

Oppgave 1 a) Vi skal deavne og hattutene Wiedemann-Franz lov koefisienten,  $\lambda = K / (\sigma T)$ , barent på Free electron gass (FEG).

Fra kapittel 5 i Kittel har vi at for klassiske ideelle gass (som jo Drude (FEG)-modellen er barent på) er den termale konduktiviteten gitt av:

$$K = \frac{1}{3} v_t^2 \tau C_V \quad (1)$$

Før vi finner den elektriske konduktiviteten, ser vi at vi har velociteten til elektroner i FEG ved romtemperaturer gitt av:

$$\frac{1}{2} m v_t^2 = \frac{3}{2} k_B T \Rightarrow v_t = \sqrt{\frac{3 k_B T}{m}}$$

Når vi så anvender et elektrisk felt og med Newtons andre lov får vi ligningen til innflytning:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} m_e = -e \mathbf{E}$$

Dette integrerer vi

$$\int \frac{dv}{dt} m_e = -e E \Rightarrow v m_e = -e E t$$

(1)

som igjen blir til

$$v(t) = -\frac{eEt}{m_e}$$

Med  $\bar{T}$  som gjennomsnittlig tid mellom hoppjoner får vi

$$\bar{v} = -\frac{eE\bar{T}}{m_e}$$

Med formelen for current density (stromstyrke på nivå) slik:  $j = n\bar{v}(-e)$  får vi

$$j = \frac{n e^2 \bar{T}}{m_e} E \quad (\text{Ohms lov})$$

Vi bruker så en annen versjon av  $j = \sigma E$  som omgjøres til  $\sigma = \frac{j}{E}$  for å få

$$\sigma = \frac{n e^2 \bar{T}}{m_e} \quad (2)$$

(1) og (2) settes så inn i  $L = K / (\sigma \bar{T})$

$$L = \frac{\frac{1}{3} V_t^2 \bar{T} C_V}{\frac{n e^2 \bar{T}}{m_e}} \quad (1)$$

Fra Månnicks gass lov har vi at

$$C_V = \frac{3}{2} n k_B$$

Dette gir oss da

$$L = \frac{1}{3} \cdot 3 k_B T \cdot \tau \cdot \frac{3}{2} n k_B \cdot m_e$$
$$\underline{m_e \cdot n e^2 \tau}$$

$$L = \frac{3}{2} \frac{k_B^2}{e^2} \cdot T$$

Ved å sette inn  $T$ -leddet i  $L = K/(eT)$  gir det oss:

$$L = \frac{3}{2} \left( \frac{k_B}{e} \right)^2$$

I denne oppgaven skal vi også ha hukuhene korrigert.

$$L = \frac{3}{2} \left( \frac{(1,38 \cdot 10^{-23})^2}{(1,602 \cdot 10^{-19})^2} \right) (erg/cesu-K)^2$$

$$L = \underline{1,11 \cdot 10^{-8} \text{ watt-ohm/K}^2}$$

(3)

Den verdien vi fant på følgende side var omkring halvparten av den eksperimentelle verden på øde  $15^{\circ} \text{C}$  i Kittel. Dette tyder på ganske god enighet.

Vedrørende det å forklare denne enigheten, når de individuelle delene er mindre hensetlig, har vi for eksempel at  $C_V$  er 100 ganger for stor ut i fra øde  $141^{\circ} \text{C}$  i Kittel. Men dette blir kompensert ved at estimatet for  $v^2$  er 100 ganger for liten.\* Videre har vi for Drude-modellen at man antok at ladningsbærenes dannede en ideell gass. Dette stemmer ikke godt da de følger Fermi-Dirac-distribusjon og har interaksjoner. Resultatet viser det samme som Drude-modellen fikk en gass av interaksjonspartikler kan bli beskrevet som et system av kvaripartikler som nesten ikke har interaksjoner.

\* Partiklene utjerner hverandre. Antas  $v_F = 10^5 \text{ m/s}$  i FEG og  $\approx 10^6 \text{ m/s}$  i FEFG (se tabell på s. 139)

b) Vi skal forbedre L ved å finne den ut fra Fri elektron Fermi gass (FEFG):

Her har vi fått oppgitt at  $C_V = \frac{\pi^2 N k_B T}{2 T_F}$

og at vi skal bruke  $N_F$  for elektronvektørhett

(4)

Vi benytter oss av  $K = \frac{1}{3} C_{Vg} l$  hvor  
 $l = T V_F$  som påpekt i kasset. Andre form-  
ler vi trenger i utledningen er  $k_B T_F =$   
 $E_F$  og  $\epsilon_F = \frac{1}{2} m V_F^2$ . Dette gir oss

$$K = \frac{1}{3} C_{Vg} l = \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{n k_B^2 T}{m V_F^2} \cdot V_F \cdot T V_F$$

$$\sim K = \frac{\pi^2 n k_B^2 T \gamma}{3 m}$$

Dette setter vi inn i  $L = K / (\sigma T)$  og får

$$L = \frac{\pi^2 n k_B^2 T \gamma / 3 m}{(n e^2 \tau / m) \cdot T}$$

$$\sim L = \underline{\underline{\frac{\pi^2}{3} \cdot \left(\frac{k_B}{e}\right)^2}}$$

Så finner vi den numeriske verdien

$$L = \frac{\pi^2}{3} \cdot \left( \frac{(1,38 \cdot 10^{-23})^2}{(1,602 \cdot 10^{-19})^2} \right) = \underline{\underline{2,44 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m} / \text{K}^2}}$$

For enhet, se følgende oppgaver.

(5)

Vi ser at dette resultatet er langt nærmere den eksperimentelle verdien som er oppgitt i Köttel.

Opgave 3 a) Vi skal vise at Fermi-energien og det lydemeße potensialet er lik ved  $T=0\text{ K}$ . Altå at  $\mu = E_F$ . I opgaven får vi oppgitt at  $G = N \cdot \mu$  ved  $T=0\text{ K}$ . Dette skal vi så sammenligne med  $G = E + pV$ . Det gir oss denne ligningen:

$$G = N \cdot \mu \Rightarrow E + pV = N \cdot \mu \quad (3)$$

For vi integrerer Fermi-Dirac sordelingen finner vi en passende verdi. For et  $N$  antall av Fermioner i volum  $V$  har vi:

$$N = g_s 2\pi V \left( \frac{2\pi}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2}}{e^{\beta(\epsilon_F - \mu)} + 1} d\epsilon$$

Som i (3) har vi også finne  $N$  gjennom

$$N = \sum_s \bar{n}_s = 2 \int_{E_F}^\infty \deg(\epsilon) \times 1$$

$$N = 2(2\pi V) \left( \frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \frac{2}{3} E_F^{3/2}$$

Dette gir oss en verdi for  $g_s$  (når vi tar henvise til begge spinstilstander, vi multipliser med 2)

$$g_s(\varepsilon) = \frac{3}{2} \frac{N}{\varepsilon_F} \left( \frac{\varepsilon}{\varepsilon_F} \right)^{1/2} \quad (4)$$

Vi ser også at (4) er ganske lik density of states på øvre 140, men litt omdannet for  $\varepsilon_F$ .

