**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΡΗΤΗΣ**
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΤΜΗΜΑ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

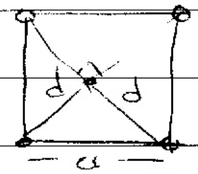
Α.Μ. Εξάμηνο Περίοδος

Εξεταζόμενο Μάθημα ΦΥΣΙΚΗ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ

Ημερομηνία 1/2/07

Ονοματεπώνυμο

## ΘΕΜΑ 1




(α) Δεδομένα: fcc με $a = 4.08$ Å. $d = a/\sqrt{2}$ (βλ. σχήμα)

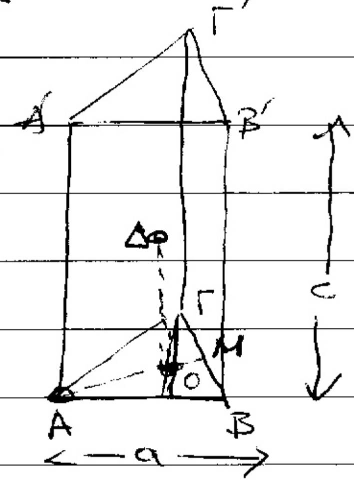
$\Rightarrow \boxed{d = 2.88 \text{ Å}}$

$$V = \frac{\text{όγκος}}{\text{ηλεκτρόνια}} = \frac{\text{όγκος}}{\zeta\text{-ιόντα}} = \frac{a^3}{\zeta\left(8\cdot\frac{1}{8}+6\cdot\frac{1}{2}\right)} = \frac{a^3}{4\zeta} \Rightarrow \boxed{V = 17.0 \text{ Å}^3}$$

$$V = \frac{4}{3}\pi r_s^3 \Rightarrow r_s = \left(\frac{3}{4\pi}V\right)^{1/3} \Rightarrow \boxed{r_s = 2.59 \text{ Å}}$$

$$V_{BZ} = \frac{(2\pi)^3}{V_i} = \frac{(2\pi)^3}{\zeta V} \Rightarrow \boxed{V_{BZ} = 14.6 \text{ Å}^{-3}}$$

(β) Η θεμελιώδης κυψελίδα του hcp είναι →




έχω άτομα στα Α, Β, Γ, Α', Β', Γ' και Δ
το Δ είναι σε ύψος c/2 πάνω από το Ο
το Ο είναι το κέντρο του ισόπλευρου τριγώνου ΑΒΓ. Αφού όλες οι αποστάσεις είναι d, θα είναι $(AB) = (B\Gamma) = (A\Gamma) = d = (A\Delta) = (B\Delta) = (\Delta\Gamma)$ κτλ.

$$\left.\begin{aligned}(A\Delta)^2 &= (O\Delta)^2 + (AO)^2 = \left(\frac{c}{2}\right)^2 + \left[\frac{2}{3}(AM)^2\right]^2 = d^2 \\ (AM)^2 &= (AB)^2 - (MB)^2 = d^2 - \left(\frac{d}{2}\right)^2 = \frac{3}{4}d^2\end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\frac{c^2}{4} + \frac{4}{9}\,\frac{3}{4}d^2 = d^2 \Rightarrow \frac{c^2}{4} + \frac{1}{3}d^2 = d^2 \Rightarrow \frac{c^2}{4} = \frac{2}{3}d^2$$

$$\Rightarrow c = \sqrt{\frac{8}{3}}\,d$$

Γνωρίζοντας το c, μπορώ να βρώ τον όγκο και τα υπόλοιπα

$$V = \frac{\text{όγκος}}{\text{ηλεκτρόνια}} = \frac{\text{όγκος}}{\text{ζ · ιόντα}} = \frac{(\text{εμβ. βάσης})\,(\text{ύψος})}{\text{ζ · ιόντα}}$$

$$V = \frac{(B\Gamma)\cdot(AM)\cdot(AA')}{5\cdot\left(6\cdot\frac{1}{6}+1\right)} = \frac{d\cdot\frac{\sqrt{3}}{2}d\;c}{2\,5} = \frac{\sqrt{3}}{4}\,\frac{d^2 c}{5}$$

$$\Rightarrow V = \frac{\sqrt{3}}{4}\,\frac{d^2}{5}\sqrt{\frac{8}{3}}\,d = \frac{\sqrt{2}\,d^3}{25} = V_{fcc}$$

