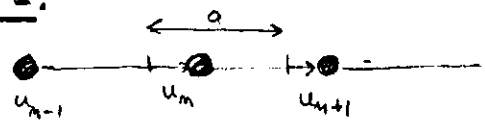
Løsningsskisse

FASTE STOFFERS FYSIKK I

30. mai 1987

Oppgave 1.

a)



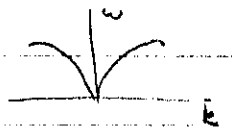
Kraft fra atom nr. $m\pm1$ er $\alpha(u_{m\pm1}-u_m)$, og Newtons bevegelseslikning blir

$$m\ddot{u}_m = \alpha(u_{m+1}-u_m) + \alpha(u_{m-1}-u_m) \quad , \quad \forall m$$

Innsetting av en harmonisk bølge, $u_m \propto e^{ikma-i\omega t}$ gir

$$-m\omega^2 = \alpha\left(e^{ika}-1+e^{-ika}-1\right) = \alpha\left(e^{ika/2}-e^{-ika/2}\right)^2$$
$$= -\alpha\, 4\sin^2\frac{ka}{2}$$

$$\underline{\omega = \sqrt{4\frac{\alpha}{m}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|}$$



Da $k+2\pi/a$ og k gir samme bølge kan vi nøye oss med $|k|<\pi/a$.

Gruppehastigheten blir

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \underline{\underline{\pm\, a\sqrt{\frac{\alpha}{m}}\cos\frac{ka}{2}}}$$

b) Ovenstående svingelikning kan skrives, med $x=na$:

$$m\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(x,t) = \alpha\left[u(x+a,t)+u(x-a,t)-2u(x,t)\right]$$

For makroskopiske svingefenomener kan x regnes kontinuerlig og a som en liten avstand. Utvikling i a til annen orden:

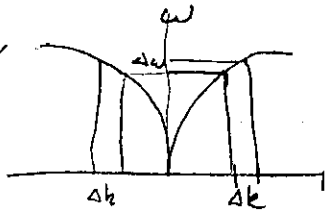
$$u(x\pm a,t) = u(x,t) + a\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + \dots ,$$

gir ved innsetting

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\alpha a^2}{m}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dots\right] \quad \text{eller} \quad \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

der $c = a\sqrt{\frac{\alpha}{m}}$ presis er langbølgegrensen av v_g, som rett og rimelig er.

c) Periodiske grensebetingelser, $u_{n+N} = u_n$, gir $k = \frac{2\pi}{Na} \cdot$ heltall for de harmoniske løsningene. Antall egensvingninger i Δk er $(Na/2\pi)\Delta k$. Da $\Delta\omega = |\partial\omega/\partial k|\,\Delta k = |v_g|\,\Delta k$, og 2 Δk-intervall gir samme $\Delta\omega$ intervall blir antall egensvingninger i $\Delta\omega$ lik

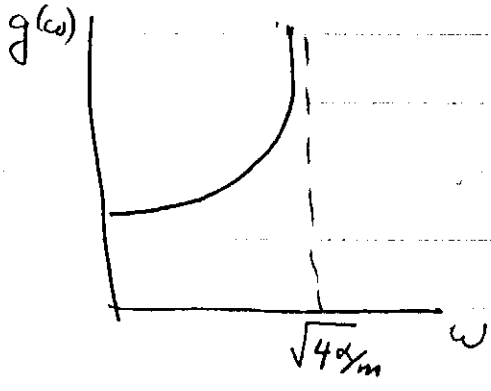


$$2 \cdot \frac{Na}{2\pi} \cdot \frac{\Delta\omega}{|v_g|} = \frac{N}{\pi} \cdot \frac{\Delta\omega}{\sqrt{\frac{\alpha}{m}}\cos\frac{ka}{2}}$$

$$= \frac{2N}{\pi}\,\frac{\Delta\omega}{\sqrt{4\frac{\alpha}{m} - \omega^2}} = g(\omega)\,\Delta\omega,$$

med frekvensfordelingen

$$g(\omega) = \begin{cases} \dfrac{2N/\pi}{\sqrt{4\alpha m^{-1} - \omega^2}} & \omega < \sqrt{4\alpha/m} \\ 0 & \omega > \sqrt{4\alpha/m} \end{cases}$$



