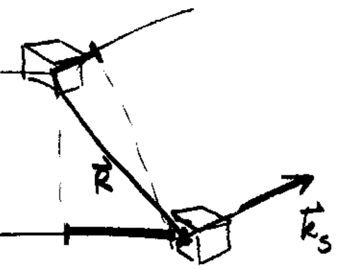
Løsningsskisse

FASTE STOFFERS FYSIKK I

14. 6. 1986

Oppgave 1

a) Gangvegforskjell mellom to gitterpunkter i avstand $\vec{R}$ er



$$\vec{R}\cdot\frac{\vec{k}_s}{k} - \vec{R}\,\frac{\vec{k}_i}{k} = \vec{R}(\vec{k}_s-\vec{k}_i)\cdot\frac{\lambda}{2\pi} \qquad \vec{k}_i$$

Konstruktiv interferens når dette er et helt antall (n) bølgelengder, dvs

$$\vec{R}\,(\vec{k}_s-\vec{k}_i) = 2\pi n\,, \qquad \text{eller}$$

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

Med $\vec{k}_s - \vec{k}_i = \vec{K}$ = en vektor i det resiproke gitter er dette oppfylt for alle $\vec{R}$.

For det kubiske gitter er

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{h}\vec{e}_x + \hat{k}\vec{e}_y + \hat{l}\vec{e}_z\right)$$

resiproke gittervektorer, fordi skalarproduktet med en gittervektor $\vec{R} = (n_x\vec{e}_x + n_y\vec{e}_y + n_z\vec{e}_z)a$ er et heltallig multiplum av 2π.

b) De relative fasefaktorer er etter det ovenstående gitt ved $e^{i(\vec{k}_s-\vec{k}_i)\vec{r}_m}$, så med ulike spredningsamplituder f_m for enkeltatomer blir den totale spredningsamplitude

$$S = \sum_{m=1}^{s} f_m\, e^{i(\vec{k}_s-\vec{k}_i)\vec{r}_m}$$

c) Ga og As kubisk flatesentrert. Så også krystallen!

d)

$$S = f_{Ga}\left[1 + e^{\pi i(\hat{h}+\hat{k})} + e^{\pi i(\hat{h}+\hat{\ell})} + e^{\pi i(\hat{k}+\hat{\ell})}\right]$$

$$+ f_{As}\, e^{\frac{\pi}{2} i(\hat{h}+\hat{k}+\hat{\ell})}\left[\qquad \text{—''—} \qquad\right]$$

$\Rightarrow$

$$\underline{S = \left(f_{Ga} + i^{\hat{h}+\hat{k}+\hat{\ell}} f_{As}\right)\left(1 + (-1)^{\hat{h}+\hat{k}} + (-1)^{\hat{h}+\hat{\ell}} + (-1)^{\hat{k}+\hat{\ell}}\right)}$$

e) Siste faktor blir null hvis både like og ulike indekser er tilstede: <u>$S=0$ for blandede indekser.</u>
Når $\hat{h}\hat{k}\hat{\ell}$ er alle like eller alle ulike er

$$S = 4\left(f_{Ga} + i^{\hat{h}+\hat{k}+\hat{\ell}} f_{As}\right)$$

For $\underline{\hat{h}+\hat{k}+\hat{\ell} = 2+4m}$ (m heltall) er $S = 4(f_{Ga} - f_{As})$
og disse refleksene er derfor svake når $f_{Ga} \approx f_{As}$.

<u>Oppgave 2</u>

a) Når u_n er det longitudinale utsving fra likevekts-posisjonen for det n'te atom vil kraften fra høyre nabo til n'te atom være $\alpha(u_{n+1} - u_n)$, og fra venstre $\alpha(u_{n-1} - u_n)$. Newtons bevegelses likning er da

$$m\,\ddot{u}_n = \alpha(u_{n+1} - u_n) + \alpha(u_{n-1} - u_n) \quad \text{qed}$$

Harmonisk bølge $u_n = c\, e^{i(kna - \omega t)}$ gir

$$-m\omega^2 = \alpha(e^{ika} + e^{-ika} - 2) = \alpha(2\cos ka - 2) = -4\alpha \sin^2\frac{ka}{2}$$

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

Gruppehastighet $\qquad v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \pm\, \underline{a\sqrt{\frac{\alpha}{m}}\cos\left(\frac{ka}{2}\right)}$

b) Skriv bevegelseslikningene som

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

For makroskopiske bevegelsestyper endrer u seg lite på avstanda. Utvikle derfor i a:

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

Til laveste orden gir dette: $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2\frac{\alpha}{m}\cdot\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$,
svingelikningen! $\; c = a\sqrt{\alpha/m} = v_g\,(\lambda \to \infty)$, som det burde være.

