

Dit tentamen bestaat uit vier (4) opgaves. Maak elke opgave op een apart vel papier. Schrijf je naam op alle bladen die je inlevert, en nummer ze. Het totaal aantal te behalen punten is 86, het aantal voor de individuele onderdelen is aangegeven. Enige natuurkonstanten zijn aan het eind gegeven.

1. Vrije elektronen en Pauli susceptibiliteit (3+3+5+3+5+5 = 24)
  - 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  $\exp(\mathbf{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ . Geef de mogelijke waarden voor  $\mathbf{k}$ . Geef ook de energie-dispersierelatie  $\varepsilon(\mathbf{k})$ . De verzameling bezette toestanden in de  $\mathbf{k}$ -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. Geef de orde van grootte van de Fermi-energie  $\varepsilon_F$ , gegeven dat een metaal ongeveer 1 electron per  $0.01 \text{ nm}^3$  bevat.
  - c. In een bepaald leerboek voor Vaste Stof Fysica wordt gezegd dat de toestandsdichtheid  $D(\varepsilon)$  (de dichtheid van electrontoestanden in het energie-interval tussen  $\varepsilon$  en  $\varepsilon+d\varepsilon$ ) gegeven door  $D(\varepsilon) = 1/(2\pi^2\hbar^3) (2m_e)^{3/2} \varepsilon^{1/2}$ , waarbij  $m_e$  de electronmassa is. Laat zien dat de dimensie van deze  $D(\varepsilon)$  inderdaad een toestandsdichtheid kan zijn. Ga na of deze  $D(\varepsilon)$  per electron toestand of per electronspin richting is gedefinieerd. En wat is het verschil tussen die twee?
  - d. Laat zien dat de toestandsdichtheid bij het Fermi niveau  $D(\varepsilon_F)$  geschreven kan worden in termen van de Fermi-energie volgens  $D(\varepsilon_F) = (3N)/(2\varepsilon_F)$
  - e. Het aantal elektronen  $n$  met energie  $\varepsilon$  bij temperatuur  $T$  wordt gegeven door  $n(\varepsilon, T) = D(\varepsilon) \times f_{FD}(\varepsilon, T)$ , met  $f_{FD} = [\exp((\varepsilon - \mu)/k_B T) + 1]^{-1}$  de Fermi-Dirac verdeling ( $\mu \approx \varepsilon_F$  is de chemische potentiaal). In Fig. 1. staat  $n(\varepsilon, T)$  uitgezet voor twee temperaturen,  $T = 0$  en  $0 < T \ll \varepsilon_F$ . Laat zien dat het aantal elektronen wat een hogere energie krijgt benaderd kan worden door  $\frac{1}{2}D(\varepsilon_F)k_B T$ , en dat daaruit volgt dat de soortelijke warmte  $C_V \propto D(\varepsilon_F)k_B^2 T$
  - f. Teken de energie  $\varepsilon$  als functie van toestandsdichtheid  $D(\varepsilon)$  voor de twee spinrichtingen van een vrije elektronenband, met 'spin-up' links van de y-as en 'spin-down' rechts van de y-as. Geef aan hoe beide subbanden verschuiven als een magnetenveld  $B$  wordt aangelegd wat evenwijdig staat aan 'spin-up'. Geef een benadering voor  $\Delta N = N_+ - N_-$ , het verschil in aantal elektronen met spin-up en spin-down. Bereken hiermee de magnetizatie  $M = \mu_e \Delta N$  en de susceptibiliteit  $\chi = \mu_0 M / B$ , waarbij  $\mu_e$  het spinmagnetisch moment van het electron is, en  $\mu_0$  de permeabiliteit van het vacuum.

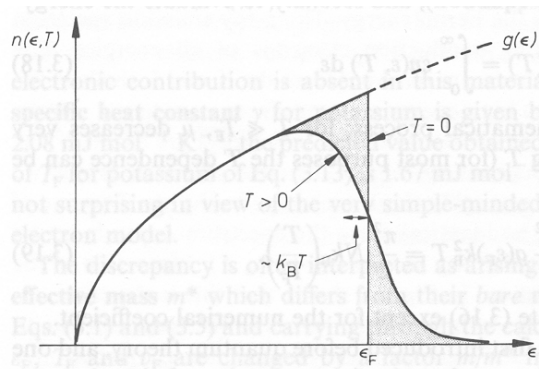


Fig. 1

2. Kristalbinding (3+5+5+3 = 16)

Een LiF kristal heeft de NaCl structuur (fcc met twee atoom basis). De Madelung constante voor de NaCl structuur  $\alpha = 1.747565$ . De wisselwerkingsenergie tussen de ionen  $i$  en  $j$  wordt beschreven met de uitdrukking

$$U_{ij} = \lambda \exp(-r_{ij} / \rho) \pm q^2 / 4\pi\epsilon_0 r_{ij}$$

waarbij  $r_{ij}$  de afstand tussen ion  $i$  en ion  $j$  is,  $\lambda = 4.93 \cdot 10^{-17} \text{ J}$ ,  $\rho = 0.0291 \text{ nm}$ .

- Bespeek de betekenis van de termen in de wisselwerkingsenergie
- Bereken (geef een uitdrukking voor) de afstand  $R_0$  tussen de ionen in evenwicht in het kristal.
- Bereken de totale rooster energie voor een kristal met  $2N$  ionen.
- Het resultaat wijkt iets af van de experimenteel gevonden cohesie energie bij  $T = 0$ . Bespreek welke aannames zijn gedaan en wat de invloed van die aannames kan zijn.

