

## Tentamen Fysica van de Vaste Stof 8 Januari 2004, 14u – 17u

Dit tentamen bestaat uit vijf (5) opgaves. Schrijf je naam op alle bladen die je inlevert, en nummer ze. Het totaal aantal te behalen punten is 100, het aantal voor de individuele onderdelen is aangegeven. Enige natuurconstanten zijn aan het eind gegeven.

### 1. Vrije elektronen (3+4+4+5+4 = 20) (30 min.)

- Gegeven  $N$  vrije elektronen in een vierkant met zijdes  $L$ , door middel van periodieke randvoorwaarden te beschrijven als vlakke golven van de vorm  $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ . De verzameling bezette toestanden in de  $\mathbf{k}$ -ruimte heeft de vorm van een cirkel. Geef een uitdrukking voor de straal  $k_F$  van de cirkel in termen van de elektronendichtheid (aantal elektronen per oppervlakte-eenheid).
- Neem aan dat het vierkant rooster een roosterafstand  $a_0$  heeft van 0.4 nm, en dat er twee elektronen per atoom zijn. Bereken de Fermi energie  $\varepsilon_F$  en de Fermi snelheid  $v_F$ .
- Bereken de toestandsdichtheid  $g(\varepsilon) = dZ/d\varepsilon$  (met  $\varepsilon$  de energie en  $dZ$  het aantal  $\mathbf{k}$ -toestanden in een interval  $d\varepsilon$ ). Deze blijkt niet van  $\varepsilon$  af te hangen. Bereken tevens de gemiddelde energie van een electron in termen van de Fermi energie  $\varepsilon_F$  bij  $T = 0$ .
- In 3D kan een infinitesimaal volume in de  $\mathbf{k}$ -ruimte geschreven worden als  $dk_{\perp}dS$ , waarbij  $dS$  een oppervlak van konstante energie is en  $dk_{\perp}$  een afstand loodrecht op dat oppervlak. Geef de vergelijkbare uitdrukking voor 2D en laat hiermee zien dat  $g(\varepsilon)$  geschreven kan worden als  $L^2/(2\pi^3) \int (\hbar v)^{-1} dS$ .
- Controleer dat ook deze uitdrukking voor  $g(\varepsilon)$  leidt tot  $N = \int g(\varepsilon) d\varepsilon$ .

### 2. Transport (3+4+3+5+5 = 20) (40 min)

Een elektrisch veld  $\mathbf{E}$  wordt aangelegd aan een opgesloten systeem van  $n$  vrije elektronen en leidt tot een impulsverandering  $\hbar\delta\mathbf{k}$  voor ieder electron.

- Gebruik de identiteit  $\hbar\delta\mathbf{k} = m\mathbf{v}_d$  (met  $m$  de electron massa en  $\mathbf{v}_d$  de driftsnelheid) en schrijf de vergelijking op die de verandering van driftsnelheid beschrijft onder invloed van  $\mathbf{E}$ . Botsingen van electronen aan roosterimperfecties, met een karakteristieke tijd tussen botsingen  $\tau$ , begrenzen de snelheidstoename. Verwerk dit in de vergelijking.
- Geef een vergelijking voor de elektrische stroom  $\mathbf{j}$  in termen van  $n$  en  $\mathbf{v}_d$ . Laat zien dat de stationaire toestand van het systeem beschreven wordt door  $\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E}$  en leid een uitdrukking voor  $\sigma$  af.
- Laat zien dat de eenheid voor  $\sigma$   $[\Omega\text{m}]^{-1}$  is. Een typische waarde voor  $\sigma$  is  $10^8$   $[\Omega\text{m}]^{-1}$ . Bereken hieruit  $\tau$  voor een typisch aantal electronen van  $10^{29}$   $[\text{m}^3]^{-1}$  en schat de gemiddelde vrije weglengte  $\ell$ . Leg uit welke electronsnelheid je hiervoor gebruikt en waarom.

