

Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet
 Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:

Navn: Ola Hunderi

Tlf.: 93411

EKSAMEN I FAG 74435 - FASTE STOFFERS FYSIKK 2

Fakultet for fysikk, informatikk og matematikk

15 august 2000

Tid: 0900-1500

Tillatte hjelpemidler: B2 - Typegodkjent kalkulator, med tomt minne

O.Jahren og K.J. Knutsen: Formelsamling i matematikk

K. Rottmann: Matematische Formelsammlung/Matematisk formelsamling

S. Barrett og T.M. Cronin: Mathematical Formulae

Oppgave 1

- a) Det flate sentrerte kubiske gitteret har resiproke gittervektorer gitt som

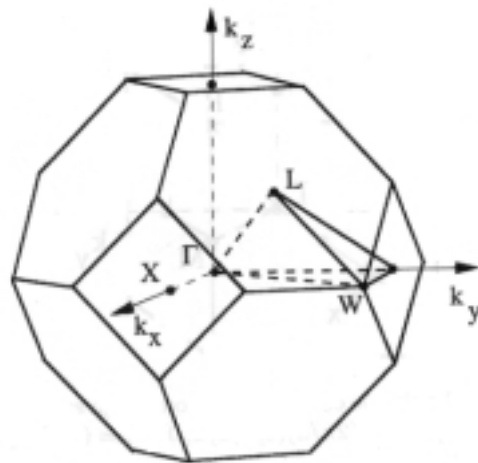
$$G_1 = \frac{2\pi}{a} (1, -1, 1)$$

$$G_2 = \frac{2\pi}{a} (1, 1, -1)$$

$$G_3 = \frac{2\pi}{a} (-1, 1, 1)$$

Figur 1 viser den første Brillouin sonen . Vis at en kule innskrevet i første Brillouin sone vil berøre en av de hexagonale flatene først. Vis at radius av denne kula vil være

$k_i = \frac{\pi\sqrt{3}}{a}$. Beregn forholdet mellom k_i og radius av den fri-elektron Fermikula for ett elektron per atom.



Figur 1

- b) Bølgevektoren k kan antas å være vinkelrett på et speilplan. Det innebærer at energien $E(k)$ er symmetrisk om dette planet. Videre er $E(k)$ en periodisk funksjon av de resiproke gittervektorer. Disse to betingelsene kan skrives som

$$E(k) = E(-k)$$

$$E(k) = E(k+G)$$

Bruk disse to betingelsene til å vise at $\frac{\partial E}{\partial k} = 0$ på en sonegrense.

- c) De primitive gittervektorene for fcc gitteret er

$$R_1 = \frac{a}{2} (1, 0, 1)$$

$$R_2 = \frac{a}{2} (1, 1, 0)$$

$$R_3 = \frac{a}{2} (0, 1, 1)$$

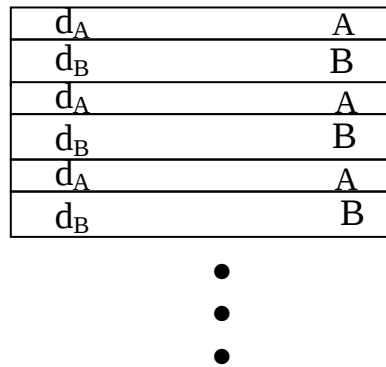
Bruk dette til å vise at det laveste energibåndet i "Tight binding" approximasjonen er gitt av et uttrykk av formen

$$E(k) = E_0 - \alpha - 4\gamma \left(\cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} \right)$$

Vis at dette energibåndet oppfyller betingelsen om at energibåndet er vinkelrett på sonegrensen. Ta den hexagonale sone-flaten eller punktet X som eksempel.

Oppgave 2

- a) Ta utgangspunkt i Maxwells ligninger og vis at følgende sammenheng eksisterer mellom dielektrisitetskonstanten ϵ og konduktiviteten σ : $\epsilon = 1 + \frac{i\sigma}{\epsilon_0\omega}$
- b) Betrakt et uendelig supergitter som består av to materialer A og B slik som vist i figur 2.