Oppgave 3

a) $$N = \int_0^{\epsilon_F} g(\epsilon)\,d\epsilon = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{2}{3}\,\epsilon_F^{\frac{3}{2}} \Rightarrow \epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} \text{ qed}$$

b) Elektroner med spinn* parallelt / antiparallelt $\vec{H}$ får et energitillegg $\mp \Delta E = \mp \mu_B B = \mp \mu_B \mu_0 H$. Det blir energetisk fordelaktig å øke antallstettheten n_+ for elektroner med spinn parallelt $\vec{H}$, og minke antallstettheten n_- for elektroner med antiparallelt spinn. Endringene er

* og magn. moment

$$\Delta n_+ = \Delta E \cdot \tfrac{1}{2}\, g(\epsilon_F)$$
$$\Delta n_- = -\Delta E \cdot \tfrac{1}{2}\, g(\epsilon_F),$$

når ΔE er liten. Da det magnetiske moment pr. elektron er $\pm\mu_B$ blir netto magnetisk moment pr. volumenhet:

$$M = \mu_B (n_+ - n_-) V^{-1} = \mu_B^2 \mu_0 H\, g(\epsilon_F)\, V^{-1}$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \underline{\mu_B^2 \mu_0\, g(\epsilon_F)/V}$$

c) Innsatt $\mu_B = e\hbar/2m$, $\mu_0 = 1/\varepsilon_0 c^2$ og for $g(\epsilon_F)$ fås

$$\chi = \left(\frac{e\hbar}{2m}\right)^2 \frac{1}{\varepsilon_0 c^2}\cdot\frac{\epsilon_F^{1/2}}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} = \left(\frac{e\hbar}{2m}\right)^2 \frac{1}{\varepsilon_0 c^2}\,\frac{(3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}}{2\pi^2}\,\frac{2m}{\hbar^2} \quad \text{vha a)}$$

$$= \left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^2 \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}\, n^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \alpha \cdot a_0 n^{\frac{1}{3}}$$

Altså $\underline{\chi = \gamma\, (a_0^3 n)^{\frac{1}{3}}}$, med $\gamma = \left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}}\cdot\frac{1}{137^2}$

Med $n = \frac{1}{\frac{4\pi}{3} r_s^3}$ blir $\chi = \left(\frac{3}{2\pi}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{1}{137^2}\,\frac{a_0}{r_s}$. Da $a_0 \sim \frac{1}{2}$ Å og $r_s \sim 1$ til 3 Å blir $\underline{\chi \sim 10^{-6}}$.

Oppgave 4

a)
$$n_e(T) = \frac{1}{V}\int_{\epsilon_e}^{\text{"}\infty\text{"}} d\epsilon \; g(\epsilon) \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_BT}+1} \simeq \frac{1}{V}\int_{\epsilon_e}^{\infty} d\epsilon \; g(\epsilon)\, e^{\frac{\mu-\epsilon}{k_BT}}$$

$$= \frac{1}{V}\int_{\epsilon_e}^{\infty} d\epsilon \; \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\epsilon-\epsilon_e}\; e^{\frac{\mu-\epsilon}{k_BT}} = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_ek_BT}{\hbar^2}\right)^{3/2} e^{\frac{\mu-\epsilon_e}{k_BT}} \int_0^{\infty} dx\,\sqrt{x}\, e^{-x}$$

ved ny variabel $x = (\epsilon - \epsilon_e)/k_BT$. Integralet er $\sqrt{\pi}/2$:

$$n_e(T) = \frac{1}{4}\left(\frac{2m_ek_BT}{\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{(\mu-\epsilon_e)/k_BT}, \quad \text{qed.}$$

Tilsvarende: $$n_h(T) = \frac{1}{V}\int_{\text{"}-\infty\text{"}}^{\epsilon_v} d\epsilon \; g(\epsilon)\left(1 - \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_BT}+1}\right),$$

der $$1 - \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_BT}+1} = \frac{1}{1+e^{(\mu-\epsilon)/k_BT}} \sim e^{(\epsilon-\mu)/k_BT}$$

$$n_h = \frac{1}{V}\int_{-\infty}^{\epsilon_v} d\epsilon \; \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m_v}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\epsilon_v-\epsilon}\; e^{(\epsilon-\mu)/k_BT}$$

$$= \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_v}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} e^{(\epsilon_v-\mu)/k_BT} \int_{-\infty}^{\epsilon_v} d\epsilon\, \sqrt{\epsilon_v-\epsilon}\; e^{(\epsilon-\epsilon_v)/k_BT}$$

