

ΔΠΜΣ «MINA», ΕΜΠ

Κβαντική θεωρία της ύλης: Τρίτη ομάδα προβλημάτων

Πρόβλημα Γ.1 (α) Ναδειχθεί ότι η εσωτερική ενέργεια ανά μονάδα όγκου ενός αερίου N ελεύθερων ηλεκτρονίων σε τρισδιάστατο κουτί στο απόλυτο μηδέν είναι: $E_{o\lambda} = \frac{3}{5}NE_F$.

(β) Έστω ότι η πυκνότητα καταστάσεων για κάποιο σύστημα δίνεται από την έκφραση: $g(E) = g_0$, για $E > 0$, και $g(E) = 0$, για $E < 0$. Έστω N ο αριθμός των ηλεκτρονίων και V ο όγκος του δείγματος. Να υπολογιστεί η ενέργεια του Fermi.

Πρόβλημα Γ.2 (α) Βρείτε την ενεργειακή πυκνότητα καταστάσεων ελεύθερων ηλεκτρονίων στις 1, 2, και 3 διαστάσεις. (β) Βρείτε την ολική ενέργεια ενός συστήματος N ελεύθερων ηλεκτρονίων σε 1, 2, και 3 διαστάσεις συναρτήσει της αντίστοιχης ενέργειας του Fermi.

Πρόβλημα Γ.3 (α) Δείξτε ότι για ένα αέριο N ελεύθερων ηλεκτρονίων στο απόλυτο μηδέν ισχύει η σχέση: $pV = \frac{2}{5}NE_F$, όπου η έκφραση $p = -\left(\frac{\partial E_{o\lambda}}{\partial V}\right)_N$ δίνει την πίεση.

(β) Αν το μέτρο ελαστικότητας όγκου του συστήματος ελεύθερων ηλεκτρονίων ορίζεται από την έκφραση: $B \equiv V\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_N$, δείξτε ότι, στο απόλυτο μηδέν, αυτό το μέτρο δίνεται από την έκφραση: $B = \frac{10}{9}\frac{E_{o\lambda}}{V}$, $E_{o\lambda} \equiv \frac{3}{5}NE_F$.

(γ) Για το λίθιο η αριθμητική πυκνότητα των ηλεκτρονίων ισούται με: $G = 4.70 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. Υπολογίστε την ηλεκτρονική συνεισφορά στο μέτρο ελαστικότητας του λιθίου.

Πρόβλημα Γ.4 Το κάλιο έχει πυκνότητα $\rho = 0.86 \text{ kg/m}^3$ και ατομικό βάρος $M = 39 \text{ g/mol}$. Υπολογίστε την ενέργεια E_F του Fermi του συστήματος των ηλεκτρονίων μέσα στο μέταλλο, αν σε κάθε άτομο του καλίου αντιστοιχεί ένα ηλεκτρόνιο του ηλεκτρονικού αερίου.

Πρόβλημα Γ.5 (α) Χρησιμοποιώντας κατάλληλα διανύσματα πλέγματος για την θεμελιώδη μοναδιαία κυψελίδα, βρείτε τα διανύσματα αντίστροφου πλέγματος για τα κάτωθι πλέγματα: 1) Απλό κυβικό (sc), 2) bcc, 3) fcc, 4) hcp. (β) Βρείτε τα διανύσματα πλέγματος, τις θέσεις των ατόμων της βάσης στην θεμελιώδη κυψελίδα και τα διανύσματα αντίστροφου πλέγματος για τις δομές NaCl, CsCl, διαμάντι και ZnS (zincblende).

Πρόβλημα Γ.6 Θεωρήστε κυβικό εδροκεντρωμένο πλέγμα και βρείτε το μέγιστο διάνυσμα στη ζώνη του Brillouin που είναι: (α) παράλληλο σε μια ακμή του κύβου, (β) παράλληλο στην κύρια διαγώνιο, (γ) παράλληλο σε διαγώνιο της πλευράς του κύβου.

Πρόβλημα Γ.7 Δείξτε ότι, για κάθε ενεργειακή ζώνη, υπάρχουν $\frac{2N^3V_c}{(2\pi)^3}$ καταστάσεις ανά μονάδα όγκου του αντιστρόφου χώρου.

Πρόβλημα Γ.8 Έστω ότι τα άτομα ενός κρυστάλλου περιβάλλονται από σφαίρες οι οποίες εφάπτονται μεταξύ τους. Ο λόγος λ του όγκου που καταλαμβάνουν αυτές οι σφαίρες προς τον όγκο του στερεού μας επιτρέπει να χαρακτηρίσουμε το πόσο πυκνή είναι μία κρυσταλλική δομή. Βρείτε τον λόγο λ για τις εξής δομές: (α) Διαμαντιού, (β) Απλό κυβικό, (γ) bcc, (δ) fcc, και (ε) hcp. Επιβεβαιώνουν τα αποτελέσματα αυτό που ξέρουμε για το ποιες δομές είναι πυκνής διάταξης;

Πρόβλημα Γ.9 Υπολογίστε τις τέσσερις χαμηλότερες ενέργειες, που μπορεί να έχει ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο σε (κενό) κυβικό πλέγμα με πλευρά a , αν το κυματόνισμα στην ανηγμένη ζώνη έχει μέγεθος $\frac{\pi}{2a}$.