Dette gir da energien

$$E = \int_0^{\varepsilon_F} E g_s(\varepsilon) \cdot d\varepsilon = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$$

Så var intenstionen at vi skal finne trykket v.h.a.

$$P = - \left( \frac{\partial E}{\partial V} \right) = N \frac{2}{5} \varepsilon_F$$

Dette gir oss da venstreiden i (3)

$$E + PV = \frac{3}{5} N \varepsilon_F + \frac{2}{5} N \varepsilon_F = N \varepsilon_F$$

som gir

$$N \varepsilon_F = N \mu \Rightarrow \underline{\varepsilon_F = \mu}$$

b) Vi skal plotta FDD som funksjon av  $E/E_F$ . Vi har at  $T_F = E_F/k_B$ . Dette gir oss da med tabellverdier for metaller ( $E_F$ ):  
 % Vi plottet det som script i Matlab og med verdierne 8.617 eV.

$$k_B = 8.617 \text{ eV}$$

$$E_F = 0,56$$

$$E = -0,2 : 0,0005 : 1,4 \quad \% \text{ Energi nivåer}$$

% Vi har da  $T_F \approx 6500$

$$T1 = 65 \quad \% T = 0,01TF$$

$$T2 = 650 \quad \% T = 0,1TF$$

$$T3 = 3250 \quad \% T = 0,5TF$$

$$T4 = 6500 \quad \% T = TF$$

$$T5 = 7800 \quad \% T = 1,2TF$$

$$gT1 = 1 ./ (1 + \exp((E - EF * ones(size(E))) / (k_B * T1)));$$

$$gT2 = 1 ./ (1 + \exp((E - EF * ones(size(E))) / (k_B * T2)));$$

$$gT3 = 1 ./ (1 + \exp((E - EF * ones(size(E))) / (k_B * T3)));$$

$$gT4 = 1 ./ (1 + \exp((E - EF * ones(size(E))) / (k_B * T4)));$$

$$gT5 = 1 ./ (1 + \exp((E - EF * ones(size(E))) / (k_B * T5)));$$

⑧

```

figure (1); clf
plot (E, gT1, 'b', 'LineWidth', 2);
plot (E, gT2, 'r', 'LineWidth', 2);
plot (E, gT3, 'g', 'LineWidth', 2);
plot (E, gT4, 'c', 'LineWidth', 2);
plot (E, gT5, 'y', 'LineWidth', 2);
axis([-0.2 1.3 -0.1 1.1])
set (1, 'Position', [34 88 634 538]);
 xlabel ('E / EF');
 ylabel ('g(E)');
 title ('Fermi-Dirac fordeling');
 legend ('T = 0,01 TF', 'T = 0,1 TF', 'T = 0,5 TF',
 'T = TF', 'T = 1,2 TF', 'Location', 'SouthWest');

```

Plotter følger som vedlegg

Når vi sammenligner det med tabellverdiene på side

- ~ B6, så ser figuren jeg har depekt opp relativt overenslig ut. 1,2 TF kunne ha vært litt lengre ned i midten i startpunktet. Dette kan ha noe med min løse TF. Jeg vil si at  $T = 3250 \text{ K}$  er en realistisk temperatur.

c) Så skal vi se på temperaturavhengigheten av  $n$  og plottet  $N/EF$  som funksjon av  $T/T_F$ .

Vi har at antallet partikler ikke forandrer

seg, så vi får

$$N = \int_0^{\infty} g(\epsilon) g(\epsilon) d\epsilon$$

(9)

$$= 4\pi V \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2} d\epsilon}{e^{(\epsilon-\mu)/kT} + 1}$$

For  $T=0$ , setter vi inn

$$N = \int_0^{\epsilon_F} g(\epsilon) d\epsilon = \frac{8\pi V}{3} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon_F^{3/2}$$

og dette gir oss

$$N = \frac{8\pi V}{3} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon_F^{3/2} = 4\pi V \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2} d\epsilon}{e^{(\epsilon-\mu)/kT} + 1}$$

Vi eliminerer faktorene som går igjen på begge sider og får

$$\frac{2}{3} \epsilon_F^{3/2} = \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2} d\epsilon}{e^{(\epsilon-\mu)/kT} + 1}$$

Efter en del mellomregning og approksimasjoner av integralet får vi:

$$\int_0^\infty \epsilon^{1/2} g(\epsilon) d\epsilon = \mu^{3/2} \left( 1 + \frac{\pi^2}{8} \left( \frac{kT}{\mu} \right)^2 + \frac{7\pi^4}{640} \left( \frac{kT}{\mu} \right)^4 \right)$$

$$= \epsilon_F^{3/2}$$

⑩

Ni har potensen av  $\frac{2}{3}$  på begge sider av ligningen og utvider ledet, noe som gir:

$$n = \epsilon_F \left( 1 + \frac{\pi^2}{8} \left( \frac{hT}{m} \right)^2 + \frac{7\pi^4}{640} \left( \frac{hT}{m} \right)^4 \right)^{-2/3}$$

$$\approx \epsilon_F \left( 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{hT}{m} \right)^2 + \frac{\pi^4}{720} \left( \frac{hT}{m} \right)^4 \dots \right)$$

så setter vi inn  $\epsilon_F = kT_F$  som gir

$$\begin{aligned} n &\approx \epsilon_F \left( 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 \right) \\ \Rightarrow \frac{n}{\epsilon_F} &= \left( 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 \right) \end{aligned}$$

Nå kan vi pløtte grafen og koden. Søker relativ

$$k_B = 8,617 \text{ e-5};$$

$$E_F = 0,56;$$

$$T = 0 : 100 : 50000;$$

$$T_F = (E_F / k_B);$$

$$u = \left( 1 - \left( (\rho_1) \cdot \Lambda(2) \cdot / (12) \right) * \left( (T) \cdot / (T_F) \right) \cdot \Lambda(2) \right);$$

Plot  $(T, u)$ ;

xlabel('T/T\_F') i

ylabel('u/E\_F') i

title('u/E\_F som funksjon av T/T\_F');

⑪

selve plottet følger som nedlegg

d) Så skal vi seplotte b) med verdiene for  $\mu$  funnet i c)

Vi bruker formelen

$$u = \epsilon_F \left( 1 - \frac{T^2}{T_F} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 \right)$$

hvor vi putter inn  $T = 0,01 T_F, T = 0,1 T_F, \dots$

Dette gir oss disse verdiene

Før  $T = 0,01 T_F \Rightarrow u = 0,559$

Før  $T = 0,1 T_F \Rightarrow u = 0,555$

Før  $T = 0,5 T_F \Rightarrow u = 0,445$

Før  $T = 1 T_F \Rightarrow u = 0,099$

Før  $T = 1,2 T_F \Rightarrow u = -0,103$

Kodingen i Matlab blir da som følger, men med  $E_g = M =$  de verdiene i avsnittet ovenfor.  
Plottet følger som nedlegg.

e) Vi skal lage et estimat elektronisk varmekapasitet, ut i fra at bare en fraksjon bidrar til summen i total energi.