Beschouw nu een halfgeleider bandstructuur, waarbij de energie van toestanden in de top van de valentieband langs  $k_x$  beschreven wordt door  $\varepsilon = -\hbar^2 k_x^2 / 2m_v$  en die van toestanden in de bodem van de geleidingsband met  $\varepsilon = U_g + \hbar^2 k_x^2 / 2m_c$ . Ook bij  $T = 0$  is de  $v$ -band niet helemaal vol. De lege toestanden kunnen nu ook als deeltjes beschouwd worden, de zogenaamde gaten.

- Schets de bandstructuur in een plaatje en geef aan welke toestanden vol en leeg zijn. Geef duidelijk aan dat er verschil is tussen  $m_v$  en  $m_c$ . Schets tevens bandstructuur en vol/leeg voor de gaten. Geef van electronen en gaten aan of hun massa positief of negatief is, en waarom.
- Als een  $\mathbf{E}$ -veld wordt aangezet in de positieve  $x$ -richting verschuiven de electronen- en gatendistributies. Teken deze verschuiving (lieft in een nieuw plaatje). Argumenteer hiermee voor de gaten dat  $\hbar d\delta\mathbf{k}/dt = e\mathbf{E}$ , met dus een positief teken van hun lading.

## 3. Structuur, diffractie (4+4+5+4+3 = 20) (40 min)

De diamantstructuur kan beschreven worden door een fcc rooster met een roosterparameter  $a_0$  en een 2-atoom basis op posities  $(0,0,0)$  en  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ .

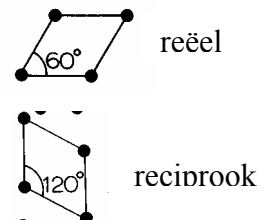
- Schets de kubische eenheidscel van het fcc rooster en de fcc atoomposities. Geef het aantal atomen in deze eenheidscel. Leg uit dat dit geen 'primitieve' eenheidscel is. De primitieve cel kan gedefinieerd worden met drie translatievectoren  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{a}_3$ . Neem  $\mathbf{a}_1 = a_0/2 (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y)$ ,  $\mathbf{a}_2 = a_0/2 (\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)$  en maak een keuze voor  $\mathbf{a}_3$ . Teken de vectoren in de schets van het rooster. Geef het aantal atomen in deze primitieve cel.

Het reciproke rooster geeft de richtingen aan waarin constructieve interferentie optreedt als een deeltje met golfvector  $\mathbf{k}_0$  elastisch verstrooid wordt aan het reële rooster. Voor de uitgaande golf  $\mathbf{k}$  moet gelden:  $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{G}_{hkl}$ , met  $\mathbf{G}_{hkl}$  een reciproke roostervector.

- Schrijf de Laue voorwaarden voor diffractie op, en laat zien dat hieraan voldaan wordt door  $\mathbf{g}_i = 2\pi (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) / [\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)]$  etc, met  $\mathbf{g}_i$  de primitieve reciproke roostervectoren.
- Bereken de reciproke eenheidsvectoren voor het fcc rooster, en laat door inspectie zien dat deze een body-centered kubisch (bcc) rooster opbouwen.
- Omdat het diamantrooster 2 atomen in de basis heeft veranderen de diffractiecondities. Bereken voor alle reflecties  $hkl$  de structuurfactor  $S = \sum \exp(-\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_p)$  met  $\mathbf{r}_p$  de posities van de atomen in de basis en de som over alle atomen in de basis.
- Laat zien dat de voorwaarde  $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{G}_{hkl}$  ook geschreven kan worden als  $2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{G}_{hkl} = |\mathbf{G}_{hkl}|^2$ ; en dat dit betekent dat diffractie optreedt als de vector  $\mathbf{k}$ , getekend vanuit de oorsprong, ligt op de middelloodlijn van de vector  $\mathbf{G}_{hkl}$

