

Arkusze zadań do ćwiczeń z
fizyki ciała stałego
Marek Izdebski

Spis treści

Temat 1. Ciało stałe. Sieć krystaliczna doskonała. Symetrie kryształów.	1
Temat 2. Sieć odwrotna.....	4
Temat 3. Defekty sieci krystalicznej.	5
Temat 5. Kryształy jonowe. Stała Madelunga.	6
Temat 8. Drgania sieci krystalicznej. Monoatomowy łańcuch liniowy.	7
Temat 9. Dwuatomowy łańcuch liniowy. Drgania sieci trójwymiarowej.....	8
Temat 11. Widmo drgań sieci	9
Temat 12. Energia i ciepło właściwe kryształu (izolatora).	10
Temat 13. Rozszerzalność cieplna ciał stałych	11
Temat 14. Stany elektronowe w kryształach. Model elektronów swobodnych.	12
Temat 21...23. Półprzewodniki.	13

Temat 1. Ciało stałe. Sieć krystaliczna doskonała. Symetrie kryształów.

Zadanie 1.1

Wykazać, że część objętości wypełniona przez nieściśliwe kule tworzące różne sieci wynosi

a). regularna prosta: $\frac{\pi}{6} \approx 0,52,$

b) BCC: $\frac{\pi}{8}\sqrt{3} \approx 0,68,$

c) FCC: $\frac{\pi}{6}\sqrt{2} \approx 0,74,$

d) HCP: $\frac{\pi}{6}\sqrt{2} \approx 0,74,$

e) sieć diamentu: $\frac{\pi}{16}\sqrt{3} \approx 0,34.$

Zadanie 1.2

Wyznaczyć kąty między wektorami prymitywnymi sieci Bravais'ego oraz objętość komórki zbudowanej na tych wektorach

a) dla monoatomowej sieci FCC,

b) dla monoatomowej sieci BCC.

Zadanie 1.3

Znaleźć postać symetrycznego rzeczywistego tensora przenikalności elektrycznej $[\epsilon_r]$ (tensor 2 rangi) kryształu o danej symetrii w układzie jego osi krystalograficznych.

a) symetria 2, zakładając, że oś 2 jest równoległa do osi krystalograficznej Z.

b) symetria $\bar{1}$,

c) symetria m , zakładając, że $m \perp Z$,

d) symetria 4, zakładając, że $4 \parallel Z$,

e) symetria $\bar{4}$, zakładając, że $4 \parallel Z$,

f) symetria mmm .

Zadanie 1.4

W nieabsorbujących ośrodkach aktywnych optycznie tensor przenikalności elektrycznej $[\mathbf{K}]$ jest zespolony, przy czym jego część rzeczywista $[\epsilon_r]$ jest symetryczna, natomiast część urojona $[\mathbf{G}]$ jest antysymetryczna

$$\mathbf{D} = \epsilon_0\{[\epsilon_r]\mathbf{E} + i\mathbf{G} \times \mathbf{E}\} = \epsilon_0\{[\epsilon_r] + i[\mathbf{G}]\}\mathbf{E} = \epsilon_0[\mathbf{K}]\mathbf{E},$$

gdzie tensor $[\mathbf{G}]$ można zawsze wyrazić poprzez składowe wektora skręcenia $\mathbf{G} = (G_1, G_2, G_3)$

$$[\mathbf{G}] = \begin{bmatrix} 0 & -G_3 & G_2 \\ G_3 & 0 & -G_1 \\ -G_2 & G_1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Znaleźć postać antysymetrycznego tensora $[\mathbf{G}]$ dla przypadków symetrii ośrodka wymienionych w zadaniu 1.3.

Zadanie 1.5

Tensor przewodnictwa elektrycznego $[\sigma]$ opisuje związek wektora gęstości prądu $\mathbf{j}$ z wektorem natężeniem pola elektrycznego $\mathbf{E}$

$$\mathbf{j} = [\sigma]\mathbf{E}.$$

Znaleźć postać tensora przewodnictwa elektrycznego $[\sigma]$ dla przypadków symetrii ośrodka wymienionych w zadaniu 1.3 nie zakładając przy tym żadnej symetrii tensora niezależnej od ośrodka.

