Φυσική Στερεάς Κατάστασης (ΕΤΥ 305): Τελική Εξέταση, 14/1/2015.

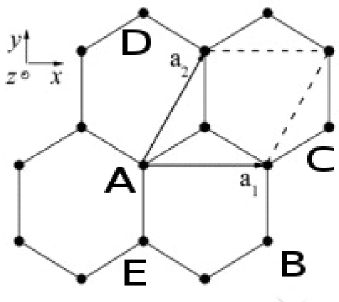
(Θέμα 1=3.0 μονάδες, θέματα 2-4=2.5 μονάδες, τυπολόγιο=0.5 μονάδα,σύνολο=11 μονάδες).

Θέμα 1: Το **διδιάστατο** υλικό γραφένιο οποίο αποτελείται από άτομα C στο πλέγμα που φαίνεται στο παρακάτω σχήμα. Το πλέγμα αποτελείται από εξάγωνα τα οποία έχουν όλες τις πλευρές ίσες με d. Επίσης, η απόσταση από το κέντρο του εξαγώνου προς μια οποιαδήποτε κορυφή είναι ίση με d. Θεωρήστε ότι το άτομο A είναι στην αρχή των αξόνων, δηλαδή έχει $\mathbf{R} = 0$.

(α) Βρείτε τα δυο διανύσματα του πλέγματος Bravais, $\mathbf{a}_1$ και $\mathbf{a}_2$, καθώς και τα διανύσματα βάσης, $\mathbf{r}_1$ και $\mathbf{r}_2$.

(β) Σε ένα διδιάστατο κρύσταλλο, η θέση κάθε ατόμου χαρακτηρίζεται από τρεις ακέραιους, n_1, n_2 και j ώστε $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + \mathbf{r}_j$. Συμπληρώστε τον παρακάτω πίνακα για τα άτομα του σχήματος.

(γ) Υπολογίστε την συγκέντρωση ατόμων, n_i, και την παράμετρο r_i για $d = 1.42$ Å. Σε δυο διαστάσεις με N_i άτομα σε εμβαδόν A είναι $n_i \equiv \frac{N_i}{A} = \frac{1}{\pi r_i^2}$.



Άτομο	n_1	n_2	j
A	0	0	1
B			
C			
D			
E			

Θέμα 2: Σε ένα μονοδιάστατο νανοκαλώδιο Cu η απόσταση γειτονικών ατόμων είναι ίδια με αυτήν στην τριδιάστατη δομή του Cu και η μέγιστη συχνότητα ταλάντωσης είναι 7 THz. (α) υπολογίστε την παράμετρο κ του μοντέλου ελατηρίων Hooke. (β) Υπολογίστε την ταχύτητα του ήχου στο νανοκαλώδιο.

Θέμα 3: Σε θερμοκρασία 0 K τα ηλεκτρόνια του Cu έχουν ενέργειες από 0 έως E_F.

(α) Υπολογίστε την E_F.

(β) Βρείτε την μέση τιμή, $\langle E \rangle$ και αβεβαιότητα, ΔE, των ενεργειών των ηλεκτρονίων του Cu. Δίνονται: $\Delta E = \sqrt{< E^2 > - < E >^2}$, $\qquad \langle E^n \rangle = \dfrac{\int_{-\infty}^{E_F} E^n \rho(E) d\epsilon}{\int_{-\infty}^{E_F} \rho(E) d\epsilon}$.

(γ) Βρείτε το ποσοστό των ηλεκτρονίων του Cu τα οποία έχουν ενέργειες από $0.9E_F$ έως E_F.

Θέμα 4: Υπολογίστε την ειδική θερμότητα (θερμοχωρητικότητα ανά μονάδα μάζας) του Cu σε J/(kg K) (α) για $T = 5$ K (β) για $T = 500$ K. Δίνεται $C_{V_{\eta\lambda}} = \frac{\pi^2 N k_B T}{2T_F}$.

Σταθερές και Ατομικές μονάδες :

$R = 8.3145$ J mol^{-1} K^{-1},	$m = 9.1 \times 10^{-31}$ kgr,	$e = 1.6 \times 10^{-19}$ C,
$\hbar = 1.05 \times 10^{-34}$ J s,	$c = 3.00 \times 10^8$ m/s,	$N_A = 6.022 \times 10^{23}$ mol^{-1},
$\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}$ F/m,	$k_B = 1.381 \times 10^{-23}$J K^{-1},	$m_p = 1836.2m$,
$\alpha_B = \dfrac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$ =0.529 Å,	$E_0 = \dfrac{\hbar^2}{ma_B^2} = 27.211$ eV,	$T_0 = \dfrac{E_0}{k_B} = 315773$ K,
	Ιδιότητες του μετάλλου Ag:	
$\zeta = 2$	$A = 64$ g/mol	δομή fcc με $a = 3.61$ Å
$\rho_M = 9.0$ g/cm^3,	$v_F = 1.6 \times 10^6$ m/s	$\Theta_D = 344K$.

