FASTE STOFFER 2. AUGUST 2000

Oppgave 1

a) Sentrum i en av de hexagonale flatene 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 fås betingelsene

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

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

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

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

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

Disse ligningene kan bare oppfylles
dersom :

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

ↄ: Energikonturene slår $\perp$ på zonegrensa.

c) Tight binding approximasjonen sier at

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

FCC strukturen har 12 nærmeste naboer
med koordinater:

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

Innsatt gir dette

$$E(k) = E_0 - \alpha - \gamma\left(e^{i\frac{a}{2}k_x}\left(e^{i\frac{a}{2}k_y} + e^{-i\frac{a}{2}k_y}\right) + e^{-ik_x\frac{a}{2}}\left(e^{i\frac{a}{2}k_y} + e\right.\right.$$

+ tilsvarende for "x, z" og "y, z" permut

Dette gir direkte:

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

$$\left. + \cos k_y \tfrac{a}{2} \cos k_z \tfrac{a}{2}\right)$$

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

$$\left.\frac{\partial E}{\partial k_x}\right|_{k_x = \frac{2\pi}{a}} = -4\gamma\left(-\frac{a}{2}\sin k_x \frac{a}{2} \cos k_y \frac{a}{2} - \frac{a}{2}\sin k_x \frac{a}{2} \cos k_z \frac{a}{2}\right)\Big/_2$$

$$= 4\gamma \cdot \frac{a}{2}\left(\sin\pi\cos\pi + \sin\pi\cos\pi\right) = 0$$

Tilsvarende bevises også enkelt for L-punktet.

Oppgave 2.

Fra Maxwell

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

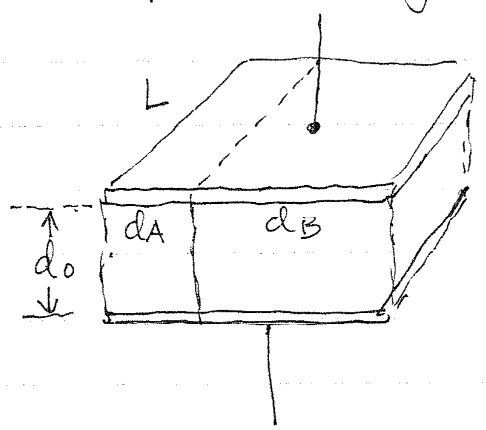
$$\Rightarrow \epsilon = 1 + \frac{i\sigma}{\epsilon_0\omega}$$

Dersom vi har både fri og bundne elektroner ville 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 parallelkopling av to kondensatorer. Ta en vilkårlig lengde L slik som vist på figuren

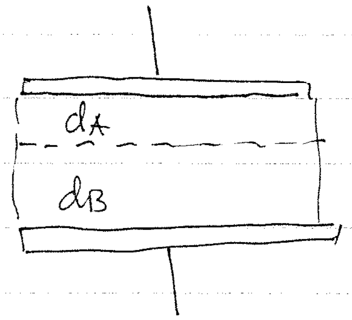
$$C_A = \epsilon_A \frac{L \cdot d_A}{d_0} \qquad C_B = \epsilon_B \frac{L \cdot d_B}{d_0}$$

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

Dette gir

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

For E-feltet $\perp$ på lagene:



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

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

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

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

c) For det parallelle tilfellet

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

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

For $d_B = 2d_A$

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

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

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

For det vinkelrette tilfelle

$$\frac{1}{\epsilon_\perp} = \frac{d_A}{d_A+d_B}\frac{1}{1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2}} + \frac{d_B}{d_A+d_B}\frac{1}{\epsilon_B}$$

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

$$= \frac{1}{3}\frac{\epsilon_B + 2\left(1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)}{\epsilon_B\left(1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)}$$

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

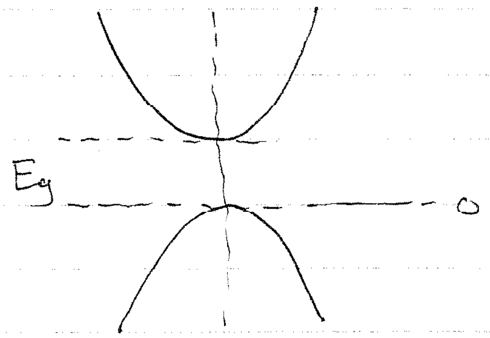
Vi sammenligner dette med dielektrisitets-konstanten for en dielektrisk isolator

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

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



Energibåndene er gitt av

$$E_v = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} \qquad E_c = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

$$E_c - E_v = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} \qquad \frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_v}$$

Fra den oppgitte ligningen

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

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

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

$$\epsilon_2 \sim \frac{1}{\omega^2}\frac{k_0^2}{k_0} \qquad \text{med } \hbar k_0 = \sqrt{2m_r(\hbar\omega - E_g}$$

Dette gir til slutt:

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

$$\epsilon_2 = 0 \qquad \hbar\omega < E_g$$

b) Her får vi

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

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

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

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

$$\epsilon_2 = 0 \qquad \hbar\omega < E_g$$

c) Energien til excitonet er gitt av

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

Her er

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

$$\mu_{el} \approx m_e$$

$$E_n = -\frac{13.6 \cdot 0.0595}{13.1^2} = 0.0047\ \text{eV} = 4{,}7\ \text{meV}$$

Oppgave 4

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

$$= \frac{\int p\cos\theta\, e^{-pE\cos\theta/kT} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi}{\int e^{-pE\cos\theta/kT} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi}$$

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

Beregner vi disse integralene får vi

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

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

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

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

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

Settes dette inn i Claussius-Mosotti får vi

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