Zadanie 1.6

Wykazać, że względna nieprzenikalność elektryczna $\mathbf{B}$ (ang. *impermeability tensor*) zdefiniowana jako odwrotność tensora względnej przenikalności ϵ , tzn.

$$\mathbf{B} = \epsilon^{-1} \quad \text{albo inaczej} \quad \mathbf{B} \epsilon = \mathbf{1} \quad (\text{macierz jednostkowa } 3 \times 3),$$

lub w zapisie odnoszącym się do składowych tensorów

$$B_{ik} \epsilon_{kj} = \delta_{ij},$$

jest także tensorem i dla danego ośrodka wykazuje taką samą symetrię jak tensor ϵ .

Zadanie 1.7

Niech $\mathbf{a}$ będzie macierzą przekształcenia izometrycznego, tzn. przekształcenia zachowującego odległości:

$$\text{dla każdego wektora wodzącego } \mathbf{r}: \quad |\mathbf{r}| = |\mathbf{a} \mathbf{r}|.$$

Wykazać, że macierz transformacji odwrotnej $\mathbf{a}^{-1}$ jest tożsama z macierzą transponowaną $\mathbf{a}^T$.

Zadanie 1.8

Wykazać, że we wszystkich punktowych grupach symetrii posiadających środek symetrii (np. grupa mmm) efekt Pockelsa, czyli liniowy efekt elektro-optyczny nie może istnieć. Jako tensor efektu elektro-optycznego przyjąć tensor $r_{ijk} = r_{jik}$, którego składowe pojawiają się w wyrazie liniowym rozwinięcia składowych tensora nieprzenikalności elektrycznej B_{ij} dla częstotliwości optycznych w szereg potęgowy względem natężenia przyłożonego pola elektrycznego niskiej częstotliwości o składowych E_i

$$B_{ij} = B_{ij}^0 + r_{ijk} E_k + g_{ijkl} E_k E_l + \dots$$

Zadanie 1.9

a). Wykazać, że we wszystkich punktowych grupach symetrii posiadających środek symetrii aktywność optyczna nie jest możliwa w żadnym kierunku propagacji światła.

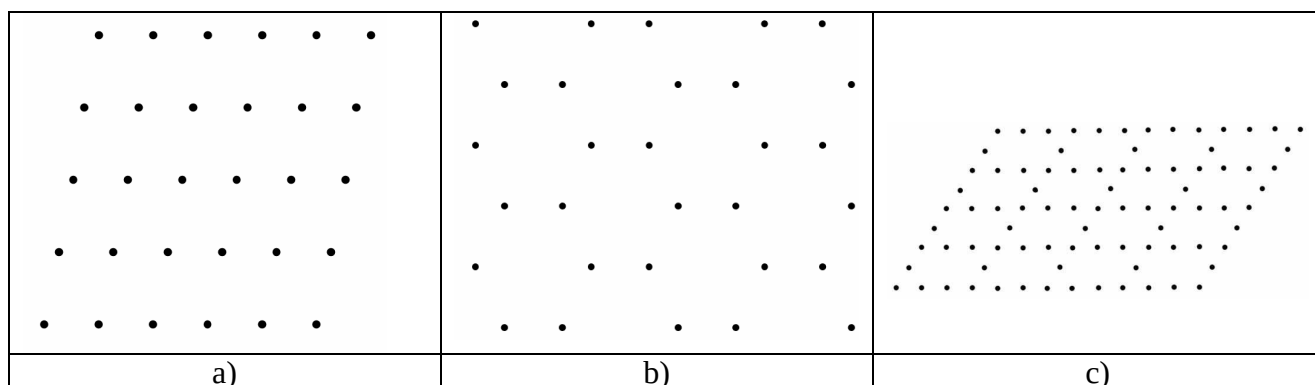
b). Czy obecność osi inwersyjnej $\bar{4}$, przy braku środka symetrii $\bar{1}$, również gwarantuje całkowity brak aktywności optycznej?

