

## Quiz 3

### (13.4) Reciprocal Lattice

- (a) Define the term Reciprocal Lattice.  
 (b) Show that if a lattice in 3d has primitive lattice vectors  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  and  $\mathbf{a}_3$  then primitive lattice vectors for the reciprocal lattice can be taken as

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (13.13)$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (13.14)$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (13.15)$$

What is the proper formula in 2d?

- (c) Define tetragonal and orthorhombic lattices.  
 For an orthorhombic lattice, show that  $|\mathbf{b}_1| = 2\pi/a_1$ . Hence, show that the length of the reciprocal lattice vector  $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$  is equal to  $2\pi/d$ , where  $d$  is the spacing of the  $(hkl)$  planes

**a)** The reciprocal Lattice es básicamente el conjunto de todos los vectores  $\vec{k}$  que, al multiplicarse en producto punto con los vectores de la base del Lattice dan cero resultado un entero;

Juegan un rol importante ya que se pueden definir como el inverso de lattice en el espacio de Fourier.

Si  $\vec{a}_1, \vec{a}_2$  y  $\vec{a}_3$  son los vectores base del Lattice; la reciprocal lattice es:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi \vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi \vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

b) Una definición general de los reciprocal Lattice vectors se puede escribir como:

$$\mathbf{b}_j = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_k)}$$

Ahora es necesario notar que la definición de reciprocidad en el espacio de Fourier implica que  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$

Podemos también recordar que  $(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_i = (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_j = \mathbf{a}_1 \cdot \delta_{ij}$

Entonces podemos revisar con la propuesta si satisface la definición

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_1 = \mathbf{a}_1 \left( \frac{2\pi (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \right) = 2\pi \quad \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_2 = \mathbf{a}_1 \left( \frac{2\pi (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \right) = 0$$

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_3 = 0 \quad \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{b}_1 = \mathbf{a}_2 \left( \frac{2\pi (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \right) = 0$$

$$\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{b}_2 = 2\pi \quad \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{b}_3 = 0$$

$$\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{b}_3 = 2\pi$$

Notemos que para todas las combinaciones, regresamos a  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$

Adicionalmente, resolver para el caso 2d es simplemente un subespacio del lattice, ojo:

$$\mathbf{e}_3 \equiv \hat{\mathbf{k}}$$

$$\therefore \mathbf{b}_1 = \frac{2\pi (\mathbf{a}_2 \times \hat{\mathbf{k}})}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \hat{\mathbf{k}})} \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi (\mathbf{a}_1 \times \hat{\mathbf{k}})}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \hat{\mathbf{k}})}$$

c) Para el lattice tetrahédrico (estructura cúbica) con  $\vec{a}_1 = \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3$  (por ejemplo), y más alla, un lattice orthorhombic tiene  $\vec{a}_1 \perp \vec{a}_2 \perp \vec{a}_3$  por siguiente:

$$\rightarrow \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j = \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_k \quad \text{con } i \neq j \neq k$$

Para el lattice orthorhombic tenemos la definición clásica del reciprocal Lattice:

$$|\mathbf{b}_1| = |2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}| = \frac{2\pi |\vec{a}_2 \times \vec{a}_3|}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} = \frac{2\pi}{\vec{a}_1}$$

$$|\mathbf{b}_2| = |2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}| = 2\pi \frac{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_3|}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} = \frac{2\pi}{\vec{a}_2}$$

$$|\mathbf{b}_3| = |2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}| = 2\pi \frac{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} = \frac{2\pi}{\vec{a}_3}$$

Dado que en un lattice la distancia entre los planos está dada por los lattice vectors, tenemos,

$$d = |\mathbf{b}_1| + |\mathbf{b}_2| + |\mathbf{b}_3| \Rightarrow |d| = \sqrt{h^2 |\mathbf{b}_1|^2 + k^2 |\mathbf{b}_2|^2 + l^2 |\mathbf{b}_3|^2}$$

$$\Rightarrow |d| = \sqrt{\frac{4\pi^2 h^2}{\vec{a}_1^2} + \frac{4\pi^2 k^2}{\vec{a}_2^2} + \frac{4\pi^2 l^2}{\vec{a}_3^2}}$$

### (14.9) Form Factors

- (a) Assume that the scattering potential can be written as the sum over the contributions of the scattering from each of the atoms in the system. Write the positions of the atoms in terms of a lattice plus a basis so that

$$V(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{R}_\alpha} V_\alpha(\mathbf{x} - \mathbf{R} - \mathbf{y}_\alpha)$$

where  $\mathbf{R}$  are lattice points,  $\alpha$  indexes the particles in the basis and  $\mathbf{y}_\alpha$  is the position of atom  $\alpha$  in the basis. Now use the definition of the structure factor Eq. 14.5 and derive an expression of the form of Eq. 14.8 and hence derive expression 14.9 for the form factor. (Hint: Use the fact that an integral over all space can be decomposed into a sum over integrals of individual unit cells.)

