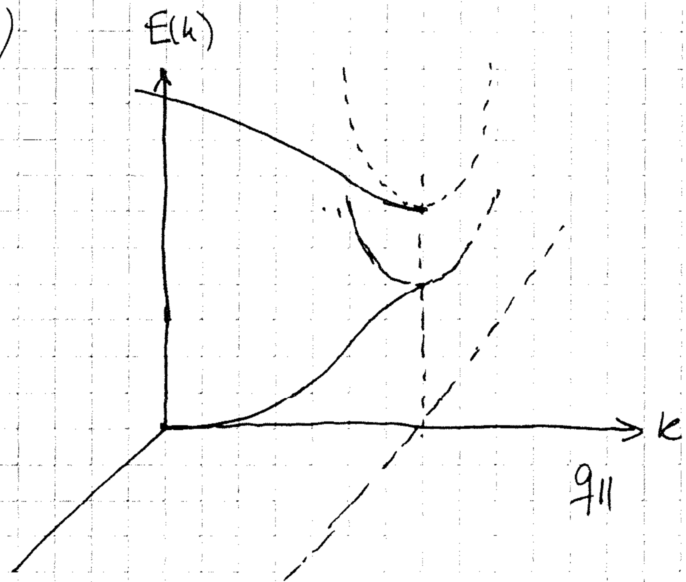
FASTE STOFFER. JANUAR 2000. 1

Oppgave 1.

a)



Figuren viser en skisse av energien i nærheten av Bragg planet. I selve Bragg-planet er $q_{\parallel} = 0$ og energien blir gitt av

$$E = E^0_{G/2} + \frac{\hbar^2 q_{\perp}^2}{2m} \pm |U_G|$$

med − for det laveste bånd og + for det øverste. Laveste punkt i bånd #2 er derfor $E^0_{G/2} + U_G$. Fermienergien med de gitte betingelser blir

$E_F = E^0_{G/2} - |U_G| + \Delta$. Dersom $\Delta < 2|U_G|$ så er $E_F <$ bunnen av bånd #2 og Fermiflata ligger i sin helhet i første BZ

$E = E_F$ gir:

$$E^0_{G/2} + \frac{\hbar^2 q_\perp^2}{2m} - |U_G| = E^0_{G/2} - |U_G| + \Delta$$

$$\Rightarrow \quad q_\perp = \sqrt{\frac{2m\Delta}{\hbar^2}}$$

b) De effektive masser finnes enklest ved å rekkeutvikle kvadratroten i uttrykket for E. Da får vi:

$$E = E^0_{G/2} + \frac{\hbar^2}{2m} q_\perp^2 + \frac{\hbar^2}{2m} q_\parallel^2 \pm |U_G| \sqrt{1 + \frac{4 E^0_{G/2}}{|U_G|^2} \frac{\hbar^2}{2m} q_\parallel^2}$$

$$= E^0_{G/2} + \frac{\hbar^2}{2m} q_\perp^2 + \frac{\hbar^2}{2m} q_\parallel^2 \left(1 \pm \frac{2E^0_{G/2}}{|U_G|}\right) \pm |U_G|$$

Fra dette ser vi at vi får følgende effektive masser:

1 ste bånd:

$$m_\perp^{-1} = m$$

$$m_\parallel^{-1} = \frac{m}{1 - \frac{2E^0_{G/2}}{|U_G|}} \quad ; \quad m_\parallel^{1} < 0$$

2 bånd

$$m_\perp^{*} = m$$

$$m_\parallel^{*} = \frac{m}{1 + \frac{2E^0_{G/2}}{|U_G|}}$$

c)

Tilstandstettheten i de to båndene finnes ved å beregne integralet

$$D(E) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3q \; \delta\left(E^0_{G/2} + \frac{\hbar^2}{2m_\perp^\pm} q_\perp^2 + \frac{\hbar^2}{2m_\parallel^\pm} q_\parallel^2 \pm |U_G| - E\right)$$

$$= \frac{2}{(2\pi)^3} \int 2\pi \, q_\perp dq_\perp \, dq_\parallel \; \delta\left(E - f(q_\perp, q_\parallel)\right)$$

Vi integrer først over $q_\perp$

$$D(E) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int dq_\parallel \left(\frac{q_\perp}{\left.\frac{\partial f}{\partial q_\perp}\right|_{E-f=0}} \right) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int dq_\parallel \frac{q_\perp}{\frac{q_\perp \hbar^2}{m_\perp}}$$

$$= \frac{2}{(2\pi)^2} \frac{m_\perp}{\hbar^2} \left(q_{\parallel max} - q_{\parallel min} \right)$$

