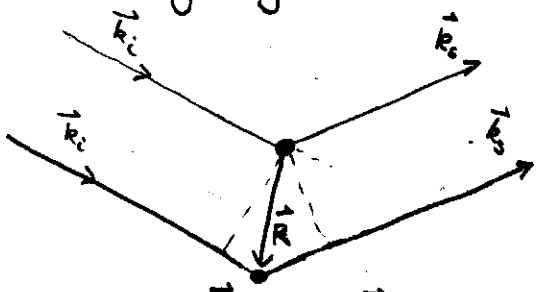
omskrives

FASTE STOFFER I Kont. 1986

Løsningsskisse

Oppgave 1

a) Konstruktiv interferens når alle veglengdeforskjeller, for spredning på ulike gitterpunkter, er et heltallig multiplum av bølgelengden $\lambda = 2\pi/k$ ($k = |\vec{k}_i| = |\vec{k}_s|$).



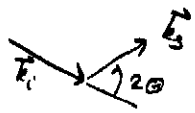
Veglengdeforskjell $= \frac{\vec{k}_i}{k}\vec{R} - \vec{R}\frac{\vec{k}_s}{k}$. Da $\vec{R} = (m_x\vec{e}_x + m_y\vec{e}_y + m_z\vec{e}_z)a$, med heltallige m_i, blir interferensbeviset

$$(\vec{k}_s - \vec{k}_i)\, a\,(m_x\vec{e}_x + m_y\vec{e}_y + m_z\vec{e}_z) = 2\pi \cdot \text{heltall}$$

for <u>alle</u> m_x, m_y, m_z. Det er bare tilfelle om $(\vec{k}_s - \vec{k}_i)_x = \frac{2\pi}{a}\cdot\hat{h}$, med $\hat{h}$ heltallig, etc, dvs

$$\underline{\vec{k}_s - \vec{k}_i = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{h}\vec{e}_x + \hat{k}\vec{e}_y + \hat{l}\vec{e}_z\right)}, \quad \hat{h}\,\hat{k},\hat{l} = \text{heltall}.$$

b) Kvadrering av overstående gir da $\vec{k}_i\vec{k}_s = k^2\cos 2\Theta$



$$2k^2(1-\cos 2\Theta) = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2(\hat{h}^2 + \hat{k}^2 + \hat{l}^2)$$

Vha $\cos 2\Theta = 1 - 2\sin^2\Theta$ og $k = 2\pi/\lambda$ blir dette

$$\underline{\sin^2\Theta = (\lambda/2a)^2(\hat{h}^2 + \hat{k}^2 + \hat{l}^2)}$$

c) Vi danner differensene $\sin^2\Theta_{i+1} - \sin^2\Theta_i$:

Linje nr. (i)	1	2	3	4
$\sin^2\Theta_{i+1} - \sin^2\Theta_i$	0.0146	0.0588	0.0437	0.0145

Den enkleste antagelsen er at minimalverdien tilsvarer en forskjell på 1 i heltallsfaktorene $N = \hat{h}^2 + \hat{k}^2 + \hat{l}^2$, altså $(\lambda/2a)^2 \approx 0.0145$

Benytter dette fås verdiene av

$$\hat{h}^2+\hat{k}^2+\hat{l}^2 = \left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2 \sin^2\Theta$$

for de enkelte linjer

Linje nr.	1	2	3	4	5
$\hat{h}^2+\hat{k}^2+\hat{l}^2$	2.99	4.05	8.05	11.07	12.07
$\hat{h}\hat{k}\hat{l}$	111	200	220	311	222
a	6.41 Å	6.40 Å	6.38 Å	6.38 Å	6.38 Å

Verdiene av $\hat{h}^2+\hat{k}^2+\hat{l}^2$ er nær heltallige så antagelsen er korrekt. Verdiene av $\hat{h}\hat{k}\hat{l}$ blir, på permutasjoner nær, som angitt i linjen nederst. Med disse verdiene og den oppgitte verdi $\lambda = 1.542$ Å fås verdiene for a som angitt på nederste linje. Altså

$$\underline{a \approx 6.38 \text{ Å}}$$

d) Når enhetscella ikke er primitiv, vil en få utslukninger av visse refleksjer fordi de identiske elementene innen enhetscella kan gi spredningsbidrag med samme amplitude, men med fase som gir fullstendig destruktiv interferens.

Oppgave 2

a) Den enkle klassiske Halleffekt er at et magnetfelt som påtrykkes en strømleder gir opphav til et potensial tilsvarende et elektrisk felt normalt på magnetfeltet og på strømretning.