Wskazówka: aktywność optyczna jest opisana symetrycznym **pseudotensorem** 2-ej rangi $[\mathbf{g}]$, który jest specyficzny dla danego ośrodka. Znajac tensor $[\mathbf{g}]$ można znaleźć wektor skręcenia $\mathbf{G}$ (wprowadzony w zad. 1.4), który zależy od kierunku propagacji światła danego wektorem jednostkowym $\mathbf{s}$

$$\mathbf{G} = [\mathbf{g}]\mathbf{s}.$$

Zadanie 1.10

Dla pokazanych poniżej dwuwymiarowych struktur narysować: wektory translacji generujące sieć Bravais'go, komórkę elementarną, komórkę prostą rozpiętą na wektorach bazowych (o najmniejszej objętości) oraz bazę. Czy te elementy są wybieralne jednoznacznie?



Zadanie 1.11

Wektor (2,3) wybrano za jeden z wektorów bazowych płaskiej sieci regularnej. Jak wybrać drugi wektor bazowy sieci?

Wskazówka: niezależnie od wyboru wektorów bazowych, powierzchni jednej komórki prostej o najmniejszej objętości i rozpiętej na tych wektorach odpowiada zawsze jeden węzeł sieci. Powierzchnia każdej poprawnie zbudowanej komórki prostej musi więc być niezależna od wyboru wektorów bazowych sieci.

Zadanie 1.12

Wśród płaszczyzn sieciowych o wskaźnikach Millera (110), $(\bar{1}10)$, $(1\bar{1}0)$ i $(\bar{1}\bar{1}0)$ wskaż płaszczyzny należące do jednej rodziny płaszczyzn sieciowych.

Zadanie 1.13

Rozpatrz następujący wzór jako płaską sieć krystaliczną.

... ..
... q p d b q p d b ...
... d b q p d b q p ...
... q p d b q p d b ...
... d b q p d b q p ...
... ..

Zaznacz: a) komórkę elementarną, b) bazę. Rozważ jakie elementy symetrii posiada dana sieć.

Zadanie 1.14

Dla sieci regularnej udowodnij, że kierunek $[hkl]$ jest prostopadły do płaszczyzny o tych samych wskaźnikach (hkl) .

Zadanie 1.15

Wektory bazowe $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ komórki umownej pewnej sieci tetragonalnej mają długości odpowiednio $3\text{\AA}$, $3\text{\AA}$, $7\text{\AA}$. Znajdź kąty między płaszczyznami sieciowymi o wskaźnikach

a). (110) i $(\bar{1}10)$,

b). (011) i $(0\bar{1}1)$.

Temat 2. Sieć odwrotna.

Zadanie 2.1

Pokazać, że siecią odwrotną do sieci FCC jest BCC i odwrotnie.

Zadanie 2.2

Wykazać, że sieć odwrotna do sieci odwrotnej jest tożsama z wyjściową siecią prostą.

Wskazówka: skorzystać z tożsamości wektorowej $\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})$.

Zadanie 2.3

Wykazać, że każdy wektor sieci odwrotnej $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$, gdzie $\mathbf{b}_i$ są wektorami bazowymi sieci odwrotnej, jest prostopadły do płaszczyzny sieciowej kryształu rzeczywistego o indeksach (hkl) .

Zadanie 2.4

Udowodnić, że odległość między sąsiednimi płaszczyznami równoległymi o wskaźnikach (hkl) można obliczyć ze wzoru $d(hkl) = 2\pi/|\mathbf{G}|$, gdzie $\mathbf{G}$ jest wektorem sieci odwrotnej $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$.

Zadanie 2.5

(a) Znaleźć gęstość punktów sieciowych w płaszczyźnie sieciowej o dowolnych wskaźnikach (hkl) w sieci regularnej prostej o stałej a .

(b) Udowodnić, że w sieci regularnej prostej płaszczyznami sieciowymi o największej gęstości punktów sieciowych są płaszczyzny $\{100\}$ (w nawiasach $\{\dots\}$ zapisujemy zbiór rodzin płaszczyzn równoważnych ze względu na symetrię kryształu - w sieci SC $\{100\}$ obejmuje rodziny (100) , (010) , (001)). Czy możliwe jest wskazanie sieci o najmniejszej gęstości punktów sieciowych?