(b) Given the equation for the form factor you just derived (Eq. 14.9), assume the scattering potential from an atom is constant inside a radius  $a$  and is zero outside that radius. Derive Eq. 14.10.

(c)\* Use your knowledge of the wavefunction of an electron in a hydrogen atom to calculate the X-ray form factor of hydrogen.

a) Partiendo de que sea la posible definir el potencial como  $V = \sum_{\mathbf{R}_\alpha} V_\alpha(x - R - y_\alpha)$  podemos regresar a la definición de structure factor:

$$f_0 = \int e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}} V d\mathbf{x}$$

Notemos que esta integral es sobre todo el espacio, así que podemos descomponer en pequeñas células

$$f_0 = \sum_{\text{Cell}} \int_{\text{Cell}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}} V d\mathbf{x}$$

Acá  $x$  es una variable de integración por ende podemos introducir un cambio de variable

$$x = x - R \Rightarrow f_0 = \sum_{\text{Cell}} \int_{\text{Cell}} e^{i\mathbf{G} \cdot (x-R)} V(x-R) d\mathbf{x}$$

Vamos a usar la identidad de Euler:  $e^{i\mathbf{G} \cdot R} = \cos(G \cdot R) + i \sin(G \cdot R) = 1$ , luego:

$$f_0 = \sum_{\text{Cell}} \int_{\text{Cell}} e^{i\mathbf{G} \cdot x} V(x-R) d\mathbf{x}$$

Finalmente nos queda introducir la identidad para  $V_0 = \sum_{\mathbf{R}} V_\alpha(x-R-y_\alpha)$

$$S = \sum_{\text{Cell}} \int_{\text{Cell}} e^{i\mathbf{G} \cdot x} \sum_{\mathbf{R}} V_\alpha(x-R-y_\alpha) d\mathbf{x} ; \quad y_\alpha = x - R$$

$$= \sum_{\text{Cell}} \int_{\text{Cell}} e^{i\mathbf{G} \cdot (x-y_\alpha)} \sum_{\alpha} V_\alpha(y_\alpha) d\mathbf{x}$$

Así, para todo el espacio podemos entenderlo como la suma sobre las integrales de las células unitarias... es decir:

$$\sum_{\text{Cell}} \int_{\text{Cell}} (...) = \int (...)$$

$$\Rightarrow S = \sum_{\alpha} \int_{\text{Cell}} e^{i\mathbf{G} \cdot x} V_\alpha(u) du \quad \Rightarrow S = \sum_{\alpha} e^{i\mathbf{G} \cdot u} f_u(\mathbf{G})$$

$$f_u(\mathbf{G}) = \int_{\text{Cell}} e^{i\mathbf{G} \cdot u} V_\alpha(u) du$$

Acá  $\mathbf{G}$  es una variable de integración por ende podemos introducir un cambio de variable

$$x = x - R \Rightarrow f_u(\mathbf{G}) = \sum_{\text{Cell}} \int_{\text{Cell}} e^{i\mathbf{G} \cdot (x-R)} V(x-R) d\mathbf{x}$$

Vamos a usar la identidad de Euler:  $e^{i\mathbf{G} \cdot R} = \cos(G \cdot R) + i \sin(G \cdot R) = 1$ , luego:

$$f_u(\mathbf{G}) = \sum_{\text{Cell}} \int_{\text{Cell}} e^{i\mathbf{G} \cdot x} V(x-R) d\mathbf{x}$$

Finalmente nos queda introducir la identidad para  $V_0 = \sum_{\mathbf{R}} V_\alpha(x-R-y_\alpha)$

$$S = \sum_{\alpha} \int_{\text{Cell}} e^{i\mathbf{G} \cdot x} \sum_{\mathbf{R}} V_\alpha(x-R-y_\alpha) d\mathbf{x} ; \quad y_\alpha = x - R$$

$$= \sum_{\alpha} \int_{\text{Cell}} e^{i\mathbf{G} \cdot x} \sum_{\mathbf{R}} V_\alpha(x-R) d\mathbf{x} ; \quad y_\alpha = x - R$$