Figur 2

Tykkelsen av de individuelle lagene er d_A og d_B og de tilsvarende dielektrisitetskonstantene er ϵ_A og ϵ_B . Tykkelsen av de individuelle lagene er mye mindre enn lysets bølgelengde slik at feltet er tilnærmet konstant over tykkelsen av et lag. Vi kan da definere en såkalt effektiv dielektrisk ϵ konstant for det sammensatte materialet. Denne effektive dielektrisitetskonstanten vil være forskjellig for lys polarisert med E-feltet henholdsvis parallelt med, og vinkelrett på lagene. Vis at den effektive dielektrisitetskonstanten for lys polarisert parallelt med lagene er gitt av

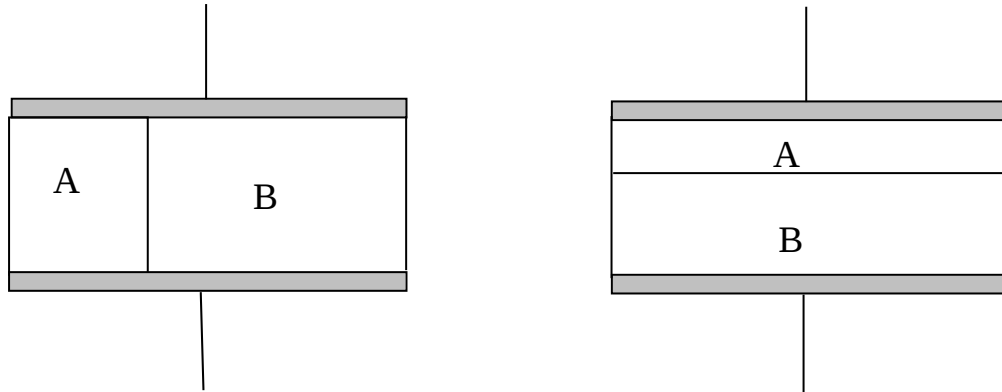
$$\epsilon_{\parallel} = \frac{d_A}{d_A + d_B} \epsilon_A + \frac{d_B}{d_A + d_B} \epsilon_B$$

og for lys polarisert vinkelrett på lagene er

$$\frac{1}{\epsilon_{\perp}} = \frac{d_A}{d_A + d_B} \frac{1}{\epsilon_A} + \frac{d_B}{d_A + d_B} \frac{1}{\epsilon_B}$$

Hint:

Den enkleste måten å utlede ligningene ovenfor er å beregne den tilsynelatende effektive dielektrisitetskonstant når det sammensatte materialet er plassert i det konstante feltet mellom to kondensatorplater slik som vist i figur 3. Det er ikke nødvendig å anta et stort antall lag, det er tilstrekkelig å betrakte to lag.



Figur 3

- c) Anta at supergitteret består av metalliske lag A med en Drude-lik $\epsilon_A = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$ og isolerende lag B med $\epsilon_B > 0$. Anta at $d_B = 2 \cdot d_A$. Vis at $\epsilon_{||}$ er Drude lik med
- $$\omega_p^{eff} = \frac{\omega_p}{\sqrt{1 + 2\epsilon_B}}.$$

Vis også at $\epsilon_{\perp}$ oppfører seg som en dielektrisk isolator og finn $\epsilon(\infty)$, ω_L and ω_T . Anta igjen $d_B = 2 \cdot d_A$. Skisser frekvensavhengigheten av $\epsilon_{\perp}$.

