

74431 Første stoffets fysikk 1

Lørdag 7 juni 1997

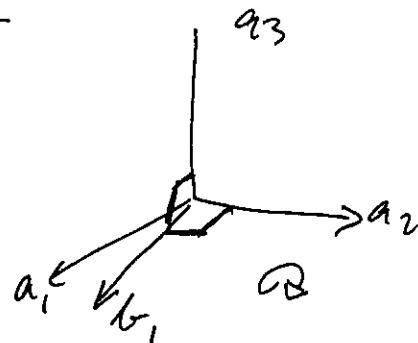
(1)

LØSNINGSFORSLAG

Oppgave 1.

a)  $b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot a_2 \times a_3}$

$b_1 \perp a_2 \text{ og } a_3$



b) Yngre ekvivalente krysstallografiske posisjoner, d.v.s. primitivt gitter med basis el.  $S_2 T_1 O_3$  m.m.d.

c) For kubiske materialer gjelder  $\frac{l_1}{a} : \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$  og  $0 : \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$  m.m.d.  $d_{hkl} \cdot R = 2L = \text{konstant}$ .

R. og R<sub>2</sub> oppgitt samt  $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$

d.v.s.  $\left(\frac{R_2}{R_1}\right)^2 \left(\frac{13.3}{10.9}\right)^2 = 1.49 = \frac{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}$

Prøvning av feilang. gitt  $\frac{1^2 + 1^2 + 1^2}{1^2 + 1^2} = 1.5 \approx 1.49$

$(h_1, k_1, l_1) = (\bar{1}10)$  og  $(h_2, k_2, l_2) = (111)$

T for å få ortogonale vektorer.

Konsistent midlerværing: 111 → 021

$d_{021} = \frac{3.905}{\sqrt{5}} = 1.75 \text{ \AA}$

$e^{-i G \cdot r_s} = e^{-2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)}$

der  $G = h b_1 + k b_2 + l b_3$  og  $r_s = x_j a + y_j b + z_j c$

d)

$\delta$  (forts.)

Summerer over basis (de oppgitte posisjoner)

$$\underline{S(hkl) = f_{Sn} + f_{Ti} e^{-\frac{\pi}{\lambda} n(h+k+l)} + f_0 \left( e^{\frac{-\pi i(h+k)}{\lambda}} + e^{\frac{-\pi i(h+l)}{\lambda}} + e^{\frac{-\pi i(k+l)}{\lambda}} \right)}$$

Angen utslutninger (primitivt gitter)

Systematisk støtte:  $f_{Sn} + f_{Ti} + 3f_0$  for  $hkl$  alle av typen  $2n, n$  heltall

Svæk  $f_{Sn} - f_{Ti} - f_0$  2 partall, 1 oddel

Middels  $f_{Sn} + f_{Ti} - f_0$  1 partall, 2 oddel

Middels  $f_{Sn} - f_{Ti} + 3f_0$  alle oddel

(Atomform faktoren gir ved rute i vinkler  $\vec{x} \times \vec{Z}$ )

( $Z_{Sn} = 38, Z_{Ti} = 22, Z_0 = 8$ ) for rutegevinst  
(dette ved stid. ikke  $\uparrow$ )

## Oppgave 2

- a) Som navnet antyder har som regel en halvleder lav elektrisk ledningsevne sammenliknet med et metall. Temperaturavhengigheten av ledningsevnen gir et klart kjennetegn:  $J$  motsetning til metaller så øker ledningsevnen for halvledere med økende temperatur, for rene halvledere som  $e^{-E_g/2k_B T}$ .

En halvleder og en isolator har begge et bandgap i de tillatte energier for elektronene (i motsetning til et metall). Er bandgapet mindre enn ca 2 eV er det en halvleder.

Dersom majoriteten av ladningsbærerne, som bidrar til ledningsevnen skyldes tilstedsvarelse av fremmedatomer (dopet halvleder) kalles halvlederen ekstrinsisk; dersom de fleste skyldes termisk eksitasjon over bandgapet kalles halvlederen intrinsisk.