Así, para todo el espacio podemos entenderlo como la suma sobre las integrales de las células unitarias... es decir:

$$\sum_{\text{Cell}} \int_{\text{Cell}} (...) = \int (...)$$

b) Note that this assumption is equivalent to having a heaviside  $\Theta(x-a)$  killing off all the  $V$  outside the atom. We can further model all as a sphere with potential proportional to the total charge  $Z_\alpha \propto V$  introducing this delta at  $x=a$  gives

$$f_u(\mathbf{G}) = \int_{\text{Cell}} e^{i\mathbf{G} \cdot x} \Theta(x-a) d\mathbf{x} = \eta Z_\alpha \int_a^\infty e^{i\mathbf{G} \cdot x} dx$$

Ahora, como esperamos simetría esférica podemos usar:  $dx = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$ :

$$16\pi = G r \cos \theta \Rightarrow f_u(\mathbf{G}) = \eta Z_\alpha \int_a^\infty r^2 \sin \theta dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{i\mathbf{G} \cdot x} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

$$\therefore f_u(\mathbf{G}) = 2\pi \eta Z_\alpha \int_a^\infty r^2 \sin \theta dr \int_0^\pi r^2 \sin \theta dr d\theta$$

$$\int_0^\pi r^2 \sin \theta dr = \frac{1}{2} (\sin(2a) - \sin(a))$$

$$\therefore f_u(\mathbf{G}) = \frac{4\pi \eta Z_\alpha}{G^2} [\sin(2a) - \sin(a)]$$

c) Basicamente el electron está descrito por la función de menor estado energético para el hidrógeno, es decir (ignorando la normalización)

$$\psi_E \sim e^{-r/a} \Rightarrow |\psi|^2 \sim e^{-2r/a}$$

De esta forma, el form factor es sólo la transformada de Fourier:

$$f(\mathbf{G}) = \int e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}} \psi_E(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

Así, llevando a coordenadas esféricas tenemos  $dr = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$

$$f(\mathbf{G}) = 4\pi \int_0^\infty r^2 \sin \theta dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{i\mathbf{G} \cdot x} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

$$= 4\pi \int_0^\infty r^2 \sin \theta dr \int_0^\pi r^2 \sin \theta dr d\theta$$

$$\int_0^\pi r^2 \sin \theta dr = \frac{1}{2} (\sin(2a) - \sin(a))$$

$$\therefore f(\mathbf{G}) = \frac{4\pi \eta Z_\alpha}{G^2} [\sin(2a) - \sin(a)]$$

Ahora, como  $\psi_E \sim e^{-r/a}$  y  $q_e = k + \delta$

$$a [\sin((k+\delta)a) + \cos((k+\delta)a)] \propto a$$

Y con la base de teoría de perturbación ( $\delta=0$ ) obtenemos que  $E = E_0 + 2V$

### (17.3) Chemical Potential

- (a) Show that the chemical potential in an intrinsic semiconductor lies in the middle of the gap at low temperature.

- (b) Explain how the chemical potential varies with temperature if the semiconductor is doped with (i) donors

- (c) A direct-gap semiconductor is doped to produce a density of  $10^{23}$  electrons/m<sup>3</sup>. Calculate the hole density at room temperature given that the gap is 1.0 eV, and the effective mass of carriers are 0.25 and 0.4 electron masses respectively. Hint: use the result of Exercise 17.2.a.

a) Nosotros sabemos que para un semiconductor

$$n = \frac{1}{q} \left( \frac{2\pi k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\beta$$

### (18.2) Density of States for Quantum Wells

(a) Consider a quantum well as described in the previous exercise. Calculate the density of states for electrons and holes in the quantum well. Hint: It is a 2D electron gas, but don't forget that there are several particle-in-a-box states.

(b) Consider a so-called "quantum wire" which is a one-dimensional wire of GaAs embedded in surrounding AlGaAs. (You can consider the wire cross-section to be a square with side 30nm.) Describe the density of states for electrons or holes within the quantum wire. Why might this quantum wire make a very good laser?

a) Sabemos que para un gas de dos dimensiones  $n = \frac{k^2}{2\pi}$  y de QM, la caja de potencial es  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow n = \frac{mE}{\hbar^2 \pi}$ .

Así, la densidad de estados es  $\mathcal{D}_E n = \frac{m}{\hbar^2 \pi}$ .

