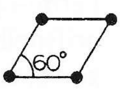
Tentamen Elektronenbanden 19 maart 2012, 14u – 17u

Dit tentamen bestaat uit 4 (vier) opgaves. Schrijf je naam op alle bladen die je inlevert, en nummer ze. Het totaal aantal te behalen punten is 55, het aantal voor de individuele onderdelen is aangegeven.

1. Vrije electronen (2+3+3+2 = 10)
   Beschouw een twee-dimensionaal electronengas, opgesloten in een vierkante doos met zijdes L.
   a. De electron golffuncties zijn vlakke golven van de vorm $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$. Gebruik periodieke randvoorwaarden en geef de toegestane waardes voor de impuls **k**, uitgesplitst in k_x en k_y. Geef de energie ε in termen van k_x en k_y.
   b. Geef het aantal electronen N(ε) wat nodig is om alle toestanden tot ε te vullen, en bereken hiermee de toestandsdichtheid g(ε). Laat zien dat als het totaal aantal electronen N is, dat geldt $g(\varepsilon) = N / \varepsilon_F$, met ε_F de Fermi energie.
   c. Laat zien dat de gemiddelde energie per electron $<\varepsilon>$ gegeven wordt door $\varepsilon_F / 2$.
   d. Bereken die energie voor een rooster met roosterafstand 0.3 nm, en 3 electronen per atoom.

2. Structuur, diffractie (3+4+4+4 = 15)
   Beschouw een 2D rooster opgebouwd uit gelijkzijdige driehoeken met zijden a_0. Hiernaast staat een primitieve cel.



reëel

   a. In de tekening zijn twee atoomrijen te zien in horizontale richting. In een diffractie-experiment leveren dergelijke rijen diffractiemaxima voor bepaalde hoeken θ van een inkomende golf met golflengte λ. Dit heet de diffractiewet van Bragg. Leid deze af. Bereken de hoek van het eerste maximum voor de getekende rijen voor a_0 = 0.4 nm en een foton energy van 8 keV.
   b. Laat zien dat het reciproke rooster van dit driehoeksrooster ook opgebouwd is uit driehoeken, maar gedraaid over 30^0 en met zijden $4\pi/(a_0\sqrt{3})$.
   c. Construeer de 1e en 2e Brillouin zones in de reciproke ruimte en laat zien dat de 2e zone dezelfde vorm en hetzelfde oppervlak heeft als de 1^e zone.
   d. Teken een paar punten van het reciproke rooster. Geef de diffractie conditie voor een inkomende golf in termen van golfvectoren en reciproke roostervectoren. Teken deze conditie in het reciproke rooster en laat zien dat dit leidt tot dezelfde waarde voor de hoek θ als in (a).

3. Elektronenbanden (1D) (3+4+4+4 = 15)
   Beschouw een 1-dimensionaal rooster waarin bijna-vrije elektronen zijn opgesloten. De (zwakke) roosterpotentiaal $U(\mathbf{x})$ heeft periode a_0 : $U(x) = U(x+ a_0)$.
   a. Schets de energiebanden, dat wil zeggen de relatie tusen energie ε en impuls k, voor de 1^e en 2^e Brillouin zones in het *gereduceerde* zoneschema. Geef de waarde van de energie van een electron in de top van de tweede band.
   b. Geef aan wat je verwacht voor de waarde van de effectieve massa van electronen in de bodem van de eerste band, en in de top van de tweede band. Is de absolute waarde gelijk aan die van vrije electronen, en is het teken gelijk aan dat voor vrije electronen,

c. Nu wordt de potentiaal sterk. Leid een uitdrukking af voor $\varepsilon(k)$ met de Tight-Binding methode, uitgaande van een enkele atomaire orbital met zwakke overlap. Geef hierbij duidelijk aan wat je constantes betekenen.
d. Een tweede atomair niveau leidt tot een tweede band, waarvan weer de top bij k=0 ligt in het gereduceerde schema. Neem aan dat de energie in de top van de band langs de k_x–as geschreven kan worden als $\varepsilon = -5\times10^{-38}\ k_x^2$. Verwijder nu uit de top van de band een electron met $k_x = 1\ (\text{nm})^{-1}$, waardoor een gat resulteert. Bereken van het gat de effectieve massa, de energie (in eV), de impuls, en de snelheid. Geef steeds expliciet aan wat het teken of de richting van de verschillende grootheden is.

4. Electronenbanden (2D) (3+3+3+3+3 = 15)

Beschouw een 2-dimensionaal vierkant rooster met periode a_0. De roosterpotentiaal is sterk, en het systeem is een isolator als het gevuld is met 2 electronen per atoom.

a. Teken het reciproke rooster (in de k-ruimte) en contrueer in één plaatje de 1^e en de 2^e Brillouin zone. Teken beide zones vervolgens in aparte plaatjes, in een gereduceerd schema. Geef steeds de waardes van de zonegrenzen aan, en arceer die gebieden in beide zones die gevuld zijn als het systeem 1.9 electron per atoom bevat.
b. Geef aan hoe het Fermi-oppervlak, of de Fermi-oppervlakken, eruit zien in het geval van een vulling van 1.9 electron per atoom, en in het geval van 2.1 electron per atoom.
c. Nu wordt een electrisch veld E langs de positieve x-as gezet. Geef voor beide gevallen aan wat de *kracht* is die op de electronen werkt (teken de vector), en of en hoe het Fermi-oppervlak verschuift in de k-ruimte. Bespreek of dit leidt tot een resulterende drifsnelheid voor het electronensysteem, en zo ja, en wat het teken daarvan is. Beschouw zowel de x- als de y-component van de driftsnelheid.
d. Vervolgens wordt een magnetisch veld B aangezet langs de positieve z-as (en E = 0). Geef opnieuw voor beide gevallen aan wat de *kracht* is die op de electronen werkt (teken de vector), en hoe het Fermi-oppervlak verschuift in de k-ruimte. Bespreek of dit leidt tot een resulterende drifsnelheid voor het electronensysteem, en zo ja, en wat het teken daarvan is. Beschouw zowel de x- als de y-component van de driftsnelheid.
e. Tenslotte wordt zowel een E-veld langs x gezet, als een B-veld langs z. Teken weer voor beide gevallen hoe het Fermi-oppervlak verschuift in de k-ruimte. Geef aan of het verschil maakt of er wel of geen stroom in de y-richting kan lopen.

-------THE END ------

Constants :

electron charge *e*	1.6×10^{-19} C	electron mass *m*	9.11×10^{-31} kg
Planck's constant *h*	6.63×10^{-34} J s	vacuum permeability μ_0	$4\pi \times 10^{-7}$ N A^{-2}