Αυτό θα μπορούσα να το είχα μαντέψει αφού ξέρω ότι τα fcc και hcp έχουν ίδιους συντελεστές πλήρωσης άρα πάλι $V = 17.0\,Å^3$, $r_s = 2.53\,Å$, $V_{BZ} = 14.6\,Å^{-3}$

## ΘΕΜΑ 2

(α) Σε τόσο χαμηλές θερμοκρασίες, ξέρω από θεωρία ότι

$$c = C_{V_{el}} + C_{V_{ph}} = \frac{\pi^2}{2}\frac{zR}{T_F}T + \frac{12\pi^4 R}{5\Theta_D^3}T^3$$

(για 1 mol $N_i = N_A$ και $N_A k_B = R$) Θα είναι και $z=1$

δηλ. $\frac{c}{T} = \alpha + \beta T^2$ όπου $\alpha = \frac{\pi^2 z R}{2T_F}$ και $\beta = \frac{12\pi^4 R}{5\Theta_D^3}$

Από το σχήμα βλέπω ότι $\alpha = 0.7\ \frac{mJ}{mol\,K^2}$ (τομή με τον άξονα)

και $\beta = \frac{2.0-1.0}{16-4}\ \frac{mJ/mol\,K^2}{K^2} = 0.08\ \frac{mJ}{mol\,K^4}$

$$\alpha = \frac{\pi^2 z R}{2T_F} \Rightarrow T_F = 59000\,K \qquad E_F = k_B T_F \Rightarrow \boxed{E_F = 5.0\,eV}$$

$$\beta = \frac{12\pi^4 R}{5\Theta_D^3} \Rightarrow \boxed{\Theta_D = 290\,K}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}k_F^2 \text{ και } k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \Rightarrow E_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{2/3} \Rightarrow$$

$$n = \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{1}{3\pi^2} \Rightarrow \boxed{n = 5.1\cdot 10^{28}\ m^{-3}}$$

Αφού $\zeta = 1$ και $n_i = \frac{1}{\zeta} n \Rightarrow \boxed{n_i = n = 5.1 \cdot 10^{28}\ m^{-3}}$

$$\Theta_D = \frac{E_D}{k_B} = \frac{\hbar c\, q_D}{k_B} = \frac{\hbar c}{k_B}\left(6\pi^2 n_i\right)^{1/3} \Rightarrow$$

$$c = \frac{k_B \Theta_D}{\hbar\left(6\pi^2 n_i\right)^{1/3}} \Rightarrow \boxed{c = 2600\ m/sec}$$

το "κατώφλι διαφάνειας" είναι η συχνότητα πλάσματος

$$\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{m\varepsilon_0}} \Rightarrow \boxed{\omega_p = 1,3 \cdot 10^{16}\ Hz}$$

(β) Βρήκαμε για το $Cu_3Au$ ότι $T_F = 59000\,K$ ενώ για τον $Au$ $T_F = 64200\,K$. Αφού $T_F = \frac{E_F}{k_B} = \frac{\hbar^2}{2mk_B}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3}$ μεγαλύτερο $T_F$ σημαίνει μεγαλύτερη συγκέντρωση ηλεκτρονίων ($n$). Αλλά η αντίσταση είναι αντιστρόφως ανάλογη του $n$ ($\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{m}{ne^2\tau}$, τύπος Drude

ή $\rho_{\eta\theta} = \frac{8\pi^2}{\hbar\omega_p^2}\lambda_t k_B T$, τύπος Bloch, όπου $\omega_p^2 = \frac{ne^2}{m\varepsilon_0}$)

