

Tentamen Fysica van de Vaste Stof

13 Januari 2006, 10u – 13u

Uitwerking

1. Vrije en minder vrije electronen (2+4+4 = 10) (25 min.)

- a. $k = (n_x + n_y + n_z) \times 2\pi/L$, n geheel ; $\epsilon(k) = \hbar^2 k^2 / (2m)$;
 volume bol $(4/3)\pi k_F^3$, volume per k -punt $8\pi^3/V$, 2 electronen per k -pnt,
 dus $(4/3)\pi k_F^3 \times 2 / (8\pi^3/V) = N/2$
- b. $dk_{\perp} = d\epsilon / (d\epsilon/dk_{\perp}) = d\epsilon / (\hbar v_F)$. Het volume bevat $V/8\pi^3 \int (\hbar v_F)^{-1} d\epsilon dS$ k -toestanden en
 $V/4\pi^3 \int (\hbar v_F)^{-1} d\epsilon dS$ electronen, gelijk te stellen aan $g(\epsilon)d\epsilon$, het aantal toestanden tussen ϵ en
 $\epsilon+d\epsilon$. Hieruit volgt $g(\epsilon) = V/4\pi^3 \int (\hbar v_F)^{-1} dS$. Dimensie : $[m^3 \times m^{-2} \times (J s m s^{-1})^{-1}] = [J^{-1}]$
- c. Integreren levert $(V / 4\pi^3)(4\pi k_F^2 / (\hbar v_F))$. Met $\hbar^2 k_F^2 / (2m) = \epsilon_F$ en $\hbar k_F / m = v_F$ volgt dit door
 simpel invullen.

$$\text{De gemiddelde energie : } \bar{\epsilon} = \frac{\int_0^{\epsilon_F} \epsilon g(\epsilon) d\epsilon}{\int_0^{\epsilon_F} g(\epsilon) d\epsilon} = \frac{\int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{3/2} d\epsilon}{\int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{1/2} d\epsilon} = \frac{2/5 \epsilon_F^{5/2}}{2/3 \epsilon_F^{3/2}} = \frac{3}{5} \epsilon_F$$

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

- a. Vanwege de verschuiving is de minimale lengte van a_3 gelijk aan $2b_0$. Het aantal atomen in de
 eenheidscel is (grondvlak) $4 \times 1/8 + 1/2 +$ (midden) $4 \times 1/4 + 1 +$ (top) $4 \times 1/8 + 1/2 = 4$.
Let op : middenvlak heeft atoom wat vaak over het hoofd gezien wordt.

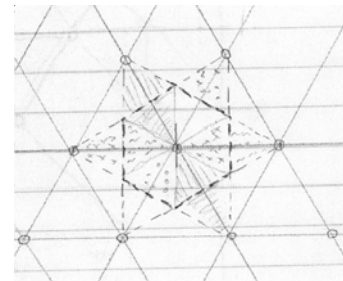
- b. Eenheidsvectoren : $a_1 = a_0 i$, $a_2 = (a_0/2) i + (a_0\sqrt{3}/2) j$, $a_3 = 2b_0 k$

$$\text{Met } a_2 \times a_3 = \begin{vmatrix} i & j & k \\ a_0 & a_0\sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 2b_0 \end{vmatrix} = a_0 b_0 \sqrt{3} i + (-a_0 b_0) j ; \quad a_1 \bullet (a_2 \times a_3) = a_0^2 b_0 \sqrt{3}$$

volgt : $a_1^* = (2\pi/a_0)(i - 1/\sqrt{3}j)$; $a_2^* = (-4\pi\sqrt{3}/(3a_0))j$; $a_3^* = (\pi/b_0)k$

- c. Basisatomen : A : (0,0,0) ; B : (a_0 , $\sqrt{3}a_0/3$, 0) ; C : ($a_0/2$, $\sqrt{3}a_0/6$, b_0)
 Structuurfactor A : 1
 B : $(4\pi/3)(h - k)$;
 C : $(2\pi/3)(h - k) + \pi l$; h, k, l geheel

- d. Via de bisectrisches en het verschuiven van alle
 driehoekjes over een reciproke roostervector.



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

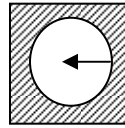
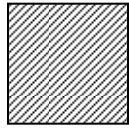
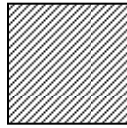
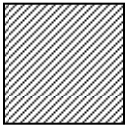
Dit is ongeveer opgave 5.1 boek - zie uitwerking boek.

- a. electron $m_e = \hbar^2 / (\partial^2 \epsilon / \partial k^2) ; \partial^2 \epsilon / \partial k^2 = 10^{-37} ;$
 $= -1.1 \times 10^{-31} \text{ [kg]} = 1.1 \times 10^{-31} / 9 \times 10^{-31} = 0.12 \text{ electron massa}$
 gat $m_h = -m_e ; \epsilon = -5 \times 10^{-38} \times 10^{18} / 1.6 \times 10^{-19} = -0.31 \text{ eV}$
 $p = \hbar k, k_h = -k_e, k_{x,h} = -10^{-9} \text{ [m}^{-1}\text{]}$
 $v_h = +v_e = \hbar k_e / m_e = -9.6 \times 10^5 \text{ [m/s]} (k_e > 0, m_e < 0)$

- b. Massa $5 \times$ hoger betekent voorfactor $5 \times$ kleiner, dus een *vlakke* parabool dan de geleidingsband.