Por consiguiente, sólo es necesario corregir con el delta para el caso en que se encuentre en la banda:

$$\tilde{E}_e = E_0 + \left[ \left( \frac{\hbar \pi a}{L} \right)^2 + \hbar^2 k^2 \right] \frac{1}{2m_e}$$

$$\Rightarrow \mathcal{D}_e = \frac{m_e}{\hbar^2 \pi^2 a^2} V(\tilde{E}) = \frac{m_e}{\hbar^2 \pi} V \left( \frac{1}{2m_e} \left\{ \left( \frac{\hbar \pi a}{L} \right)^2 + \hbar^2 k^2 \right\} \right)$$

b) Como es el caso de una guía de onda, podemos escribir la energía

$$E = \frac{n^2 \hbar^2}{8m L^2} \Rightarrow E_T = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m_e^*}$$

Entonces podemos escribir:  $\mathcal{D}_e = \mathcal{D}_E N = \mathcal{D}_E \left( \int \frac{k_z dk_x dk_y}{4\pi^2} \right)$

Este sistema puede dar paso a niveles discretos de energía con densidad alta de energía. (que da paso a más fuerte emisión)

### (18.3) p-n Junction\*

Explain the origin of the depletion layer in an abrupt p-n junction and discuss how the junction causes rectification to occur. Stating your assumptions, show that the total width  $w$  of the depletion layer of a p-n junction is:

$$w = w_n + w_p$$

where

$$w_n = \left( \frac{2\epsilon_r \epsilon_0 N_A \phi_0}{e N_D (N_A + N_D)} \right)^{1/2}$$

and a similar expression for  $w_p$ . Here  $\epsilon_r$  is the relative permittivity and  $N_A$  and  $N_D$  are the acceptor and donor densities per unit volume, while  $\phi_0$  is the difference in potential across the p-n junction with no applied voltage. You will have to use Poisson's equation to calculate the form of  $\phi$  given the presence of the ion charges in the depletion region.

▷ Calculate the total depletion charge and infer how this changes when an additional voltage  $V$  is applied.

▷ What is the differential capacitance of the diode and why might it be useful to use a diode as a capacitor in an electronic circuit?

Si consideramos que hay una distribución de carga, podemos modelar la distribución del potencial para cada región como función de la posición  $x$  y tomando también que para las fronteras  $\phi|_{w_n} = \phi|_{w_a} = \text{cte}$  y  $N_{\text{new}} = N_D w_a$

$$\phi(x) = \frac{-eN}{2\epsilon_0 \epsilon_r} (x^2 + 2w_i x); \quad w_i = \begin{cases} w_n & x \leq 0 \\ -w_a & x > 0 \end{cases}$$

Por consiguiente es directo calcular la diferencia en potencial:

$$\Delta\phi = |\phi(w_n) - \phi(w_a)| = \frac{(N_D w_n^2 + N_A w_a^2)e}{2\epsilon_0 \epsilon_r} = \frac{\epsilon_f (w_n + w_a)e}{2\epsilon_0 \epsilon_r}; \quad \epsilon_f = w \cdot N.$$

$$\Rightarrow \frac{2\epsilon_0 \epsilon_r \Delta\phi}{\epsilon_f e} - w_n^2 = w_a^2 \Rightarrow w_h = \frac{w_a N_A}{N}$$

$$\Rightarrow \frac{2\epsilon_0 \epsilon_r \Delta\phi}{\epsilon_f e} = w_a^2 \left( 1 + \frac{N_A^2}{N_D^2} \right) \Rightarrow w_a = \sqrt{\frac{2\epsilon_0 \epsilon_r \Delta\phi}{\epsilon_f e \left( 1 + \frac{N_A^2}{N_D^2} \right)}} = \sqrt{\frac{2\epsilon_0 \epsilon_r N_D \Delta\phi}{N_A e (N_A + N_D)}}$$

$$w_n = \frac{w_a N_A}{N_D} = \sqrt{\frac{2\epsilon_0 \epsilon_r N_D \Delta\phi N_A^2}{N_A e (N_A + N_D) N_D^2}} = \sqrt{\frac{2\epsilon_0 \epsilon_r \Delta\phi N_A}{e (N_A + N_D) N_D}}$$

Así, el voltaje de deplección  $\epsilon_f$  está dado por:

$$\epsilon_f = w_a N_A = \sqrt{\frac{2\epsilon_0 \Delta\phi N_D}{e (N_D + N_A)}}; \quad \Delta\phi = \phi_0 + eV$$

Mientras que la capacitancia diferencial es:

$$C = \partial_V \epsilon_f = \frac{1}{2} \epsilon_f \cdot \partial_V (\sqrt{\phi_0 + eV}) = \frac{1}{2} \frac{\epsilon_f}{\sqrt{\phi_0 + eV}}$$