Vi har at antall partikler i et gitt energiintervall er:

$$n(E) dE = 2 g(E) f(E) dE$$

(2)

Ved OK er alle energitilstander under  $E_F$  okkupert. Dette gir da  $g(E) = 1$ . Vi får da

$$N_1 = 2 g(E_F) k_B T$$

Det har vi vist at

$$g(E_F) = \frac{3N}{4E_F}, N = \text{totalt antall elektroner}$$

Det gir

$$N_1 \approx \frac{3}{2} N \frac{k_B T}{E_F}$$

Vi legger dette inn i energi for ideal gass (hentet fra lenesonen i sywhh)

$$U_1 = \frac{3}{2} N_1 k_B T$$

Dette gir da energien for enkelt elektron

$$U_1 = \frac{q}{4} N k_B \frac{k_B T^2}{E_F}$$

Videre er elektron varme kapasitet gitt av

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} \text{ som gir}$$

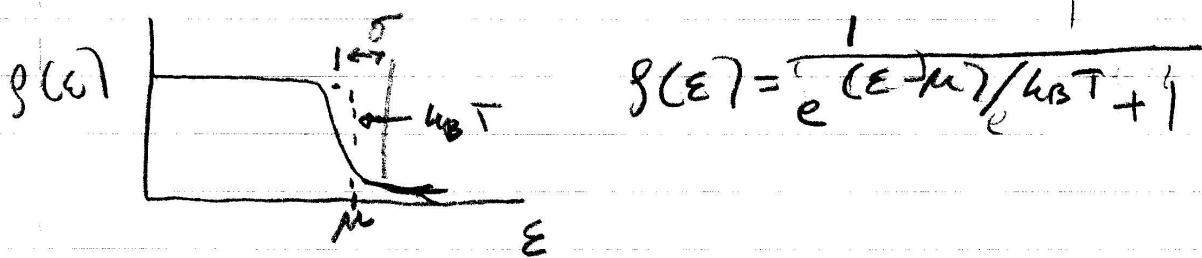
$$\underline{C = \frac{q}{2} N k_B \frac{k_B T}{E_F}}$$

Når vi skal sammenligne  $C$  overfor kan vi sammenligne med  $C$  fra Drude-modellen

$$C = \frac{3}{2} N k_B$$

Vi ser da atterledes at Drude-modellens  $C$

er mye hoyere. Vi har allerede sett på plottet over  $g(E)$  ut i fra  $E$ . Derfor slutter jeg bare an i denne oppgaven:



Vi ser at  $g(E)=1$  for energinivået når  $E$  tilstår at alle energinivåene er fulle. Vi ser at i fra grafen at den delen til hoyne for  $\mu$  feller med en brakjon  $1/e$  over en energidimensjonal på  $k_B T$ . Like til venstre for  $\mu$  har vi også en energidimensjonal på  $k_B T$ . Dette kommer av matematiske fordi vi antar at  $k_B T$  er mye mindre enn  $\mu$  og dette gir  $g(E) = 1 - \exp[(E-\mu)/k_B T]$  og gi en rett linje  $g(E)=1$ .

Dette betyr altså det er elektroner innen  $k_B T$  som er eksisterte. Den termale energien til de eksistente elektronene er på  $k_B T$ .

Når temperaturen øker over  $0\text{K}$ , så blir stoyet i FDD glassere ettersom elektroner like under Fermi energi blir eksistert over det. Vi ser altså at "hulen" er ganskevis liten og ekspansiv. Dette betyr at hvis elektronen målt i trakten av Fermi-energien blir eksistert

Opgave 4 a) Vi skal vise at Density of states (DOS) er uavhengig av energi ( $E$ ) for elektroner i 2D

$$D(E) dE = 2 \cdot \frac{2\pi k dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} * D(k) \text{ er en annen formel for DOS.}$$

Med

$$E = E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k dk = \frac{m}{\hbar^2} dE$$

Dette gir oss da:

$$D(E) = \frac{m A}{\hbar^2 \pi} \quad \text{hvor } A = L^2 \quad (2 \text{ dimensjoner alltid})$$

Altså ingen  $E$  gir at det er uavhengig av  $E$ .

b) Så skal vi vise at DOS (eller  $D(E)$ ) er proporsjonal til  $E^{-1/2}$  i 1D:

$$D(E) dE = 2 \cdot \frac{2 dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)}$$

Fra øde 138 i Kittel har vi også en:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

(15)

Det gir  $dk = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{E}} dE$

Vi retter så dette inn

$$D(E) = \frac{2 \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \cdot E^{-1/2}}{2\pi L}$$

$$D(E) = \frac{L}{\pi} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \cdot E^{-1/2}$$

DOS er også proporsjonal med  $E^{-1/2}$

a) Vi skal se hvilke DOS trender for quantum wells og quantum wires sammenlignet med 3D.

Forst vil jeg legge til en figur (vedlegg 1) som viser Density ut i fra energien. Der ser vi at quantum wells går ettersom som fortalt i oppgavelekturen. Ut i fra a) og oppgavelekturen har vi at  $k_z$  er konstant. Det gir at bølgemfunksjonen i en retning alltså er konstant. Rent matematisk har vi også fra a) at  $D(E) = \frac{mA}{\hbar^2 \pi}$ . Dette alltså

vi på  $k_x$  eller  $k_y$  og  $k_z$ . Det gir oss

16

$$P_{\text{energi}} = \frac{m}{\pi \hbar^2}, \text{ Med denne Density of States}$$

medfører også tilstander assosiert med  $k_z$ . Som en følge av det er hver  $k_z$ -verdi medført av et "subband" og dette blir matematisk uttrykt som

$$P_{\text{energi}}(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \sum_{n_z} \Theta(E - E_{n_z}) \text{ hvor}$$

- $n_z$  er den inndelen assosiert med "confinement energi" (et begrep fra kvantemekanikken) og kommer fra quantum confinement. Quantum confinement er ansvarlig for økning i energiforskjell mellom energitilstander langs  $z$ -retningen. Husk at  $z$ -retningen er kvantisert og  $\Theta(E - E_{n_z})$  er Heaviside stegfunksjonen. Det gir oss da tendensen i plottet hvor man får steigende fløyling på plottet i 2D, mens det i 3D får en jevn stigning.
- etterom det er ingen kvantiserte  $k$ -komponenter.

Fortsett på en annen måte (for å være helt sikker på at sensor forteller meg korrekt) så har vi at  $k$ -bølgivektorer ligger i et plan med  $z$ -komponent fram til  $k_x^2 + k_y^2$  er så stor at  $k_z$  kan skrives.