Άρα περιμένω το $Cu_3Au$ να έχει <u>μεγαλύτερη</u> αντίσταση

$$\left.\begin{aligned} &\rho_\eta \sim \frac{1}{n} \Rightarrow \frac{\rho_\eta^{Cu_3Au}}{\rho_\eta^{Au}} = \frac{n^{Au}}{n^{Cu_3Au}} \\ &\text{Βρήκα πριν ότι } n = \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{1}{3\pi^2} \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\text{άρα } \frac{\rho_\eta^{Cu_3Au}}{\rho_\eta^{Au}} = \left(\frac{T_F^{Au}}{T_F^{Cu_3Au}}\right)^{3/2} \Rightarrow$$

$$\rho^{Cu_3Au} = \rho_\eta^{Au}\left(\frac{T_F^{Au}}{T_F^{Cu_3Au}}\right)^{3/2} = 2,20\,\mu\Omega cm\left(\frac{64200}{59000}\right)^{3/2}$$

$$\Rightarrow \boxed{\rho^{Cu_3Au} = 2,5\,\mu\Omega cm}$$

## ΘΕΜΑ 3

(α) είναι $U_e = \frac{a}{r_s'^2} - \frac{\gamma}{r_s'}$ όπου $r_s = \frac{2a}{\gamma}$, $B = \frac{1}{6\pi}\frac{a}{r_s^5}$

$\Rightarrow a = 6\pi r_s^5 B$ και $\gamma = \frac{2a}{r_s} = 12\pi r_s^4 B$

αντικαθιστώ στην $U_e = \frac{a}{r_s'^2} - \frac{\gamma}{r_s'} = \frac{6\pi r_s^5 B}{r_s'^2} - \frac{12\pi r_s^4 B}{r_s'}$

$$= 6\pi r_s^3 B\left[\left(\frac{r_s}{r_s'}\right)^2 - \frac{2r_s}{r_s'}\right].$$

(β)

$$\left.\begin{aligned} P &= -\frac{dU_e}{dV} = -\frac{1}{\frac{dV}{dr_s'}}\frac{dU_e}{dr_s'} \\ V &= \frac{4}{3}\pi r_s'^3 \Rightarrow \frac{dV}{dr_s'} = 4\pi r_s'^2 \\ \frac{dU_e}{dr_s'} &= 6\pi r_s^3 B\left[-\frac{2r_s^2}{r_s'^3} + \frac{2r_s}{r_s'^2}\right] \end{aligned}\right\} \Rightarrow P = 3B\left[\left(\frac{r_s}{r_s'}\right)^5 - \left(\frac{r_s}{r_s'}\right)^4\right]$$

$$\rho' = (1+x)\rho \Rightarrow \frac{M}{V_i'} = (1+x)\frac{M}{V_i} \Rightarrow \frac{M}{\frac{4}{3}\pi r_s'^3} = \frac{M}{\frac{4}{3}\pi r_s^3}(1+x)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{r_s'^3} = \frac{1+x}{r_s^3} \Rightarrow \frac{r_s}{r_s'} = (1+x)^{1/3}$$

άρα $P = 3B\left[(1+x)^{5/3} - (1+x)^{4/3}\right]$ $\quad 1+x = 1+0{,}1\% = 1{,}001$

$\Rightarrow P = 3\cdot 1{,}732\cdot 10^6\ \text{bar}\left[1{,}001^{5/3} - 1{,}001^{4/3}\right]$

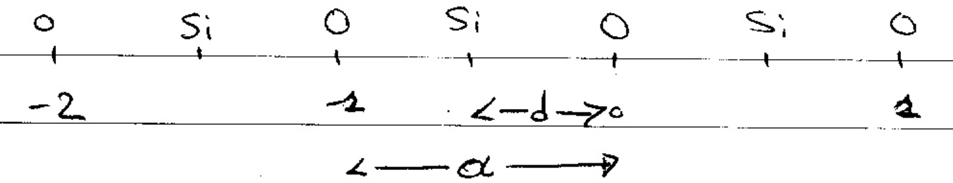
$\Rightarrow \boxed{P = 1734\ \text{bar}}$

$PV = nRT \Rightarrow V = \frac{nRT}{P} = \frac{1\,\text{mol}\ 8{,}3145\cdot 300\,\text{K}\ \text{J/mol K}}{1734\cdot 10^5\ \text{J/m}^3}$

