E1 $D(E)$ är tillståndstätheten för elektrontillstånd. I k-rummet ges tillståndstätheten av $N(k)$, där

$$N(k) = \begin{cases} 2 \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right) & \text{i } 1D \\ 2 \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 & \text{i } 2D \\ 2 \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 & \text{i } 3D \end{cases} \qquad (1)$$

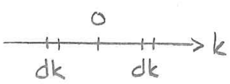
I ett intervall dk i k-rummet ges antal tillstånd dN av $dN = N(k)\,dk$. Samma tillstånd kan beskrivas med $D(E)$ och ett intervall i E-rummet enligt

$$dN = D(E)\,dE.$$

Vi vill alltså för att bestämma $D(E)$ skriva om dN i termer av dE istället för dk. Energin för en elektron ges av $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, vilket ger

$$k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} \quad (2) \qquad dk = \frac{m}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{2mE}\right)^{1/2} dE \quad (3)$$

1D



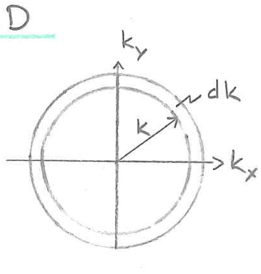
Längd i k-rummet

$$dN = N(k)\,dk = \{(1)\} = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right) \cdot 2\,dk =$$

$$= \{(3)\} = \frac{2L}{\pi} \cdot \frac{m}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{2mE}\right)^{1/2} dE = D(E)\,dE$$

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

2D



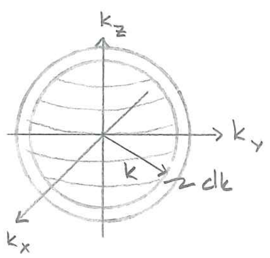
Area i k-rummet

$$dN = N(k)\,dk = \{(1)\} = 2 \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \cdot 2\pi k\,dk =$$

$$= \{(2),(3)\} = 2 \cdot \frac{L^2}{4\pi^2} \cdot 2\pi \cdot \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} \cdot \frac{m}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{2mE}\right)^{1/2} dE = D(E)\,dE$$

$$\Rightarrow \boxed{D(E) = \frac{L^2 m}{\pi\hbar^2} \cdot E^0}$$

3D



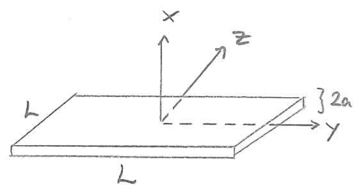
Volym i k-rummet

$$dN = N(k)\,dk = \{(1)\} = 2 \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot 4\pi k^2\,dk =$$

$$= \{(2),(3)\} = 2\,\frac{L^3}{8\pi^3} \cdot 4\pi \cdot \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\frac{m}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{2mE}\right)^{1/2} dE = D(E)\,dE$$

$$\Rightarrow \boxed{D(E) = \frac{L^3 (2m^3)^{1/2}}{\pi^2\hbar^3}\,E^{1/2}}$$

E2 a) $\Psi(x,y,z)=0$ för $|x|>a$, $a \sim 1$ atomradie



Elektronerna rör sig i en potential $V(x,y,z)=\begin{cases}0\ , & |x|<a\\ \infty\ , & |x|>a\end{cases}$

- Schrödingerekvationen för en elektron i systemet är

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x,y,z)+V\Psi=\varepsilon\Psi$$

- Genom variabelseparation $\Psi(x,y,z)=\mathcal{X}(x)\cdot\phi(y,z)$ blir S.E:

$$\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\mathcal{X}=\varepsilon_x\mathcal{X}\quad ,\ \mathcal{X}(-a)=\mathcal{X}(a)=0 & (1)\\[2mm] -\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\phi=\varepsilon_{yz}\phi & (2)\end{cases}$$

(1) $\Rightarrow \mathcal{X}(x)=A\sin k_x\cdot x+B\cos k_x\cdot x$

$\Rightarrow k_x=n_x\cdot\frac{\pi}{2a}$, $n_x=1,2,3,\ldots$, $\begin{Bmatrix}A=1\\B=0\end{Bmatrix}$ om n_x jämnt, $\begin{Bmatrix}A=0\\B=1\end{Bmatrix}$ om n_x udda.

