Podstawy Fizyki Ciała Stałego II

Fizyka Techniczna, 3 rok, zestaw 3 - teoria pasmowa (II).

1. *Oszacowanie energii oddziaływania elektronu walencyjnego w atomie litu*
   Numeryczne obliczenia w teorii pasmowej bazują na rozwiązaniu jednocząstkowego równania Schrödingera dla elektronu, który porusza się w krysztale o zadanej symetrii sieci oraz oddziałuje: z jądrami atomów, znajdującymi się w węzłach sieci, i innymi elektronami (walencyjnymi oraz tymi z głębszych powłok, otaczających jądro). Dzięki istnieniu dyskretnej symetrii translacyjnej i twierdzeniu Blocha obliczenia można sprowadzić do pojedyńczej komórki elementarnej z nałożonymi periodycznymi warunkami brzegowymi, jednak w dalszym ciągu problem jest skomplikowany, bo wszystkie elektrony w komórce oddziałują ze sobą i oddziaływanie to jest dwuciałowe, tzn. zależne od położenia wszystkich elektronów (problem wielocząstkowy). Kluczowym dla teorii pasmowej jest fakt że oddziaływania elektronowe (*wielocząstkowe*) można efektywnie przybliżyć przez oddziaływanie *jednocząstkowe* tzn. oddziaływanie elektronu z otaczającą go chmurą elektronową opisaną pewnym polem potencjału. Niestety przejście do opisu jednocząstkowego gubi ważną cechę funkcji falowej wielocząstkowej - elektrony są fermionami więc muszą być opisane wielocząstkową antysymetryczną funkcją falową, tzn. zmieniającą znak w momencie przestawień i zgodną z zakazem Pauliego. Ta kwantowość wielocząstkowej fukcji przy przejściu do opisu jednocząstkowego powoduje pojawienie się dodatkowego "potencjału" tzw. potencjału wymienno-korelacyjnego, który ma poprawić opis jednocząstkowy oddziaływania ze średnim polem o efekty wymienne (biorące się z fermionowości elektronów) i korelacyjne (wynikające z kulombowskiego oddziaływania elektron-elektron). Sukces teorii pasmowej np. w metalach i półprzewodnikach, jest konsekwencją względnej słabości potencjału wymienno-korelacyjnego, którego nie potrafimy opisać ścisłymi wzorami, w stosunku do klasycznych oddziaływań elektrostatycznych. Aby to zobrazować oszacujemy składniki energii oddziaływania elektronu walencyjnego w atomie litu.

   Elektron walencyjny 2s w atomie Li (Z = 3) porusza się w potencjale wytworzonym przez dwa elektrony powłoki $1s^2$. Przybliżając ich funkcje falowe funkcjami wodoropodobnymi mamy postać:

$$\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \exp(-r/a), \quad a = a_B/Z \tag{1}$$

   Obliczyć:

   (a) gęstość elektronową w funkcji r, $n(r)$

   (b) ładunek wewnątrz sfery o promieniu r

   (c) natężenie i energię potencjalną pola elektrycznego U_e

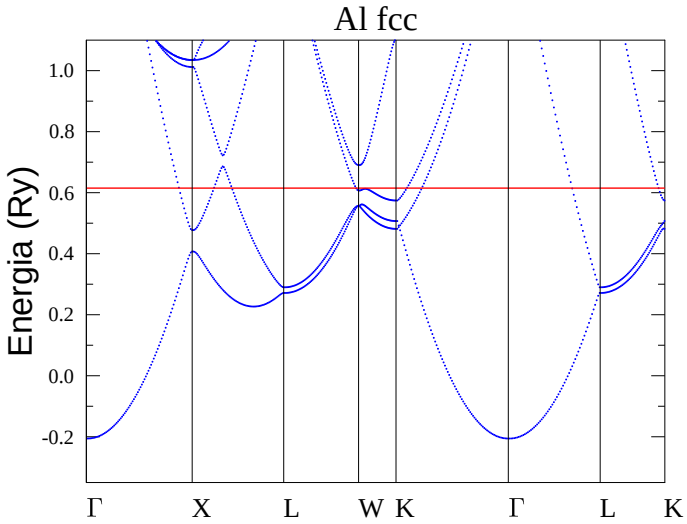
   (d) potencjał wymienno-korelacyjny przy pomocy wzoru Slatera:

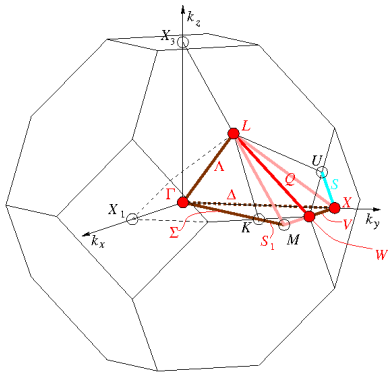
$$U_{xc} = -\alpha \cdot n(r)^{1/3}, \quad \alpha = \frac{(3/\pi)^{4/3} e^2}{16\epsilon_0} \tag{2}$$

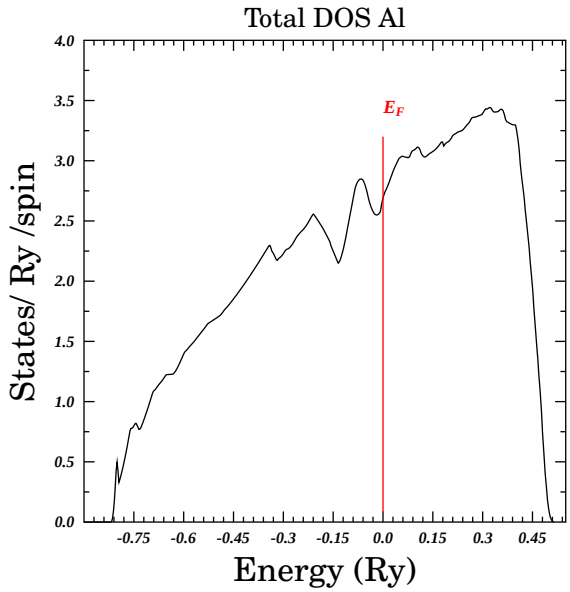
   (e) Energię potencjalną elektrostatyczną oddziaływania z jądrem, $U_j(r)$

   (f) stosunek U_{xc}/U_j i U_{xc}/U_e w odległości $r = 2a$.

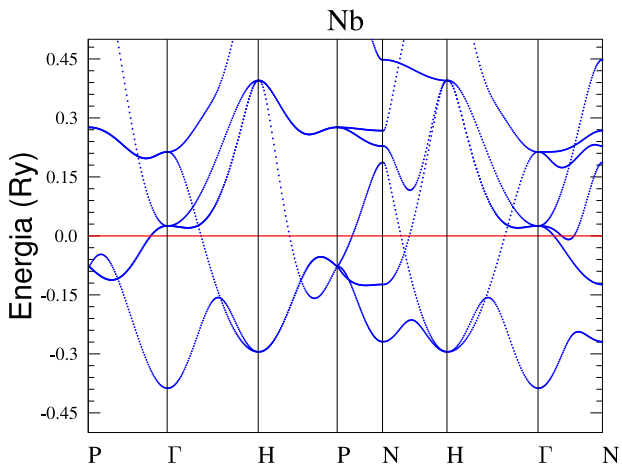
2. Poniższe wykresy przedstawiają strukturę pasmową oraz gęstość stanów elektronowych aluminium (fcc, $a = 7.655a_B$). Zidentyfikować kierunki w strefie. Porównać kształt pasm i gęstości stanów z modelem elektronów swobodnych. Obliczyć energię Fermiego i gęstość stanów na poziomie Fermiego dla Al z modelu elektronów swobodnych i porównać z wartościami odczytanymi z wykresów. Obliczyć współczynnik γ elektronowego ciepła właściwego (podać wartość), porównać ciepło elektronowe z wartością doświadczalną (1.35 mJ/mol K^2) oraz z wartością sieciowego ciepła właściwego dla temperatury 5 K i 500 K ($\Theta = 400$ K).