Απαντήσεις

Θ1

(α) $\mathbf{a}_1 = (d\sqrt{3}, 0, 0), \mathbf{a}_2 = (d\sqrt{3}/2, 3d/2, 0), \mathbf{r}_1 = (0, 0, 0), \mathbf{r}_2 = (d\sqrt{3}/2, d/2, 0)$.

(β) $\mathbf{R}_A = 0, \mathbf{R}_B = (d\sqrt{3}, -d, 0), \mathbf{R}_C = (3\sqrt{3}d/2, d/2, 0), \mathbf{R}_D = (0, 2d, 0), \mathbf{R}_E = (0, -d, 0)$,

$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + \mathbf{r}_j = (d\sqrt{3}/2(2n_1 + n_2 + (j-1), d/2(3n_2 + (j-1), 0)$.

$R = R_B \Rightarrow 2n_1 + n_2 + (j-1) = 2, 3n_2 + (j-1) = -2 \Rightarrow n_1 = 1, n_2 = -1, j = 2$. Ομοίως:

Άτομο	n_1	n_2	j
A	0	0	1
B	1	-1	2
C	1	0	2
D	-1	1	2
E	0	-1	2

(γ) Στη θεμελιώδη κυψελίδα $N_i = 2$ και $A = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2| = \frac{3\sqrt{3}d^2}{4} = 5.24$ Å^2, οπότε $n_i = 1.9 \times 10^-19$ m^{-2}, $r_i = 1.3$ Å.

Θ2

$\omega_{max} = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m_i}} \Rightarrow \kappa = \frac{m_i\omega_{max}^2}{4} = \frac{A\omega_{max}^2}{4N_A} = 1.3N/m.$

$c = \sqrt{\frac{\kappa d^2}{m_i}} = \sqrt{\frac{\kappa d^2 N_A}{A}}$ και $d = a\sqrt{2}/2 = 2.55$ Å, $\Rightarrow c = 892$ m/s.

Θ3

(α) $E_F = \frac{1}{2}mv_F^2 = 1.16 \times 10^{-18}$ J.

(β) $\rho(E) = a\sqrt{E}$ για $E > 0$ και 0 για $E < 0, \Rightarrow \langle E \rangle = \frac{\int_0^{E_F} Ea\sqrt{E}d\epsilon}{\int_0^{E_F} a\sqrt{E}d\epsilon} = \frac{\frac{2}{5}E_F^{5/2}}{\frac{2}{3}E_F^{3/2}} = \frac{3}{5}E_F = 0.6E_F$.

$\langle E^2 \rangle = \frac{\int_0^{E_F} E^2a\sqrt{E}d\epsilon}{\int_0^{E_F} a\sqrt{E}d\epsilon} = \frac{\frac{2}{7}E_F^{7/2}}{\frac{2}{3}E_F^{3/2}} = \frac{3}{7}E_F^2$

$\Delta E = \sqrt{\frac{3}{7}E_F^2 - E_F^2 - \frac{9}{25}E_F^2} \approx 0.26E_F$.

για τον Cu $\langle E \rangle = 0.7 \times 10^{-18}$ J, $\Delta E = 0.3 \times 10^{-18}$ J

(γ) $x = \frac{\int_{0.9E_F}^{E_F} \rho(E)d\epsilon}{\int_0^{E_F} \rho(E)d\epsilon} = \frac{\int_{0.9E_F}^{E_F} a\sqrt{E}d\epsilon}{\int_0^{E_F} a\sqrt{E}d\epsilon} = \frac{\frac{2}{3}(E_F^{3/2} - (0.9E_F)^{3/2})}{\frac{2}{3}E_F^{3/2}} = 1 - 0.9^{3/2} \approx 0.15 = 15\%$.

Θ4

(α) $\Theta_D = 344K, T_F = frac12mv_F^2/k_B = 116000K$.

$c = \frac{C_{V_{\eta\lambda}} + C_{V_\phi}}{M} = \frac{C_{V_{\eta\lambda}} + C_{V_\phi}}{N_iA/N_A} = \frac{N_A}{N_iA}(\frac{\pi^2 Nk_BT}{2T_F} + \frac{12\pi^4T^3N_ik_B}{5\Theta_D^3})$ αντικαθιστώ $k_BN_A = R$ οπότε

$c = (\frac{\pi^2\zeta T}{2T_F} + \frac{12\pi^4T^3}{5\Theta_D^3})\frac{R}{A} = 0.15$ J/(kg K).

(β) $c = \frac{C_{V_\phi}}{M} = \frac{3N_ik_B}{N_iA/N_A} = 3R/A = 390$ J/(kg K).