Wskazówka: wykorzystać związek z poprzedniego zadania oraz fakt, że gęstość punktów sieciowych w przestrzeni jest odwrotnością objętości komórki elementarnej.

Zadanie 2.6

Korzystając z definicji wektorów $\mathbf{b}_i$ sieci odwrotnej pokaż, że objętość komórki elementarnej sieci odwrotnej jest równa $(2\pi)^3/\Omega$, gdzie Ω jest objętością komórki elementarnej sieci prostej.

Zadanie 2.7

Grafit posiada strukturę warstwową, gdzie w warstwie atomy węgla leżą w narożach sześciokątów regularnych o boku a . Pokazać, że komórka elementarna zawiera 2 atomy. Znaleźć sieć prostą, odwrotną oraz 1 strefę Brillouina.

Zadanie 2.8

Korzystając z wektorów prymitywnych postaci

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{x}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a\mathbf{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\mathbf{y}, \quad \mathbf{a}_3 = c\mathbf{z}.$$

lub też na jakiejkolwiek innej drodze udowodnić, że sieć odwrotna prostej sieci heksagonalnej jest również prostą siecią heksagonalną ze stałymi sieci $2\pi/c$ oraz $4\pi/\sqrt{3}a$, obróconą o kąt 30° względem sieci pierwotnej.

Zadanie 2.9

Narysuj pierwszą strefę Brillouina dla dwuwymiarowej sieci odwrotnej:

a) tetragonalnej z prostopadłymi wektorami bazowymi o długościach w stosunku 3 do 2,

b) sieci z wektorami bazowymi o równych długościach tworzącymi kąt $< 90^\circ$ i jednocześnie $> 45^\circ$.

Temat 3. Defekty sieci krystalicznej.

Zadanie 3.1

Defekty Frenkla. Wykazać, że liczba n atomów międzywęzłowych znajdujących się w stanie równowagi termodynamicznej z n lukami w sieci kryształ, który ma N węzłów sieci i N' możliwych położań międzywęzłowych, dana jest wzorem

$$E_I = k_B T \ln \frac{(N-n)(N'-n)}{n^2}, \quad (3.1)$$

skąd dla $n \ll N, N'$

$$n = \sqrt{NN'} \exp\left(-\frac{E_I}{2k_B T}\right), \quad (3.2)$$

gdzie E_I jest energią potrzebną do przeniesienia jednego jonu z węzła sieci na pozycję międzywęzłową.

Zadanie 3.2

Rozpatrzmy kryształ NaCl domieszkowany wapniem, w którym w jednostce objętości znajduje się n_{Ca} jonów Ca^{++} zastępujących jony Na^+ w węzłach sieci, przy czym $n_{Ca} \ll N_-$, gdzie N_- jest liczbą węzłów w czystym kryształ NaCl, których może pojawić się defekt o ujemnym ładunku (po usunięciu dodatniego jonu Na^+). Wykazać, że gęstości defektów typu Schottky'ego w kryształ z domieszkami dane są wyrażeniami

$$n_+ = \frac{1}{2} \left[\sqrt{4n_i^2 + n_{Ca}^2} + n_{Ca}^2 \right], \quad (3.3)$$

$$n_- = \frac{1}{2} \left[\sqrt{4n_i^2 + n_{Ca}^2} - n_{Ca}^2 \right], \quad (3.4)$$

gdzie n_i opisuje równe koncentracje defektów po jonach dodatnich oraz defektów po jonach ujemnych w czystym kryształ NaCl.

Wskazówka: minimalizacja metodą mnożników Lagrange'a wyrażenia typu $G + \lambda \sum_j q_j n_j$, gdzie G jest energią swobodną Gibbsa, prowadzi do następującej koncentracji defektów j -tego rodzaju, z którymi związany jest ładunek elektryczny q_j

$$n_j \approx N_j \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_j + \lambda q_j}{k_B T}\right). \quad (3.5)$$

Temat 5. Kryształy jonowe. Stała Madelunga.