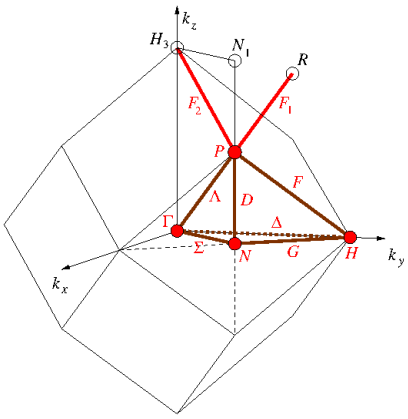


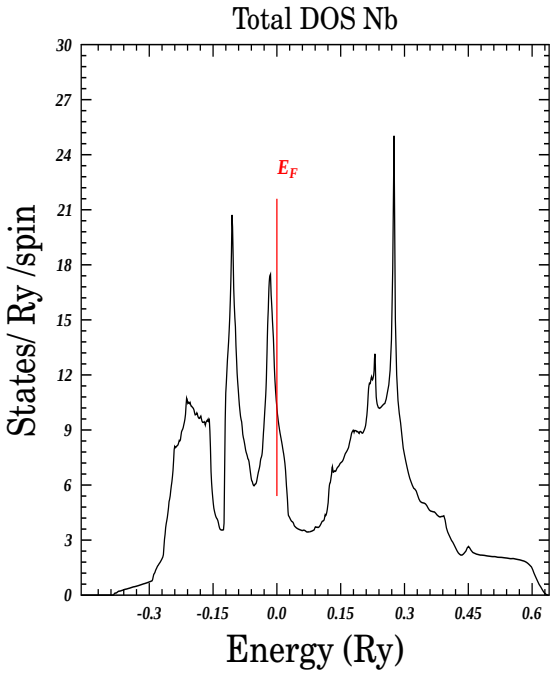




3. Przy użyciu modelu elektronów swobodnych obliczyć E_F, $DOS(E_F)$, γ dla niobu (bcc, stała sieci 3.3Å. Porównać z wynikami obliczeń pasmowych.







4. Wykres poniżej przedstawia wyniki pomiarów niskotemperaturowego ciepła właściwego w niobie (z pracy Phys. Rev. 127, 1501–1507 (1962), dostępna z sieci AGH `http://prola.aps.org/abstract/PR/v127/i5/p1501_1`). Skąd na wykresie skokowy przebieg ciepła właściwego? Z wykresu liniowego, uzyskanego z pomiarów w polu magnetycznym, odczytać wartośc współczynnika γ. Porównać z wynikiem γ obliczonym na podstawie gęstości stanów z obliczeń pasmowych, odczytanej z wykresu z poprzedniego zadania.

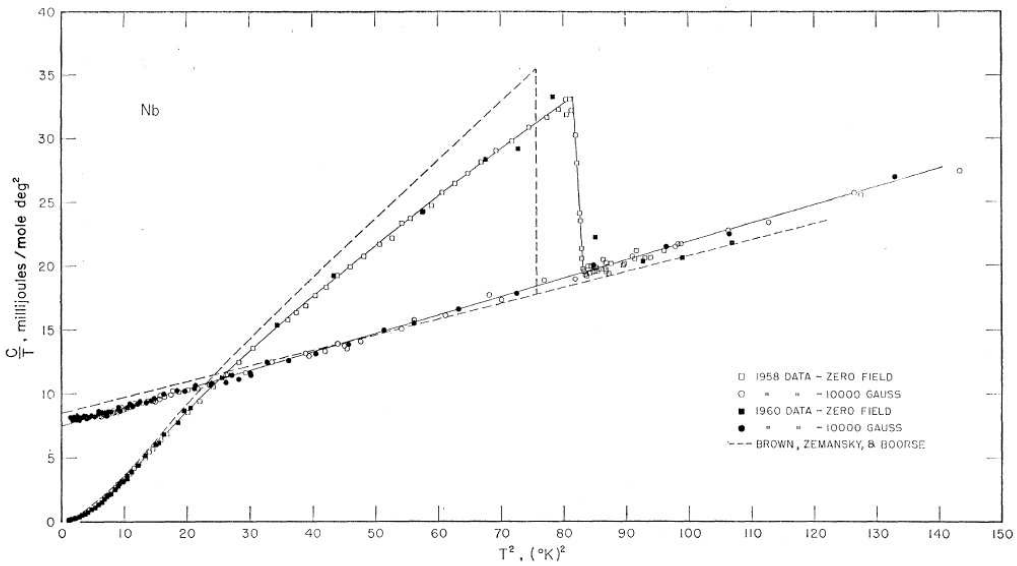


FIG. 2. C/T vs T^2 plot of the normal and superconducting specific heat of a polycrystalline sample of Nb. Full lines represent the mean of two series of measurements; blank and black squares represent data taken in zero field; blank and black circles represent data taken in a field of over 10 000 G. The dashed line represents the results of the earlier measurements of Brown, Zemansky, and Boorse on the same sample before the 2350°C heat treatment.