- b) Antall ledningselektroner er gitt ved

$$N_e = \int_{E_c}^{\infty} g_c(E) f(E) dE,$$

der  $g_c(E)$  er tilstandstettheten i ledningsbandet og  $f(E)$  er fermifordelingen. Tilstandstettheten er som for fri partikkel med masse  $m_e$ :

$$g_c(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2}$$

Det gir elektronkonsentrasjonen

$$n_e = \frac{N_e}{V} = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_c}^{\infty} \frac{(E-E_c)^{1/2}}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1} dE$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} (k_B T)^{-3/2} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{e^{x+(E_c-\mu)/k_B T} + 1}$$

veda  $E = E_c + x \cdot k_B T$ .

Når  $E_c - \mu \gg k_B T$  kan 1-tallet i nevneren sløyfes, og vi får

$$n_e = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} e^{(\mu-E_c)/k_B T} \cdot \underbrace{\int_0^{\infty} x^{1/2} dx e^{-x}}_{\sqrt{\pi}/2}$$

$$n_e = \underline{2 \left( \frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{(\mu-E_c)/k_B T}}$$

som skulle vises.

For hull, som er fravær av elektroner i valensbandet, må vi bruke

$$n_h = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{\hat{E}_v} g_v(E) [1 - f(E)] dE$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_h}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\hat{E}_v} \frac{(\hat{E}_v - E)^{1/2} dE}{1 + e^{(\mu-E)/k_B T}}$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_h k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{1 + e^{x+(\mu-\hat{E}_v)/k_B T}}$$

og når  $\mu - E_v \gg k_B T$ :

$$\underline{n_h = 2 \left( \frac{m_h k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{(\hat{E}_v - \mu)/k_B T}}$$

c) For en udøpt halvleder krever elektrisk nøytralitet at

$$m_e = m_h$$

Innsetting fra b) gir

$$m_e^{3/2} e^{(\mu - E_c)/k_B T} = m_h^{3/2} e^{(E_v - \mu) k_B T}$$

eller

$$e^{(2\mu - E_c - E_v)/k_B T} = \left(\frac{m_h}{m_e}\right)^{3/2}$$

$$\mu = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{3}{4} k_B T \ln \frac{m_h}{m_e}$$

Ved å multiplisere  $m_e$  og  $m_h$  faller  $\mu$  bort:

$$m_e \cdot m_h = 4 (m_e m_h)^{3/2} \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2}\right)^3 e^{-E_g/k_B T}$$

og med  $m_e = m_h$  fås

$$m_e^i = 2 (m_e m_h)^{3/4} \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2}\right)^{3/2} e^{-E_g/2k_B T}$$

d) Relasjonen

$$m_e \cdot m_h = (m_e^i)^2$$

gjelder også for dopede halvledere når bare forutsetningen om at  $\mu$  ligger et stikkje fra bandkantene gjelder. Her var det slik svak doping. Elektrisk nøytralitet blir nå

$$m_e = m_h + m_d. \quad \text{Disse tolkningene gir}$$

$$m_e \cdot (m_b - m_d) = m_e^{i^2},$$

med løsning

$$\underline{m_e = \frac{m_d}{2} + \sqrt{m_e^{i^2} + \frac{1}{4} m_d^2}}$$

e) Coulombtiltrekningen til  $A^{+}$  er som for et hydrogenatom. For et estimat antar vi at virkningen av det periodiske potensialet kan representeres gjennom den effektive massen  $m_e$  og dielektrisk konstanten  $\epsilon_r \epsilon_0$ .

Da Coulombenergiene er  $\propto m$  og  $\propto \epsilon^{-2}$  får vi estimatet

$$E_{\text{binding}} \approx \frac{m_e}{m_0} \cdot \frac{1}{\epsilon_r^2} \cdot 13.6 \text{ eV} \approx 0.1 \cdot \frac{1}{16^2} \cdot 13.6 \text{ eV}$$