Zadanie 5.1

Wykazać, że wartość krytyczna stosunku promieni r^+ / r^- (promień większego jonu / promień mniejszego jonu) jest równa:

- a) $\sqrt{2} + 1 \approx 2,41$, dla struktury NaCl,
- b) $\frac{1}{2}(\sqrt{3} + 1) \approx 1,37$, dla struktury CsCl,
- c) $2 + \sqrt{6} \approx 4,45$, dla struktury blendy cynkowej ZnS.

Zadanie 5.2

Potencjał oddziaływania pomiędzy dwoma molekułami dany jest wzorem postaci

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}, \quad (5.1)$$

gdzie α i β są stałymi dodatnimi. Wykaż, że aby mogło powstać wiązanie pomiędzy tymi molekułami, musi być spełniony warunek $m > n$.

Zadanie 5.3

Energię potencjalną kryształu jonowego w funkcji odległości między jonami R opisano wyrażeniem

$$U(R) = Nu_i = N \left(\frac{b}{R^n} - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \right), \quad (5.2)$$

gdzie N jest liczbą par jonów, zaś n , α oraz b są stałymi znanymi dla danego kryształu. Dopasować stałe w analogicznym wyrażeniu według modelu **Borna-Mayera** dla najlepszej zgodności w okolicach minimum energii U

$$U(R) = N \left[\lambda \exp\left(-\frac{R}{\rho}\right) - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \right]. \quad (5.3)$$

Zadanie 5.4

Wyznaczyć współczynnik ściśliwości liniowej $k = -\frac{1}{L} \frac{\partial L}{\partial F}$ jednowymiarowego kryształu jonowego, gdzie L jest długością kryształu. Przyjąć, że energia potencjalna w funkcji odległości między sąsiednimi jonami R jest dana wzorem

$$U = Nu_i = N \left(\frac{b}{R^n} - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \right), \quad (5.4)$$

gdzie N jest liczbą jonów, zaś n , α oraz b są stałymi znanymi dla danego sieci krystalicznej.

Zadanie 5.5

Wykazać, że moduł ściśliwości objętościowej kryształów jonowych o strukturze NaCl dany jest

wyrażeniem $B = \frac{1}{18R_0} \left. \frac{d^2 u}{dR^2} \right|_{R=R_0}$ w przybliżeniu dla temperatury $T = 0K$, gdzie R_0 jest

równowagową odległością między najbliższymi sąsiadami, u jest energią jednej pary jonów.

Temat 8. Drgania sieci krystalicznej. Monoatomowy łańcuch liniowy.

Zadanie 8.1

Jakiej zmianie ulegnie związek dyspersyjny $\omega(k)$ dla monoatomowego łańcucha liniowego, jeżeli oprócz oddziaływań z najbliższymi sąsiadami zostaną uwzględnione także oddziaływania z drugimi sąsiadami? Przyjąć, że każdy atom w łańcuchu jest połączony z najbliższymi oraz drugimi sąsiadami sprężynami o stałej sprężystości odpowiednio K_1 oraz K_2 . Naszkicować wpływ drugich sąsiadów na wykres zależności $\omega(k)$.

Zadanie 8.2

W monoatomowej liniowej sieci atomów o masie M rozchodzi się fala podłużna o częstości ω , przy czym wychylenie n -tego atomu wynosi

$$\rho_n(t) = A \cos(kna - \omega t), \quad (8.1)$$

gdzie k liczba falowa ($2\pi/\lambda$), a - odległość najbliższych sąsiadów. Wykorzystując związek dyspersyjny (wyprowadzony na wykładzie)

$$M\omega^2 = 2K(1 - \cos ka) \quad (8.2)$$

pokazać, że uśredniona po czasie energia całkowita przypadająca na jeden atom wynosi

$$E = (1/2)M\omega^2 A^2. \quad (8.3)$$

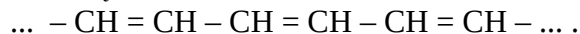
Zadanie 8.3

Oblicz częstość drgań własnych atomu domieszkowego o masie $M \neq m$ na pozycji $n = 0$ (gdzie m jest masą atomów macierzystych) w łańcuchu liniowym wprowadzając dla przemieszczenia podstawienie w postaci fali gasnącej $\rho_n = \rho_0 \exp(-C|n| - i\omega t)$, gdzie C jest nieznaną stałą, zakładając jednakowe stałe siłowe dla wszystkich wiązań. Dla jakiego zakresu M istnieją drgania zlokalizowane?