$\Rightarrow V = 1{,}4\cdot 10^{-5}\ \text{m}^3$ ή $\boxed{V = 14\ \text{cm}^3}$

ΘΕΜΑ 4

(α)




LCAO:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\nu} e^{ik\nu a}\left(\alpha\, \phi_O(x-\nu a) + \beta\, \phi_{Si}(x-\nu a - d)\right)$$

$$a = 2d \Rightarrow \quad \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\nu} e^{2ik\nu d}\left(\alpha\, \phi_O(x-2\nu d) + \beta\, \phi_{Si}(x-(2\nu+1)d)\right)$$

$$H\psi(x) = E\psi(x) \Rightarrow \cancel{\frac{1}{\sqrt{N_c}}} \sum_{\nu} e^{2ik\nu d}\left(\alpha\, H\phi_O(x-2\nu d) + \beta H\phi_{Si}(x-(2\nu+1)d)\right)$$

$$= \cancel{\frac{1}{\sqrt{N_c}}}\, E \sum_{\nu} e^{2ik\nu d}\left(\alpha\, \phi_O(x-2\nu d) + \beta\, \phi_{Si}(x-(2\nu+1)d)\right) \qquad (1)$$

πολ/ζω με $\phi_O^*(x)$ και ολοκληρώνω

$$\sum_{\nu} e^{2ik\nu d}\left\{\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_O^*(x) H \phi_O(x-2\nu d)\,dx + \beta \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_O^*(x) H \phi_{Si}(x-(2\nu+1)d)\,dx\right\}$$

$$= E \sum_{\nu} e^{2ik\nu d}\left\{\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_O^*(x) \phi_O(x-2\nu d)\,dx + \beta \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_O^*(x) \phi_{Si}(x-(2\nu+1)d)\,dx\right\}$$

είναι $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_O^*(x) H \phi_O(x-2\nu d)\,dx = \begin{cases} \varepsilon_O, & \nu=0 \\ 0, & \text{αλλιώς} \end{cases}$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_O^*(x) H \phi_{Si}(x-(2\nu+1)d)\,dx = \begin{cases} V_2, & \nu=0 \text{ ή } \nu=-1 \\ 0, & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_O^*(x) \phi_O(x-2\nu d)\,dx = \begin{cases} 1, & \nu=0 \\ 0, & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_O^*(x) \phi_{Si}(x-(2\nu+1)d)\,dx = 0$$

ἀρα $\quad a\,\varepsilon_0 + \beta V_2 e^{-2ikd} + \beta V_2 = E a \qquad (2)$

Πολ/ζω την (1) με $\phi^*_{s_i}(x-d)$ και ολοκληρώνω:

$$\sum_\nu e^{2ik\nu d}\left\{a\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*_{s_i}(x-d)H\phi_0(x-2\nu d)\,dx + \beta\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*_{s_i}(x-d)H\phi_{s_i}(x-(2\nu+1)d)\,dx\right\} =$$

$$= E\sum_\nu e^{2ik\nu d}\left\{a\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*_{s_i}(x-d)\phi_0(x-2\nu d)\,dx + \beta\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*_{s_i}(x-d)\phi_{s_i}(x-(2\nu+1)d)\,dx\right\}$$

είναι $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*_{s_i}(x-d)H\phi_{s_i}(x-(2\nu+1)d)\,dx = \begin{cases}\varepsilon_{s_i}, & \nu=0\\ 0, & \text{αλλιώς}\end{cases}$

$\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*_{s_i}(x-d)\phi_{s_i}(x-(2\nu+1)d)\,dx = \begin{cases}1 & \nu=0\\ 0 & \text{αλλιώς}\end{cases}$

ἀρα $\quad aV_2 + a e^{2ikd}V_2 + \beta\varepsilon_{s_i} = E\beta \qquad (3)$

$(2) \Rightarrow \quad (E-\varepsilon_0)a - (1+e^{-2ikd})V_2\beta = 0$

$(3) \Rightarrow \quad -(1+e^{2ikd})V_2 a + (E-\varepsilon_{s_i})\beta = 0$

Για να έχω λύση πρέπει η ορίζουσα να είναι 0 δηλ.

