Dit tentamen bleek wat (te) veel. De normering werd daardoor 60 pnt = max

Tentamen Fysica van de Vaste Stof 13 Januari 2006, 10u – 13u

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 75, het aantal voor de individuele onderdelen is aangegeven. Enige natuurkonstanten zijn aan het eind gegeven.

1. Vrije en minder vrije electronen (2+4+4 = 10) (25 min.)
   a. Gegeven N vrije elektronen in een kubus met zijdes L (en volume $L^3 = V$), door middel van periodieke randvoorwaarden te beschrijven als vlakke golven van de vorm exp($i\mathbf{k}\bullet\mathbf{r}$). Geef de mogelijke waardes voor **k.** Geef ook de energie-dispersierelatie $\varepsilon(\mathbf{k})$. De verzameling bezette toestanden in de **k**-ruimte is een bol. Laat zien dat de straal k_F van de bol gegeven wordt door $k_F = (3\pi^2 N / V)^{1/3}$.
   b. In 3D kan een infinitesemaal volume in de **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. Laat hiermee zien dat $g(\varepsilon)$ geschreven kan worden als $V/4\pi^3 \int (\hbar v)^{-1}\, dS$, met v de snelheid van het electron, en dat de dimensie van deze $g(\varepsilon)$ inderdaad een toestandsdichtheid is.
   c. Laat zien dat hieruit volgt dat $g(\varepsilon) = 1/(2\pi^2\hbar^3)\,(2m_e)^{3/2}\,\varepsilon^{1/2}$. Gebruik dit om te laten zien dat de gemiddelde energie per electron ε_{av} gegeven wordt door $\varepsilon_{av} = 3/5\ \varepsilon_F$ (met ε_F de Fermi energie).

2. Structuur, diffractie (5+5+5+5 = 20) (50 min)

Fig. 3 geeft schematisch de structuur van grafiet weer. Het bestaat uit vlakken van zeshoeken, waarbij het vlak boven het grondvlak zodanig verschoven is dat drie atomen nog overdekken, maar de andere drie atomen in de 'holtes' van het grondvlak liggen. De afstand naar het vlak boven het grondvlak is b_0

   a. Een eenheidscel wordt opgespannen door vectoren $a_{1,2}$ in het grondvlak en een vector a_3 loodrecht daarop. Geef de minimale lengte van a_3 in eenheden b_0. Een mogelijk keus voor $a_{1,2}$ is gegeven in Fig. 3b, geef twee andere mogelijke keuzes. Geef het aantal atomen in de eenheidscel gevormd door a_1, a_2 en de minimale a_3. Werk verder met deze eenheidscel
   b. Bereken de reciproke roostervectoren voor de eenheidscel uit (a).
   c. Met de gegeven eenheidscel is de kristalstructuur te beschrijven als 'rooster + basis'. Geef de posities van de basisatomen en bereken voor alle reflecties *hkl* de structuurfactor S.
   d. Construeer *voor het grondvlak* van de structuur de 1^e en 2^e Brillouin zones in de reciproke ruimte.

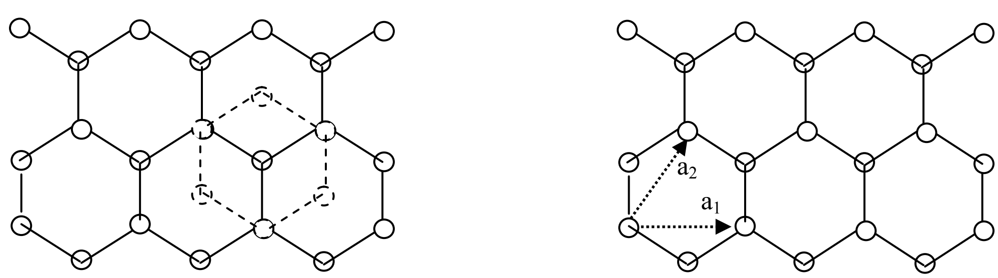

Fig. 1 (a) de kristalstructuur van grafiet. De doorgetrokken lijnen en cirkels liggen in het grondvlak, de gestippelde in het eerste vlak daarboven. (b) mogelijke keuze voor de in-vlak roostervectoren.

