72122 PUOLIJOHDEFYSIIKKA I

Tentti 11.05.2005

Kokeeseen osallistuvalle annetaan taulukko luonnonvakioista.

Huom! VASTAA VAIN VIITEEN (5) TEHTÄVÄÄN

1. Selitä MBE-menetelmän periaate.

2. Käyttäen $\mathbf{k} = (2\pi/a)(1,1,1)$ pisteessä symmetrisoituja vapaaelektronimallin mukaisia sinkkivälkekiteen elektronien aaltofunktioita:
$$\begin{aligned} \Gamma_1: &\quad \sqrt{8}\cos(2\pi x/a)\cos(2\pi y/a)\cos(2\pi z/a), \\ \Gamma_4(x): &\quad \sqrt{8}\sin(2\pi x/a)\cos(2\pi y/a)\cos(2\pi z/a) \quad \text{ja} \\ \Gamma_4(y): &\quad \sqrt{8}\cos(2\pi x/a)\sin(2\pi y/a)\cos(2\pi z/a), \end{aligned}$$
osoita, että liikemääräoperaattorin $\mathbf{p}$ x-komponentti toteuttaa relaation
$$|\langle\Gamma_1|p_x|\Gamma_4(x)\rangle|^2 = (2\hbar\pi/a)^2,$$
kun taas matriisielementti $\langle\Gamma_1|p_x|\Gamma_4(y)\rangle$ on nolla.

3. Selitä,
a) mikä on pseudopotentiaali,
b) semiempiirisen pseudopotentiaalimenetelmän periaate ja
c) *ab initio*- eli "first principles" pseudopotentiaalimenetelmän ero edelliseen.

3. Määrittele tai selitä lyhyesti
a) erilaiset fononityypit sekä
b) matalien (shallow) donoritilojen tarkastelun lähtökohta.

5. Piin johtavuuskaistan minimi muodostuu kuudesta 1. Brillouinin vyöhykkeen suunnissa $\langle 1\ 0\ 0\rangle$ olevista tiloista. Nämä virittävät pisteryhmässä T_d esityksen Γ, jonka karakteerit ovat 6, 2, 0, 2 ja 0 alla annetussa karakteeritaulukossa oleville symmetriaoperaatioille, samassa järjestyksessä.

T_d	E	$3C_2$	$6S_4$	6σ	$8C_3$	kantafunktiot
A_1	1	1	1	1	1	xyz
A_2	1	1	-1	-1	1	$x^4(y^2-z^2)+y^4(z^2-x^2)+z^4(x^2-y^2)$
E	2	2	0	0	-1	$x^2-y^2,\ z^2-(x^2+y^2)/2$
T_1	3	-1	1	-1	0	$x(y^2-z^2),\ y(z^2-x^2),\ z(x^2-y^2)$
T_2	3	-1	-1	1	0	$x,\ y,\ z$

Osoita, että $\Gamma = A_1 \oplus E \oplus T_2$.

6. a) Kirjoita elektronien Boltzmannin yhtälö ja sen ratkaisu tasapainossa, kun ulkoista kenttää ei ole, sekä ulkoisen kentän $\mathbf{F}$ vaikuttaessa, kun korjaus tasapainotilan ratkaisuun on
$$g_{\mathbf{k}}(\mathbf{F}) = \left(\frac{\partial f^0_{\mathbf{k}}}{\partial E_{\mathbf{k}}}\right) q\,\tau_{\mathbf{k}}\,\mathbf{v}_{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{F}.$$
relaksaatioaika-approksimmaatiossa (RTA).
b) Osoita edellä olevan perusteella (RTA), että degeneroitumattoman puolijohteen elektronien jakautumafunktio heikossa ulkoisessa kentässä on
$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{F}) = f^0_{\mathbf{k}}(E_{\mathbf{k}} + q\,\tau_{\mathbf{k}}\,\mathbf{v}_{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{F}).$$