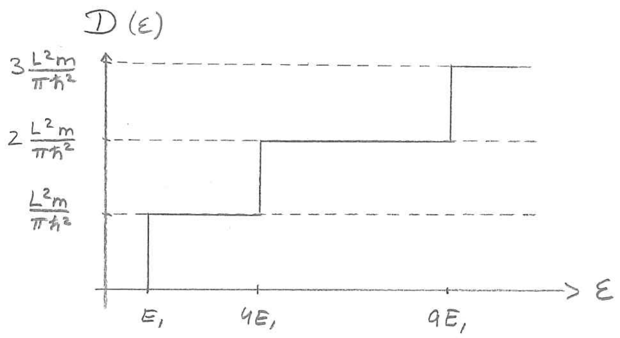
(2) $\Rightarrow$ Ej diskreta k-värden, $k_{yz}=|(k_y,k_z)|$

- Energin för elektronen ges av summan av bidragen från x och yz:

$$\varepsilon(n,k_{xy})=\frac{\hbar^2}{2m}k_x^2+\frac{\hbar^2}{2m}k_{yz}^2$$

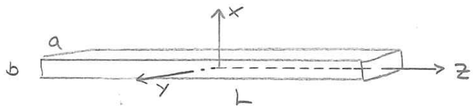
- För en tvådimensionell elektrongas är $D(\varepsilon)=\frac{L^2m}{\pi\hbar^2}$ (se E1)

$\Rightarrow$ Varje $\mathcal{X}(x)$-tillstånd bidrar med $\frac{L^2m}{\pi\hbar^2}$ till $D(\varepsilon)$



$$\boxed{D(\varepsilon)=\frac{L^2m}{\pi\hbar^2}\sum_{n=1}^{\infty}\Theta(\varepsilon-E_1n^2)}$$

E2b) $\Psi(x,y,z) = 0$ för $|x| > a$, $|y| > b$



Elektronerna rör sig i en potential $V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & |x| < a \text{ och } |y| < b \\ \infty, & \text{annars} \end{cases}$

- Schrödingerekvationen för en elektron i systemet är

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x,y,z) + V\Psi = \varepsilon\Psi$$

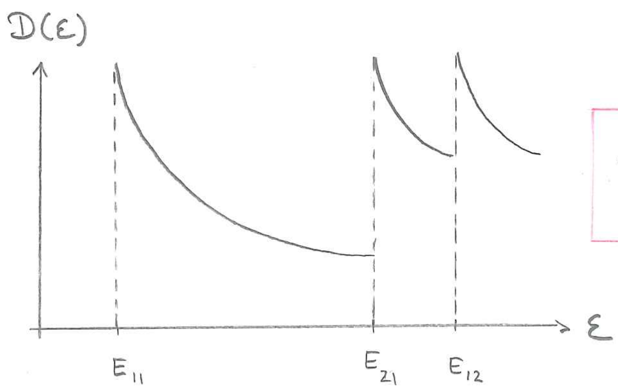
- På samma sätt som i a) kan vågfunktionen variabel-separeras, och elektronens energi ges av bidragen från x, y och z-riktning enligt

$$\varepsilon(n_x, n_y, k) = \underbrace{\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2} n_x^2}_{\text{x-komponent}} + \underbrace{\frac{\hbar^2\pi^2}{8mb^2} n_y^2}_{\text{y-komp.}} + \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{\text{z-komp.}}$$

- Om $E_{n_x n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2}\right)$ blir uttrycket

$$\varepsilon(n_x, n_y, k) = E_{n_x n_y} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

- För en endimensionell elektrongas är $D(\varepsilon) = \frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{2m}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$ (se E1)



$$\boxed{D(\varepsilon) = \sum_{n_x n_y} \frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{2m}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon - \varepsilon_{n_x n_y}}}\,\Theta(\varepsilon - \varepsilon_{n_x n_y})}$$