3. Halfgeleiders (3+4+3 = 10) (25 min)

Neem aan dat voor een electron in een halfgeleider de energie in de buurt van top van de valentieband langs de k_x–as geschreven kan worden als $\varepsilon = -5\times10^{-38}\, k_x^2$. De halfgeleider is intrinsiek, bij T = 0 is de valentieband vol, bij 300 K is een fractie n_i van de electronen geëxciteerd naar de geleidingsband.

a. Bij T = 0 wordt een electron verwijderd met $k_x = 1\ (\mathrm{nm})^{-1}$, waardoor een gat resulteert.Geef de effectieve massa van het oorspronkelijke electron. 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.
b. De geleidingsband van deze halfgeleider kan ook benaderd worden als parabolisch, met een effectieve massa die vijf maal hoger is dan die van de valentieband. Teken schematisch het bandplaatje $\varepsilon(k_x)$. Neem aan dat de elastische verstrooiïngstijden τ voor beide banden gelijk zijn. Bereken het geleidingsvermogen σ bij 300 K in eenheden ($e^2\,\tau$).
c. Een halfgeleider kan met 'tight binding' beschreven worden. Beschouw het geval van 2D en een vierkant rooster. Teken in de k-ruimte schematisch de vulling van de 1^e en de 2^e Brillouin zone (gebruik het 'gereduceerde' schema) en het Fermi oppervlak voor de verhouding electronen (e) / atoom (a) : e/a = 4 en 3.5. Geef voor e/a = 3.5 de richting aan van $d\varepsilon/dk$ op een willekeurige plek op het Fermi oppervlak.

4. Tight-binding (5+5+5+5=20)(50 min)

In de tight-binding benadering wordt de energie van een band gegeven door $\varepsilon_k = -B - A\sum_{buren} e^{-ik\bullet\rho_m}$, met ρ_m de positie van de naaste buren van een gegeven atoom.

a. Leg *kwalitatief* uit wat tight binding betekent. Wat is de relatie tussen de energie-band en het atomaire niveau van het oorspronkelijke electron, en wat zijn A en B.
b. Gegeven een fcc rooster met ribbe van de kubische eenheidscel a_0. Laat zien dat het aantal naaste buren 12 bedraagt; en dat de energie, onder verwaarlozing van de constante term, gegeven wordt door
$$\varepsilon_k = -4A\,[\cos(k_x a_0/2)\cos(k_y a_0/2) + \cos(k_y a_0/2)\cos(k_z a_0/2) + \cos(k_z a_0/2)\cos(k_x a_0/2)].$$
c. Laat zien dat voor het aantal electronen (e) per atoom (a) e/a << 1 de bandstructuur parabolisch is en het Fermi-oppervlak een bol.
d. Geef een uitdrukking voor ε_k voor de volgende drie richtingen : (k_x,k_y,k_z) = (1,0,0); (1,1,1); (1,1,0); en geef voor iedere richting bij welke waardes de bandsnelheid van het electron nul is. Leg uit waarom dat is, onder gebruik making van het feit dat het reciproke rooster een bcc rooster is met ribbe van de kubische eenheidscel $4\pi/a_0$.

N.B. : $\cos(\alpha) + \cos(\beta) = 2\cos(\frac{\alpha+\beta}{2})\cos(\frac{\alpha-\beta}{2})$

5. Fononen (5+5+5 = 15) (25 min)
   a. Gegeven een keten met identieke massa's m, verbonden aan hun eerste naburen met veren met veerconstante K_1, en tevens aan hun tweede naburen met veren met veerconstante K_2. De roosterparameter (nabuurafstand) is a_0. Geef de bewegingvergelijking en laat zien dat de dispersierelatie nu luidt
   $$m\omega^2 = 2K_1[1-\cos(ka_0)] + 2K_2[1-\cos(2ka_0)]$$
   b. Een ketenlengte L en periodieke randvoorwaarden geven een discrete set normal modes voor k-waardes tussen 0 en π / a_0. Geef de groepssnelheid van de golven voor $k \to 0$ en voor $k = \pi / a_0$. Gebruik dit om een schets te maken van de toestandsdichtheid $g(\omega)$ als functie van ω.
   c. Omdat $g(\omega)$ een divergentie vertoont is de functie lastig te gebruiken. De Debije benadering is een manier om dit probleem (in benadering) te omzeilen. Geef aan hoe dit werkt.

-------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}

Onderdelen	3 + 4 + 3 + 4 + 3	= 17
Punten	10 +20 + 10 + 20 + 15	= 75
Tijd	25 50 25 50 25	= 175