2008

재료의 전자기적 성질 중간고사 모범답안 (유상임 교수님)

1. $w = \lambda \nu = E/p$: the velocity of propagation for a de Broglie wave
$\rightarrow$ phase velocity, w

· particle 이 실제로 움직이는 속도 $\rightarrow$ group velocity, v

비상대론적 system 에서 $w = v/2$ 이다. matter wave 의 velocity 를 기술할 때는 이 둘을 구분하여 고려하여야 한다

2. (a) $\dfrac{d^2\psi}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \rightarrow k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \dfrac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi$ ↓ solution

$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$

B.C. 적용
$\begin{cases} x=0 \text{ 에서 } \psi = 0 & \therefore \psi(0) = B = 0 \\ x=a \text{ 에서 } \psi = 0 & \therefore \psi(a) = A\sin ka = 0 \end{cases}$ → $A \neq 0$ 이어야 물리적 의미를 가지므로 $ka = n\pi \ (n=1,2,3\cdots)$

$\therefore k = \dfrac{n\pi}{a}, \quad E_n = \dfrac{k^2\hbar^2}{2m} = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (n=1,2,3\cdots)$

(b) $E_n \propto n^2$ 이므로 $E_2 = 4E_1 = 40.00\,eV, \quad E_3 = 9E_1 = 90.00\,eV$

3. (a) $x \le 0, \quad \dfrac{d^2\psi}{dx^2} + \dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \qquad x \ge 0 \quad \dfrac{d^2\psi}{dx^2} + \dfrac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\psi = 0$

(b) $x \le 0, \quad k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \therefore \psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$

$x \ge 0, \quad k_2 = \dfrac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}, \quad \psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + \cancel{De^{-ik_2x}}$ (assuming there is no incoming wave to the right)

B.C. 적용
$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) & \text{—— (1)} : A + B = C \\ \left.\dfrac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\dfrac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=0} & \text{—— (2)} : Aik_1 - Bik_1 = Cik_2 \rightarrow \dfrac{(A-B)k_1}{k_2} = C \end{cases}$ 대입

$A + B = \dfrac{(A-B)k_1}{k_2}, \quad k_2(A+B) = k_1(A-B)$
$(k_1 - k_2)A = (k_1 + k_2)B$ ↓ $\therefore B/A = \dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$

$\therefore R = \dfrac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \left(\dfrac{\sqrt{E} - \sqrt{E+V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E+V_0}}\right)^2$

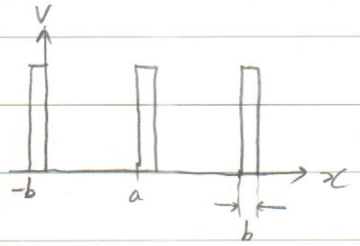
(c) $E = V_0/3 \rightarrow V_0 = 3E$

$$\therefore R = \left(\frac{\sqrt{E} - 2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + 2\sqrt{E}}\right)^2 = \left(\frac{-1}{3}\right)^2 = \frac{1}{9} \qquad \therefore T = 1 - R = \frac{8}{9}$$

4. Kronig-Penny model (free electrons in a periodic potential well)

고체를 주기적인 potential well 로 단순화 시키고, Bloch function 을 이용해 이러한 potential 에서의 Schrödinger equation 을 푼다.

Potential :

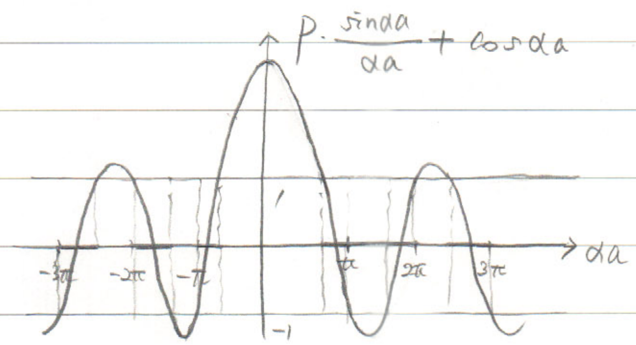


최종적으로 얻은 해는

$$P\frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a = \cos ka$$

$$\left(P = \frac{m a V_0 b}{\hbar^2},\ \alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right)$$

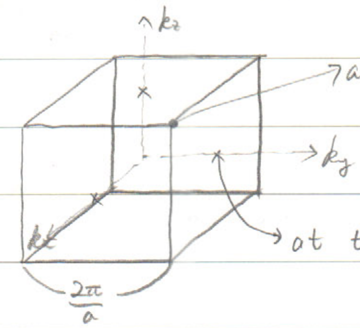
이를 αa 와 $P\frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a$ 에 대해 plot 해 보면 다음과 같이 표현된다



이 때 $\cos ka$ 는 -1부터 1 사이의 값을 가지므로 해를 가지는 영역이 정해지게 된다

해가 존재하는 영역이 allowed energy band, 존재하지 않는 영역이 forbidden energy band 가 된다.