Her er $q_\parallel$ $min = 0$ og $q_\parallel$ max er gitt av

$$E^0_{G/2} + \frac{\hbar^2}{2m_\parallel^+} q_\parallel^2 + |U_G| - E = 0$$

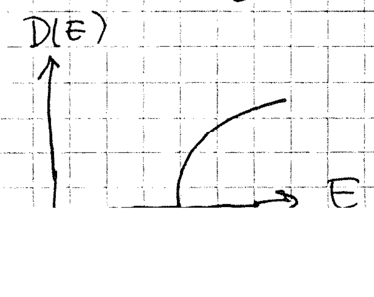
$$q_{\parallel max} = \sqrt{\left(E - E^0_{G/2} + |U_G|\right) \frac{2m_\parallel^+}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow \quad D(E) = \frac{1}{4\pi^2} \frac{2m_\perp^+}{\hbar^2} \left(\frac{2m_\parallel^+}{\hbar^2}\right)^{1/2} \cdot \sqrt{E - (E^0_{G/2} + |U_G|}$$

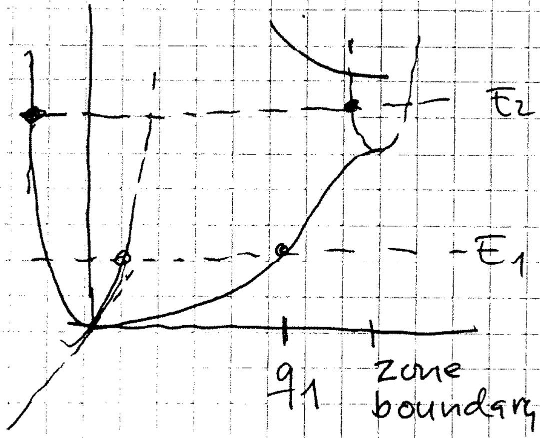
$E > E^0_{G/2} + |U_G|$

$D(E) = 0$

for $E < E^0_{G/2} + |U_G|$



For det laveste båndet blir situasjonen noe mer kompleks.



For E_1 er q_{max} gitt av sentrum i zonen og $q_{min} = q_1$

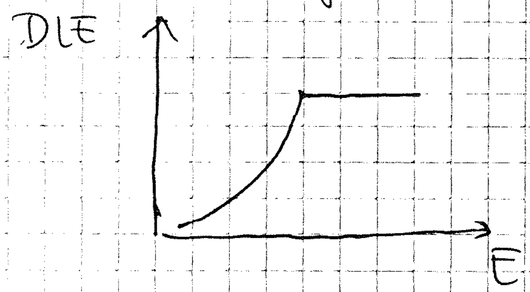
For E_2 er $q_{min} = 0$ og $q_{max} \equiv$ sentrum

$\Rightarrow$ $q_{max} - q_{min}$ = Konstant for $E > E^{0}_{G/2} - |U_G|$

For $E < E^{0}_{G/2} - |U_G|$

$$D(E) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2m_\perp}{\hbar^2}\left(\text{Konst} - \sqrt{\left((E^{0}_{G/2} - |U_G|) - E\right)\frac{2m_\parallel}{\hbar^2}}\right)$$

Plotter vi dette får vi:



Oppgave 2.

a) Se Kittel.

b)

$$A_k = \frac{2\pi e}{\hbar \Delta(\frac{1}{B})} = \frac{(2\pi)^2 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}}{6{,}62 \cdot 10^{-34} \cdot 1.83 \cdot 10^{-5}} = \underline{5{,}21 \cdot 10^{20}\ m^{-2}}$$

I fri elektron modellen er

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{2/3} \Rightarrow A_k = \pi k_F^2 = \pi \cdot (3\pi^2 n)^{2/3}$$

$$A_k = \pi(3\pi^2 n)^{2/3} = \pi(3 \cdot \pi^2 \cdot 8.45 \cdot 10^{28})^{2/3} = \underline{5{,}79 \cdot 10^{20}\ m^{-2}}$$

Dette er som forventet. Tilstanden i "halsen" av Fermiflata fylles opp og det reduserer arealet av "belly orbits".

c)

Fra b) har vi at $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$. FCC strukturen har 4 atomer ~~elektroner~~ per enhetscelle ~~for Ca~~

Det betyr at vi kan skrive

$$k_F = \left(3\pi^2 \cdot \frac{4 \cdot Z}{a^3}\right)^{1/3} = \frac{2\pi}{a}\sqrt{(\tfrac{1}{2})^2 + (\tfrac{1}{2})^2 + (\tfrac{1}{2})^2}$$

Z er midlere ladning pr. atom for at

Fermi kula skal berøre zonegrense

Løser ni for z finner vi

$$z = \frac{\pi\sqrt{3}}{4} = 1{,}36$$

Oppgave 3.

