

TASTE STOFFER 2 . AUGUST 2000

Oppgave 1

a) Sentrum i en av de hexagonale flater har koordinatene $\frac{\pi}{a}(1, -1, 1)$

Avstanden fra sentrum i BZ til dette punktet blir da

$$k_i = k_L = \frac{\pi}{a} \sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2} = \frac{\pi\sqrt{3}}{a}$$

Alle andre punkter har større avstand fra sentrum. Ta for eksempel X-punktet. Det har koordinater $\frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$ og avstanden ut til X-punktet er $\frac{2\pi}{a}$

I fri-elektron er $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$

FCC-strukturen har 4 atomer per enhetscelle. Det betyr at vi kan skrive

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

og

$$\frac{k_i}{k_F} = \frac{\pi\sqrt{3}/a}{(3\pi^2 \cdot 4)^{1/3}/a} = \frac{\pi\sqrt{3}}{(3\pi^2 \cdot 4)^{1/3}} = 1.10$$

b) Fra de oppgitte ligningene får betingelsene

$$E(k) = E(-k) \Rightarrow \left. \frac{\partial E}{\partial k} \right|_k = - \left. \frac{\partial E}{\partial k} \right|_{-k}$$

$$E(k) = E(k \pm G) \Rightarrow \frac{\partial E}{\partial k}|_k = \frac{\partial E}{\partial k}|_{k \pm G}$$

Ved zone-grensen er $k = \pm G/2$
og setter vi dette inn får

$$\frac{\partial E}{\partial k}|_{G/2} = - \frac{\partial E}{\partial k}|_{-G/2} \quad (1)$$

$$\frac{\partial E}{\partial k}|_{G/2} = + \frac{\partial E}{\partial k}|_{-G/2} \quad (2)$$

Disse ligningene kan bare oppfylles
dersom :

$$\frac{\partial E}{\partial k}|_{G/2} = \frac{\partial E}{\partial k}|_{-G/2} = 0$$

∴ Energikonturene står $\perp$ på zonegrensa.

c) Tight binding approksimasjonen sier at

$$E(k) = E_0 - \alpha - t \sum_m e^{i \underline{k} \cdot \underline{R}_m}$$

FCC strukturen har 12 nærmeste naboer
med koordinater:

$$\underline{R} = \left(\frac{a}{2}\right)(\pm 1, \pm 1, 0), \left(\frac{a}{2}\right)(\pm 1, 0, \pm 1), \frac{a}{2}(0, \pm 1, \pm 1)$$

Tilnseth gir dette

$$E(k) = E_0 - \alpha - \gamma (e^{i\frac{a}{2}k_x} (e^{i\frac{a}{2}k_y} + e^{-i\frac{a}{2}k_y}) + e^{-ik_x\frac{a}{2}} (e^{i\frac{a}{2}k_y} + e^{-i\frac{a}{2}k_y})) + \text{tilsvarende for } "x, z" \text{ og } "y, z" \text{ permut}$$

Dette gir direkte:

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

La oss se på $\partial E / \partial k$ i f. ex punktet x

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial E}{\partial k_x} \right|_{k_x = \frac{2\pi}{a}} &= -4\gamma \left(-\frac{a}{2} \sin k_x \frac{a}{2} \cos k_y \frac{a}{2} - \frac{a}{2} \sin k_x \frac{a}{2} \cos k_z \frac{a}{2} \right) \Big|_2 \\ &= 4\gamma \cdot \frac{a}{2} (\sin \pi \cos \pi + \sin \pi \cos \pi) = 0 \end{aligned}$$

Tilsvarende bevises også enkelt for L-punktet.

Oppgave 2.

