	1	2	3	4	Σ

Полусеместровая контрольная работа по курсу «Основы современной физики», гр. 523

Критерии оценки: Каждая задача максимум три балла, суммарный балл выше 10 округляется до 10, суммарный балл пересчитывается в 5-бальную шкклу стандартным образом.

Задача 1 (обратная решётка, зонная структура)

В модельном двумерном кристалле на квадратной решетке (сторона решетки a) на элементарную ячейку приходится 2 электрона. Оценить, при какой ширине запрещенной зоны (имеется в виду запрещенная зона между первой и второй ветвями спектра) этот кристалл будет металлом, а при какой — диэлектриком. Массу электрона для оценки можно принять равной массе свободного электрона.

Задача 2 (колебания атомов в кристалле)

В модельной одномерной цепочке, содержащей атомы двух сортов, возбуждены колебания с волновым вектором $k=\frac{\pi}{2a}$, где a – период цепочки (расстояние между одинаковыми атомами). Оказалось, что амплитуды колебаний атомов разных сортов в одной из мод колебаний отличаются в $\sqrt{2}$ раз. Найти отношение масс атомов. В какой ветви спектра реализуется эта ситуация?

Задача 3 (полупроводники)

В полупроводниковый кристалл с шириной запрещенной зоны $\Delta=1\text{эВ}$ введено небольшое количество примеси донорного типа с концентрацией $N_d=10^{14}\,1/см^3$. Оказалось, что низкотемпературная проводимость этого кристалла подчиняется закону $\sigma\propto\exp\left(-\frac{\Delta}{3T}\right)$.

1. Указать расположение примесного уровня и положение уровня химического потенциала при нулевой температуре.
2. Оценить, при какой температуре уровень химического потенциала сместится на половину различия между положением уровня химического потенциала допированного и чистого полупроводника при нулевой температуре.

Для оценки считать, что статфакторы валентной зоны зоны проводимости одинаковы и равны при интересующих нас температурах $Q\simeq10^{19}\,1/см^3$ и что число вакансий в валентной зоне мало по сравнению с числом ионизованных примесей.

Задача 4 (фононная и электронная теплоёмкость)

Оценить для модельного двумерного металла температуру, при которой сравняются электронная и фононная теплоёмкость. Скорость звука для оценки принять равной 3 км/сек, массу атома равной 10 а.е.м.. Кристаллическая решётка — квадратная, межатомное расстояние 3 Å, на элементарную ячейку имеется один свободный электрон.

Решения задач

Задача 1

В модельном двумерном кристалле на квадратной решетке (сторона решетки a) на элементарную ячейку приходится 2 электрона. Оценить, при какой ширине запрещенной зоны (имеется в виду запрещенная зона между первой и второй ветвями спектра) этот кристалл будет металлом, а при какой — диэлектриком. Массу электрона для оценки можно принять равной массе свободного электрона.

Решение

Начнём с приближения свободных электронов. В этой модели свойства газа электронов — металлические. Фермиевский импульс:

$$2\times\frac{\pi k_F^2}{(2\pi)^2}=n=\frac{2}{a^2}$$
$$k_F=\frac{\sqrt{4\pi}}{a}>\frac{\pi}{a}$$
.

При учёте взаимодействия электронов с кристаллом на границе первой зоны Бриллюэна откроется запрещенная зона. Важно заметить, что фермиевский волновой вектор выходт за первую зону Бриллюэна. Если ширина зоны будет небольшой, то минимальной полной энергии всех электронов будет соответствовать частично заполненная первая ветвь спектра и частично заполненная вторая ветвь спектра — кристалл останется металлом из-за пересечения ветвей спектра. Если ширина запрещенной зоны будет настолько велика, что пересечения зон не будет, то сначала должна будет полностью заполниться первая зона — ёмкость которой как раз соответствует двум электронам на ячейку. Таким образом, такой кристалл окажется диэлектриком.

Оценкой ширины запрещенной зоны, при которой произойдёт переход между этими режимами может быть разница между минимальной и максимальной энергиями электрона на границе зоны Бриллюэна, вычисленная для свободных электронов. Положения этих экстремумов — это вектора $\left(\frac{\pi}{a},0\right)$ и $\left(\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}\right)$, соответственно.

Отсюда, $\Delta\simeq\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{\pi^2}{a^2}$.

Задача 2

В модельной одномерной цепочке, содержащей атомы двух сортов, возбуждены колебания с волновым вектором $k=\frac{\pi}{2\mathrm{a}}$, где a – период цепочки (расстояние между одинаковыми атомами). Оказалось, что амплитуды колебаний атомов разных сортов в одной из мод колебаний отличаются в $\sqrt{2}$ раз. Найти отношение масс атомов. В какой ветви спектра реализуется эта ситуация?