Oppgave 2

a) Et Bravaisgitter er et romlig mønster av punkter, der mønsteret ser identisk ut fra ethvert punkt.

eller

Et Bravaisgitter i d dimensjoner er alle punktene $\vec{R}$ av formen

$$\vec{R} = \sum_{i=1}^{d} \vec{a}_i n_i ,$$

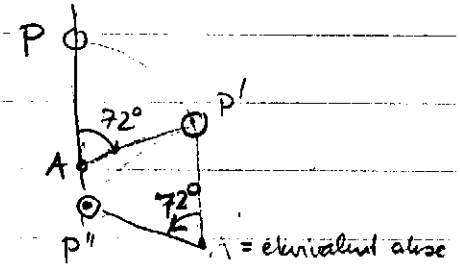
der $\vec{a}_1 .. \vec{a}_d$ er d uavhengige vektorer og der n_i løper gjennom alle heltall.

eller noe slikt

En primitiv enhetscelle er et volum som fyller hele rommet uten overlapping når det translateres med alle gittervektorer $\vec{R}$ i et Bravaisgitter.

Det resiproke gitter til et gitt Bravais-gitter er settet av alle bølgevektorer $\vec{K}$ som gir planbølger $e^{i\vec{K}\vec{r}}$ med Bravaisgitterets periodisitet. $\Rightarrow$ $e^{i\vec{K}\vec{R}} = 1$ for alle $\vec{R} \in$ Bravaisgitteret.

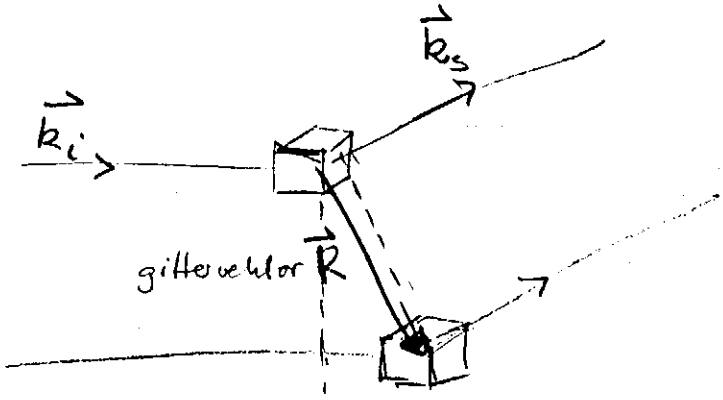
b) Et Bravaisgitter kan ikke ha en 5-tallig rotasjonsakse. Bevis: La A være aksen og P det nærmeste gitterpunkt.



Rotasjon (−72°) om A og rotasjon +72° om en ekvivalent akse A' gir at det må være et gitterpunkt i P'' i avstand fra A lik

$AP\,(1 - 2\cos 72°) < AP$, imot forutsetningen om at P var det nærmeste gitterpunkt. Motsigelse, dvs en 5-tallige akse A eksisterer ikke. (andre bevismåter er mulige)

c)



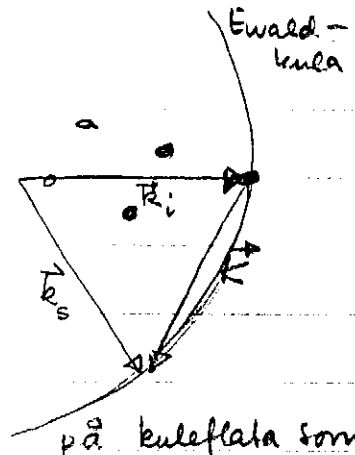
Konstruktiv interferens når gangvegforskjellen $\vec{R}\frac{\vec{k}_s}{k_s} - \vec{R}\frac{\vec{k}_i}{k_i}$ er et helt antall bølgelengder λ. For elastisk spredning er $k_s = k_i = 2\pi/\lambda$:

$$\vec{R}(\vec{k}_s - \vec{k}_i) = 2\pi \cdot \text{heltall} \quad \text{eller}$$