E3 Tredimensionell elektrongas vid 0 K

Alternativ 1

Tillståndstäthet: $D(k) = \frac{V}{4\pi^3}$ Energi: $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Total energi: $$E_k = \int_0^{k_F} D(k) \cdot \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \cdot 4\pi k^2 \, dk =$$

$$= \int_0^{k_F} \frac{V}{4\pi^3} \cdot \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \cdot 4\pi k^2 dk = \frac{V\hbar^2}{2m\pi^2} \cdot \frac{k_F^5}{5}$$

Antal tillstånd i en Fermisfär:

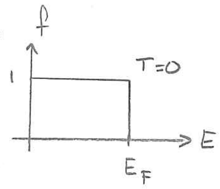
$$N = \int_0^{k_F} D(k) \cdot 4\pi k^2 dk = \int_0^{k_F} \frac{V}{4\pi^3} \cdot 4\pi k^2 dk = \frac{V}{\pi^2} \cdot \frac{k_F^3}{3}$$

$$\Rightarrow E_k = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{3}{5} k_F^2 \cdot N = \left\{ k_F = \frac{(2mE_F)^{1/2}}{\hbar} \right\} = \underline{\frac{3}{5} N \cdot E_F}$$

Alternativ 2

Tillståndstäthet $D(E) = \frac{V \cdot (2m^3)^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot E^{1/2}$

$$E_k = \langle E \rangle = \int_0^{\infty} D(E) \cdot E \, dE = \int_0^{\infty} \frac{V (2m^3)^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot E^{1/2} \cdot E \, dE = \Big\{$$



$$\Big\} =$$

$$= \frac{V \cdot \sqrt{2}\, m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \frac{2}{5} E_F^{5/2} = \left\{ N = \frac{V}{\pi^2} \frac{k_F^3}{3} = \frac{V}{\pi^2 \cdot 3} \frac{(2mE_F)^{3/2}}{\hbar^3} \right\} =$$

$$= \underline{\frac{3}{5} \cdot N \cdot E_F}$$

E5

Då tillståndstätheten $D(\varepsilon)$ anger tätheten av energitillstånd blir separationen mellan energinivåerna inversen av tätheten.

För Aluminium är Fermienergin, $\varepsilon_F = 11{,}63\,eV$ (Kittel s. 139)

I tre dimensioner ges tillståndstätheten (enl E1) av

$$D(\varepsilon) = \frac{V \cdot m^{3/2}\sqrt{2}\sqrt{\varepsilon_F}}{\pi^2 \hbar^3}$$, vilket innebär att energiseparationen är

$$\Delta\varepsilon = \frac{1}{D(\varepsilon)} = \frac{\pi^2\hbar^3}{V \cdot m^{3/2}\sqrt{2}\sqrt{\varepsilon_F}}$$, där

$\hbar = 1{,}055 \cdot 10^{-34}\ Js$
$m = 9{,}109 \cdot 10^{-31}\ kg$
$\varepsilon_F = 1{,}863 \cdot 10^{-18}\ J$

Efter insättning av ingående konstanter fås att

$$\Delta\varepsilon = \frac{1}{V} \cdot 6{,}9055 \cdot 10^{-48}\ J = \frac{1}{V} \cdot 4{,}31 \cdot 10^{-29}\ eV$$

a) $V = 10\ cm^3 = 10 \cdot 10^{-6}\ m^3 \Rightarrow \Delta\varepsilon = 4{,}31 \cdot 10^{-24}\ eV$

b) $V = 10\ \mu m^3 = 10 \cdot 10^{-18}\ m^3 \Rightarrow \Delta\varepsilon = 4{,}31 \cdot 10^{-12}\ eV$

c) $V = 100\ \mathring{A}^3 = 100 \cdot 10^{-30}\ m^3 \Rightarrow \Delta\varepsilon = 4{,}31 \cdot 10^{-1}\ eV$

E9 $E_F = 12\,eV$, $\rho = 3\cdot 10^{-8}\ \Omega m$

Resistiviteten, eller inversen av konduktiviteten, definieras av

$$\rho = \frac{m}{ne^2\tau}, \quad \text{där} \quad \tau = \frac{\text{Fri medelväglängd}}{\text{Hastighet vid } E_F} = \frac{l}{v_F}$$

$$\Rightarrow l = \frac{v_F \cdot m}{\rho n e^2} = \left\{E_F = \frac{m v_F^2}{2}\right\} = \frac{m}{\rho n e^2}\sqrt{\frac{2E_F}{m}}, \quad \text{där}$$