Ny variabel $\epsilon_v - \epsilon = k_BT x$ gir samme integral som over:

$$n_h(T) = \frac{1}{4}\left(\frac{2m_vk_BT}{\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{(\epsilon_v-\mu)/k_BT}.$$

b) Uten doping må $n_h = n_e$, som gir

$$(m_e/m_v)^{3/2}\, e^{(2\mu-\epsilon_e-\epsilon_v)/k_BT} = 1 \quad \text{eller}$$

$$\underline{\mu = \frac{\epsilon_e+\epsilon_v}{2} - \frac{3}{4}k_BT \ln\frac{m_e}{m_v}}$$

Vi kan sette dette inn, eller direkte nytte at

$$n_e \cdot n_h = 4\,(m_em_v)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{k_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^3 e^{-(\epsilon_e-\epsilon_v)/k_BT}$$

generelt og når $n_e = n_h$,

$$\underline{n_e = n_e^i = 2\,(m_em_v)^{\frac{3}{4}}\left(\frac{k_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-\frac{\epsilon_e-\epsilon_v}{2k_BT}}}$$

c) Ladningsbevarelse: $n_e = n_d + n_h$

Sammen med likninga nederst forrige side

$$n_e \cdot n_h = n_e^{i\,2}$$

gir det $n_e(n_e - n_d) = n_e^{i\,2}$

$$\left(n_e - \tfrac{1}{2}n_d\right)^2 = \tfrac{1}{4}n_d^2 + n_e^{i\,2}$$

$$\underline{n_e = \tfrac{1}{2}n_d + \sqrt{\tfrac{1}{4}n_d^2 + n_e^{i\,2}}}$$, der n_e^i er uttrykket forrige side.

d) Ladningsbevarelse (da $n_h = 0$)

$$\boxed{n_d = n_e}$$

Her er

$$n_d = d - \frac{2d}{2 + e^{(\epsilon_d - \mu)/k_BT}} = \frac{d}{2e^{(\mu - \epsilon_d)/k_BT} + 1}$$, og n_e er gitt ved uttrykket øverst forrige side.

Likninga mellom μ og T:

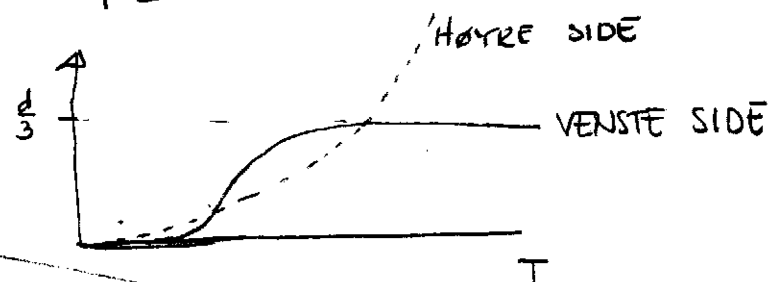
$$\boxed{\frac{d}{2e^{(\mu-\epsilon_d)/k_BT}+1} = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_\ell}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_{\epsilon_\ell}^{\infty} d\epsilon\,\frac{\sqrt{\epsilon - \epsilon_\ell}}{e^{(\epsilon-\mu)/k_BT}+1}}$$

Så setter vi $\mu = \epsilon_\ell$: Da kan integralet utføres:

$$\int_{\epsilon_\ell}^{\infty} d\epsilon\,\frac{\sqrt{\epsilon-\epsilon_\ell}}{e^{(\epsilon-\epsilon_\ell)/k_BT}+1} = (k_BT)^{3/2}\int_0^\infty dx\,\frac{\sqrt{x}}{e^x+1} = (k_BT)^{3/2}\,\frac{\sqrt{\pi}}{2}\,\zeta\!\left(\tfrac{3}{2}\right)$$

Likninga blir da

$$\frac{d}{2e^{(\epsilon_\ell-\epsilon_d)/k_BT}+1} = \frac{\zeta(\frac{3}{2})}{4}\left(\frac{2m_\ell k_BT}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$



Noen parametre gir skjæring. De facto to skjæringer.

ra: Med $x = \frac{k_BT}{\epsilon_\ell - \epsilon_d}$:

$$\frac{1}{2e^{1/x}+1} = \frac{\zeta(\frac{3}{2})}{\sqrt{2}}\underbrace{\frac{[m_\ell(\epsilon_\ell-\epsilon_d)]^{\frac{3}{2}}}{d\,\hbar^3}}_{\text{denne må være liten nok}}x^{3/2}$$