3. Fononen (3+5+4+5+5 = 22)

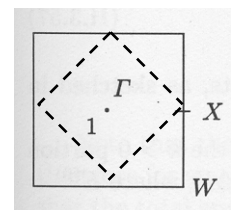
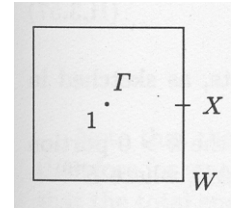
Beschouw een kristal met een uitgesproken gelaagde structuur, dwz bestaande uit atomen die heel sterk gebonden zijn in de twee dimensies in het vlak, maar zwak gebonden in de richting loodrecht op het vlak. Beschouw een opéénstapeling van  $N$  van deze vlakken met massa  $M$ , waarbij de koppeling wordt uitgedrukt in een veerconstante  $C$ . De gemiddelde afstand tussen de vlakken is  $a_0$ .

- Bespreek kwalitatief de roostertrillingen in zo'n gelaagd kristal, vanaf (zeer) lage temperatuur tot hoge temperatuur.
- Stel de bewegingsvergelijkingen voor het systeem op, en laat zien dat de dispersierelatie voor de trillingen gegeven wordt door  $M\omega^2(k) = 4C\sin^2(\frac{1}{2}ka_0)$ , waarbij  $\omega$  de hoekfrequentie en  $k$  het golfgetal is.
- Geef de mogelijke  $k$  - waarden voor het systeem onder gebruikmaking van de periodieke randvoorwaarde  $u_n = u_{n+N}$ , en maak een grafiek van de dispersierelatie. Bespreek het begrip eigentrilling (normal mode).
- Definieer de groepssnelheid en de fasesnelheid. Geef een uitdrukking voor de geluidssnelheid  $v_s$  voor het geval  $ka_0 \ll 1$ . Leg uit wat er met de groepssnelheid gebeurt als  $k \rightarrow \pi / a_0$  en wat de beweging van de atomen is als  $k = \pi / a_0$ .
- Bespreek de Debije benadering voor de toestandsdichtheid, en laat zien voor dit systeem dat de soortelijke warmte in de limiet van (zeer) lage temperatuur evenredig is met de temperatuur  $T$ .

4. Elektronenergiebanden (3+5+3+3+5 +5= 24)

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

- Leg kwalitatief uit wat de *tight binding* benadering betekent, en wanneer die gebruikt kan worden. Wat is de relatie tussen de energieband in de vaste stof en het atomaire niveau van het ‘oorspronkelijke’ electron? Wat betekenen A en B?
- Laat zien dat op een 2D vierkant rooster met roosterafstand  $a_0$  de energie gegeven wordt door  $E_k = -2E_0 (\cos k_x a_0 + \cos k_y a_0)$  onder verwaarlozing van de constante term.
- Laat zien dat voor het aantal electronen per atoom  $n \ll 1$  de bandstructuur parabolisch is en het Fermi-oppervlak een cirkel.
- Hiernaast is de eerste Brillouin Zone getekend. Teken daarin het Fermi-oppervlak voor  $n \ll 1$  en voor het geval dat de eerste Brillouin Zone vrijwel gevuld is ( $2 - n \ll 1$ ).
- Het punt  $k_x = k_y = 0$  in de eerste Brillouin Zone heet  $\Gamma$ . Bedenk bij welke  $k$ -waardes de zone-randen liggen. Teken een energie-band grafiek  $E(k)$  met  $E$  op de verticale as, en  $k$  langs het pad  $\Gamma$ - X - W -  $\Gamma$ , waarbij X op het midden van de ribbe ligt, en W op een hoekpunt. Geef in de grafiek de waardes voor  $(k_x, k_y)$  van  $\Gamma$ , X, W en gebruik correcte verhoudingen voor de afstanden langs de  $k$ -as.
- Stel dat de band wordt gevuld met 1 electron per atoom. Geef de fractie van het oppervlak van de Brillouin-zone dat gevulde toestanden bevat. Laat met behulp van de uitdrukking voor  $E_k$  zien dat de contour van het Fermi-oppervlak geven wordt door rechte (stippel-)lijnen zoals aangegeven in de figuur (ze komen uit de middens van de ribben). Gebruik hierbij het feit dat  $E_k$  spiegelsymmetrisch is om het midden van de band voor alle richtingen in de  $k$ -ruimte (zoals blijkt uit de grafiek van (e) voor bepaalde doorsnedes).



Constants :

electron charge $e$	$1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$	electron mass $m_e$	$9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Planck's constant $h$	$6.63 \times 10^{-34} \text{ J s}$	vacuum permeability $\mu_0$	$4\pi \times 10^{-7} \text{ NA}^{-2}$
Light velocity $c$	$3.0 \times 10^8 \text{ m/s}$	Boltzmann constante $k_B$	$1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$
Avogadro number N	$6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$	vacuum permittiviteit $\epsilon_0$	$10^7 / (4\pi c^2)$
Bohr magneton $\mu_B$	$9.27 \times 10^{-24} \text{ JT}^{-1}$		

$$2\cos ka = \exp(ika) + \exp(-ika)$$

$$1 - \cos ka = 2\sin^2(ka/2)$$