Temat 9. Dwuatomowy łańcuch liniowy. Drgania sieci trójwymiarowej.

Zadanie 9.1

Łańcuch poliacetyleny ma strukturę



Traktując go jako liniowy łańcuch atomów o identycznych masach M , i połączonych na przemian wiązaniami o różnych stałych sprężystości K_1 i K_2 :

- Sprawdzić, czy amplitudy drgań dwóch kolejnych grup CH mogą być różne.
- Wyprowadzić związek dyspersyjny $\omega(k)$. Wykreślić wykres krzywych dyspersyjnych uwzględniając gałąź optyczną i akustyczną.
Wskazówka: rozwiązanie jest podobne do rozwiązania dla łańcucha diatomowego (dwie różne masy i jedna stała sprężystości), które zostało podane na wykładzie.
- Rozważyć przejście graniczne $K_1 \rightarrow K_2$. W jaki sposób można uzasadnić znikanie gałęzi optycznej podczas tego przejścia.
- Na podstawie gałęzi akustycznej w wyprowadzonym związku $\omega(k)$ wyznaczyć prędkość dźwięku w przybliżeniu Debye'a.

Zadanie 9.2

W liniowym łańcuchu złożonym z leżących na przemian atomów o masach M_1 i M_2 połączonych wiązaniami o jednakowej stałej sprężystości K znaleźć stosunek amplitud drgań dwóch kolejnych atomów w przypadku drgań odpowiadających granicy I strefy Brillouina.

Zadanie 9.3

Wyprowadź związek dyspersyjny dla sieci kwadratowej (dwuwymiarowej) na podstawie przybliżenia najbliższych sąsiadów. Załóż, że drgania odbywają się w kierunku prostopadłym do płaszczyzny sieci.

Temat 11. Widmo drgań sieci

Zadanie 11.1

Określ średnią liczbę fononów w funkcji temperatury dla kryształu trójwymiarowego w modelu Einsteina. Rozważ obszar niskich i wysokich temperatur.

Wskazówka: w modelu Einsteina drgania trójwymiarowej sieci złożonej z N atomów rozpatruje się jako N niezależnych oscylatorów o określonych częstotliwościach ω_E , przy czym każdy oscylator może wykonywać drgania o trzech typach polaryzacji, co oznacza, że gęstość stanów fononowych $D(\omega) = 3N \delta(\omega - \omega_E)$.

Zadanie 11.2

Określ średnią liczbę fononów w funkcji w funkcji temperatury dla kryształu trójwymiarowego w modelu Debye'a. Rozważ obszar niskich i wysokich temperatur.

Wskazówka 1: $\int_0^{\infty} \frac{x^2}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^2}{3}.$

Wskazówka 2: gęstość stanów fononowych D dla jednego rodzaju polaryzacji w funkcji częstości ω dla kryształu trójwymiarowego w przybliżeniu Debye'a była wyprowadzona na wykładzie:

$$D(\omega) = \frac{\omega^2 L^3}{2\pi^2 v^3},$$

gdzie L jest długością krawędzi próbki w kształcie sześcianu, zaś v jest prędkością dźwięku, a częstości ω przyjmują wartości od 0 do ω_D

$$\omega_D = \left(6\pi^2 N\right)^{1/3} \frac{v}{L}.$$

Zadanie 11.3

Wzorując się na wyprowadzeniu funkcji gęstości stanów $D(\omega)$ w kryształ trójwymiarowym w przybliżeniu Debye'a, które było przedstawione na wykładzie w rozdziale 11.3, wyprowadzić wzór opisujący funkcję gęstości stanów w kryształ dwuwymiarowym, tzn. o grubości jednej warstwy atomów.

Zadanie 11.4

Korzystając z wyników zadania 11.3 określ średnią liczbę fononów w funkcji temperatury dla kryształu dwuwymiarowego w przybliżeniu Debye'a. Rozważ obszar niskich i wysokich temperatur. Porównaj wyniki z przypadkiem trójwymiarowym.