Fra Maxwell

$$\nabla \times H = j + \frac{\partial D}{\partial t} = \nabla E - i\omega \epsilon_0 E = -i\omega \epsilon_0 \epsilon E$$

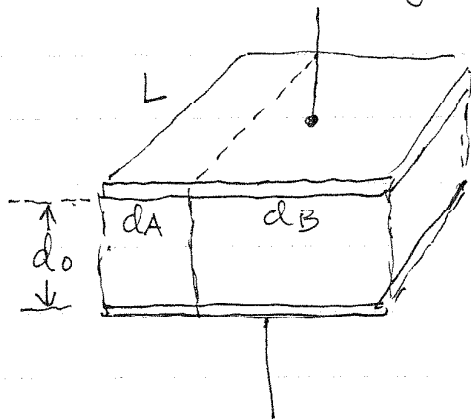
$$\Rightarrow \epsilon = 1 + \frac{i\sigma}{\epsilon_0 \omega}$$

Dersom vi har både fri og bundne elektroner
vill vi få

$$\epsilon = \epsilon_b + \frac{i\sigma}{\epsilon_0 \omega}$$

b)

E-feltet parallelt med lagene. I dette
tilfelle blir geometrien som i skissen



I dette har vi en parallellkopling av
to kondensatorer. Ta en vilkårlig lengde L
slik som vist på figuren

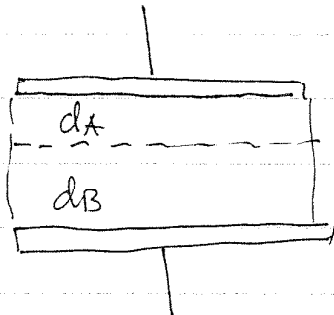
$$C_A = \epsilon_A \frac{L \cdot d_A}{d_0} \quad C_B = \epsilon_B \frac{L \cdot d_B}{d_0}$$

$$C_{TOT} = \epsilon_{||} \frac{L \cdot (d_A + d_B)}{d_0} = \epsilon_A \frac{L \cdot d_A}{d_0} + \epsilon_B \frac{L \cdot d_B}{d_0}$$

Detta gir

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

For E -feltet $\perp$ på lagene:



Her kan vi ta et tilfeldig areal A av
kondensatorplatene. Her har vi en seriekopling av
kondensatorer

$$C_A = \frac{\epsilon_A A}{d_A}, \quad C_B = \frac{\epsilon_B A}{d_B}$$

$$\frac{1}{C_{\text{tot}}} = \frac{d_A + d_B}{\epsilon_{\perp} A} = \frac{d_A}{\epsilon_A A} + \frac{d_B}{\epsilon_B A}$$

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

c) For det parallelle tilfellet

$$\epsilon_{||} = \frac{d_A}{d_A + d_B} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) + \frac{d_B}{d_A + d_B} \epsilon_B$$

$$= \frac{d_A + \epsilon_B d_B}{d_A + d_B} - \frac{d_A}{d_A + d_B} \frac{\omega^2}{\omega_p^2}$$

For $d_B = 2d_A$

$$\epsilon_{||} = \frac{1 + 2\epsilon_B}{3} - \frac{1}{3} \frac{\omega^2}{\omega_p^2}$$

Plasmafrekvensen i kompositten er gitt av $\epsilon_{\parallel} = 0$. Dette gir

$$\omega_p = \frac{\omega}{\sqrt{1+2\epsilon_B}}$$

For det vinkelrette tilfelle

$$\begin{aligned}\frac{1}{\epsilon_{\perp}} &= \frac{d_A}{d_A+d_B} \frac{1}{1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2}} + \frac{d_B}{d_A+d_B} \frac{1}{\epsilon_B} \\ &= \frac{1}{3} \frac{1}{1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2}} + \frac{2}{3} \frac{1}{\epsilon_B} \\ &= \frac{1}{3} \frac{\epsilon_B + 2(1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2})}{\epsilon_B(1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2})}\end{aligned}$$

$$\epsilon_{\perp} = \frac{3\epsilon_B(\omega^2 - \omega_p^2)}{(\epsilon_B + 2)\omega^2 - 2\omega_p^2} = \frac{3\epsilon_B}{\epsilon_B + 2} \frac{\omega^2 - \omega_p^2}{\omega^2 - \frac{2\omega_p^2}{\epsilon_B + 2}}$$

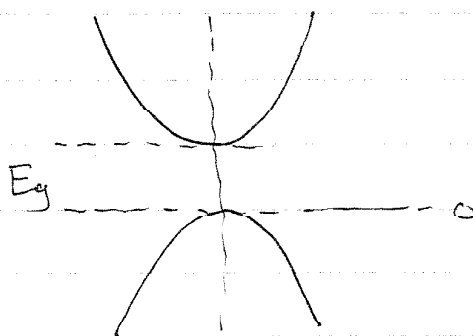
Vi sammenligner dette med dielektrisitetskonstanten for en dielektrisk isolator

