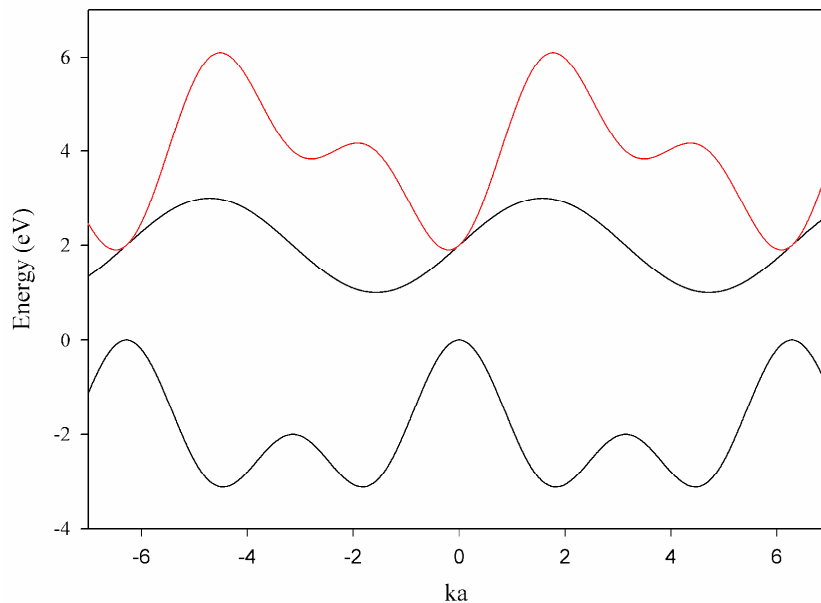
$\frac{d\sigma}{dp} = -\frac{n_i^2}{p^2} \mu_e e + \mu_h e = 0$ dvs $p = n_i \sqrt{\mu_e / \mu_h}$ som med 2) ger $n = n_i \sqrt{\mu_h / \mu_e}$. Det här gäller för att få minsta möjliga konduktivitet.

När man dopar gäller också (ekv 5.63 i H&H) att $n+N_A=p$ (laddningsneutralitet). Härur löser vi $N_A=p-n$.

$$N_A = p - n = n_i \sqrt{\mu_e / \mu_h} - n_i \sqrt{\mu_h / \mu_e} = 2 \cdot 10^{16} \left(\sqrt{0.13 / 0.048} - \sqrt{0.048 / 0.13} \right) = 2.08 \cdot 10^{16}$$

- 6) a) För att få fram det optiska bandgapet söker vi minsta avstånd mellan ledningsband och valensband vid samma k , dvs $\epsilon_C(k) - \epsilon_V(k) = (\sin(ka) + 2) - (\cos(2ka) + \cos(ka) - 2)$

Vi kan rita upp banden och skillnaden enligt figur. Den röda kurvan är skillnaden. Den lägsta punkten på den röda kurvan motsvarar det optiska bandgapet, dvs 2 eV.



b) Ferminivån ges av uttrycket $\mu = \frac{\epsilon_G}{2} + \frac{3}{4}k_B T \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right)$. Här ska absolutvärdet av m^* sättas in, annars kan man få en negativ logaritm. Halvledaren har indirekt bandgap som inte är detsamma som det optiska bandgapet. $\epsilon_G = \text{ledningsbandets minimum} - \text{valensbandets top} = 1 \text{ eV} - 0 \text{ eV} = 1 \text{ eV}$

De effektiva massorna för hål respektive elektroner ska bestämmas i valensbandets topp och ledningsbandets minimum, enligt det välkända sambandet $m^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2\epsilon}{dk^2}\right)}$

För elektroner i ledningsbandet gäller:

$$\frac{d^2\epsilon}{dk^2} = \frac{d}{dk}(a \cos(ka)) = -a^2 \sin(ka).$$

Ledningsbandet har minimum vid $k = -\pi/2a$ där $\frac{d^2\epsilon}{dk^2} = a^2$ och $m_e^* = \frac{\hbar^2}{a^2}$

För hål i valensbandet gäller:

$$\frac{d^2\epsilon}{dk^2} = \frac{d}{dk}(-2a \sin(2ka) - a \sin(ka)) = -4a^2 \cos(2ka) - a^2 \cos(ka).$$

Valensbandet har maximum vid $k=0$ där $\frac{d^2\epsilon}{dk^2} = -5a^2$ och $m_h^* = \frac{\hbar^2}{-5a^2}$

$$\mu = \frac{\epsilon_G}{2} + \frac{3}{4}k_B T \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) = 0.5 + \frac{3}{4}k_B T \ln(0.2) = 0.47 \text{ eV}$$