Wskazówka: $\int_0^{\infty} \frac{x}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^2}{6}.$

Temat 12. Energia i ciepło właściwe kryształu (izolatora).

Zadanie 12.1

Wykazać, że dla niskich temperatur $T \ll \Theta$ ciepło właściwe jednoatomowej sieci liniowej, zgodnie z przybliżeniem Debye'a, jest proporcjonalne do T/Θ , gdzie Θ jest efektywną temperaturą Debye'a, która w przypadku jednowymiarowym zdefiniowana jest przez $\Theta = \hbar\omega_D/k_B = \hbar\pi v/k_B a$; gdzie ω_D jest maksymalną częstotliwością wg przybliżenia Debye'a, k_B jest stałą Boltzmann, v jest prędkością dźwięku, zaś a jest odległością między atomami.

Wskazówka 1: $\int_0^{\infty} \frac{x}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^2}{6}.$

Wskazówka 2: gęstość stanów fononowych dla jednoatomowej sieci liniowej w przybliżeniu Debye'a była wyprowadzona na wykładzie:

$$D(\omega) = \begin{cases} \frac{L}{\pi v}, & \text{dla } \omega \leq \pi v / a, \\ 0, & \text{dla } \omega > \pi v / a, \end{cases}$$

gdzie $L = Na$ jest długością łańcucha liniowego, zaś N liczbą atomów w łańcuchu.

Temat 13. Rozszerzalność cieplna ciał stałych

Zadanie 13.1

Znając współczynnik rozszerzalności liniowej $\lambda = 2,38 \cdot 10^{-27} \text{ 1/K}$, prędkość dźwięku $v = 5 \text{ km/s}$, stałą sieci $a = 0,3 \text{ nm}$ oraz masę atomową $M = 45 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ (dane dla aluminium) określ stałą sprężystości K oraz stałą anharmoniczną γ dla tej substancji, tzn. stałe w rozwinięciu siły działającej na wychylony atom w szereg potęgowy względem wychylenia z położenia równowagi: $F(x) = -Kx + \gamma x^2$.

Wskazówka: wykorzystać wzór wyprowadzony na wykładzie $\lambda = \frac{3g}{4ac^2} k_B$ dla energii potencjalnej rozwiniętej w szereg potęgowy względem wychylenia x z położenia równowagi $U(x) = cx^2 - gx^3$, gdzie c i g mają wartości dodatnie, zaś $a = L/N$ jest stałą sieci.

Zadanie 13.2

Energia potencjalna oddziaływań atomów w kryształach molekularnych jest opisana wzorem Lennarda-Jonesa:

$$U(R) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right].$$

Ile wynosi współczynnik liniowej rozszerzalności cieplnej λ kryształu molekularnego w przybliżeniu oddziaływania najbliższych sąsiadów, jeżeli stałe ϵ i σ są znane?

Temat 14. Stany elektronowe w kryształach. Model elektronów swobodnych.

Zadanie 14.1

Energia kinetyczna trójwymiarowego gazu N elektronów w temperaturze 0 K w przybliżeniu elektronów swobodnych (model Sommerfelda) wynosi $E = \frac{3}{5} N \mathcal{E}_F$, gdzie $\mathcal{E}_F$ jest energią Fermiego.

Znaleźć analogiczny związek dla nanostruktur w postaci:

- Bardzo cienkich drutów (struktura jednowymiarowa),
- Monoatomowej warstwy (struktura dwuwymiarowa).

Wskazówka: rozwiązanie dla przypadku trójwymiarowego było przedstawione na wykładzie.

Zadanie 14.2

Wyprowadź wzory na funkcję gęstości stanów $g(\mathcal{E})$, tzn. liczbę stanów na jednostkowy przedział energii wokół wartości $\mathcal{E}$, dla elektronów swobodnych w przypadkach:

- jednowymiarowy łańcuch atomów o długości L ,
- dwuwymiarowy kwadrat o boku L i grubości monoatomowej.

Porównaj odpowiednie wykresy z przypadkiem trójwymiarowym (wykład, temat 15).