$m = 9{,}109\cdot 10^{-31}$ kg

$e = 1{,}6022\cdot 10^{-19}$ C

$n = (\text{Total elektrontäthet})\cdot\frac{\#\,\text{Valens}}{\#\,\text{Totalt}} = \{\text{Physics s. 133}\} = 18{,}06\cdot 10^{28}\ m^{-3}$

$\Rightarrow l = 1{,}35\cdot 10^{-8}\ m = \underline{135\ \text{Å}}$

Ohms lag: $\underbrace{j}_{\text{Täthet}}^{\text{ström}} = n\cdot \overset{\text{Laddning}}{q}\cdot \underbrace{v_d}_{\text{Drifthastighet}}$

$j = \sigma E \Rightarrow \sigma E = nq\, v_d$

Förutsatt att det elektriska fältet och drifthastigheten är motsatt riktade (Fältets riktning är samma som riktningen för motsvarande kraft på positiv laddning) kan ekvationerna kombineras till

$$v_d = \frac{\sigma\cdot E}{n\cdot e} = \left\{\sigma = \frac{1}{\rho}\right\} = \frac{E}{ne\rho} = \frac{1000}{18{,}06\cdot 10^{28}\cdot 1{,}6022\cdot 10^{-19}\cdot 3\cdot 10^{-8}} =$$

$= \underline{1{,}15\ m/s}$

E 11

Bestäm plasmonenergin $E_p = \hbar\omega_p$, där ω_p är plasmonfrekvensen som beskriver elektronernas svängningar.

Den relativa permittiviteten $\varepsilon_r = 1 - \dfrac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau}$ kan för metaller (τ stor) approximeras till

$$\varepsilon_r = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} = 1 - \frac{(\hbar\omega_p)^2}{(\hbar\omega)^2} \qquad (1)$$

ε_r kan delas in i $\varepsilon_r = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$, och för stora τ blir imaginärdelen noll enligt ovanstående approximation.

Omskrivning av (1) ger

$$-\varepsilon_r = -\varepsilon_1 = \frac{(\hbar\omega_p)^2}{(\hbar\omega)^2} - 1 = E_p^2 \cdot \frac{1}{(\hbar\omega)^2} - 1$$

En linjär regression för givna data (alternativt plottning) ger

$$-\varepsilon_1 = 148{,}8 \cdot \frac{1}{(\hbar\omega)^2} + 0{,}28$$

$$\Rightarrow E_p^2 = 148{,}8 \text{ eV}^2$$

$$\Rightarrow \underline{E_p = 12{,}2 \text{ eV}}$$

E 13

Genom att jämföra valenselektronernas värmekapacitet med fononernas värmekapacitet kan elektronbidraget beräknas.

Valenselektroner

$$C_{el} = \frac{1}{2} \pi^2 N k_B \frac{T}{T_F} \qquad \text{(Eku 36 s. 144 Kittel)}$$

- För N st valenselektroner

Fononer

För $T = 300\,K > \Theta = 160\,K$ är

$$C_{fo} = 3 M k_B \qquad \text{(s. 117 Kittel)}$$

- För M st atomer

För Na som har 1 valenselektron är $N = M$. Andelen av den totala värmekapaciteten som utgörs av valenselektronernas bidrag ges av

$$\frac{C_{el}}{C_{el} + C_{fo}} = \frac{\frac{1}{2}\pi^2 N k_B \frac{T}{T_F}}{\frac{1}{2}\pi^2 N k_B \frac{T}{T_F} + 3 N k_B} = \left\{ E_F = k_B T_F \right\} =$$

$$= \frac{\frac{1}{2}\pi^2 \cancel{N} k_B^2 \frac{T}{E_F}}{\frac{1}{2}\pi^2 \cancel{N} k_B^2 \frac{T}{E_F} + 3 \cancel{N} k_B} = \frac{1}{1 + \frac{2 \cdot 3 E_F k_B}{\pi^2 k_B^2 T}} =$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} E_F = 3{,}2\,eV \\ T = 300\,K \end{array} \right\} = 0{,}0131 = 1{,}31\,\%.$$