$$(E-\varepsilon_0)(E-\varepsilon_{s_i}) - V_2^2|1+e^{2ikd}|^2 = 0$$

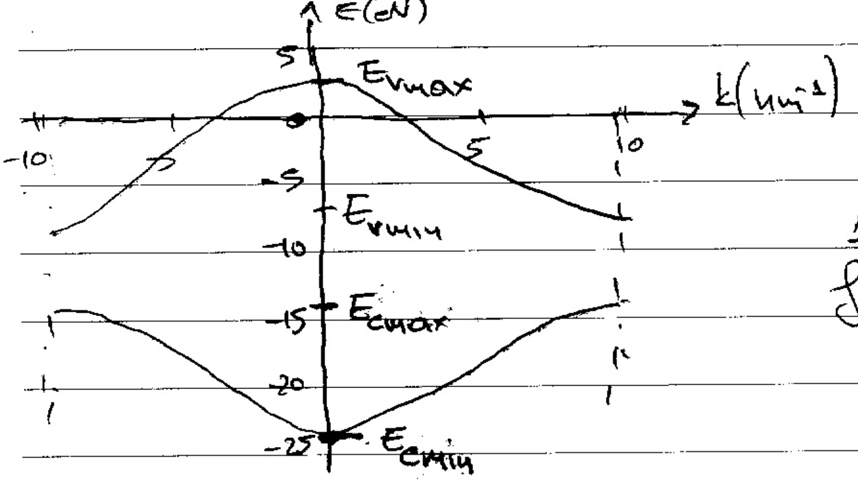
$$(E-\varepsilon_0)(E-\varepsilon_{s_i}) - V_2^2|e^{ikd}(e^{-ikd}+e^{ikd})|^2 = 0$$

$$(E-\varepsilon_0)(E-\varepsilon_{s_i}) - 4V_2^2\cos^2 kd = 0$$

$$\Rightarrow E^2 - (\varepsilon_0+\varepsilon_{s_i})E - 4V_2^2\cos^2 kd = 0$$

$$\boxed{E = \frac{\varepsilon_0+\varepsilon_{s_i}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_0+\varepsilon_{s_i}}{2}\right)^2 + 4V_2^2\cos^2 kd}}$$

είναι $V_2 = V_{pp\sigma} = 2.22 \frac{\hbar^2}{md^2} \Rightarrow V_2 = 6.6\,eV$




Ζώνη Brillouin: $|k| \le \frac{\pi}{d} = 9.81\ nm^{-1}$

1e ανά άτομο άρα η κάτω ζώνη κατειλημμένη και η άνω κεν

Όρια ζωνών: $E_{cmin} = E_-|_{k=0} = -24.4\,eV$

$E_{cmax} = E_-|_{kd=\pi} = \varepsilon_{Si} = -13.6\,eV$

$E_{vmin} = E_+|_{kd=\pi} = \varepsilon_0 = -8.2\,eV$

$E_{vmax} = E_+|_{k=0} = 2.57\,eV$

έχει χάσμα $E_g = -8.2\,eV - (-13.6\,eV) = 5.4\,eV$
άρα είναι μονωτής. Το χάσμα είναι μεγαλύτερο από τις ενέργειες των φωτονίων του ορατού φωτός (2-3 eV) άρα το υλικό θα είναι διαφανές.

(β) Ο Ag ξέρω ότι είναι μέταλλο, άρα θα έχει πολλές στάθμες στην ενέργεια Fermi ($E=0$ στο σχήμα) άρα είναι το αριστερό. Αντίθετα το διαμάντι (δεξιά) έχει χάσμα.
Η διαφάνεια του διαμαντιού δικαιολογείται από το ότι το χάσμα είναι ~ 5eV > ενέργεια οπτικού φωτονίου
Ο Ag είναι αστραφτερός γιατί έχει κενές καταστάσεις με ενέργειες οποιεσδήποτε θέλουμε, άρα μπορεί να απορροφήσει και να επανεκπέμψει (δηλ. να ανακλάσει) όλα τα μήκη κύματος.