Problemet er i virkeligheten en partikkel i boks der dimensjonen i z retningen er liten mens utstrekningen i x og y retningene er tilnærmet uendelig. Schrødinger ligningen blir

$$-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\chi(z)\, e^{i(k_x x + ik_y y)} = E\chi(z)\, e^{i(k_x x + ik_y y)}$$

$$\Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi(z)}{dz^2} + \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2)\chi(z) = E\chi(z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dz^2} = (E - E_{xy})\chi(z)$$

Grensebetingelsene $\chi(z) = 0$ for $z = \pm(\frac{d}{2})$

Dette gir løsningen:

$$\chi(z) = A\sin k_z \cdot z$$

med $k_z(\frac{d}{2}) = n\cdot\pi$ $\qquad n = 1,2,3\ldots$

og $E_z^s = \frac{\hbar^2}{2m}k_z^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{(\frac{d}{2})^2}$

og $\chi(z) = A\cos k_z \cdot z$

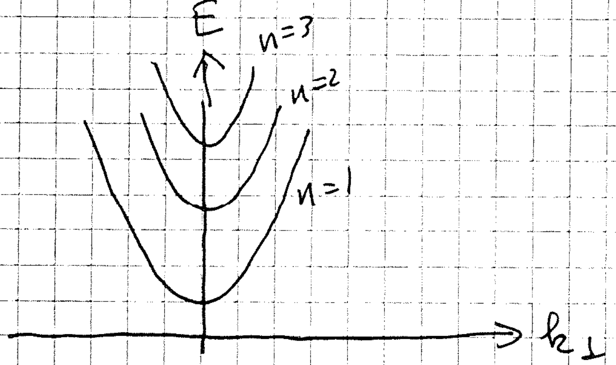
med $k_z(\frac{d}{2}) = (n+\frac{1}{2})\pi$

og $E_z^c = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(n+\frac{1}{2})^2 \pi^2}{\left(\frac{d}{2}\right)^2}$

Tilsammen får vi derfor energispekteret

$$E_z = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{d^2} \cdot n^2 \qquad n = 1, 2, 3 \dots$$

$$\text{ɔ: } f(d) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{d^2} \quad \Rightarrow \quad E = f(d) n^2 + \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2)$$



$k_\perp = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$

b) I to dimensjoner er tilstandstettheten konstant

$$g_i = \frac{m}{\pi \hbar^2} \quad ; \quad \text{(kan utledes om man ikke husker det)}$$

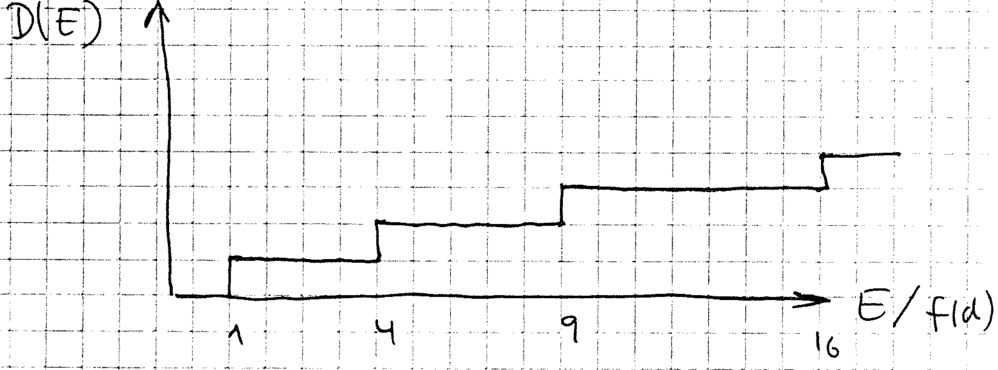
Dette gir:

For $E < \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{d^2}$ er $D(E) = 0$

For $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{d^2} < E < \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{d^2} \cdot 4$ er $D(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2}$

For $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{d^2} 4 < E < \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{d^2} \cdot 9$ er $D(E) = 2 \frac{m}{\pi \hbar^2}$

Plotter vi dette fås:



c) Dersom avstanden mellom steps er mindre en $k_B T$ vil de todimensjonale effektene viskes ut. Det betyr at med de betingelser gitt i oppgaven fås

$$k_B T < \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{d^2}(2^2 - 1^2)$$

$$T < \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m d^2} \frac{\cdot 3}{k_B} = \underline{130.8\ K}$$

Eventuelt for $T = 15\,mK$ fås

$$d^2 < \frac{\hbar^2 \pi^2 \cdot 3}{2m\, k_B T}$$

Eventuelt $d_1^2 T_1 = d_2^2 T_2$

$$\Rightarrow \quad d_2 = \sqrt{\frac{T_1}{T_2}}\, d_1 = \sqrt{\frac{130.8}{0.015}} \cdot 10 = \underline{934\ nm.}$$