$$e^{i\vec{R}(\vec{k}_s - \vec{k}_i)} = 1$$

Dette skal holde for alle gittervektorer $\vec{R}$. Men dette er definisjonen på forrige side av <u>resiproke</u> gittervektorer $\vec{K}$. Dvs

$$\underline{\vec{k}_s - \vec{k}_i = \vec{K}}.$$



d) Når $\vec{k}_i$ ender med spissen på et punkt i det resiproke gitter sier interferensbetingelsen at interferens er betinget av at et annet gitterpunkt ligger på kuleflata som har $\vec{k}_i$ som en radius vektor. Det er normalt ikke tilfelle, men en kan få det til ved

<u>a)</u> å bruke polykromatisk stråling med et kontinuum av bølgelengder, dvs et kontinuum av ovennevnte Ewaldkuleflater som normalt omfatter noen resiproke gitterpunkter.

<u>b)</u> å dreie krystallen, og dermed det resiproke gitter,

til skjæringer med Ewald kuleflata.

c) å benytte et polykrystallinsk materiale med statistisk fordelte orienteringer, dvs en så godt som kontinuerlig fordeling av det reciproke gitters orientering. Dermed kan interferensbetingelsen oppfylles.

Oppgave 3

Med frielektronnivåtetthet, $g(\epsilon) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}(\epsilon-\epsilon_0)^{1/2}$, blir antall ledningselektroner

$$N = \int_{\epsilon_0}^{\epsilon_0+\Delta\epsilon} g(\epsilon)\,d\epsilon = \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\Delta\epsilon\right)^{3/2},$$

dvs

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\Delta\epsilon}\left(3\pi^2 N/V\right)^{2/3}$$

Tettheten var oppgitt

$$n = 2/a^3, \quad \text{dvs}$$

$$\underline{\underline{m^* = \frac{\hbar^2}{2\Delta\epsilon a^2}\left(3\pi^2\right)^{2/3}}}$$

Tallverdier

$$\hbar = \frac{1}{2\pi}\cdot 6.626\ 10^{-34}\ \text{Js}$$

$$\Delta\epsilon = 3.0\ \text{eV} = 3\cdot 1.602\ 10^{-19}\ \text{J}$$

$$a = 4.25\cdot 10^{-10}\ \text{m}$$

gir

$$m^* = \underline{\underline{9.73\cdot 10^{-31}\ \text{kg}}} \qquad (1.07 \text{ elektronmasse})$$

Kommentar: Da $k_B T \simeq 0.025$ eV ved romtemperatur er temperatureffekter uviktige.

Oppgave 4

a) Antall elektroner i ledningsbandet er $\int_{\epsilon_\ell}^{\infty} g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$ der $g(\epsilon)$ er nivåtettheten og $f(\epsilon)$ Fermifordelingen. Antallstettheten fås ved å dividere med V. Innsatt

$$n = \int_{\epsilon_\ell}^{\infty} \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_\ell}{\hbar^2}\right)^{3/2}(\epsilon-\epsilon_\ell)^{\frac{1}{2}} \frac{d\epsilon}{e^{\frac{\epsilon-\mu}{k_BT}}+1}$$

Vi integrerer til ∞ uten problemer fordi $f(\epsilon)$ faller så raskt av med ϵ at øvre grense er uviktig. Nå f er liten kan 1-tallet i nevneren skøyfes og vi får

$$n \simeq \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_\ell}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_{\epsilon_\ell}^{\infty} (\epsilon-\epsilon_\ell)^{1/2} e^{-(\epsilon-\mu)/k_BT} d\epsilon$$

$$= \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_\ell}{\hbar^2}\right)^{3/2} e^{(\mu-\epsilon_\ell)/k_BT} \cdot (k_BT)^{3/2} \int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-x} dx$$

ved $\epsilon = \epsilon_\ell + k_BT\,x$. Integralet er $\sqrt{\pi}/2$:

$$n \simeq \frac{1}{4}\left(\frac{2m_\ell k_BT}{\hbar^2\pi}\right)^{3/2} e^{(\mu-\epsilon_\ell)/k_BT} = \underline{\underline{n_c e^{(\mu-\epsilon_\ell)/k_B}}}$$

med $n_c = \frac{1}{4}\left(\frac{2m_\ell k_BT}{\pi\hbar^2}\right)^{3/2} = 2\left(\frac{m_\ell k_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}$.

