

## Φυσική Στερεάς Κατάστασης (ETY 305): Ειδική Εξέταση, 9/6/2017.

### Θέμα 1. (3 μον.)

Μονοδιάστατο νανοκαλώδιο μήκους  $L$  αποτελείται από 20 άτομα Na σε ευθεία γραμμή. Υπολογίστε την ολική κινητική ενέργεια,  $E$ , των ηλεκτρονίων του συστήματος

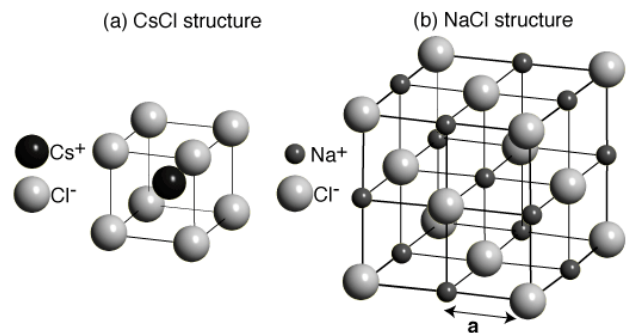
- (α) στην προσέγγιση ελεύθερων ηλεκτρονίων (Jellium) και  
(β) στην προσέγγιση γραμμικού συνδυασμού ατομικών τροχιακών (LCAO).

Η απόσταση γειτονικών ατόμων στο νανοκαλώδιο είναι ίση με την απόσταση γειτονικών ατόμων στο τριδιάστατο στερεό. Κάθε άτομο έχει  $\zeta = 1$  ηλεκτρόνιο σθένους σε τροχιακό  $s$ . Το μέταλλο Na σχηματίζει δομή bcc με  $a=4.2 \text{ \AA}$ . Η ενεργός μάζα των ηλεκτρονίων είναι  $m_* = 1.2m$ . Σε θερμοκρασία  $T = 0 \text{ K}$ , τα ηλεκτρόνια στο νανοκαλώδιο έχουν ενέργειες από 0 έως 0.52 eV.

### Θέμα 2. (3 μον.)

Το κράμα FeCo σχηματίζει τις δομές που φαίνονται στο διπλανό σχήμα. Και στις δυο δομές η απόσταση γειτονικών ατόμων Fe και Co είναι  $d = 2.5 \text{ \AA}$ . Και τα δυο άτομα συνεισφέρουν  $\zeta = 2$  ελεύθερα ηλεκτρόνια. Υπολογίστε την θερμοκρασία Φέρμι του FeCo

- (α) στην δομή CsCl (β) στην δομή NaCl.



### Θέμα 3. (2 μον.)

Γιατί δεν υπάρχει υλικό στο οποίο οι θερμοκρασίες Φέρμι και Ντιμπάι να είναι ίσες;

### Θέμα 4. (4 μον.)

Το W σχηματίζει δομή bcc και έχει πυκνότητα  $19.3 \text{ g/cm}^3$  και ατομικό βάρος  $183.8 \text{ g/mol}$ , 3 ηλεκτρόνια σθένους ανά άτομο και ταχύτητες ήχου  $5200 \text{ m/s}$  και  $2900 \text{ m/s}$  για διαμήκη και εγκάρσια κύματα, αντίστοιχα. Υπολογίστε για το W:

- (α) Τον όγκο 1 mol. (β) Την ταχύτητα Φέρμι,  $v_F$ .  
(γ) Τον κυματάριθμο Ντιμπάι,  $q_D$ . (δ) Την συχνότητα Ντιμπάι,  $\omega_D$ .

$$m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

$$\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ F/m}$$

$$\alpha_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \text{ \AA}$$

$$\omega_0 = \frac{u_0}{\alpha_B} = 4.13 \times 10^{16} \text{ Hz}$$

$$m_p = 1840m$$

$$c = 3.00 \times 10^8 \text{ m/s,}$$

$$k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{ma_B^2} = 27.2 \text{ eV}$$

$$F_0 = \frac{E_0}{a_B} = 8.2 \times 10^{-8} \text{ N,}$$

$$e = 1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$k_B^{-1} = 11600 \text{ K/eV}$$

$$u_0 = \sqrt{\frac{E_0}{m}} = 2190 \text{ km/s}$$

$$T_0 = \frac{E_0}{k_B} = 316000 \text{ K}$$

ΛΥΣΕΙΣ

Θ1  $L = 20d = 20a\sqrt{3}/2 = 72.7 \text{ \AA}$ .  $k_F = \frac{\pi}{2d} = \frac{10\pi}{L}$ .

$$E = \sum_{|k| \leq k_F} 2E(k) = \frac{L}{2\pi} \int_{-k_F}^{k_F} 2E(k)dk = \frac{L}{\pi} \int_{-\frac{10\pi}{L}}^{\frac{10\pi}{L}} E(k)dk.$$

(α)  $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \Rightarrow E = \frac{1000\pi^2 \hbar^2}{3m^* L^2} \approx 4.3 \text{ eV}$ .

LCAO:  $E(k) = \epsilon + 2V_2 \cos kd$  με  $E_{min} = 0$  και  $E_F = 3.2 \text{ eV}$  και τροχιακά  $s \Rightarrow \epsilon = 0.52 \text{ eV}$  και

$$V_2 = -0.25 \text{ eV}. \text{ Άρα } E = \frac{L}{\pi} \int_{-\frac{10\pi}{L}}^{\frac{10\pi}{L}} E(k)dk = \frac{L}{\pi} \int_{-\frac{10\pi}{L}}^{\frac{10\pi}{L}} [\epsilon + 2V_2 \cos(kL/20)]dk \approx 3.7 \text{ eV}.$$

Θ2  $T_F = E_F/k_B = \dots \approx 582000(\frac{a_B}{r_s})^2$

(α)  $\frac{4}{3}\pi r_s^3 = (2d/\sqrt{3})^3/4 \Rightarrow a_B/r_s = 0.47 \Rightarrow T_F = 129000K$ .

(β)  $\frac{4}{3}\pi r_s^3 = d^3/2 \Rightarrow a_B/r_s = 0.43 \Rightarrow T_F = 108000K$ .

Θ3  $\frac{T_F}{\Theta_D} = \frac{E_F}{\epsilon_D} = \frac{\frac{1}{2}mv_F^2}{\hbar c q_D} \sim \frac{v_F}{c}$  γιατί  $mv_F = \hbar k_F \approx \hbar q_D$ . Από διαστατική ανάλυση φαίνεται ότι οι  $v_F, c$  διαφέρουν κατά 2-3 τάξεις μεγέθους (βλ. και εξίσωση 4.14 Οικονόμου).

Θ4

(α)  $V_m = 183.8/19.3 \text{ cm}^3 = 9.5 \text{ cm}^3$ .

$\frac{V_m}{4N_A} = \frac{4}{3}\pi r_s^3 \Rightarrow r_s/a_B = 1.85$

$c = 3200 \text{ m/s}$ .

(β)  $v_F = 4200/1.85 = 2270 \text{ km/s}$ .

(γ)  $q_D = 1.7 \text{ \AA}^{-1}$ .

(δ)  $\omega_D = 54 \text{ THz}$ .