Da er  $k$ -bølgivektoren såpass at man kan få eksitasjon fra  $n_z=1$  til  $n_z=2$ . Her vil DOS

gjøre et "steg" opp til DOS<sub>3D</sub> og så fortsette kontinuitet til næste eksitasjon fra  $n_z=2$  til  $n_z=3$ .

Denne tendensen går så videre. Vi får da

at DOS<sub>2D</sub>(E) er null for  $E < \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 - k_z^2)$  og hopper for hver gang det blir null i n<sub>z</sub>. Det gir oss da Heaviside-funksjonen vi ser i vidlegg 1.

Som sensor fortør ble svaret mitt litt langt, men jeg skrev det sånn slik at det ikke skulle være noe misforståelse. Den første delen kan karakterisere som mer matematisk, mens den andre er mer praktisk og kommer som en følge av ting jeg har lest på Internett. Det gir i hvert fall, bareaktig på vidlegget, at selv om density i to dimensjoner er konstant for 2D, så er density of states for 2D quantum wellthen stegfunksjon hvorverst generell funksjonsform kommer ved energiens tilhørighet hvert kvantiserte nivå. Altå i motsetning til 3D.

Så ser vi på nærmestningen, som også er 1D. Her er to av bølgemodus-komponentene kvantiserte, mens den k-komponenten er „fri“. Vi gjør som før 2D og dette gir oss:

$$\text{Pengi}(E) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \sum_{n_x, n_y} \frac{1}{(E - E_{n_x, n_y})^2}$$

$$\theta(E - E_{n_x, n_y})$$

Her er E<sub>n<sub>x</sub>,n<sub>y</sub></sub> confinement energi assorert med

(18)

$x$  og  $y$  retningen. Det antyder da at  $k_z$  er den frie retningen. Vi legger også merke til proporsjonaliteten til  $E^{-1/2}$  som i b). Her ser vi på grafen at det er mulig for samme energinivå å oppnå for flere arrangementer. Dette er i ørste kontrast til stevns situasjon i 2D og gjenfinning i 3D. Det er i Nedenfor funksjonen til ledet  $E_{nx, ny}$ .

Man har også en fri dimensjon, her da  $z$ -komponenten, som statenes langs  $z$ -aksen til  $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$  er stor nok til å elektronene kan ellers  $k_x$  DOS ( $E$ ) gjør da et hopp, så minner det med  $E^{-1/2}$ . Den minner til den kan elektronene ellers  $k_x$  på mytt.

d) Vi skal i denne deloppgaven forklare degenerasjon som finnes i quantum wins. Med degenerasjon av energinivåer mener vi at to eller flere forskjellige tilstander av et kvantesystem gir samme verdi av energi ved måling. Vi har allerede sett i forrige oppgave at dette forekommer for quantum wins. Så la oss se på energien for quantum wins:

$$E_{nx, ny} = (n_x^2 + n_y^2) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L^2}$$

Vi har f.eks. det laveste energinivået

$$E_{11} = 2 \left( \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L^2} \right) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L^2}$$

Dette niveauet er ikke degenerert. Men det  
neste

$$\epsilon_{21} = \epsilon_{12} = (4+1) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L^2} \Rightarrow \underline{\underline{\frac{5\pi^2 \hbar^2}{2m L^2}}}$$

dennest er degenerert. Det er gotti vi  
har  $\epsilon_{21}$  og  $\epsilon_{12}$  med samme energi.

Videre er det slik at for quantum niveus  
er det slik at for dobbelde degenerasjon,  
så øker DOS for det energinivået med en  
faktor 2.

Opgave 6 a) Vi har at

$$\epsilon_k = \frac{\pi^2}{2m} k_F^2$$

etterom eten til volumet blir  $\frac{4\pi k_F^3}{3}$

går vi at

$$2 \cdot \frac{4\pi k_F^3 / 3}{(\frac{2\pi}{L})^3} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 = N$$

Dette gir da

$$k_F^3 = \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \text{ med } V = a^3 \text{ volumet, } V =$$

Vi må da ta henvnen til at "halvparten" av monovalente atomer fjernes, når en divalent legges til.

Det bør da gi oss noe svakt:

$$\left( (1-x) + (2x) \right)^{1/3} \cdot \left( 3\pi^2 \right)^{1/3} = \pi$$

$$x = \frac{1}{3}(\pi - 3) \approx 0,047$$

$$= \underline{\underline{4,7\%}}$$

Man må legge til 4,8 % divalente atomer for at  $k_F = k_{FZ}$ . Man får en minsking i elektrisk ledningskraft, fordi antall ledige tilstander vil synke.

c) Vi skal gjøre kationene i a) om igjen for b). Det er oppgitt i oppgaveklusteren at Na krystalliserer i BCC med 2 atomer i hver komponjonelle celle.

Ri har fra oppgave a) at

$$k_F = \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$$

For BCC har vi altså  $\frac{N}{V} = \frac{2}{a^3}$ . Dette gir

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

$$k_F = \left( \frac{24\pi^3}{4a^3\pi} \right)^{1/3} = \left( \frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$$

(21)

Så skal vi sammenligne det med den korteste  
distanzen fra origo i h-rom til kanten av den  
første Brillouin-sonen.

Vi går da i en retning. Dette gir oss (ut i fra  
kortel side 165):

$$k = \frac{1}{2} G = \frac{\pi}{a}$$

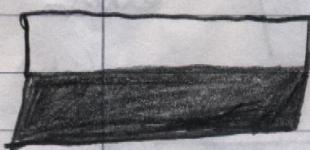
$$\frac{\pi}{a} = \frac{\sqrt[3]{3\pi^2}}{a} \quad (\text{antar at } a \text{ er punkt})$$

$$\text{Det gir oss } 3,14 = 3,09$$

Altså er de omrent like store, men  $k_F$  er mindre  
enn  $k_{BZ}$ .

b) Vi skal finne ut hvor mye divalent atomer skal  
legges til i SC lattisen for å få  $k_F = k_{BZ}$  i  
legingen. Jeg går da ut i verdene vi fant i a).

Vi har da at  $k_{BZ} = \pi$  og hvor variabelen skal være  
kjeg. Vi tillegner  $a=1$  og  $M=1$ . Fra Kuznetsov sine  
forelesningsfilere har vi at oppfyllingen av bånd fore-  
går slik.



Monovalente  
metaller



Divalente  
metaller

Vi ser at  
divalente  
metaller er  
overlappende

Så skal vi sammenligne det med korteste distanse fra origo til h-rom til kanten av første Brillouin-zone. Atomic spacing langs [110] for BCC er  $\sqrt{2}a$ . I følge Hesse Fredriksson: "Physics of Functional Materials", side 166, er  $k_{\max}[110] = \frac{\sqrt{2}\pi}{a}$

Det gir da

$$k_{BZ} = k_F \Rightarrow \frac{\sqrt{2}\pi}{a} = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a}$$

som gir

$$4,44 = 3,90$$

Altså er  $k_{BZ}$  større enn  $k_F$  her enn i a.

d) Vi skal kalkulere hvor mye Mg skal legges til Na for å få  $k_F = k_{BZ}$ . Her er  $Mg^{2+}$  divalent, mens  $Na^+$  er monovalent. Vi gjør som i b da.

