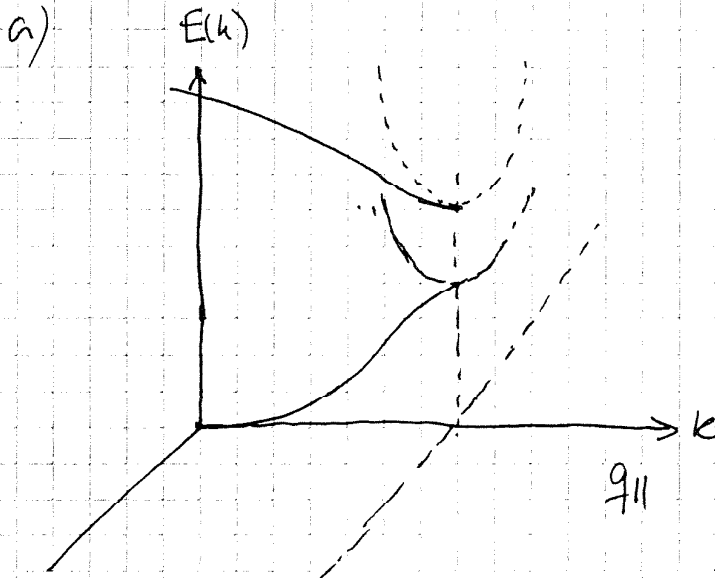


FASTE STOFFER. JANUAR 2000. 1

Oppgave 1.



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

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

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

$$E_F = E_{G/2}^0 - |U_G| + \Delta. \quad \text{Dersom } \Delta < 2|U_G|$$

Så er $E_F <$ bunnen av bånd #2 og Fermiflata ligger i sin helhet i første BZ

$E = E_F$ gir:

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

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

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

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

Fra dette ser vi at vi får følgende effektive masser:

1 ste bånd:

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

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

2 bånd

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

$$m_{\parallel}^{\pm} = \frac{m}{1 + \frac{2E_{G/2}^0}{|U_G|}}$$

c)

3

Tilstandstettheten i de to båndene finnes ved å beregne integralet

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

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

Vi integrerer først over q_{\perp}

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

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

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

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

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

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

$$D(E) = 0$$

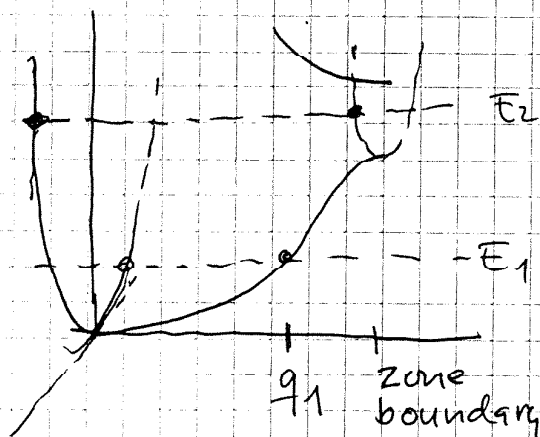
$$\text{for } E < E_{G/2}^0 + |U_G|$$

$D(E)$

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



Før det laveste båndet blir situasjonen noe mer kompleks.



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

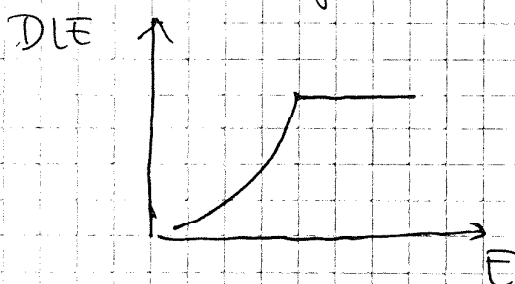
Før E_2 er $q_{min} = 0$ og $q_{max} = \text{sentrum}$

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

Før $E < E_{G/2}^0 - |U_G|$

$$D(E) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2M_1L}{\hbar^2} \left(\text{Konst} - \sqrt{(E_{G/2}^0 - |U_G|) - E} \right) \frac{2M_2L}{\hbar^2}$$

Plotter vi dette får vi:



Oppgave 2.

a) se Kittel.

b)

$$A_k = \frac{2\pi e}{h \Delta(\frac{1}{B})} = \frac{(2\pi)^2 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}}{6.62 \cdot 10^{-34} \cdot 1.83 \cdot 10^{-5}} = \underline{5.21 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-2}}$$

I fri elektron modellen er

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

$$A_k = \pi (3\pi^2 n)^{2/3} = \pi (3 \cdot \pi^2 \cdot 8.45 \cdot 10^{28})^{2/3} = \underline{5.79 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-2}}$$

Dette er som forventet. Tilstander 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~~

Det betyr at vi kan skrive

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

Z er midlere ladning pr. atom for at

Fermi kula skal bevare z-egenskap

Løse n 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. Schrødingers ligningen blir