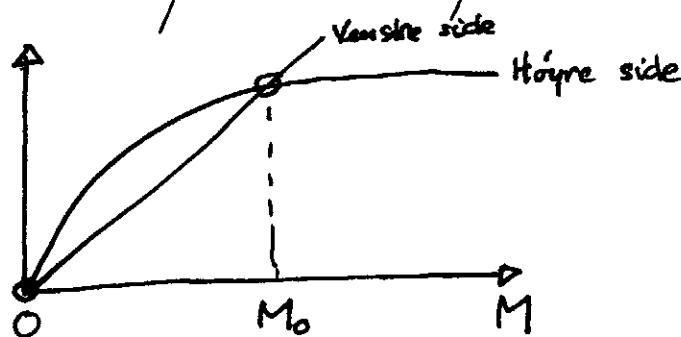
dvs

$$E_{\text{binding}} \approx \underline{\underline{9 \text{ meV}}}$$

### Oppgave 3

a) For  $B=0$  er middelfeltlikningen

$$M = N \mu \tanh(\mu \lambda M / k_B T)$$

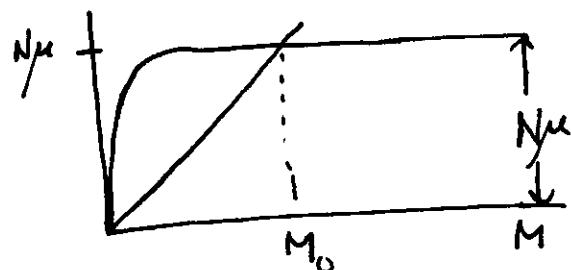


For små  $M$  er  $N \mu \tanh(\mu \lambda M / k_B T) \approx (N \mu^2 \lambda / k_B T) M$  da  $\tanh x \approx x$  for små  $x$ .

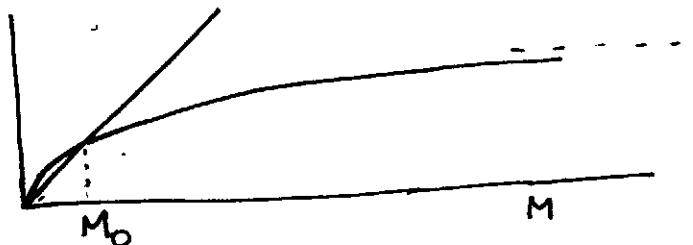
Som figuren viser får vi en løsning  $M_0 \neq 0$  når  $N\mu^2/\lambda k_B T > 1$ , i motsatt fall får vi bare  $M = 0$  som løsning. Den kritiske temperatur er altså

$$\underline{\underline{T_c = N\mu^2 \lambda / k_B}}$$

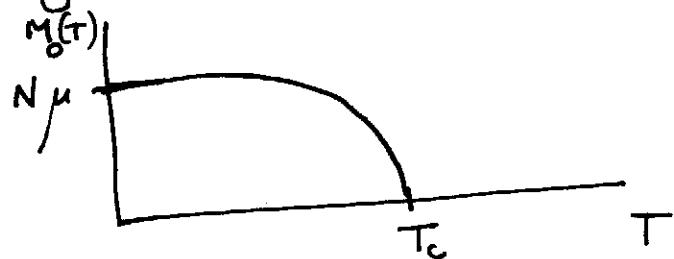
- b) Av konstruksjonen i figuren ser vi at for lave  $T$  vil  $M_0 \approx N\mu$  da tanh  $x \approx 1$  for  $x$  stor:



og for  $T$  nær  $T_c$  vil  $M_0$  være liten:



Så kvalitativt vil  $M_0$ , den spontane magnetisering, variere slik:



c) Ved derivasjon av  $M = N\mu \tanh[(\mu B + \mu\lambda M)/k_B T]$   
 mhp B fås

$$\left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T = N\mu \left[1 + \tanh^2 \left\{(\mu B + \mu\lambda M)/k_B T\right\}\right] \cdot \frac{\mu}{k_B T} \left[1 + \lambda \left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T\right]$$

For overkritiske temperaturer og  $B \rightarrow 0$  vil  $M \rightarrow 0$   
 (ingen spontan magnetisering). Dvs

$$\left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T = \frac{N\mu^2}{k_B T} \left[1 + \lambda \left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T\right] \quad \text{eller}$$

$$\chi \left[1 - \frac{N\mu^2 \lambda}{k_B T}\right] = \frac{N\mu^2}{k_B T} \cdot \mu_B$$

eller

$$\chi = \frac{N\mu^2 \mu_B / k_B}{T - \frac{N\mu^2 \lambda}{k_B}} = \underline{\mu_B}^{-1} \underline{\frac{T_c}{T - T_c}}$$

Susceptibiliteten divergeres ved  $T = T_c$ ,  
 som ventet.