Zadania z fizyki — Zestaw 7

Fizyka ciała stałego

WEAIiE - Informatyka, rok I, grupy 1 i 3

1. *Gaz elektornów swobodnych.* Dla trójwymiarowej nieskończonej studni potencjału operator energii potencjalnej $V(x_i)$ dany jest formułą:

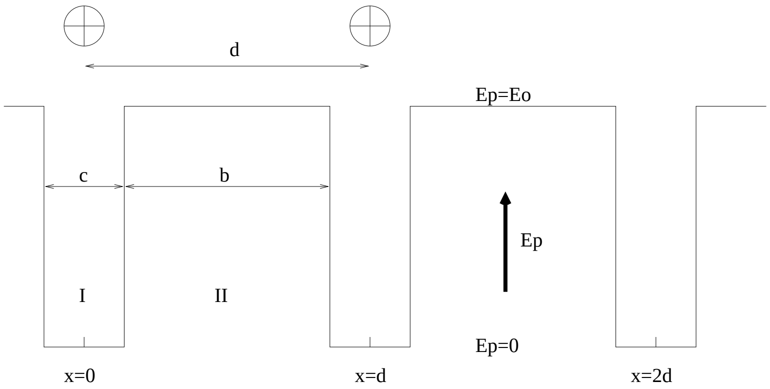
$$V(x_i) = \begin{cases} 0 & \Leftrightarrow x_i \in (0, a) \\ \infty & \Leftrightarrow x_i \in (-\infty, 0] \cup [a, +\infty) \end{cases} \quad \text{dla } i = 1, 2, 3.$$

Korzystając z rozwiązania problemu jednowymiarowego oraz metody separacji zmiennych proszę rozwiązać równanie Schrödingera dla cząstki w studni zakładając zerowanie się funkcji falowej na brzegach studni: $\psi(x_i = 0) = \psi(x_i = a) = 0$ dla $i = 1, 2, 3$. Znaleźć dopuszczalne wartości wektora falowego $k_{n_1}, k_{n_2}, k_{n_3}$ i energii $E_{n_1 n_2 n_3}$ cząstki w studni.

2. *Energia Fermiego.* Znaleźć zależność **poziomu Fermiego** w temperaturze zera bezwzględnego od gęstości elektronowej n: $E_F(T = 0) = \dfrac{\hbar^2}{2m}(3n\pi^2)^{2/3}$, oraz zależność średniej energii na elektron od energii Fermiego $\bar{E}(T = 0) = \dfrac{3}{5}E_F$.

3. Proszę znaleźć **gęstość stanów** $D(k)$ w przestrzeni wektora falowego i $g(E)$ w przestrzeni energii dla cząstki w nieskończonej jedno-, dwu- i trzywymiarowej studni potencjału.

4. *Struktura pasmowa ciał stałych.* Rozwiążmy równanie Schrödingera dla **potencjału Kroniga-Penney'a** (będącego przedstawionym na rysunku przybliżeniem potencjału rdzeni sieci krystalicznej) i energii cząstki $E < E_0$.



Po rozwiązaniu równania Schrödingera niezależnie dla regionu I i II:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= u_I(x)e^{ikx}, & u_I(x) &= Ae^{i(\gamma-k)x} + Be^{-i(\gamma+k)x}, & \gamma &= \sqrt{2mE/\hbar^2} \\ \psi_{II}(x) &= u_{II}(x)e^{ikx}, & u_{II}(x) &= Ce^{(\xi-ik)x} + De^{-(\xi+ik)x}, & \xi &= \sqrt{2m(E_0 - E)/\hbar^2} \end{aligned} \tag{1}$$

żadamy ciągłości funkcji falowej i jej pochodnej:

$$\psi_I(c/2) = \psi_{II}(c/2), \quad \frac{d\psi_I}{dx}(c/2) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(c/2). \tag{2}$$

Warunek periodyczności rozwiązania (**twierdzenie Blocha**) narzuca kolejne dwa warunki:

$$u_I(-c/2) = u_{II}(b + c/2), \quad \frac{du_I}{dx}(-c/2) = \frac{du_{II}}{dx}(b + c/2) \tag{3}$$

na stałe A, B, C, D w równaniu (1). Jednoznaczne, nietrywialne rozwiązanie istnieje (na mocy twierdzenia Cramera) wtedy, i tylko wtedy, gdy:

$$P\frac{\sin\gamma d}{\gamma d} + \cos\gamma d = \cos kd, \tag{4}$$

gdzie: $P = \dfrac{mE_0bd}{\hbar^2}$.

Równanie 4 można rozwiązać ze względu na $E(k)$ numerycznie. Jego prawa strona zmienia się w przedziale $[-1, +1]$. Wektor falowy k jest czysto urojony w przedziałach energii, gdzie lewa strona równania 4 jest większa od $+1$ lub mniejsza od -1. Pęd cząstki musi być rzeczywisty, więc elektron **nie może** mieć energii, dla których k jest urojone. Prowadzi to do istnienia **dozwolonych** i **wzbronionych pasm** energii w ciałach stałych.

Wynaczyć numerycznie zależność $E(k)$. Przyjąć $P = 5\pi/2$, $d = 2$ Å, $m = m_e$ w przedziale energii od 0 eV do 200 eV. Jak zmienia się szerokość pierwszego dozwolonego pasma w funkcji stałej sieci krystalicznej d ($d = 1$ Å, $d = 1.5$ Å, $d = 2$ Å dla $E_0b = 25$ eVÅ)? Jak zmienia się ta szerokość w funkcji E_0 ($E_0b = 50$ eVÅ, $E_0b = 75$ eVÅ, $E_0b = 100$ eVÅ dla $d = 1$ Å)?

5. *Masa efektywna.* Pod wpływem zewnętrznego pola elektrycznego elektrony swobodne w metalach doznają przyspieszenia zgodnie z prawami Newtona. Jednak w obecności potencjału sieci krystalicznej zachowują się jakby były obdarzone **efektywną masą** m^* różną od masy spoczynkowej m, mogącą być zarówno większą od m (a nawet nieskończoną) lub mniejszą od m (a nawet ujemną), gdyż formalna definicja tego parametru związana jest z wypukłością związku dyspersyjnego $E(k)$:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2}.$$

- Pokazać, że dla gazu elektronów swobodnych (o kwadratowym związku dyspersyjnym) $m^* = m_e$.
- Eksperymentalnie znaleziona energia Fermiego dla sodu wynosi $E_F = 2.5$ eV. Korzystając ze związku $E_F = \dfrac{\hbar^2}{2m}(3n\pi^2)^{2/3}$ znaleźć masę efektywną elektronów walencyjnych w sodzie. Sód jest jednowartościowy, jego masa atomowa wynosi 22.99 g/mol, zaś gęstość 0.97 g/cm^3.

Krzysztof Malarz, 98/12/02