Решение:

Запишем уравнения динамики для атомов кристалла и подставим решения в форме бегущей волны $u_{A,B}e^{i(kx-\omega t)}$. В результате получим пару уравнений на амплитуды

$$\begin{cases} -\dfrac{m}{C}\omega^2 u_A=(1+e^{ika})u_B-2u_A \\ -\dfrac{M}{C}\omega^2 u_B=(1+e^{-ika})u_A-2u_B \end{cases}.$$

Решение в общем виде нас не интересует, можно сразу подставить волновой вектор интересующей точки в k-пространстве:

$$\begin{cases} (2-\dfrac{m}{C}\omega^2)u_A-(1+i)u_B=0 \\ -(1-i)u_A+(2-\dfrac{M}{C}\omega^2)u_B=0 \end{cases}.$$

Для отношения амплитуд из, например, первого уравнения:

$\dfrac{u_A}{u_B}=\dfrac{1+i}{2-\dfrac{m}{C}\omega^2}=\dfrac{1+i}{2-\xi}$, где для компактности обозначено $\xi=\dfrac{m}{C}\omega^2$. Отношение комплексное, что соответствует неизвестному априори сдвигу фаз колебаний атомов разного типа. Поэтому для вычислений удобнее взять квадрат модуля отношения амплитуд:

$$\left|\frac{u_A}{u_B}\right|^2=\frac{2}{(2-\xi)^2}.$$

В условиях задачи это даёт $2-\xi=\pm 1$ и $\xi=\begin{cases}3\\1\end{cases}$.

Для совместимости двух уравнений требуем вырожденности системы:

$$\begin{gathered} (2-\xi)(2-\frac{M}{m}\xi)-(1+i)(1-i)=0 \\ \frac{M}{m}\xi^2-2(1+\frac{M}{m})\xi+2=0 \\ \xi=\frac{m}{M}\left(1+\frac{M}{m}\pm\sqrt{\left(\frac{M}{m}\right)^2+1}\right)=\frac{m}{M}+1\pm\sqrt{\left(\frac{m}{M}\right)^2+1} \end{gathered}.$$

Остаётся найти при каких $\dfrac{m}{M}$ возможно получить параметр ξ равный 1 или 3.

Для $\xi=1$ решений нет: получаем условие $\dfrac{m}{M}\pm\sqrt{\left(\dfrac{m}{M}\right)^2+1}=0$.

Для $\xi=3$:

$$\begin{gathered} 2-\frac{m}{M}=\pm\sqrt{\left(\frac{m}{M}\right)^2+1} \\ 3=4\frac{m}{M} \\ \frac{m}{M}=\frac{3}{4} \end{gathered}.$$

Решение получилось единственное: амплитуда колебаний *легкого* атома в $\sqrt{2}$ раз больше. Для $\dfrac{m}{M}=\dfrac{3}{4}$ частоты колебаний в интересующей нас точке: $\xi=\begin{cases}3\\1/2\end{cases}$, то есть описанная в условии ситуация имеет место для оптической ветви.

Задача 3

В полупроводниковый кристалл с шириной запрещенной зоны $\Delta = 1\text{эВ}$ *введено небольшое количество примеси донорного типа с концентрацией* $N_d = 10^{14}\, 1/см^3$ *. Оказалось, что низкотемпературная проводимость этого кристалла подчиняется закону* $\sigma \propto \exp\left(-\frac{\Delta}{3T}\right)$.

1. *Указать расположение примесного уровня и положение уровня химического потенциала при нулевой температуре.*
2. *Оценить, при какой температуре уровень химического потенциала сместится на половину различия между положением уровня химического потенциала допированного и чистого полупроводника при нулевой температуре.*

Для оценки считать, что статфакторы валентной зоны зоны проводимости одинаковы и равны при интересующих нас температурах $Q \simeq 10^{19}\, 1/см^3$ *и что число вакансий в валентной зоне мало по сравнению с числом ионизованных примесей.*

Решение:

Температурная зависимость проводимости полупроводника определяется в первую очередь температурной зависимостью концентрации носителей. В экспоненциальную часть этой зависимости входит отличие энергии носителей и химпотенциала. Таким образом, с учётом того, что примеси донорные по условию, можно сразу сказать, что при T=0 уровень химпотенциала находится на $\Delta/3$ ниже дна зоны проводимости. Так как уровень химпотенциала при $T=0$ в полупроводнике лежит точно посередине между последним заполненным и первым свободным уровнем, то следовательно донорный уровень лежит на $2\Delta/3$ ниже дна зоны проводимости. Если отсчитывать энергии от потолка валентной зоны, то $E_v = 0$, $E_d = \Delta/3$, $\mu = 2\Delta/3$, $E_c = \Delta$.