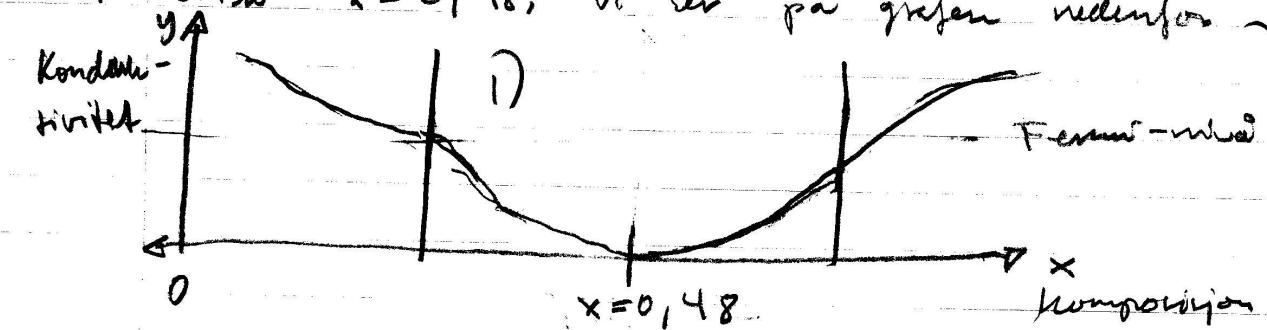
$$\left( (1-x) + 2x \right)^{1/3} \cdot (6\pi^2)^{1/3} = \sqrt{2}\pi$$

Wolfram Alpha gir oss

$$x = \frac{\sqrt{2}}{3}\pi - 1 = \underline{0,48} = \underline{\underline{48\%}}$$

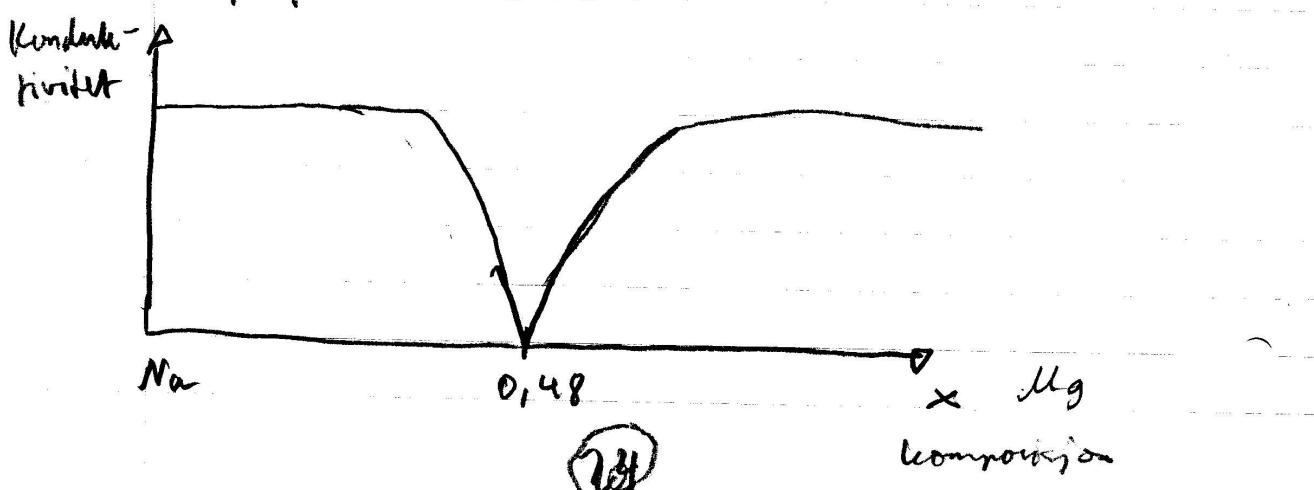
Vi må da ha 48% Mg.

e) Når jeg skal utvile en scenario, så har vi det at hvis en Brillouin sone er helt full opp, så vil det ikke være noen romme tilstander og det vil ikke være noe hundurjon. Så det er hundurjon frem til  $h_S = h_{BZ}$ . Før det blir ingen hundurjon. Når  $h_S$  blir så stor at man kommer seg ut av den sentrale BZ blir det hundurjon igjen. Denne verdien for  $h_S = h_{BZ}$  er altså  $x = 0,48$ . Vi ser på grafen nedenfor.



D) lavste BZ-sone, som er mellom zyglen og albo

Jeg antar at lederaktiviteten girer en evolusjon - hvor den blir mindre etterhvert som det blir flere tilstander. Men det er fortsatt lederaktivitet. En annen graf kan være

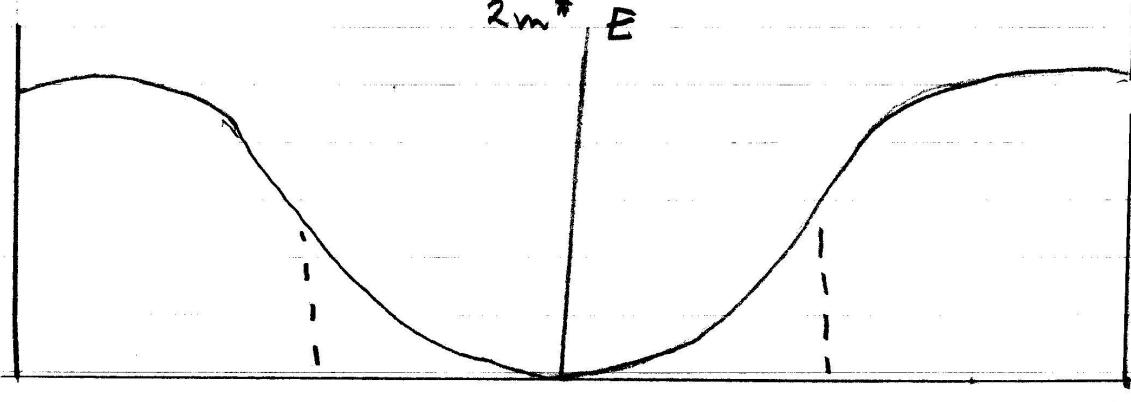


masse.