Πρόβλημα Γ.10 (α) Δείξτε, ότι η γωνία μεταξύ δύο οποιωνδήποτε γραμμών που ενώνουν ένα πλεγματοειδές σημείο της δομής του αδάμαντα με τους τέσσερις πρώτους γείτονες είναι $\arccos \frac{1}{3} = 109^\circ 28'$. (β) Δείξτε, ότι το ποσοστό κατάληψης όγκου από τα άτομα, για δομή αδάμαντα πυκνής δομής είναι: $f = \frac{\sqrt{3}\pi}{16} = 0.34$.

Πρόβλημα Γ.11 Αν το διάνυσμα του αντιστρόφου πλέγματος που σχετίζεται με μια συγκε-
κριμένη σκέδαση του Bragg δίνεται από τη σχέση: $\vec{G}_{m_1 m_2 m_3} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3$,

να δεχθεί ότι η συνθήκη ανάκλασης του Bragg για απλό κυβικό πλέγμα δίνεται από τη σχέση:

$$\frac{\lambda^2}{4a^2} = \frac{\sin^2 \theta}{n^2} (m_1^2 + m_2^2 + m_3^2),$$

όπου a είναι η πλεγματική σταθερά και n ο ακέραιος αριθμός που δίνει την τάξη της σκέδασης.

Πρόβλημα Γ.12 Ένα δισδιάστατο αντίστροφο πλέγμα ορίζεται από τα διανύσματα $\vec{b}_1 = k\hat{x}$
και $\vec{b}_2 = k \cos \frac{\pi}{3} \hat{x} + k \sin \frac{\pi}{3} \hat{y} = \frac{\sqrt{3}k}{2} \hat{x} + \frac{k}{2} \hat{y}$.

(α) Κατασκευάστε την πρώτη ζώνη του Brillouin.

(β) Υπολογίστε τον όγκο της πρώτης ζώνης του Brillouin.

(γ) Σχεδιάστε και υπολογίστε τα διανύσματα του πλέγματος στον «ευθύ» χώρο.

Πρόβλημα Γ.13 Η ενέργεια ενός ηλεκτρονίου, μάζας m , που κινείται σε μονοδιάστατο
κρύσταλλο σταθεράς a είναι:

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right).$$

Θεωρούμε ότι ένα σταθερό, χρονικά ανεξάρτητο, ηλεκτρικό πεδίο $E_0 > 0$ εφαρμόζεται κατά μήκος
του κρυστάλλου. Τη χρονική στιγμή $t = 0$ το ηλεκτρόνιο βρίσκεται στον πυθμένα της ζώνης.
Υπολογίστε:

(α) Την ταχύτητα ομάδας $v_g(k)$.

(β) Την ενεργό μάζα $m^*(k)$.

(γ) Επιβεβαιώστε τις ιδιότητες: $E(-k) = E(k)$ και $E(k+G) = E(k)$ στην προκειμένη περίπτω-
ση.

(δ) Δείξτε ότι το ηλεκτρόνιο, αν υποθέσουμε ότι δεν σκεδάζεται, εκτελεί περιοδική κίνηση στον
πραγματικό χώρο.

(ε) Βρείτε τις τιμές των k , $E(k)$, $v_g(k)$ και $m^*(k)$ στο άνω και στο κάτω όριο της ζώνης.

(στ) Ποιό είναι το εύρος της ζώνης;

Πρόβλημα Γ.14 Θεωρήστε μονοδιάστατο ημιαγωγό, στον οποίο οι σχέσεις διασποράς για
τη ζώνη σθένους και τη ζώνη αγωγιμότητας γράφονται: $E_c(k) = E_1 - E_2 \cos ka$, $E_v(k) = E_3 -$
 $E_4 \sin^2 \frac{ka}{2}$, όπου οι E_1 , E_2 , E_3 , E_4 είναι θετικές ποσότητες και $E_3 < E_1 - E_2$ και $-\frac{\pi}{a} < k < +\frac{\pi}{a}$.

(α) Προσδιορίστε το ενεργειακό χάσμα.

(β) Ποιό είναι τα εύρη ζώνης ΔE_v για τη ζώνη σθένους και ΔE_c για τη ζώνη αγωγιμότητας;

(γ) Ποιά είναι η ενεργός μάζα στον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας;

(δ) Ποιά είναι η ενεργός μάζα στην κορυφή της ζώνης σθένους;

Πρόβλημα Γ.15 Ως θεμελιώδη διανύσματα του εξαγωνικού πλέγματος θεωρήστε τα

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

Δείξτε ότι:

(α) Ο όγκος V_c της θεμελιώδους κυψελίδας είναι $\frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$.

(β) Τα θεμελιώδη διανύσματα του αναστρόφου πλέγματος είναι:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\sqrt{3}\pi}{3a} \hat{x} + \frac{2\pi}{a} \hat{y}, \quad \vec{b}_2 = -\frac{2\sqrt{3}\pi}{3a} \hat{x} + \frac{2\pi}{a} \hat{y}, \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{c} \hat{z}.$$

Σχεδιάστε το πλέγμα που ορίζουν τα διανύσματα αυτά.

(γ) Για το εξαγωνικό πλέγμα, σχεδιάστε την πρώτη ζώνη του Brillouin.