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

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

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

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

Dette gir løsningen:

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

$$\text{med } k_z \left(\frac{d}{2}\right) = n \cdot \pi \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

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

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

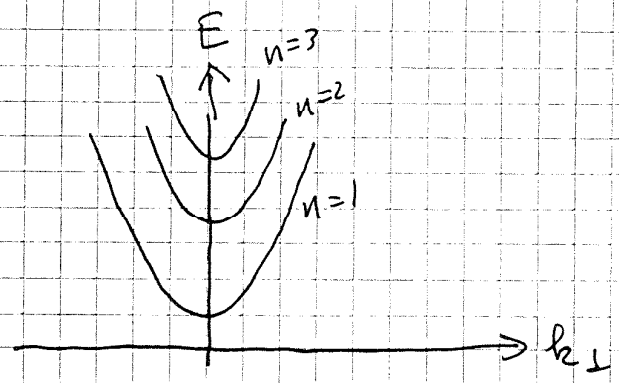
$$\text{med } k_z \left(\frac{d}{2}\right) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi$$

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

Tillsammen får vi därför energispektrat

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

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



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

b) I två dimensioner är tillståndstätteten konstant

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

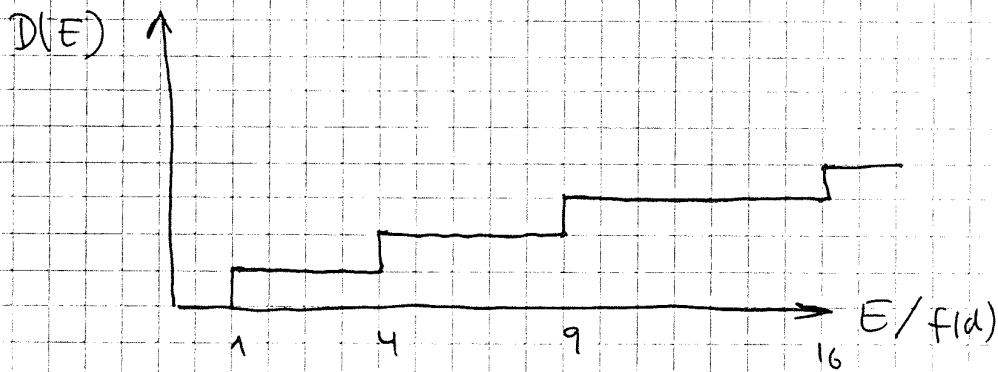
Detta ger:

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

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

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

Plotten vi dette fás:



- 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 fás

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

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

Eventuelt for $T = 15 \text{ mK}$ fás

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

b)

$$\begin{aligned}\epsilon_1(0) &= 1 + \frac{2}{\pi} \int \frac{\epsilon_2(\xi)}{\xi} d\xi \\ &= 1 + \frac{2}{\pi} \int_2^6 -\frac{2(E-2)(E-6)}{E} dE = \underline{4,59}\end{aligned}$$

Fra a)

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

Multiplisera med ξ^2

$$E_p^2 = -\frac{2 \cdot 2}{\pi} \int_2^6 E(E-2)(E-6) dE = 54,4 \text{ eV}^2$$

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

Vidare kan vi fin plasmafrekvensen

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

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

Med insatte talvärden får vi

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

Oppgave 5.

a) Se Kittel

b) Vi beregner først molekyl tettheten

$$N_V = N_A \cdot \frac{\rho}{M_{\text{mol}}} = \frac{2.17 \cdot 10^3}{58.4} \cdot 6.02 \cdot 10^{23} =$$

$$= \frac{2.17 \cdot 6.02}{5.84} \cdot 10^{28}$$

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

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

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

Fra Kittel får

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

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

$$\Rightarrow \frac{E_{\text{lok}}}{E} = \left(1 + \frac{\epsilon - 1}{3}\right) = 1 + \frac{4.9}{3} = \underline{\underline{2.63}}$$

For synlig lys:

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

c) Fra å beregne dipolmomentet per ionepaar
 beregner vi polarisasjon pr m^3 og
 dividerer med antall molekyler pr m^3

$$P = \chi(0) \epsilon_0 E = (\epsilon(0) - 1) \epsilon_0 E \quad (\epsilon_0 \approx E)$$

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

Dipolmomentet pr. ionepaar blir da

$$p = \frac{P}{N_v} = \frac{4,34 \cdot 10^{-2}}{2,24 \cdot 10^{28}} = 1,94 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$$

Dette tilsvarer en ladningsforskyvning d
 gitt av

$$e \cdot d = p$$

$$d = \frac{1,94 \cdot 10^{-30}}{1,6 \cdot 10^{-19}} = \underline{1,21 \cdot 10^{-11} \text{ m}}$$

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