5. Zarówno Al, jak i Nb, są niskotemperaturowymi nadprzewodnikami, z temperaturami krytycznymi T_c równymi odpowiednio 1.2 K oraz 9.2 K. Oddziaływanie elektron-fonon, które jest przyczyną nadprzewodnictwa, odpowiada też za podbicie mierzonej wartości współczynnika ciepła elektronowego γ. Miarą siły sprzężenia elektron-fonon jest wartość tzw. stałej sprzężenia λ, renormalizującej wsp. γ, w stosunku do jego wartości wynikającej z teorii pasmowej:

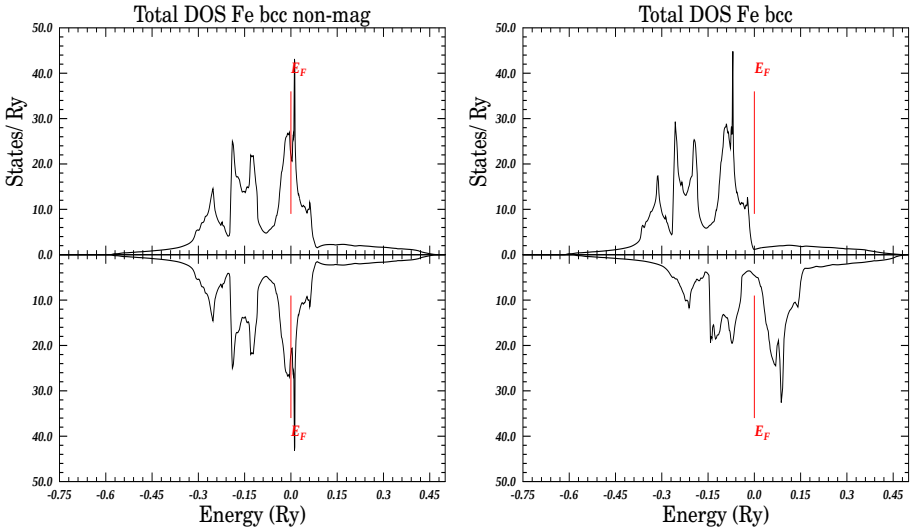
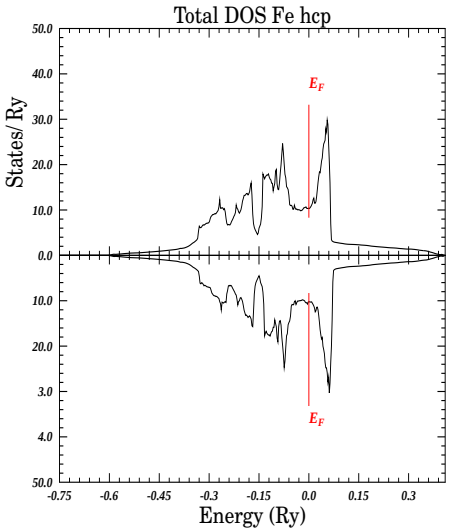
$$\gamma = \gamma_0(1 + \lambda). \tag{3}$$

Oszacować wartość λ w Al i Nb na podstawie poprzednich zadań. Wielkość λ decyduje bezpośrednio o wartości temperatury krytycznej przejścia w stan nadprzewodzący. Opisuje to przybliżona zależność analityczna, zwana wzorem McMillana:

$$T_c = \frac{\Theta}{1.45} \exp\left\{-\frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^\star(1+0.62\lambda)}\right\}. \tag{4}$$

Θ jest temp. Debye'a, a $\mu^\star$ jest tzw. pseudopotencjałem Kulombowskim, opisującym efektywne zmniejszenie siły przyciągania elektron-elektron (przyczyna nadprzewodnictwa) z powodu ich Kulombowskiego odpychania. Typowo $\mu^\star \simeq 0.10 - 0.15$, najczęściej przyjmuje się $\mu^\star = 0.13$. Wyznaczyć λ dla Al i Nb na podstawie równania 4, przyjmując $\mu^\star = 0.13$, $\Theta_{Al} = 400$ K, $\Theta_{Nb} = 275$ K. Porównać z wynikiem analizy γ.

6. Poniższe wykresy przedstawiają obliczone gęstości stanów dla żelaza w strukturze bcc w stanie niemagnetycznym (hipotetycznym), oraz ferromagnetycznym. Analizując wykresy zastanowić się, dlaczego stan ferromagnetyczny realizuje się w rzeczywistej próbce.



7. Poniższy wykres przedstawia obliczoną gęstość stanów dla żelaza w strukturze hcp, w którą żelazo przechodzi pod wysokim ciśnieniem (i prawdopodobnie w takiej strukturze występuje żelazo w jądrze Ziemi). Analizując gęstość stanów zastanowić się czy stan ferromagnetyczny będzie stanem podstawowym dla żelaza hcp.