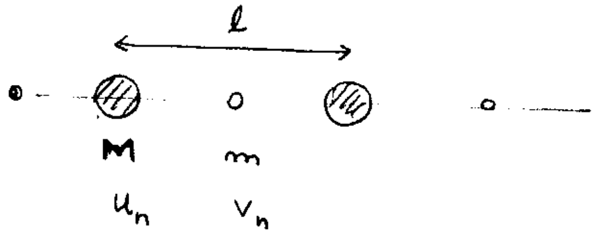
(1)

Faste stoffers fysikk I 1985. Løsningsskisse.

11/6-85

Oppgave 1.

a)



Bev. likn.: $M\ddot{u}_n = \alpha(v_{n-1} - u_n + v_n - u_n)$

$m\ddot{v}_n = \alpha(u_n - v_n + u_{n+1} - v_n)$

Harmonisk ansats: $u_n = u\, e^{iknl - i\omega t}$, $v_n = v\, e^{iknl - i\omega t}$ $\Rightarrow$ $-M\omega^2 u = \alpha(e^{-ikl}v + v - 2u)$, $-m\omega^2 v = \alpha(u + e^{ikl}u - 2v)$

$$\frac{u}{v} = \frac{\alpha(e^{-ikl}+1)}{2\alpha - M\omega^2} = \frac{2\alpha - m\omega^2}{\alpha(1+e^{ikl})}$$

Del på M:
$$\frac{\frac{1}{4}\omega_0^2(1+e^{-ikl})}{\frac{1}{2}\omega_0^2 - \omega^2} = \frac{\frac{1}{2}\omega_0^2 - \omega^2\mu^{-1}}{\frac{\omega_0^2}{4}(1+e^{ikl})}$$

$$x = \frac{4\omega^2}{\omega_0^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{1+e^{-ikl}}{2-x} = \frac{2-x/\mu}{1+e^{ikl}}$$

$$(2-x)(2-x\mu^{-1}) = 4\cos^2(kl/2)$$

$$4 - 2x(1+\mu^{-1}) + x^2\mu^{-1} = 4\cos^2(kl/2)$$

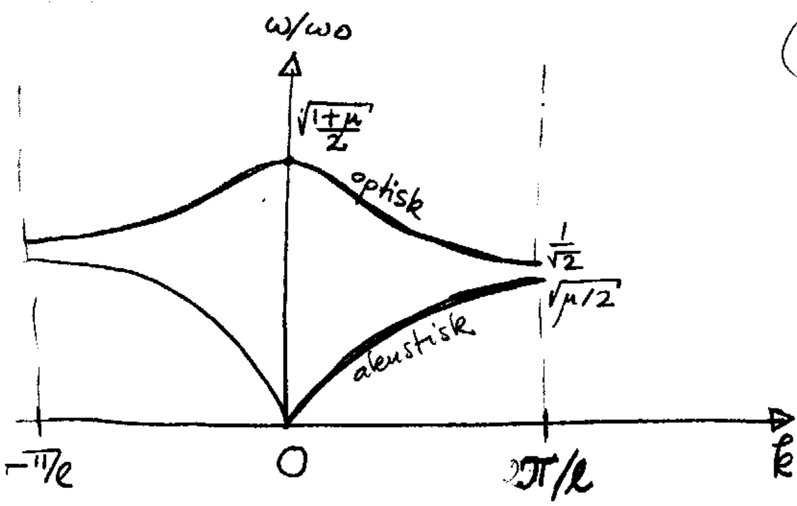
$$x^2 - 2x(1+\mu) = -4\mu\sin^2(kl/2)$$

$$(x - 1+\mu)^2 = (1+\mu)^2 - 4\mu\sin^2(kl/2)$$

$$x = \frac{4\omega^2}{\omega_0^2} = 1+\mu \pm \sqrt{(1+\mu)^2 - 4\mu\sin^2(kl/2)}$$

$$\omega = \frac{1}{2}\omega_0\sqrt{1+\mu \pm \sqrt{(1+\mu)^2 - 4\mu\sin^2(kl/2)}}$$