Zadanie 14.3

- Wyprowadź równanie stanu (związek ciśnienia i objętości) trójwymiarowego gazu elektronowego w temperaturze $T = 0$ K.
- Wyznaczyć moduł sprężystości objętościowej $B = -V(\partial p / \partial V)$ gazu elektronowego w temperaturze $T = 0$ K i wyrazić go poprzez energię Fermiego.

Wskazówki:

- W temperaturze 0 K zmiana energii E gazu elektronowego jest równa jego pracy objętościowej ze znakiem „-”.
- Wykorzystaj związki wyprowadzone na wykładzie:

$$E = \frac{3}{5} N \mathcal{E}_F, \quad \text{oraz} \quad \mathcal{E}_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3},$$

gdzie E jest energią całego gazu elektronowego, $\mathcal{E}_F$ jest energią Fermiego, N jest ilością elektronów w próbce o objętości V , $n = N/V$ jest gęstością elektronów, zaś m jest masą elektronu.

Zadanie 14.4

Wykazać, że gęstość prądu elektrycznego j [A/m²] płynącego w metalu o stałej koncentracji elektronów swobodnych n jest wprost proporcjonalna do natężenia przyłożonego pola elektrycznego E [V/m].

Wskazówka: z powodu zderzeń elektronów z domieszkami, z niedoskonałościami sieci krystalicznej oraz z fononami, elektrony poruszają się od zderzenia do zderzenia ze średnim czasem τ , który można uznać za wielkość stałą. Dodatkowy pęd uzyskany między zderzeniami na skutek działania pola elektrycznego, podczas zderzenia zmniejsza się średnio biorąc do zera.

Temat 21...23. Półprzewodniki.

Zadanie 21.1

Półprzewodnik samoistny GaAs został domieszkowany krzemem Si w taki sposób, że domieszki zastąpiły atomy galu Ga. Jakiej modyfikacji ulegnie model pasmowy na skutek domieszkowania? Wzorując się na modelu atomu wodoru Bohra wyprowadzić wzór opisujący położenie poziomu domieszkowego na osi energii wyskalowanej w eV. Masy efektywne wynoszą: $0,07m$ dla elektronów w paśmie przewodnictwa, $0,68m$ i $0,12m$ dla dziur ciężkich i lekkich w paśmie walencyjnym, gdzie $m = 9,106 \times 10^{-31}$ kg jest energią elektronu w próżni. Stała dielektryczna GaAs wynosi $\epsilon = 13,1$ a szerokość przerwy energetycznej $E_g = 1,42$ eV.

Zadanie 21.2

W czystym germanie przerwa energetyczna wynosi $E_g = 0,74$ eV, a masy efektywne elektronów m_e^* i dziur m_h^* są równe odpowiednio 0,22 i 0,37 masy elektronu swobodnego.

a) Oszacować koncentrację elektronów w paśmie przewodnictwa przy $T = 300$ K.

b) Określić położenie poziomu Fermiego przy $T = 300$ K.

Wskazówka: koncentracja elektronów n w paśmie przewodnictwa oraz dziur p w paśmie walencyjnym są opisane wzorami:

$$n = \frac{1}{4} \left(\frac{2m_e^* k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{\mathcal{E}_F - \mathcal{E}_{0e}}{k_B T} \right), \quad p = \frac{1}{4} \left(\frac{2m_h^* k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{\mathcal{E}_{0h} - \mathcal{E}_F}{k_B T} \right),$$

gdzie $\mathcal{E}_{0e}$ jest energią elektronu na dnie pasma przewodnictwa, $\mathcal{E}_{0h}$ jest energią na wierzchołku pasma walencyjnego, zaś $\mathcal{E}_F$ oznacza poziom Fermiego (nie jest dany).

Zadanie 21.3

Znaleźć koncentrację elektronów przewodnictwa w Ge, zawierającym domieszki donorowe o koncentracji $N_D = 10^{22} \text{ m}^{-3}$. Wiadomo, że poziom donorowy znajduje się w odległości 0,03 eV od dna pasma przewodnictwa i $T = 100$ K. Masa efektywna elektronów m_e^* wynosi 0,22 masy elektronu swobodnego.

Wskazówka: wskazówka jak wyżej do zadania 21.2.