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2}$$

Dette gir: $\epsilon(\infty) = \frac{3\epsilon_B}{\epsilon_B + 2}$, $\omega_L = \omega_p$

$$\omega_T = \left(\frac{2\omega_p^2}{\epsilon_B + 2} \right)^{1/2}$$

Oppgave 3



Energi-båndene er gitt av

$$E_v = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_v}$$

$$E_c = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}$$

$$E_c - E_v = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}$$

$$\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v}$$

Fra den oppgitte ligningen

$$\epsilon_2 \sim \frac{JDS}{\omega^2} \sim \frac{1}{\omega^2} \int d^3k \delta(E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} - \hbar\omega)$$

$$= \frac{4\pi}{\omega^2} \int k^2 dk \delta(E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} - \hbar\omega)$$

Fra $\int g(x) \delta(f(x)) dx = \frac{g(x_0)}{\left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_0}}$ for

$$\epsilon_2 \sim \frac{1}{\omega^2} \frac{k_0^2}{k_0}$$

$$\text{med } \hbar k_0 = \sqrt{2m_r(\hbar\omega - E_g)}$$

Dette gir til slutt:

$$\epsilon_2 \sim \frac{1}{\omega^2} \sqrt{\hbar\omega - E_g}$$

$$\hbar\omega > E_g$$

$$\epsilon_2 = 0$$

$$\hbar\omega < E_g$$

b) Her får vi

$$\epsilon_2 \sim \frac{1}{\omega^2} \int d^3k \propto k^2 \delta(E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} - \hbar\omega)$$

$$= \frac{4\pi\alpha}{\omega^2} \frac{k_0^4}{k_0/m_r} = 4\pi\alpha m_r \cdot \frac{k_0^3}{\omega^2}$$

med igjen $\hbar k_0 = \sqrt{2m_r(\hbar\omega - E_g)}$
som gir

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

$$\epsilon_2 = 0$$

$$\hbar\omega < E_g$$

c) Energien til excitonet er gitt av

$$E_n = - \frac{\mu_{ex} e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \epsilon_r^2 \hbar^2 n^2} = - \frac{\mu_{ex}}{\mu_{ex} \epsilon_r} \frac{1}{2} E_H \quad E_{nH} = - \frac{\mu_{ex}}{\mu_{ex} \epsilon_r^2} \frac{1}{2} E_H$$

Her er

$$\frac{1}{\mu_{ex}} = \left(\frac{1}{0.067} + \frac{1}{0.53} \right) \frac{1}{m_e} \Rightarrow \mu_{ex} = 0.0595 m_e$$

$$\mu_{ex} \approx m_e$$

$$E_n = - \frac{13.6 \cdot 0.0595}{13.1^2} = 0.0047 \text{ eV} = 4.7 \text{ meV}$$

Oppgave 4

$$a) \langle p_x \rangle = \langle p \cos \theta \rangle$$

$$= \frac{\int p \cos \theta e^{-p E \cos \theta / kT} \sin \theta d\theta dp}{\int e^{-p E \cos \theta / kT} \sin \theta d\theta dp}$$

$$= p \frac{\int_{-1}^1 x e^{-\frac{pE}{kT} x} dx}{\int_{-1}^1 e^{-\frac{pE}{kT} x} dx}$$

Beregner vi disse integralene får vi

$$\langle p_x \rangle = p \left[\coth u - \frac{1}{u} \right]$$

$$\text{med } u = \frac{pE}{kT}$$

b) For $u \ll 1$ kan vi rekkeutvikle $\coth u$
Gjør vi dette finner vi at

$$\langle p_x \rangle = p \cdot \frac{1}{3} u = \frac{p^2}{3kT} E$$

$$\Rightarrow \alpha_d = \frac{p^2}{3kT}$$

Settes dette inn i Clausius-Mosotti får vi

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{1}{3\epsilon_0} N \left(\frac{p^2}{3kT} + \alpha_{\text{jon}} + \alpha_{\text{el}} \right)$$