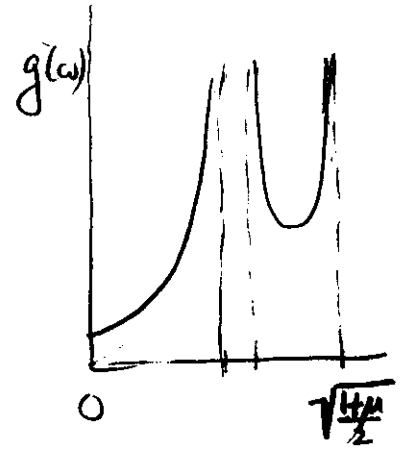
(Tegnet for $\mu < 1$)

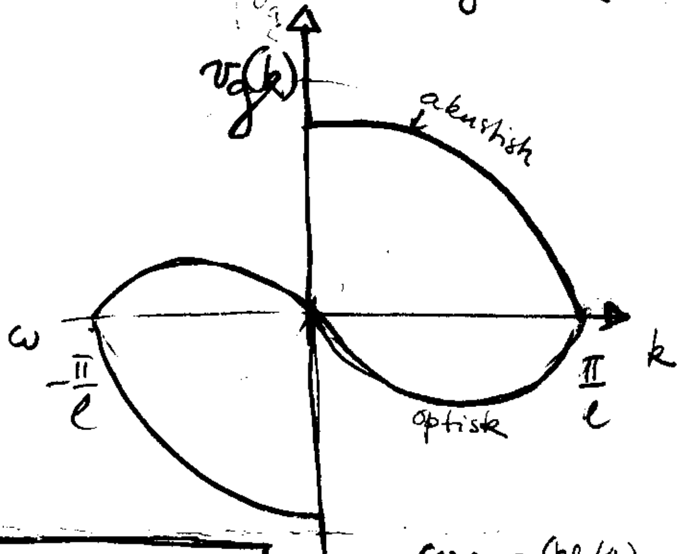


Periodisitet mod $(2\pi/l)$, kan begrense k til $(-\pi/l, \pi/l)$. k-verdier utenfor dette intervallet er da uinteressante, de bær ingen ny informasjon.

b)

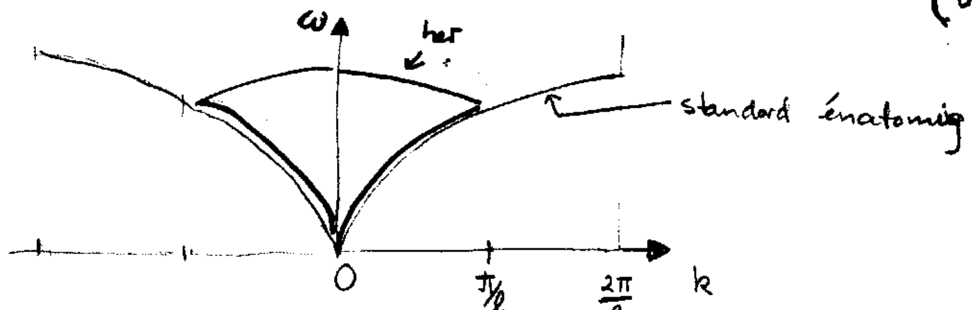
$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$$





c) $m = M$ gir

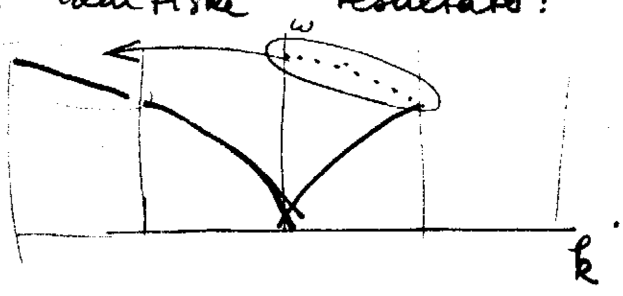
$$\omega = \frac{1}{2}\,\omega_0 \sqrt{2 \pm 2\cos(kl/2)} = \begin{cases} \omega_0 \cos(kl/4) \\ \omega_0 \sin(kl/4) \end{cases}$$



Det er trivielt at enhetcella er halvert nå: $l = 2a$:

$$\omega = \omega_0 \begin{cases} \cos(ka/2) \\ \sin(ka/2) \end{cases}.$$

Ved å flytte grenene til andre Brillouinsones får en da identiske resultater:



d) 3 akustiske , $3p-3$ optiske

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

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

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

Når $\vec{k}$ skal ligge i 1 BZ tar ~~tre~~ 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 $\frac{8\pi^3}{\text{cellevol. i Bravaisgitteret}} = \frac{8\pi^3}{V/N}$.