## 4. Bandstructuur (5+5+5+5 = 20) (40 min)

Beschouw een 2D rooster opgebouwd uit gelijkzijdige driehoeken met zijden  $a_0$ . Hiernaast staat een primitieve cel. Het reciproke rooster is ook opgebouwd uit driehoeken, maar gedraaid over  $30^\circ$  en met zijden  $4\pi/(a_0\sqrt{3})$



- 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 1e zone.
- Neem aan dat de roosterpotentiaal zeer zwak is, en teken in 1 plaatje de electronenergie  $\epsilon$  als functie van golfvector  $\mathbf{k}$  voor twee richtingen in de reciproke ruimte, namelijk (a) langs een kortste lijn naar een zonerand en (b) langs een langste lijn naar een zonerand. Gebruik  $\hbar^2/2m = 1$  en zet voor het gemak  $\mathbf{k}$  uit in eenheden  $(2\pi)/a_0$ .
- Nog steeds voor zwakke roosterpotentiaal, schets de contour van het Fermi-oppervlak als ieder atoom twee electronen bijdraagt. Geef aan of je verwacht dat dit een metaal of een isolator is.
- Neem nu aan dat de roosterpotentiaal sterk is zodat Tight Binding een betere benadering voor de bandstructuur oplevert. Schets *kwalitatief* (geen getallen, wel uitleg) wat je verwacht voor de electronenbijdrage  $\gamma$  aan de soortelijke warmte als functie van het aantal electronen (e) per atoom (a) voor  $e/a$  tussen 1 en 2.

## 5. Magnetisme (3+4+4+5+4 = 20) (30 min)

- Geef de relatie tussen het magnetisch moment  $m$  en de magnetisatie  $M$  van een stof; en de relatie tussen het aangelegde veld  $H_a$  (in A/m), en de susceptibiliteit  $\chi$ . Geef van  $m$ ,  $M$  en  $\chi$  de (S.I.) eenheden.
- Beschouw een vrij atoom met een electron in een s-orbital.. Geef het magnetisch (spin)moment  $m$  van het atoom in Bohr magneton  $\mu_B$ . In een magnetisch veld  $H_a$  splitst de toestand in twee niveau's met een energievverschil  $\Delta$ . Geef een uitdrukking voor  $\Delta$  in termen van  $m$  en  $H_a$  (en vergis je niet in de eenheden).
- Het systeem telt  $N$  atomen in een volume  $V$ . Geef de fracties  $N_1/N$  en  $N_2/N$  van het aantal atomen in het lagere en het hogere nivo, respectievelijk, bij eindige temperatuur  $T$ . Geef ook de waarde van de component van  $m$  langs de veldrichting voor beide niveau's.
- Geef een uitdrukking voor de resulterende magnetizatie  $M$  voor de  $N$  atomen. Laat zien dat voor  $mH_a \ll k_B T$  het resultaat is  $M = N m^2 \mu_0 H_a / (V k_B T)$ .
- De susceptibiliteit van een materiaal kan positief (paramagnetisch) of negatief (diamagnetisch) zijn. Geef een mogelijke bron voor diamagnetisme en twee mogelijke bronnen voor paramagnetisme. Leg voor iedere mogelijkheid uit wat je verwacht in het geval van macroscopische preparaten Si en Cu. Argumenteer voor Cu ook of de susceptibiliteit temperatuurafhankelijk is in het gebied tussen 0 K en 300 K.

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

Constants :

electron charge $e$	$1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$	electron mass $m$	$9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Planck's constant $h$	$6.63 \times 10^{-34} \text{ J s}$	vacuum permeability $\mu_0$	$4\pi \times 10^{-7} \text{ N A}^{-2}$
Bohr magneton $\mu_B$	$9.23 \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$		

$$20 + 20 + 20 + 20 + 20 = 100$$

$$30 \quad 40 \quad 40 \quad 40 \quad 30 = 170$$