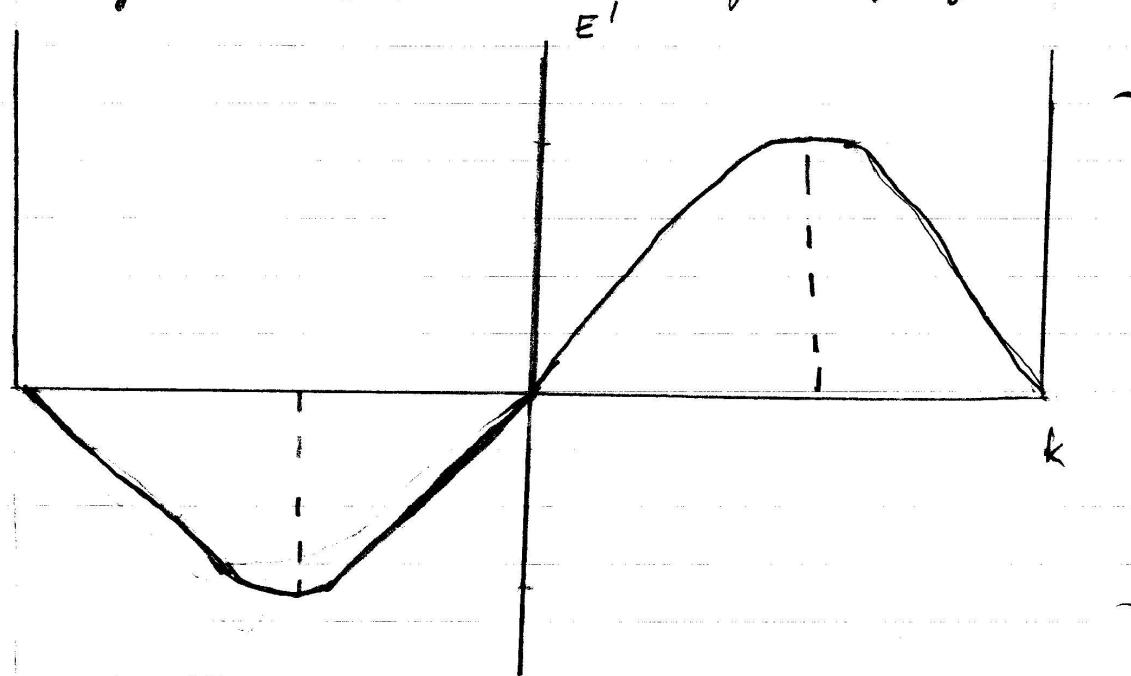
Så skal vi probe  $E(k)$ , dets første og andre derivativ, samt dets effektive masse (som en bestyrje av å være den feste Billowin-zone).

Leg tegner først  $E(k)$ . Dette blir gjort for hånd

$$E(k) = E(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k - k_0)^2$$



Så følger den første-deriverte for ligningen



Oppgave 7 Vi har Taylor-senien:

$$E(k) = E(k_0) + (k - k_0) \frac{\partial}{\partial k} E(k_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} (k - k_0)^2$$

Den enkleste måten å beregne strukturen på er ved minimum og maksimum. Dette gir oss da

$$E(k) = E(k_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} (k + k_0)^2 \quad (4)$$

Fra tidligere har vi utringen  $E = \frac{\pi^2 h^2}{2m}$

Dette omdanner vi til  $\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{\pi^2}{m}$

som blir til

$$m^* = \frac{\pi^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}} \quad \begin{array}{l} \text{(altså den)} \\ \text{effektive massen} \end{array}$$

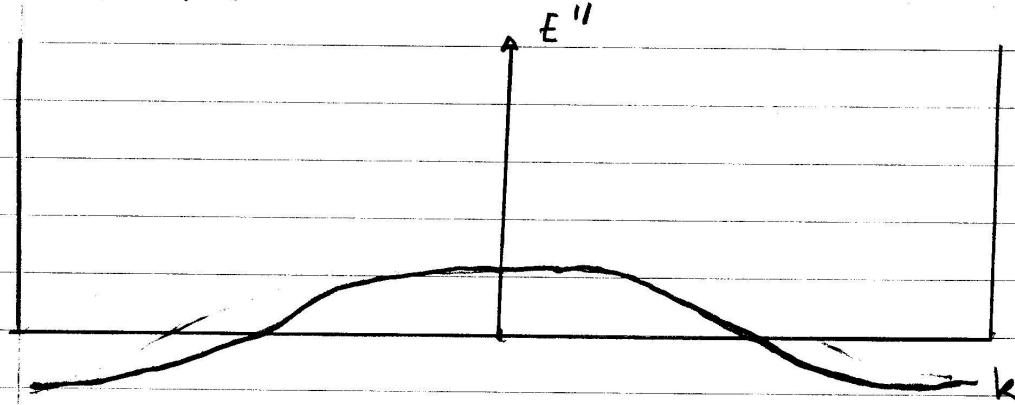
Dette setter vi så inn i (4) og får:

$$E(k) = E(k_0) + \frac{\pi^2}{2m^*} (k - k_0)^2$$

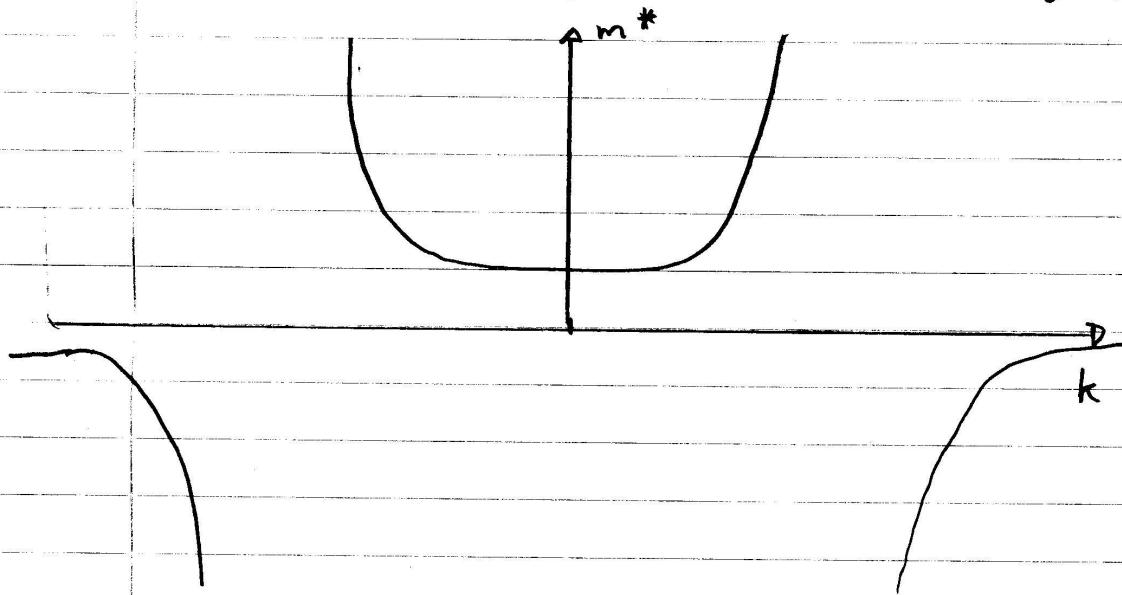
Når det kommer til hvorfor det blir effektiv masse,  $m^*$ , så er det fordi at en av egenskapene til elektroner i bystaller at de responderer til annet elektrisk felt som om de blir tilknyttet en effektiv

(7.6)

Den tredje grafen er av den dobbelt dimerste



Så tegner vi før den effektive massen som funksjon av  $k$



- a) I denne oppgaven skal man diskutere hvorfor effektiv masse er forskyddig fra hvilemassen til elektronet  
Vi har at den effektive massen er avhengig av  
- bølgelengden til elektronet og formen til bandet  
ut i fra formelen vi fant ovenfor.