Modetettheten er derfor

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

f)

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

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. For 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 greinene lineære, $\omega = v_i k$, v_i = lydhastighet. Modetettheten $V(2\pi)^{-3}$ 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 $4\pi\omega^2 d\omega \cdot V(2\pi)^{-3} v_i^{-3} = \frac{\omega^2 V}{2\pi^2 v^3}$ 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:

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

Oppgave 2

a) Makroskopisk: (i) ledningsevne mye større enn isolator, mye mindre enn metaller
(ii) ledningsevnen øker med temperaturen

Mikroskopisk: Energigap mellom fulle og tomme band av moderat størrelse (sammenliknet med $k_B T$, T = romtemperatur), typisk 0.01 – 2 eV.

b) Da besettelsestallene i ledningsbandet er små for en halvleder settes

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

Antall elektroner er

$$N_e = \int_{\epsilon_e(0)}^{\infty} d\epsilon \; n(\epsilon) \; g(\epsilon) = \int_{\epsilon_e(0)}^{\infty} d\epsilon \; e^{(\mu-\epsilon)/k_B T} \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2}\left[\epsilon - \epsilon_e(0)\right]^{1/2}$$

Med ny variabel $\epsilon = \epsilon_e(0) + x\, k_B T$ blir dette

$$e^{[\mu-\epsilon_e(0)]/k_B T} \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e k_B T}{\hbar^2}\right)^{3/2} \underbrace{\int_0^{\infty} dx\, e^{-x} x^{\frac{1}{2}}}_{\sqrt{\pi}/2}$$

Altså:

$$\underline{\underline{\frac{N_e}{V} = 2\left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2}\right)^{3/2} e^{\frac{\mu-\epsilon_e(0)}{k_B T}}}}$$

c) Ladningsbevarelse for en intrinsikk halvleder tilsier at

$$p = \frac{N_e}{V} = n_e$$

Som gir

$$e^{[2\mu - \epsilon_e(0) - \epsilon_v(0)]/k_B T} = \left(\frac{m_v}{m_e}\right)^{3/2}$$

Løst m.h.p. μ:

$$\underline{\underline{\mu = \frac{\epsilon_e(0)+\epsilon_v(0)}{2} + \frac{3}{4}k_B T \ln \frac{m_v}{m_e}}}$$

Siste ledd er normalt lite så dette er nær midten av energigapet.

Elektrontettheten n_e kan en finne enten ved å sette uttrykket for μ inn i uttrykket for $n_e = N_e/V$, eller da $n_e = p$ direkte som

$$n_e = \sqrt{n_e \cdot p} = 2\,(m_e m_v)^{\frac{3}{4}} \left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\epsilon_e(0)-\epsilon_v(0)}{2k_B T}}$$

d)

Det var oppgitt at alle donorelektronene var eksiterte, så antall elektroner i ledningsbåndet er lik $n_d V$, pluss de som måtte være termisk eksitert fra valensbåndet. Når det er mange elektroner i ledningsbåndet må Ferminivået μ ligge høyt i gapet, nær $\epsilon_e(0)$, og da blir hullkonsentrasjonen p minimal. Kan derfor se bort fra termisk eksitasjon fra valensbåndet.

Antall elektroner i ledningsbåndet er gitt ved formelen vi utledet under b). Altså

$$n_d = 2\left(\frac{m_e k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{[\mu - \epsilon_e(0)]/k_B T},$$

som gir

$$\mu - \epsilon_e(0) = k_B T \ln\left[4\, n_d \left(\frac{\pi\hbar^2}{2m_e k_B T}\right)^{3/2}\right]$$

For numerisk beregning uttrykker vi dette ved $E_i = \hbar^2/2m a_0^2$:

$$\mu - \epsilon_e(0) = k_B T \ln\left[4\; n_d a_0^3 \left(\pi \frac{E_i}{k_B T} \frac{m}{m_e}\right)^{3/2}\right]$$

$$= \ln\left[4 \cdot\; 5\cdot 10^{21} \cdot 0.53^3 \cdot 10^{-30} \left(3.14 \cdot 13.6 \cdot 40 \cdot 100\right)^{3/2}\right] \frac{1}{40}\,\mathrm{eV}$$

$$= \ln\left[0.02\; 1.06^3\; (3.14 \cdot 1.36)^{3/2}\right] \cdot \frac{1}{40}\,\mathrm{eV}$$