I stasjonær tilstand er Lorentzkrafta i y-retning lik null, dvs

$$F_y = -e\,\mathcal{E}_y + e v_x B_z = 0 \quad \text{dvs} \quad \mathcal{E}_y = v_x B_z$$

Her er partikkelhastigheten og strømtettheten proporsjonale:

$$j_x = -e\, n_- v_x \,.$$

Hallkoeffisienten blir

$$R = \frac{\mathcal{E}_y}{j_x B_z} = \frac{v_x B_z}{-e\, n_- v_x B_z} = \underline{\underline{-\frac{1}{e\, n_-}}}$$

b) Her er $j_x = \dfrac{10^{-2}}{5\cdot 10^{-3}\cdot 10^{-3}} = 2000 \text{ A m}^{-2}$

$$|E_y| = \frac{0.004}{0.005} = 0.8 \text{ V m}^{-1}$$

$$e = 1.6\cdot 10^{-19} \text{ C}$$

slik at

$$n_- = \frac{j_x \cdot B_z}{e\,|\mathcal{E}_y|} = \frac{2000\cdot 0.6}{1.6\cdot 10^{-19}\cdot 0.8} \text{ m}^{-3} = \frac{15}{16}\, 10^{22} \text{ m}^{-3}$$

$$= \underline{\underline{0.94\ 10^{22} \text{ m}^{-3}}}$$

c) Når mobilitetene $\mu_\pm$ regnes positive fås

$$j_x = (n_+ e \mu_+ + n_- e \mu_-)\,\mathcal{E}_x$$

$$j_y = n_+ e \mu_+ \left[\mathcal{E}_y - (\mu_+ \mathcal{E}_x) B_z\right] + n_- e \mu_- \left[\mathcal{E}_y + (\mu_- \mathcal{E}_x) B_z\right]$$

$j_y = 0$ gir $\mathcal{E}_y = \mathcal{E}_x B_z \,(\mu_+^2 n_+ - \mu_-^2 n_-)/(n_+\mu_+ + n_-\mu_-)$

og $$R = \frac{\mathcal{E}_y}{B_z j_x} = \underline{\underline{\frac{\mu_+^2 n_+ - \mu_-^2 n_-}{e(\mu_+ n_+ + \mu_- n_-)^2}}}$$

d) se tilslutt

Oppgave 3

a) 3 akustiske , 3p − 3 optiske

b) Harmonisk bølge $\vec{u}(\vec{R}) = \vec{u}\, e^{i\vec{k}\vec{R} - i\omega t}$. Periodiske grense-betingelser $\vec{u}(\vec{R} + \vec{a}_j N_j) = \vec{u}(\vec{R}) \Rightarrow \boxed{e^{i\vec{k}\vec{a}_j N_j} = 1}$, $j = 1,2,3$.

Da enhetsvektorene $\vec{b}_j$ i det resiproke gitter oppfyller $\vec{a}_i \vec{b}_j = 2\pi\, \delta_{ij}$ så er løsningen av den innrammede likninga

$$\underline{\vec{k} = \frac{m_1}{N_1}\vec{b}_1 + \frac{m_2}{N_2}\vec{b}_2 + \frac{m_3}{N_3}\vec{b}_3}$$, med m_i = vilkårlige heltall.

Når $\vec{k}$ skal ligge i 1 BZ tar ~~tar~~ m_i N_i ulike verdier. I alt blir det da $N = N_1 N_2 N_3$ ulike tillatte $\vec{k}$ verdier i 1 BZ , altså like mange som det er enhetsceller i det opprinnelige gitteret.

Nå er volumet av 1. BZ lik $\dfrac{8\pi^3}{\text{cellevol. i Bravaisgitteret}} = \dfrac{8\pi^3}{V/N}$.

Modelettheten er derfor

$$\underline{\underline{\frac{N}{8\pi^3 N/V} = \frac{V}{(2\pi)^3}}}$$

c)

$$U(T) = \int_0^\infty g(\omega)\, d\omega \quad \hbar\omega \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

Ny variabel $x = \hbar\omega / k_B T \Rightarrow$

$$U(T) = k_B^2 T^2 \hbar^{-1} \int_0^\infty g\left(\frac{k_B T}{\hbar} x\right) dx \; \frac{x}{e^x - 1}$$

For lave T ser vi at vi trenger g bare for lave frekvenser, dvs de akustiske modene. Tilnærmet hver av de 3 akustiske modene er $g(\omega) \simeq c_i \omega^2$ for små ω, med $c_i = V/2\pi^2 v_i^3$. Bevis: For lave ω er de akustiske grenene lineære , $\omega = v_i k$, v_i = lydhastighet. Modelettheten $V(2\pi)^{-3}$ i k-rommet gir modetetthet $V(2\pi)^{-3} v_i^{-3}$ i $\vec{\omega}$-rommet ($\vec{\omega} = v_i \vec{k}$). Antall moder i $(\omega, \omega + d\omega)$ er $4\pi\omega^2 d\omega \cdot V(2\pi)^{-3} v_i^{-3} = \dfrac{\omega^2 V}{2\pi^2 v_i^3}$ qed.