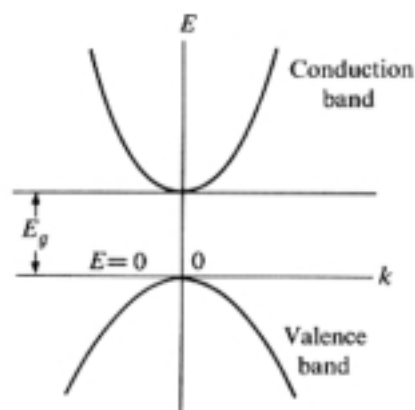
Oppgave 3

Kvantemekanisk er imaginærdelen av dielektrisitetskonstanten, $\epsilon_2(\omega)$, gitt av

$$\epsilon_2 = \frac{2\pi e^2}{m^2 \epsilon_0 \omega^2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} |M|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$$

der E_f er en energien i slutt-tilstanden og E_i er energien i begynnelses-tilstanden for en optisk overgang $i \rightarrow f$.

a)



Figur 4

Anta at vi har en halvleder med et direkte gap $E_c = 2\Delta$ slik som vist på figur 4. Valensbåndet har en parabolisk $E(k)$ med en hull-masse m_h . Ledningsbåndet er også av parabolisk form med masse m_c . Anta at matriseelementet M for en optisk overgang nær $k=0$ er konstant. Vis at "joint density of states" for systemet er $\sim \sqrt{\hbar\omega - E_C}$ og at ϵ_2 dermed er av formen

$$\epsilon_2 \sim \frac{1}{\omega^2} \sqrt{\hbar\omega - E_C} \quad \text{for } \hbar\omega > E_C$$

$$\epsilon_2 = 0 \quad \text{for } \hbar\omega < E_C$$

- b) Anta så at overgangen ved $k=0$ er en såkalt forbudt overgang slik at matriseelementet er null for $k=0$. I et slikt tilfelle kan vi rekkeutvikle matriseelementet og skrive $|M|^2 = |M(0)|^2 + \alpha k^2 = \alpha k^2$. Vis at ϵ_2 i dette tilfelle blir av formen

$$\epsilon_2 \sim \frac{1}{\omega^2} (\hbar\omega - E_C)^{3/2} \quad \text{for } \hbar\omega > E_C$$

$$\epsilon_2 = 0 \quad \text{for } \hbar\omega < E_C$$

- c) Beregn exciton bindingsenergien i GaAs der $\epsilon = 13.1$, $m_e^* = 0.067 m_e$ og $m_h = 0.53 m_e$

Oppgitt: Energinivåene i hydrogenatomet er gitt av

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{R_0}{n^2}$$

med $R_0 = 13.6$ eV og μ er den reduserte masse.

Hint: Potensialet rundt en ladning Q plassert i et materiale med dielektrisitetskonstant ϵ er

$$U = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0\epsilon r}$$

Oppgave 4

- a) Vi skal i denne oppgaven beregne den såkalte orienterings-polariserbarheten. Anta at vi har et system der permanente elektriske dipoler kan rotere fritt slik som i en gass eller væske. Systemet plasseres i et homogent elektrisk felt med retning langs x-aksen. Den potensielle energi til en dipol i et elektrisk felt er

$$V = - \bar{p} \cdot \bar{E} = - pE \cos \theta$$

Her er θ vinkelen mellom dipolens retning og x-aksen. Sannsynligheten for å finne en dipol orientert i retning θ er gitt av Boltzmann-faktoren $e^{-pE \cos \theta / kT}$. Bruk dette til å vise at middelverdien av p_x , x-komponenten av dipolmomentet, er gitt av den såkalte Langevin funksjonen

$$\langle p_x \rangle = p \cdot L(u) = p \left(\coth(u) - \frac{1}{u} \right)$$

der $u = \frac{pE}{kT}$.

- b) I de fleste tilfeller er $pE/kT \ll 1$. Vis at i dette tilfelle gjelder at

$$\langle p_x \rangle = \frac{p^2}{3kT} E = \alpha_d E$$

Bruk Clausius Mosottis ligning til å beregne dielektrisitetskonstanten til et system med elektronisk polariserbarhet α_{el} , jonisk polariserbarhet α_j og dipolar polariserbarhet gitt av ligningen ovenfor. Anta N dipoler per volumenhet.