Som et grovt overslag settes vi

$$\mu - \epsilon_\ell(0) \simeq \ln\left[0.02 \cdot 1 \cdot 4^{3/2}\right] \frac{1}{40}\,\text{eV} = \frac{\ln 0.16}{40}\,\text{eV}$$

Da $0.16 \approx 6^{-1} \approx e^{-2}$ blir $\ln 0{,}16 \approx -2$

$$\underline{\mu - \epsilon_\ell(0) \approx -0.05\ \text{eV}}$$

μ blir altså liggende under donornivået, som det måtte.

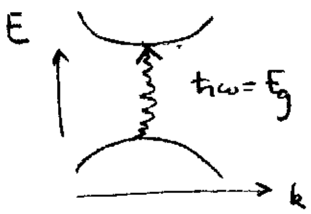
e) Bandgapet kan bestemmes eksperimentelt på flere måter:

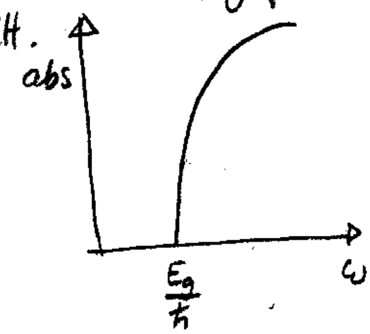
(i) Ved å måle ledningsevnens temperatur-avhengighet. Ledningsevnen er $\propto$ antall ladningsbærere, etter c) lik

$$2V\,(m_\ell m_v)^{3/4}\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-\frac{\epsilon_\ell(0)-\epsilon_v(0)}{2k_B T}}$$

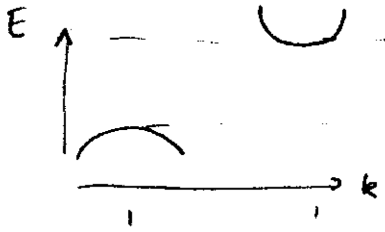
Energigapet $E_g = \epsilon_\ell(0) - \epsilon_v(0)$, slik at ledningsevnen er $\sigma \propto e^{-E_g/2k_BT}$, essensielt da $T^{3/2}$ faktoren varierer langsommere. I en $\ln\sigma$ mot T^{-1}-plot vil helningen av den tilnærmet rette linja være $-E_g/2k_B$.

(ii) Ved ~~optisk~~ å måle absorbsjon av fotoner, som funksjon av frekvens. Når fotonenergien blir lik energigapet for et direkte gap øker absorbsjonen brått.





For et indirekte gap,



må et fonon hjelpe til med bølgetallsbevarelsen ($k_{foton} \approx 0$).

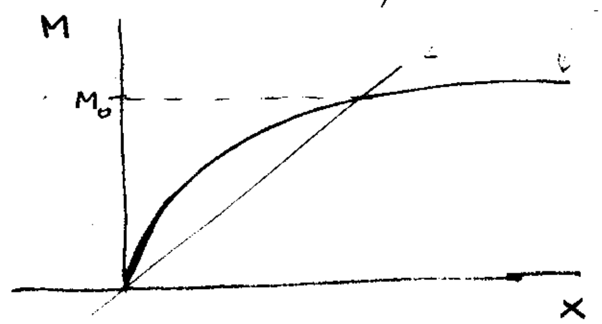
Oppgave 3

a) Kubisk romsentrert

b) Ved høye temperaturer går ledningsevnen σ ned pga elektron-fonon vekselvirkning. Da antall fononer i en harmonisk krystall øker $\propto T$ vil $\sigma \sim T^{-1}$ omtrent

c) Nullfelt likning for M:

$$M = n g \mu_B \tanh x, \quad x = \frac{g\mu_B}{k_B T} \lambda M$$



Når $k_B T / g\mu_B \lambda \geqslant n g \mu_B$ får vi bare $M = 0$ som løsning. Den kritiske verdi er derfor

$$k_B T_C = n g^2 \mu_B^2 \lambda = \sum_{\vec{R}} J(\vec{R})$$

(Alternativ utledning ut fra susceptibiliteten)