

PODSTAWY FIZYKI CIAŁA STAŁEGO II

Fizyka Techniczna, 3 rok, zestaw 1 - model elektronów swobodnych.

1. Dla gazu N elektronów swobodnych zamkniętych w dwuwymiarowym kwadracie o boku L znaleźć funkcję falową, relację dyspersji, gęstość stanów w przestrzeni k i E , wzór na energię Fermiego i promień „kuli” Fermiego. Znaleźć wartość energii Fermiego dla 2-wymiarowego kryształu o centrowanej komórce elementarnej o boku $3\text{\AA}$ i 2 elektronach walencyjnych na atom.
2. Potencjał chemiczny μ definiujemy uwikłanym równaniem całkowym:

$$N = \int_0^\infty D(E) f(\mu, T) dE, \quad (1)$$

gdzie N jest ustaloną liczbą cząstek, $D(E)$ funkcją gęstości stanów, a f to rozkład Fermiego-Diraca dany równaniem

$$f(\mu, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) + 1}. \quad (2)$$

Pokazać, że w 2-wymiarowym gazie elektronów swobodnych potencjał chemiczny w funkcji temperatury dany jest wzorem:

$$\mu(T) = k_B T \ln \left[\exp\left(\frac{\pi n \hbar^2}{m k_B T}\right) - 1 \right] \quad (3)$$

gdzie n jest powierzchniową koncentracją elektronów. Narysować wykres $\mu(T)$.

3. Dla układu 3-wymiarowego wyprowadzić wzory na gęstość stanów elektronowych i E_F . Obliczyć całkowitą energię gazu elektronów swobodnych w funkcji energii Fermiego (odp. $E_{\text{tot}} = 3/5 N E_F$) oraz ciśnienie jakie panuje w gazie w $T = 0$ (wsk. $p = -\frac{\partial F}{\partial V}$, F - energia swobodna).
4. Obliczyć energię Fermiego kryształu sodu w przybliżeniu elektronów swobodnych, przyjmując, że każdy atom Na ma 1 elektron walencyjny. Struktura krystaliczna sodu to *bcc*, stała sieci jest równa $4.23 \text{ \AA}$. Wynik podać w eV oraz K.
5. Obliczyć moduł ściśliwości B kryształu sodu w temperaturze 0 K, pochodzący od elektronów swobodnych. $B = -V \frac{\partial p}{\partial V}$. Porównać z wartością doświadczalną $B = 6.3 \text{ GPa}$.
6. *Rozwinięcie niskotemperaturowe dla potencjału chemicznego w modelu elektronów swobodnych*
Potencjał chemiczny μ zdefiniowany jest jak w zadaniu 2. Uzyskać przybliżone równanie na potencjał chemiczny dla elektronów swobodnych w funkcji temperatury dla 3-wymiarowego kryształu. W tym celu:
 - (a) Rozdzielić całkę (1) na dwa wyrazy całkując przez części (znany postać $D(E)$ z modelu elektronów swobodnych).
 - (b) W pozostałej całce podstawić zmienną bezwymiarową $x = (E - \mu)/k_B T$, a funkcję którą mnoży f' (będzie nią całka z gęstości stanów) przekształcić do postaci $(1 + \text{const} * x)^{3/2}$ i rozwinąć w szereg do drugiego rzędu (dlaczego nie wystarczy pierwszy rząd? jaka jest parzystość funkcji f' ?) Jak można przybliżyć dolną granicę całkowania?
 - (c) Po rozwinięciu całkować wyraz po wyrazie (jedna z całek daje się łatwo obliczyć analitycznie, druga to całka oznaczona taka jak w wyprowadzeniu elektronowego ciepła właściwego. W razie potrzeby korzystać z www.wolframalpha.com). Powinniśmy teraz dojść do równania:

$$N = \alpha \mu^{3/2} \left(1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 \right) \quad (4)$$

gdzie w α są stałe fizyczne i czynniki liczbowe.

- (d) Obliczyć niezależnie N w funkcji E_F dla $T = 0$, z porównania uzyskanych równań wyliczyć μ . Wynik można następnie rozwinąć w szereg i zostawić tylko dwa wyrazy, uzyskując ostatecznie:

$$\mu(T) = E_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right) \quad (5)$$

Gdyby ktoś miał problem z podpunktami (a)-(b) proszę przeliczyć (c) - (d), stała α to wszystko co stoi przed energią po scałkowaniu funkcji gęstości stanów elektronowych.

- (e) Narysować wykres $\mu(T)$, obliczyć $\mu(T)/E_F$ dla układu o $E_F = 5 \text{ eV}$ (typowa wartość dla metalu) i o $E_F = 0.1 \text{ eV}$ (silnie domieszkowany półprzewodnik) w $T = 10, 300, 1000 \text{ K}$ (dla półprzewodnika wzór jest już mocno przybliżony).