I of. elv. i en halvleder er det slik at båndbruddet er på 20 eV, mens båndgapet er omstørrelse på 0,2-2 eV. Den reciproke massen er da økt med faktor 10-100, mens effektive massen er redusert til 0,1-0,01 av fri elektronmassen. Når vi går bort fra båndgapet er massen like stor som for fri elektron. Det betyr altså at den effektive massen til elektronet forandrer seg etter miljøet det er i og bevegelsesmengden til miljøet.

b) Den effektive massen kan være negativ. Et elektron nær toppen av et energibånd vil ha en negativ effektiv masse. Et negativt ladet partikkell med en negativ masse vil bli akcelert som en positiv partikkell med en positiv masse (altså et null).

Når vi skal forklare fenomenet med negativ effektiv masse litt nærmere, har vi det at tilstanden med positiv masse kontrimer ved bunnen av båndene på grunn av positiv bånd kurvning, mens negativ opptrer på toppen. Rent fysisk betyr det at å gå fra  $k$  til  $k + \Delta k$  medfører at momentumoverføringen fra kassen til elektronet er større enn momentumoverføring fra den annen delen til elektronet.

c) Vi skal regne ut den effektive massen til elektronene. Det er oppgitt at  $E(h) = Ah^2$  med  $A = 5e-37 \text{ J} \cdot \text{m}^2$ .

Vi har at  $m^* = \frac{\frac{\hbar^2}{2}}{\frac{\partial^2 E}{\partial h^2} E(h_0)}$  som blir  $\frac{\hbar^2}{2A}$

$$\frac{\partial E}{\partial h} = 2Ah \Rightarrow \frac{\partial^2 E}{\partial h^2} = 2A$$

$$m^* = \frac{\frac{\hbar^2}{2}}{2A} = \frac{\hbar^2 c^2 (2\pi)^2}{2A c^2 (2\pi)^2}$$

Her må det påpekes at  $A = 5e-37 \text{ J m}^2 = 3.12 \text{ eV nm}^2$ . Det gir da

$$\frac{(1240 \text{ eV nm})^2}{2A (2\pi)^2 c^2} = 6291 \frac{\text{eV}}{\text{c}^2}$$

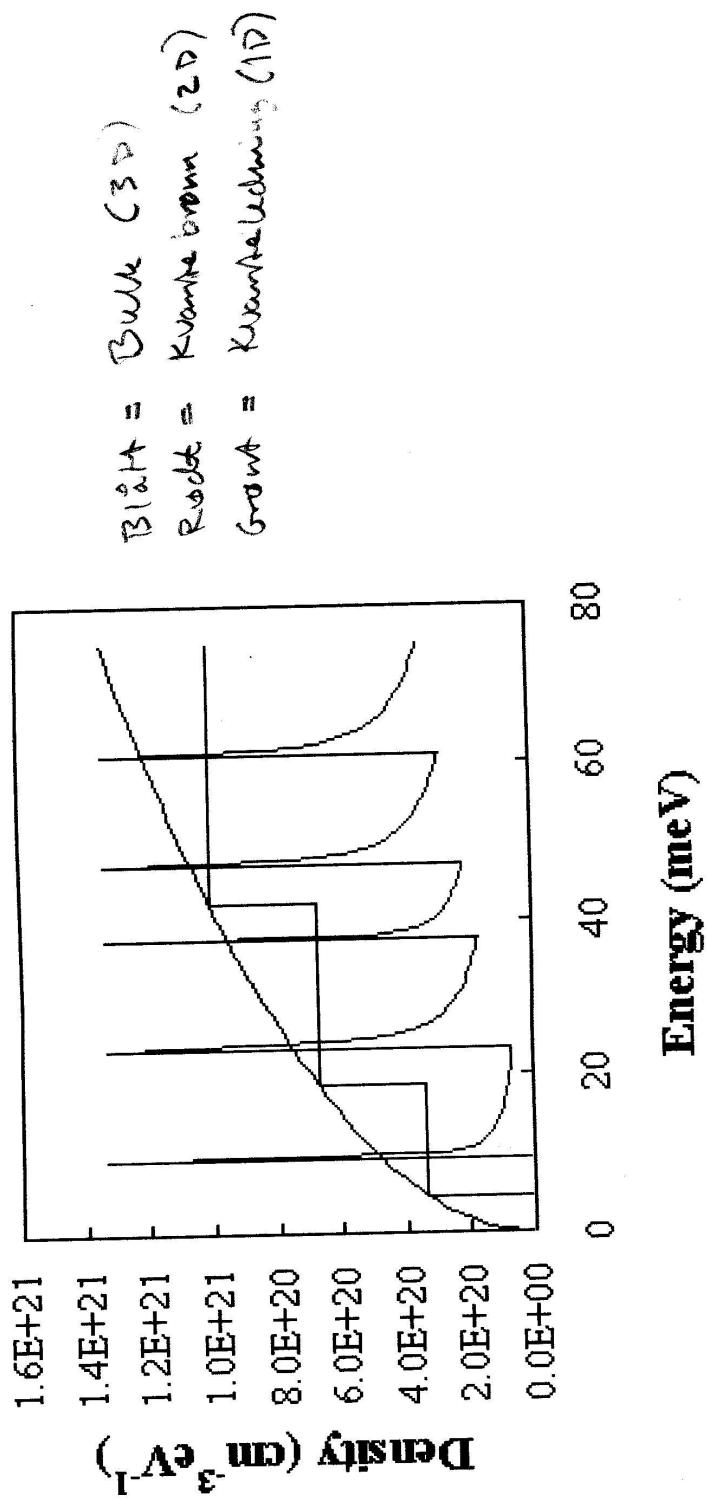
$\approx \underline{0,012 \text{ m}_0}$

### Kommentar til vedleggene

- Det første vedlegget er av DOS i nærområdet og kvarterpriser.
- Det andre vedlegget er av 3b (oppgave) med  $T_F = 6500 \text{ kr}$
- Det tredje vedlegget er av 3c
- Det fjerde vedlegget er av 3d
- Det femte vedlegget er av 3b med  $T_F = 50000$  (som i pensumboken)
- Det sjette vedlegget er av 3b uten fast  $n$  (bare for interesse).