Geleidingsvermogen via $j = -n e v_e + p e v_h \rightarrow \sigma = (ne^2 \tau) / |m_e| + (ne^2 \tau) / m_h$, want $n = p$, wordt in eenheden ($e^2 \tau$): $\sigma = (6/5)(n/|m_e|)$.

- c. Voor $e/a = 4$, zones 1,2; Voor $e/a = 3.5$, zones 1,2



De richting van $\partial \epsilon / \partial k$ is naar binnen, omdat het vullen van lege toestanden de energie groter maakt

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

- a. Tight binding betekent weinig overlap tussen de electronen-niveau's en daardoor slechts naaste burenen meenemen voor bandvorming. A is de overlap-integraal, B is de energie van het oorspronkelijke atomaire niveau, met een kleine correctie voor de 'extra' periodieke potentiaal.

- b. De posities ρ_m worden gegeven door $(a_0/2)(\pm 1, \pm 1, 0)$, $(a_0/2)(\pm 1, 0, \pm 1)$ en $(a_0/2)(0, \pm 1, \pm 1)$, totaal 12 naburen. De eerste vier termen leveren in $\exp(k \cdot \rho_m)$:
 $\cos[(a_0/2)(k_x + k_y)] + \cos[(a_0/2)(-k_x - k_y)] + \cos[(a_0/2)(k_x - k_y)] + \cos[(a_0/2)(-k_x + k_y)] =$
 $2 \cos[(a_0/2)(k_x + k_y)] + 2 \cos[(a_0/2)(-k_x - k_y)] = (\text{met de gegeven formule})$
 $= 4 \cos(k_x a_0/2) \cos(k_y a_0/2)$. De andere 8 termen leveren dan $4 \cos(k_x a_0/2) \cos(k_z a_0/2)$ en $4 \cos(k_y a_0/2) \cos(k_z a_0/2)$, de gevraagde uitdrukking

- c. Ontwikkelen van $\cos(x) = 1 - x^2$ levert voor ieder product van cosinussen een term $[1 - (k_x^2 a_0^2/4)] [1 - (k_y^2 a_0^2/4)]$ etc. Verwaarlozen van de constanten levert dan $(-4a_0^2/4)(k_x^2 + k_y^2 + k_x^2 + k_z^2 + k_y^2 + k_y^2) = -2a_0^2 k^2$

- d. $(1,0,0) : \epsilon = -4(1 + 2\cos(k_x a_0/2))$

$$\partial \epsilon / \partial k \propto \sin(k_x a_0/2) = 0, k_x = 2\pi/a_0$$

$$(1,1,1) : \epsilon = -4(3\cos^2(ka_0/2)), k_x = k_y = k_z = k$$

$$\partial \epsilon / \partial k \propto \cos(ka_0/2) \sin(k_x a_0/2) = \sin(2ka_0/2) = 0, k = \pi/a_0 - \text{het 'bcc'-punt}$$

$$(1,1,0) : \epsilon = -4(\cos^2(ka_0/2) + 2\cos(k_x a_0/2)), k_x = k_y = k$$

De snelheid is nul op alle middens van de reciproke roostervectoren.

5. Fononen (5+5+5 = 15) (25 min)

Dit was probleem 2.1 uit het boek. Zie daar, en

a. $m\ddot{u}_n = K_1 (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + K_2 (u_{n+2} - 2u_n + u_{n-2})$; invullen $u_n = A \exp[i(kx_n - \omega t)]$ geeft $m\omega^2 = 2K_1 [1 - \cos(ka_0)] + 2K_2 [1 - \cos(2ka_0)]$

b. Voor $k \rightarrow 0$ ontwikkelen van $\cos(ka_0)$ geeft $m\omega^2 = k^2 a_0^2 (K_1 + 4K_2)$

De geluidssnelheid wordt $v_s = \omega / k = a_0 \sqrt{(K_1 + 4K_2)/m}$

Met $g(\omega) \propto dk / d\omega$ is dit een konstante in de buurt van $k = 0$

Voor $ka_0 = \pi$ wordt $\omega^2 = 2(K_1 + K_2)/m$

$g(\omega)$ divergeert bij $k = \pi / a_0$

c. In de Debije benadering wordt de dispersie lineair genomen met de $k \rightarrow 0$ waarde voor de geluidssnelheid, maar het aantal modes N wordt konstant gehouden door te integreren tot de

Debije frequentie ω_D , gedefinieerd via $\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = N$.

-----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 μ_0

$4\pi \times 10^{-7} \text{ N A}^{-2}$

Onderdelen $3 + 4 + 3 + 4 + 3 = 17$

Punten $10 + 20 + 10 + 20 + 15 = 75$

Tijd $25 \quad 50 \quad 25 \quad 50 \quad 25 = 175$