b) Ved $T=0$ er systemet i grunntilstanden med fylte donornivåer og tomme ledningsbånd. Dvs:

$$\underline{\underline{\epsilon_d < \mu(0) < \epsilon_\ell}}$$

Ladningsbalansen $\underline{\underline{n}} = n_d + p = \underline{\underline{n_d}}$ nå

c) Den eksplisitte form av siste likning er

$$n_c e^{(\mu-\epsilon_\ell)/k_BT} = \frac{N_d}{1+2e^{(\mu-\epsilon_d)/k_BT}}$$

eller med $e^{(\mu-\epsilon_d)/k_BT} \equiv x$:

$$(1+2x)\, n_c\, x\, e^{(\epsilon_d-\epsilon_\ell)/k_BT} = N_d$$

$$x^2 + \tfrac{1}{2}x \doteq \frac{N_d}{2n_c} e^{(\epsilon_\ell-\epsilon_d)/k_BT}$$

$$\left(x+\tfrac{1}{4}\right)^2 - \tfrac{1}{16}$$

$$x = -\tfrac{1}{4} \mp \sqrt{\tfrac{1}{16} + \frac{N_d}{2n_c} e^{(\epsilon_\ell-\epsilon_d)/k_BT}}$$

$$\mu = \epsilon_d + k_BT \ln x = \underline{\epsilon_d + k_BT \ln\left[\tfrac{1}{4}\sqrt{1+\frac{8N_d}{n_c(T)} e^{(\epsilon_\ell-\epsilon_d)/k_BT}} - \tfrac{1}{4}\right]}$$

For små T dominerer leddet $\frac{8N_d}{n_c} e^{(\epsilon_\ell-\epsilon_d)/k_BT}$

$$\mu \approx \epsilon_d + \tfrac{1}{2}k_BT \ln \frac{8N_d}{n_c} e^{(\epsilon_\ell-\epsilon_d)/2k_BT}$$

$$= \epsilon_d + \frac{\epsilon_\ell-\epsilon_d}{2} + \tfrac{1}{2}k_BT \ln\left[8N_d/n_c(T)\right]$$

I siste ledd er $n_c \sim T^{3/2}$, og $\lim_{T\to 0} T \ln T$ brukes til å gi

$$\underline{\mu(0) = \frac{\epsilon_d+\epsilon_\ell}{2}}$$, midt mellom!

d) Innsetting for x i uttrykket

$$n = n_d = \frac{N_d}{1+2x}$$

gir

$$n = \frac{N_d}{1-\frac{1}{2}+2\sqrt{\frac{1}{16}+\frac{N_d}{2n_c}e^{(\epsilon_\ell-\epsilon_d)/k_BT}}} = \underline{\underline{\frac{2N_d}{1+\sqrt{1+\frac{8N_d}{n_c}e^{(\epsilon_\ell-\epsilon_d)/k_BT}}}}}$$

e) Ved å ta faktoren $e^{(\epsilon_\ell - \epsilon_d)/2k_BT}\sqrt{\frac{N_d}{2n_c(T)}}$ ut av logaritmen i uttrykket for $\mu(T)$, pkt c, fås

$$\mu = \tfrac{1}{2}(\epsilon_\ell + \epsilon_d) + \frac{k_BT}{2}\ln\frac{N_d}{2n_c(T)} +$$
$$k_BT\cdot\ln\left[\sqrt{1+\frac{n_c}{8N_d}e^{-(\epsilon_\ell-\epsilon_d)/k_BT}} - \sqrt{\frac{n_c}{8N_d}}\,e^{-(\epsilon_\ell-\epsilon_d)/2k_BT}\right]$$

Siste ledd er eksponensielt lite, faktoren $n_c \propto T^{3/2}$ hjelper bare på. Så lavtemperatur-uttrykket kan tas som

$$\mu(T) = \frac{\epsilon_\ell+\epsilon_d}{2} + \frac{k_BT}{2}\ln\frac{N_d}{2n_c(T)}, \quad \text{der } n_c \equiv 2\left(\frac{m_\ell k_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