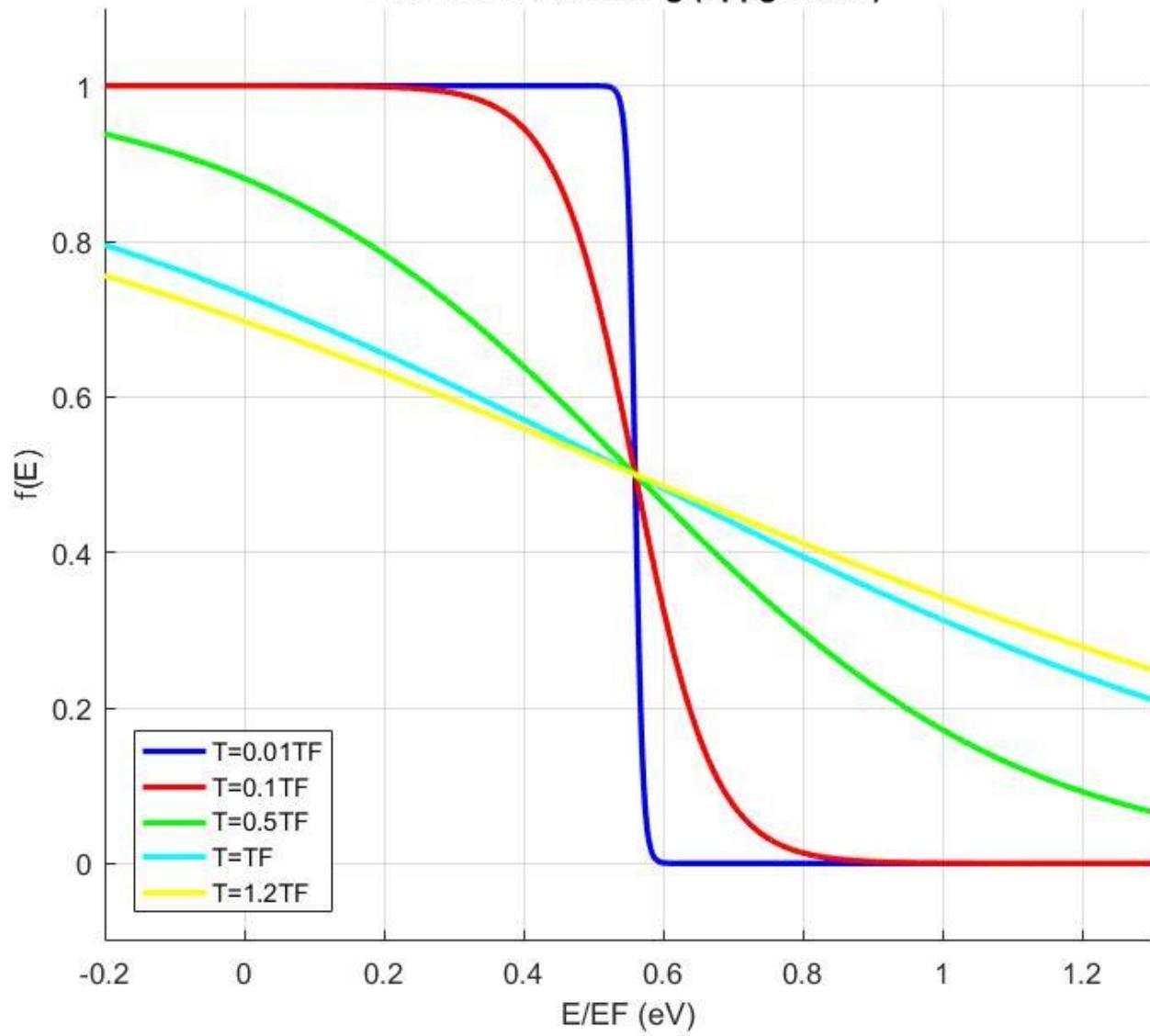
## DOS in nanowires and quantum dots

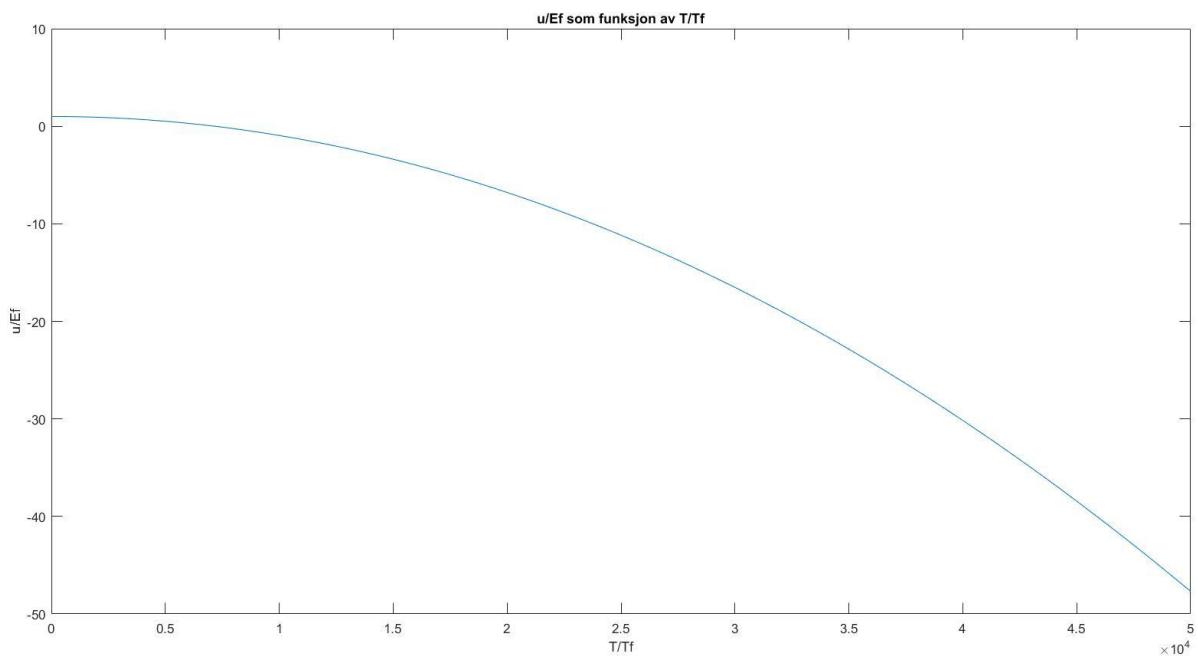
Figure 1



Density of states per unit volume and energy for a 3-D semiconductor (blue curve), a 10 nm quantum well with infinite barriers (red curve) and a 10 nm by 10 nm quantum wire with infinite barriers (green curve).

### Fermi-Dirac fordeling (oppgave 3b)





### Fermi-Dirac fordeling (oppgave 3d)