Innsatt i U fås

$$U = \sum_{i=1}^{3} k_B^4 T^4 \hbar^{-3} \frac{V}{2\pi^2 v_i^3} \underbrace{\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}}_{\pi^4/15}$$

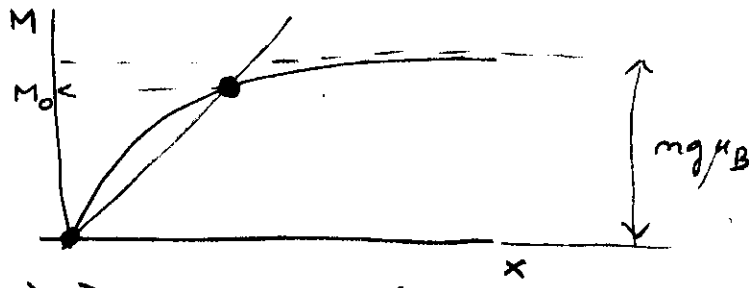
Varmekapasiteten:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = \frac{2\pi^2}{15} k_B V \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \sum_{i=1}^{3} v_i^{-3}$$

Oppgave 4

a) Med $\boxed{x = \frac{g\mu_B}{k_B T}\lambda M \quad M = ng\mu_B \tanh x}$ er likningen for $B=0$:

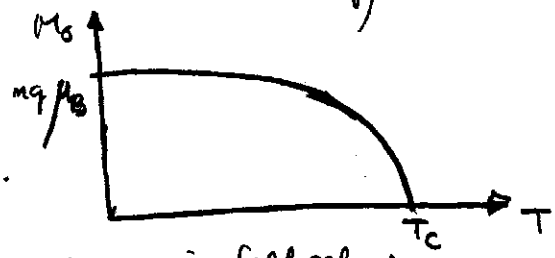
De to innrammede likninger er to likninger mellom M og x:



Når $k_B T / g\mu_B \lambda \geq ng\mu_B$ (stigningene i origo) får vi bare $M=0$ som løsning. Den kritiske verdien er derfor

$$k_B T_c = ng^2\mu_B^2 \lambda = \sum_{\vec{r}} J(\vec{r}).$$

Den spontane magnetisering M_0 har verdien 0 ved T_c og øker til verdien $ng\mu_B$ ved $T=0$, dvs. full innretning av alle spinn i feltretning.



b) For overkritiske temperaturer er M liten når B er er liten og $\tanh[\ ] \approx [\ ]$ dvs:

$$M \approx ng\mu_B \frac{g\mu_B}{k_B T}(B + \lambda M), \text{ dvs}$$

$$M = \frac{ng^2\mu_B}{k_B T} B \Big/ \left(1 - \frac{ng^2\mu_B^2\lambda}{k_B T}\right)$$

Susceptibiliteten:

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T = \frac{n g \mu_B}{k_B} \frac{1}{T - n g^2 \mu_B^2 \lambda / k_B}$$

eller vha uttrykket for T_c:

$$\chi = \frac{n g \mu_B}{k_B} \frac{1}{T - T_c}$$

Vi ser at χ divergerer ved $T = T_c$, som ventet.

Oppgave 2

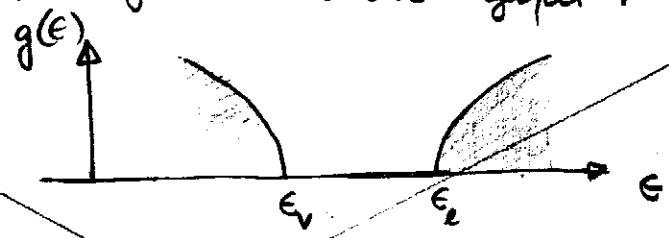
a) Eksperimentelt: (i) elektrisk ledningsevne << metallers, men større enn isolatorers
(ii) el. ledningsevne øker med temperaturen

Båndstruktur: Gap mellom fylte og tomme bånd ved $T=0$
Gap $\lesssim 2.5$ eV ved romtemp., ellers isolator

Intrinsikk: Elektrisk strøm skyldes i hovedsak termisk eksiterte ladningsbærere

Ekstrinsikk: Ladningsbærerne kommer i hovedsak fra doping.

b) Nivåtettheten er symmetrisk om gapet:



Antall elektroner i et energiintervall $d\epsilon$ er

$$g(\epsilon)\, d\epsilon \cdot f(\epsilon),$$

der

$$f(\epsilon) = \frac{1}{1 + e^{(\epsilon - \mu)/k_B T}}.$$

Fordi alle elektroner som eksiteres til ledningsbåndet kommer fra valensbåndet må også f være symmetrisk: