

# 고체물리학 기말고사 답안

## 1. (총 30점)

- (a) (10) Bloch theorem: 밴드 이론(전자들이 독립적으로 이온들의 주기적인 포텐셜

$$U(\vec{x} + \vec{T}) = U(\vec{x}) \quad (1)$$

아래에서 움직인다고 가정)에서 전자들이 가지는 고유함수들을 아래와 같은 형태로 나타낼 수 있다.

$$\psi_k(\vec{x}) = u_k(\vec{x})e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}, \quad u_k(\vec{x} + \vec{T}) = u_k(\vec{x}) \quad (2)$$

- (b) Van Hove singularity: 전자 또는 포논의 Density of states(또는 normal modes)(5) 값이 에너지가 변함에 따라 급격히 증가하는 변화 (5)를 보이는 에너지 지점(특히 군속도가 0인 지점에서 나타난다.)
- (c) Brillouin zone:  $k$ -space (모멘텀 또는 wave vector 공간)(5)에서 Wigner-Seitz cell(5)잡는 방식으로 primitive cell을 잡은 cell 내부 영역

## 2. (총 20점)

- (a)  $C_V = AT + \gamma T^3$  (5),  $(T \ll T_D \ll T_F)$  (5) ( $T_D$ : Debye 온도,  $T_F$ : Fermi 온도)
- (b)  $C_V = AT$  (5),  $(T \ll T_D)$  (5) (자유 전자의 contribution이 없으므로)

## 3. (총 100점)

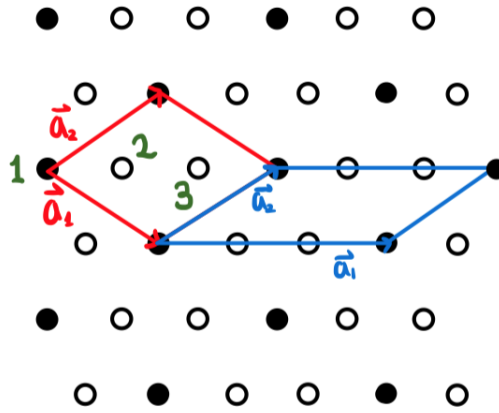


FIG. 1: primitive unit cell, 3-(a)(5)

- (a) 빨간색 primitive lattice vector(5):

$$\vec{a}_1 = \left( \frac{3}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

$$\vec{a}_2 = \left( \frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

원자의 개수: 3개(5) 이고 basis 원자들의 좌표(5)는

$$r_1 = (0, 0)$$

$$r_2 = (a, 0)$$

$$r_3 = (2a, 0)$$

이다. 또는 파란색 primitive lattice vector:

$$\vec{a}_1 = (3, 0)$$

$$\vec{a}_2 = \left( \frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

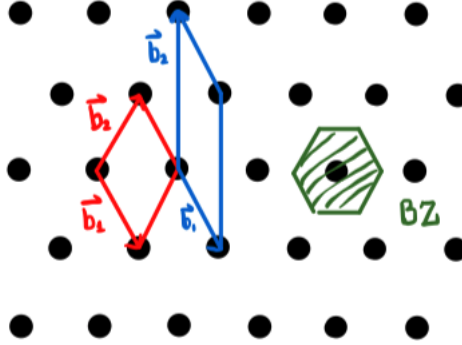


FIG. 2: reciprocal lattice와 Brillouin zone (5)

(b) 빨간 reciprocal lattice vector:

$$\vec{b}_1 = \left( \frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right) b = \left( \frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \right)$$

$$\vec{b}_2 = \left( \frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) b = \left( \frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \right)$$

또는 파란색의 reciprocal lattice vector:

$$\vec{b}_1 = \left( -\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right) b = \left( \frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \right)$$

$$\vec{b}_2 = \left( 0, \sqrt{3} \right) b = \left( 0, \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \right)$$

Brillouin zone은 초록색 빗금과 같다. (5)

(c) (10) 빨간 reciprocal vector에 대하여  $\vec{G} = n_1 \vec{b}_1 + n_2 \vec{b}_2 = \left( \frac{2\pi}{3a}(n_1 + n_2), \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(n_2 - n_1) \right)$ ,  $n_1, n_2 = \text{integers}$

파란 reciprocal vector에 대하여  $\vec{G} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 = \left( \frac{2\pi}{3a}m_1, \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(2m_2 - m_1) \right)$ ,  $m_1, m_2 = \text{integers}$

(d) (10)  $\Delta k = k_f - k_i = G$  (Bragg condition)

(e) (10)

$$\begin{aligned}
S_g &= \sum_j f_j e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j} \\
&= f_A + f_B (e^{-iaG_x} + e^{-2iaG_x}) \\
&= f_A + f_B (e^{-i\frac{2\pi}{3}(n_1+n_2)} + e^{-i\frac{4\pi}{3}(n_1+n_2)})
\end{aligned}$$

(f) (10)

$$S_G = f \left\{ 1 + e^{-i\frac{2\pi}{3}(n_1+n_2)} + e^{-i\frac{4\pi}{3}(n_1+n_2)} \right\}$$

i)  $n_1 + n_2$ 가 3의 배수이면  $S_G = 3f$ ii)  $n_1 + n_2 = 3l \pm 1$ , ( $l$ 은 정수)

$$\begin{aligned}
S_G &= f \left\{ 1 + e^{-i\frac{2\pi}{3}(3l \pm 1)} + e^{-i\frac{4\pi}{3}(3l \pm 1)} \right\} \\
&= f \left\{ 1 + e^{-i\frac{2\pi}{3}} + e^{-i\frac{4\pi}{3}} \right\} \\
&= 0 \quad (5)
\end{aligned}$$

새로운 primitive reciprocal lattice vector는

$$\vec{b}'_1 = 2\vec{b}_1 + \vec{b}_2, \quad (n_1, n_2) = (2, 1)$$

$$\vec{b}'_2 = -\vec{b}_1 + \vec{b}_2, \quad (n_1, n_2) = (-1, 1)$$

이고 new lattice constant는

$$\begin{aligned}
\sqrt{3}b &= \sqrt{3} \left( \frac{4\pi}{3a} \right) \\
&= \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}
\end{aligned}$$

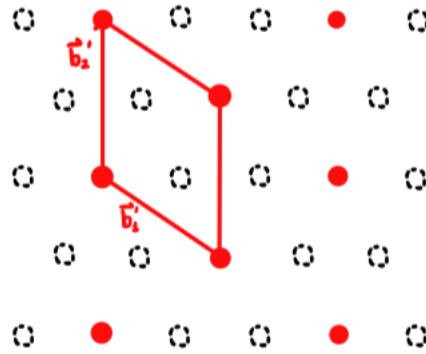


FIG. 3: reciprocal lattice, 3-(f)(5)

(g) 1st, 2nd, 3rd Brillouin zone은 다음 그림 4와 같고

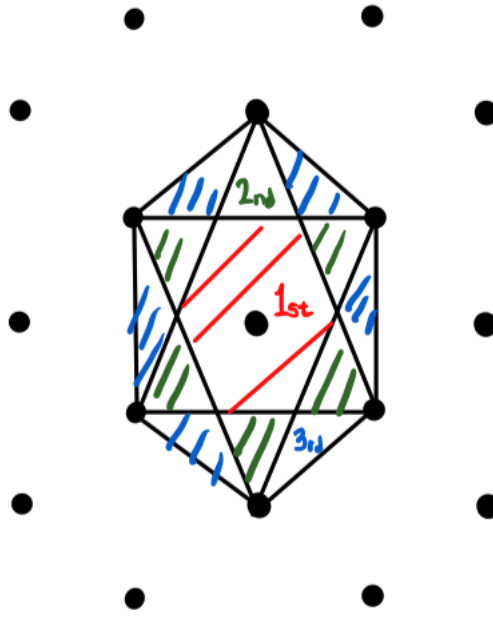


FIG. 4: 1st, 2nd, 3rd Brillouin zone, 3-(g)(5)

각각의 Brillouin zone이 reduced zone으로 이동되는지는 다음과 같다.



FIG. 5: reduced zone, 3-(g)(5)

(h) 최외각 전자가 1개 일 때, Fermi wave vector는

$$\pi k_F^2 = S/2$$

의 관계로부터 계산될 수 있다. 여기서  $S$ 는 Brillouin zone의 넓이이므로

$$\begin{aligned} S &= \frac{\sqrt{3}}{4} b^2 \times 2 \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2} \left( \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \right)^2 \\ &= \frac{8\pi^2}{\sqrt{3}a^2} \end{aligned}$$

이 Fermi wave vector의 크기는

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

이다. (5)

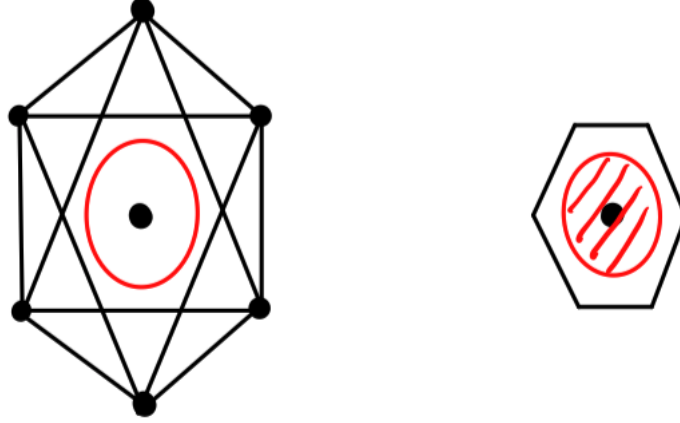


FIG. 6: Brillouin zone, 3-(h) (5)

(i) 최외각 전자가 2개 일때, Fermi wave vector는

$$\pi k_F^2 = S$$

이다. 따라서,

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

이다. (5)

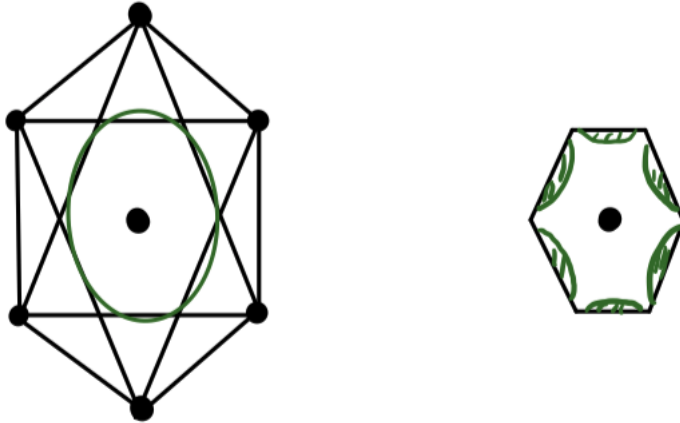


FIG. 7: Brillouin zone, 3-(i) (5)

## 4. (총 50점)

(a) (20 = 5 × 4)  $d$ -차원 자유전자기체의 경우 ( $d = 1, 2, 3$ )(에너지  $\varepsilon$ 와  $\varepsilon + d\varepsilon$ 사이의 states의 개수)

$$\begin{aligned}
 D(\varepsilon)d\varepsilon &\sim \frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon \\
 &\sim \frac{dN}{dk} \frac{dk}{d\varepsilon} d\varepsilon \sim \frac{dN}{dk} \left( \frac{d\varepsilon}{dk} \right)^{-1} d\varepsilon \\
 &\sim \frac{d}{dk} (k^d) \left\{ \frac{d}{dk} (k^2) \right\}^{-1} d\varepsilon \\
 &\sim \varepsilon^{\frac{d-1}{2}} \varepsilon^{-\frac{1}{2}} d\varepsilon \\
 &\sim \varepsilon^{\frac{d}{2}-1} d\varepsilon
 \end{aligned}$$

여기서  $N(\varepsilon)$ : 에너지  $\varepsilon$  보다 작은 states의 총 개수따라서,  $D(\varepsilon) \sim \varepsilon^{\frac{d}{2}-1}$  0차원의 경우 particle in a box 에서 discrete한 에너지를 가지므로

FIG. 8: 0차원(5)

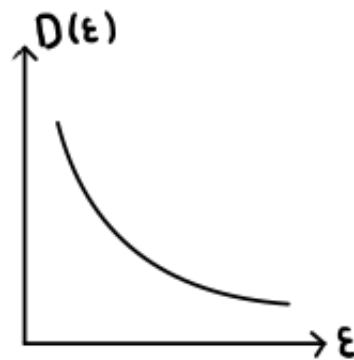
1차원의 경우  $D(\varepsilon) \sim \varepsilon^{-1/2}$ 

FIG. 9: 1차원(5)

2차원의 경우  $D(\varepsilon) \sim \varepsilon^0 = \text{const.}$

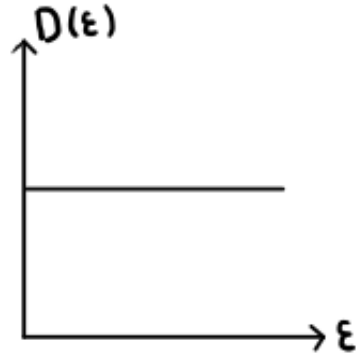


FIG. 10: 2차원(5)

3차원의 경우  $D(\varepsilon) \sim \varepsilon^{1/2}$

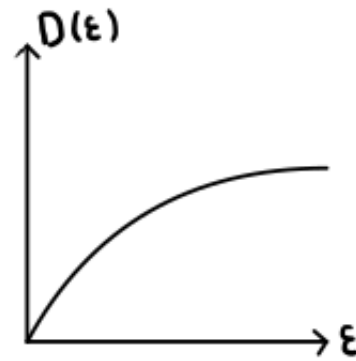


FIG. 11: 3차원(5)

- (b) 고유 에너지는  $\varepsilon = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{n_x^2} + \frac{1}{n_y^2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2$ 의 형태로 된다. 첫 항은 0차원에 해당하고 마지막 항은 1차원에 해당하는 항이므로, DOS는 0차원과 1차원이 결합된 형태이다. (5)

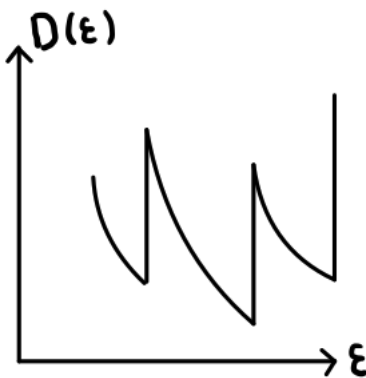


FIG. 12: 나노 와이어의 DOS(5)

(c)

$$D(\varepsilon) = \frac{dN}{dk} \frac{dk}{d\varepsilon} \sim \frac{d}{dk} (\sim k^2) \frac{dk}{d\varepsilon} \sim |\varepsilon - \varepsilon_F| \quad (5)$$

이므로, 이다.

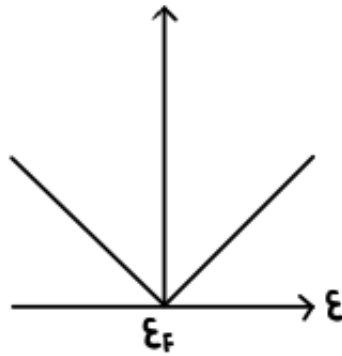


FIG. 13: 4-(c)(5)

(d) (10) Debye 모델에 의하면

$$\varepsilon \sim \omega \sim k$$

이고, 문제 (a)의 풀이를 이용하면

$$\begin{aligned} D(\varepsilon) &\sim \frac{dN}{dk} \left( \frac{d\varepsilon}{dk} \right)^{-1} \\ &\sim \frac{d}{dk} (k^d) \left\{ \frac{d}{dk} (k) \right\}^{-1} \\ &\sim \varepsilon^{\frac{d-1}{2}} \end{aligned}$$

이다.



5. (총 40점) 주어진 퍼텐셜을 지수 함수로 표현하면

$$U(x, y) = -U_0 \left[ \frac{e^{i\frac{2\pi x}{a}} + e^{-i\frac{2\pi x}{a}} + e^{i\frac{2\pi y}{b}} + e^{-i\frac{2\pi y}{b}}}{2} + \frac{e^{i2\pi(\frac{x}{a} + \frac{y}{b})} + e^{i2\pi(\frac{x}{a} - \frac{y}{b})} + e^{-i2\pi(\frac{x}{a} - \frac{y}{b})} + e^{-i2\pi(\frac{x}{a} + \frac{y}{b})}}{4} \right]$$

(a) (10)  $G_1 = (\frac{2\pi}{a}, 0)$ ,  $U_{G_1} = -\frac{U_0}{2}$ ,

$$\langle U \rangle = \begin{pmatrix} 0 & -U_0/2 \\ -U_0/2 & 0 \end{pmatrix} = -\frac{U_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

gap= $U_0$

(b) (10)  $G_2 = (0, \frac{2\pi}{b})$ ,  $U_{G_2} = -\frac{U_0}{2}$ ,

$$\langle U \rangle = \begin{pmatrix} 0 & -U_0/2 \\ -U_0/2 & 0 \end{pmatrix} = -\frac{U_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

gap= $U_0$

(c) (20) 문제 (a)와 문제 (b)처럼 basis

$$|1\rangle = e^{-i(\pi/a)x - i(\pi/b)y}, \quad |2\rangle = e^{-i(\pi/a)x + i(\pi/b)y}, \quad |3\rangle = e^{i(\pi/a)x - i(\pi/b)y}, \quad |4\rangle = e^{i(\pi/a)x + i(\pi/b)y}$$

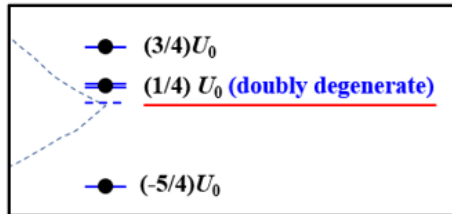
를 이용하면 행렬은 다음과 같다.

$$\langle U \rangle = U_0 \begin{pmatrix} 0 & -1/2 & -1/4 & -1/2 \\ -1/2 & 0 & -1/2 & -1/4 \\ -1/4 & -1/2 & 0 & -1/2 \\ -1/2 & -1/4 & -1/2 & 0 \end{pmatrix}$$

이를 대각화 시키면

$$\langle U \rangle = U_0 \begin{pmatrix} -5/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 \end{pmatrix}$$

이고, 밴드갭이 열리지 않는다.



중간의 doubly degenerate level로 보아 gap이 열리지 않을 거라 예상되지만, 더 정확하게 확인하려면 zone boundary 근처 k값에 대해서도 계산해 봐야 함. 따라서 에너지 값만 맞게 계산하면 모두 정답 처리.

6. (총 40점)

(a) (10) 하나의 unit cell안의 최외각 전자의 총 수 =  $2 \times 1 + 1 \times 1 = 3$ , 홀수이다.

즉, 총 전자 수가 홀수이면 밴드를 부분적으로 채울 수 밖에 없으므로 금속으로 예측된다.

(b) (10) 이 때, 하나의 unit cell안의 최외각 전자의 총 수 =  $2 \times 3$ , 짝수이다. 총 전자 수가 짝수이면 밴드를 부분적으로 채울 수도 있고 짝 채울 수도 있으므로 예측 불가능

(c) (10) 밴드이론이 맞지 않는 경우이므로 밴드 이론의 기본 가정(독립전자, 전자-전자 상호작용 무시)이 맞지 않는다. 즉, 전자-전자 상호작용 (repulsion)이 커서 전기전도가 일어나지 않아 비금속이 된다.

(d) (10) 두 개의 밴드가 겹쳐져서 전자가 그 겹쳐진 밴드를 부분적으로 채우므로 금속이 된다.

7. (총 20점)

(a) (5) indirect-gap semiconductor

- (b) (5) 0.9 eV
- (c) (5) A-C-B 또는 C-A-B
- (d) (5) indirect-gap 반도체는 momentum 이 보존되기 위하여 전자가 여기될 때 동시에 포논이 생기거나 없어져야 한다. 즉, 두 가지 과정이 동시에 일어나야 하므로 그 확률이 작아서 효율이 낮다. (광특성이 나쁘다.)