Oppgave 4.

a) KK relasjonen lyder

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\xi \epsilon_2(\xi)}{\xi^2 - \omega^2} d\xi$$

$\omega = 0$ gir

$$\underline{(\epsilon_1(0) - 1)\frac{\pi}{2}} = P \int_0^\infty \frac{\epsilon_2(\xi)}{\xi} d\xi = \underline{M_{-1}}$$

b) La ω være stor slik at bidraget til integralet for $\xi > \omega$ er neglisjerbart. Da kan vi skrive

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\omega_{max}} \frac{\xi \epsilon_2(\xi)}{-\omega^2} d\xi$$

$$= 1 + \frac{2}{\pi}\left(-\frac{1}{\omega^2}\right) \int_0^{\omega_{max}} \xi \epsilon_2(\xi) d\xi$$

$$\epsilon_1 = 1 - \frac{2}{\pi \omega^2} \int_0^{\omega_{max}} \xi \epsilon_2(\xi) d\xi$$

$$= 1 - \frac{2}{\pi \omega^2} M_1 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

$$\Rightarrow \quad M_1 = \frac{\pi}{2} \omega_p^2 = \frac{\pi}{2} \frac{Ne^2}{m\epsilon_0}$$

b)

$$\epsilon_1(0) = 1 + \frac{2}{\pi} \int \frac{\epsilon_2(\xi)}{\xi} d\xi$$

$$= 1 + \frac{2}{\pi} \int_2^6 \frac{-2(E-2)(E-6)}{E} dE = \underline{4{,}59}$$

Fra a)

$$\omega_p^2 = \frac{2}{\pi} \int \xi \epsilon_2(\xi) d\xi$$

Multipliser med $\hbar^2$

$$E_p^2 = -\frac{2 \cdot 2}{\pi} \int_2^6 E(E-2)(E-6) dE = 54.4 \text{ eV}^2$$

$$\Rightarrow E_p = 7{,}4 \text{ eV}.$$

Videre har vi for plasmafrekvensen

$$\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{m\epsilon_0}$$

$$\Rightarrow N = \frac{m \epsilon_0 \omega_p^2}{e^2}$$

Med innsatte tallverdier får vi

$$N = 3{,}97 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$$

Oppgave 5.

a) Se Kittel

b) Vi beregner først molekyltettheten

$$N_V = N_A \cdot \frac{\rho}{M_{mol}} = \frac{2.17 \cdot 10^3}{58.4} 6.02 \cdot 10^{26} =$$

$$= \frac{2.17 \; 6{,}02}{5.84} \cdot 10^{28}$$

$$2.24 \cdot 10^{28} \text{ molekyl}/m^3$$

Ved å benytte Clausius-Mosottis ligning fås for den statiske polariserbarhet

$$\alpha(0) = \frac{3}{N_V} \frac{\epsilon(0)-1}{\epsilon(0)+2} = 8.32 \cdot 10^{-29} \; m^3$$

Fra Kittel fås

$$E_{lok} = E + \frac{1}{3\epsilon_0} P = E + E\frac{\chi}{3} = E\left(1+\frac{\chi}{3}\right)$$

Samtidig har vi at $\epsilon = 1+\chi$

$$\Rightarrow \frac{E_{lok}}{E} = \left(1 + \frac{\epsilon-1}{3}\right) = 1 + \frac{4.9}{3} = \underline{2{,}63}$$

For synlig lys:

$$\alpha_{el} = \frac{3}{N_V} \frac{n^2-1}{n^2+2} = 4.21 \cdot 10^{-29} \; m^3$$

c) For å beregne dipolmomentet per ione-par beregner vi polarisasjon pr m^3 og dividerer med antall molekyler pr m^3

$$P = \chi(0)\,\epsilon_0 E = (\epsilon(0)-1)\,\epsilon_0 \cdot E \qquad (E_0 \simeq E)$$

$$= 4{,}34 \cdot 10^{-2}\ C/m^2$$

Dipolmomentet pr. ionepar blir da

$$p = \frac{P}{N_v} = \frac{4.34 \cdot 10^{-2}}{2.24 \cdot 10^{28}} = 1.94 \cdot 10^{-30}\ Cm$$

Dette tilsvarer en ladningsforskyvning d gitt av

$$e \cdot d = p$$

$$d = \frac{1.94 \cdot 10^{-30}}{1.6 \cdot 10^{-19}} = \underline{1.21 \cdot 10^{-11}\ m}$$

Forskyvningen er således liten sammenlignet med avstanden mellom Na og Cl.