Для ответа на второй вопрос заметим, что при нагреве в пределе должна получиться ситуация неотличимая от чистого полупроводника (когда количество носителей заряда активированных из валентной зоны начнет доминировать). В этом пределе химпотенциал сместится к положению, типичному для чистого полупроводника. При нулевой температуре химпотенциал чистого полупроводника расположен посередине запрещенной зоны на уровне $\Delta/2$. Таким образом, требуется оценить при какой температуре $\mu(T) = \mu_0 - \Delta/12$.

Записываем условие электронейтральности:

$$Q e^{-(\Delta-\mu)/T} = Q e^{-\mu/T} + N_d\left(1 - \frac{1}{e^{(E_d-\mu)/T}+1}\right) = Q e^{-\mu/T} + \frac{N_d}{e^{(\mu-E_d)/T}+1} .$$

По условию предлагается не учитывать концентрацию вакансий в правой части, также очевидно что можно пренебречь единицей в знаменателе. Тогда логарифмируя оставшиеся слагаемые:

$$\begin{gathered} \ln Q - \frac{\Delta-\mu}{T} \simeq \ln N_d - \frac{\mu - E_d}{T} \\ \mu = \frac{\Delta + E_d}{2} - \frac{T}{2} \ln \frac{Q}{N_d} \end{gathered} .$$

Для требуемой оценки

$$\frac{T}{2}\ln\frac{Q}{N_d}=\frac{\Delta}{12}$$

$$T\simeq\frac{\Delta}{6\ln\dfrac{Q}{N_d}}\simeq\frac{\Delta}{6}\ln 10^5\approx\frac{\Delta}{70}\approx 140\,K \quad .$$

Проверим применимость приближения $Q e^{-\mu/T}\ll N_d e^{-(\mu-E_d)/T}$, проверку надо делать для $\mu=7\Delta/12$ и $T=\Delta/70$:

$$10^{19}e^{-41}\ll 10^{14}e^{-18}$$
$$0.15\ll 1.5\times 10^6$$
, выполнено с большим запасом.

Задача 4

Оценить для модельного двумерного металла температуру, при которой сравняются электронная и фононная теплоёмкость. Скорость звука для оценки принять равной 3 км/сек, массу атома равной 10 а.е.м.. Кристаллическая решётка — квадратная, межатомное расстояние 3 Å, на элементарную ячейку имеется один свободный электрон.

Решение

В условии не указано в каком пределе надо вычислять решёточную теплоёмкость. Для электронной теплоёмкости есть общий ответ $C=\frac{\pi^2}{3}D(E_F)T$. Плотность состояний (на единицу объёма) в двумерном случае $D=\frac{dN}{dE}=\frac{dN}{dk}\frac{1}{dE/dk}=2\times\frac{2\pi k\,dk}{(2\pi)^2 dk}\frac{m}{\hbar^2 k}=\frac{m}{\pi\hbar^2}$ и не зависит от импульса. Откуда $C=\frac{\pi}{3}\frac{m}{\hbar^2}T\approx\frac{m}{\hbar^2}T$.

Предположим, что имеет место низкотемпературное приближение. Тогда для решеточной теплоёмкости в двумерном случае (учитываем две поляризации, также считаем на единицу объёма):

$$E=2\times\int_0^\infty\frac{\hbar s k}{e^{\hbar s k/T}-1}\frac{2\pi k\,dk}{(2\pi)^2}=\frac{1}{\pi}\frac{T^3}{(\hbar s)^2}\int_0^\infty\frac{x^2dx}{e^x-1}\approx\frac{2.40}{\pi}\frac{T^3}{(\hbar s)^2} \quad .$$
$$C\approx 2.3\frac{T^2}{(\hbar s)^2}$$

Приравнивая, получаем:

$$T^*\approx 0.5ms^2=0.5mc^2\left(\frac{s}{c}\right)^2=0.5\times 0.5\cdot 10^6\times 10^{-10}\,\text{эВ}=0.25\cdot 10^{-4}\,\text{эВ}\approx 0.3\,K \quad .$$

Температура заведомо много меньше дебаевской, так что низкотемпературное приближение применимо.