5. (a) first Brillouin zone of a simple cubic lattice



at the corner, $k_c = \left(\pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{\pi}{a}\right) \quad |k_c| = \sqrt{3}\frac{\pi}{a}$

at the midpoint of the face, $k_m = \begin{cases} (\pm\frac{\pi}{a}, 0, 0) \\ (0, \pm\frac{\pi}{a}, 0) \\ (0, 0, \pm\frac{\pi}{a}) \end{cases}, \quad |k_m| = \frac{\pi}{a}$

(for a free electron)

$$\therefore E_c = \frac{\hbar^2|k_c|^2}{2m} = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2ma^2}, \quad E_m = \frac{\hbar^2|k_m|^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

$\therefore E_c$ 는 E_m 보다 $\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}$ 만큼 더 크다

$(E_c = 3E_m)$

(b) FCC의 main lattice vector (in real space)

$\vec{t_1} = \frac{a}{2}(i+j)$, $\vec{t_2} = \frac{a}{2}(j+l)$, $\vec{t_3} = \frac{a}{2}(l+i)$ (a: lattice parameter, i, j, k : x, y, z 방향 unit vector)

in reciprocal space,

$$\vec{b_1} = \frac{\vec{t_2}\times\vec{t_3}}{V}, \quad \vec{b_2} = \frac{\vec{t_3}\times\vec{t_1}}{V}, \quad \vec{b_3} = \frac{\vec{t_1}\times\vec{t_2}}{V}$$

$$V = \vec{t_1}\cdot\vec{t_2}\times\vec{t_3} = \left(\frac{a}{2}\right)^3 \cdot \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \left(\frac{a}{2}\right)^3\cdot(1+1) = \frac{a^3}{4}$$

$$\therefore \vec{b_1} = \frac{4}{a^3}\left(\frac{a}{2}\right)^2 \cdot \begin{vmatrix} i & j & k \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{1}{a}(i+j-l)$$

$$\vec{b_2} = \frac{4}{a^3}\left(\frac{a}{2}\right)^2 \cdot \begin{vmatrix} i & j & k \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \frac{1}{a}(-i+j+l), \quad \vec{b_3} = \frac{4}{a^3}\left(\frac{a}{2}\right)^2 \begin{vmatrix} i & j & l \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{1}{a}(i-j+l)$$

간단하게 표현, $b_1 = \frac{1}{a}(11\bar{1})$, $b_2 = \frac{1}{a}(\bar{1}11)$, $b_3 = \frac{1}{a}(1\bar{1}1)$ → bcc의 main lattice vector (in reciprocal space)

6. Drude postulation → a free electron gas

전자에 electrostatic force $e\mathcal{E}$ 와 저항력 γV 가 작용한다고 생각하자. (γ = const.)

$$\therefore m\frac{dv}{dt} + \gamma V = e\mathcal{E} \text{ (운동 방정식)}$$

For steady state, $V = V_f$ → $dv/dt = 0$ $\therefore \gamma = e\mathcal{E}/V_f$

$$\therefore m\frac{dv}{dt} + \frac{e\mathcal{E}}{V_f}v = e\mathcal{E} \xrightarrow[\text{solution}]{} v = V_f\left[1-\exp\left(-\frac{e\mathcal{E}t}{mV_f}\right)\right]$$

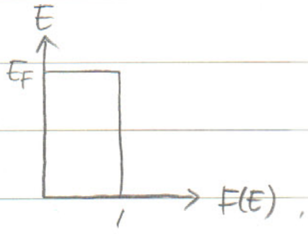
relaxation time $\tau = \frac{mV_f}{e\mathcal{E}} \longrightarrow V_f = \frac{\tau e\mathcal{E}}{m}$

Current density : $J = N_f V_f e = \sigma\mathcal{E} \longrightarrow \sigma = \frac{N_f e^2\tau}{m}$

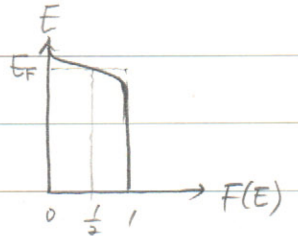
(6번 이어서)

온도가 올라가면 입자들 사이에 충돌 횟수가 많아지게 되고, 따라서 τ(relaxation time)이 감소한다. 즉 위에서 구한 conductivity 식에 의하면 온도가 증가함에 따라 σ는 감소 (ρ는 증가) 하게 된다. 실제 empirical equation 에서도 pure metal 에서 온도가 증가함에 따라 ρ가 증가하는 것은 확인할 수 있다.

7. (a)



(T=0K)



(T>0K)

T=0 K 에서는, E_F 이상의 energy를 갖는 전자는 존재하지 않고, E_F 이하의 모든 에너지 level에 전자가 가득차 있다. T>0K 에서는 thermal energy에 의해 E_F 이상의 energy를 갖는 전자가 존재하게 되고, fermi energy level 에 전자가 존재할 확률은 항상 1/2 이 된다.

$$F(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-E_F}{k_BT}\right)+1} \rightarrow \frac{1}{F(E)} - 1 = \exp\left(\frac{E-E_F}{k_BT}\right)$$

silver : $E_F = 5.5\,eV$, 1% above : $5.5 \times 1.01 = 5.555\ (eV)$

$F(E) = 0.1$

$$\frac{E-E_F}{k_BT} = \ln\left(\frac{1}{F(E)}-1\right), \quad T = \frac{E-E_F}{k_B \ln\left(\frac{1}{F(E)}-1\right)} = \frac{5.555-5.5}{8.616\times10^{-5}\times\ln 9} = 290.5\ (K)$$

(b) Effective mass, m^*.

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(2\pi\nu)}{dk} = \frac{d(2\pi E/h)}{dk} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$$

(group velocity)

$$\therefore a = \frac{dV_g}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}\left(\frac{dE}{dk}\right) = \frac{1}{\hbar}\frac{d^2E}{dk^2}\frac{dk}{dt}$$

$p = \hbar k$ 에서 $\frac{dp}{dt} = \hbar\frac{dk}{dt} \xrightarrow[\text{대입}]{}$ $= \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}\frac{dp}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}\cdot F$

$F = ma$ 에서 $m = \frac{F}{a}$

$$\therefore m^* = \hbar^2\left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)^{-1}$$

morning glory