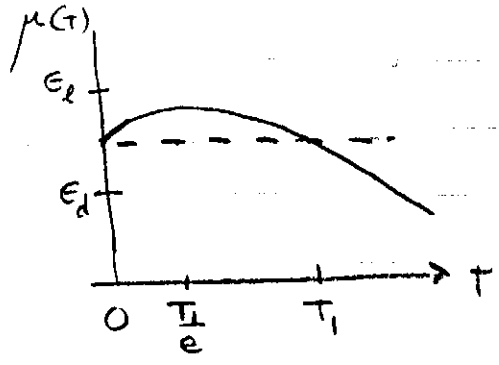
Vi ser at når $n_c(T_1) = \frac{1}{2}N_d$ er $\mu(T_1) = \mu(0)$. Dette skjer for

$$\underline{\underline{T_1 = \frac{2\pi\hbar^2}{m_\ell k_B}\left(\frac{N_d}{4}\right)^{2/3}}}.$$

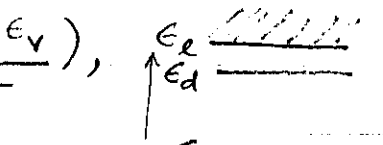
Ved å innføre denne istedetfor konstantene i lavtemperaturuttrykket fås

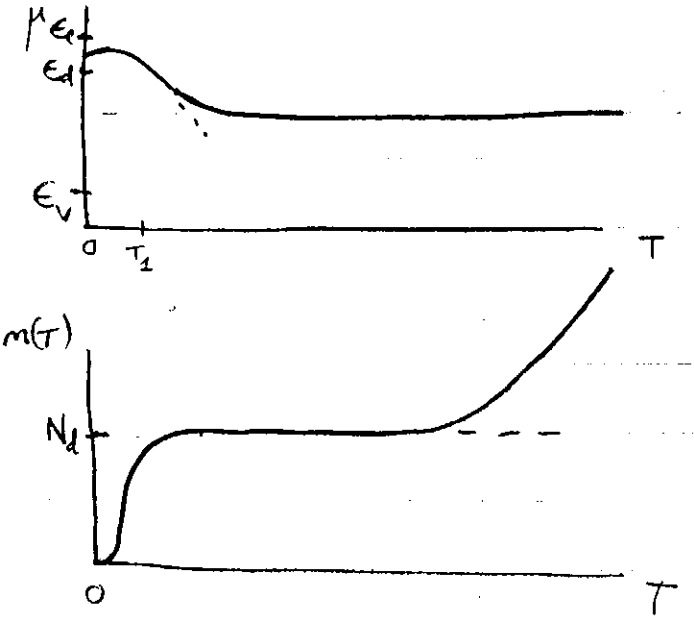
$$\mu(T) = \frac{\epsilon_\ell+\epsilon_d}{2} + \frac{3k_BT}{4}\ln\frac{T_1}{T}.$$

Vi ser at for $0<T<T_1$ er $\mu(T)>\mu(0)$, for $T>T_1$ er $\mu(T)<\mu(0)$. Altså har $\mu(T)$ et maksimum i $(0,T_1)$. (Ved å derivere ser en at maksimaet inntres for T_1/e, og ligger $\frac{3}{4}k_BT_1$ over $\mu(0)$. Men det var det ikke spurt om.)



f) Når T øker kan en etter en stund ikke neglisjere termisk eksitasjon fra valensbandet, og når majoriteten av elektronene i ledningsbandet kommer fra valensbandet er halvlederen <u>intrinsikk</u>.
Vi vet fra forelesningene at under rent intrinsikke forhold vil μ være nær midten av energigapet $\left(\frac{\epsilon_c+\epsilon_v}{2}\right)$, og det er klart at $n(T)$ bare øker med T. Skissert:





Röd kurve er det som uttrykkene i oppgavens pkt c) & d) gir, blyantkurven skisserer forløpet når halvlederen nærmer seg rent intrinsikke forhold.