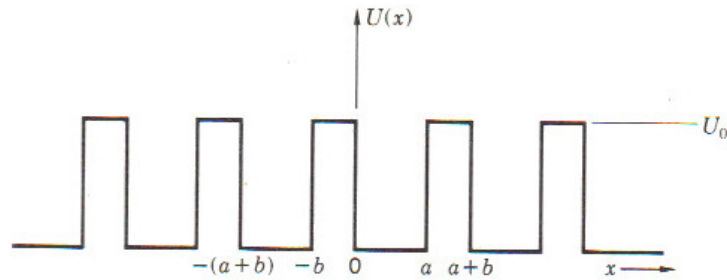


Θεωρία Υλικών Εργασία 3

1. Να βρεθεί η σχέση ενέργειας - κρυσταλλικής ορμής ηλεκτρονίου σε μονοδιάστατο διατομικό περιοδικό στερεό, το οποίο αποτελείται από N άτομα τύπου A και N άτομα τύπου B που εναλλάσσονται (σε κυκλική αλυσίδα) με πλεγματική σταθερά a (δηλαδή, a είναι η απόσταση μεταξύ ίδιου τύπου ατόμων). Θεωρήστε ότι αλληλεπιδρούν μόνο οι πλησιέστεροι γείτονες με ενέργεια $-V$, όπου $V > 0$. Το κάθε άτομο τύπου A στην θεμελιώδη κυψελίδα n συνεισφέρει ένα ατομικό τροχιακό $\phi_{A,n}$ με ενέργεια ϵ_A και το άτομο τύπου B ένα ατομικό τροχιακό $\phi_{B,n}$ με ενέργεια ϵ_B . Υποθέστε ότι η κυματοσυνάρτηση του συστήματος είναι γραμμικός συνδυασμός των ατομικών τροχιακών (LCAO) τα οποία αποτελούν ορθοκανονική βάση. Σχεδιάστε τις ενεργειακές ζώνες που προκύπτουν.
2. Υπολογίστε την ενέργεια Fermi και τη μέση κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων στο μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων στις 1, 2 και 3 διαστάσεις (θερμοκρασία $T=0$). Χρησιμοποιώντας και αποτελέσματα της άσκησης 4, εργασία 1, βρείτε την ενέργεια Fermi του μονοστοιχειακού στερεού Al (3 διαστάσεις, σε περίπτωση που χρειάζεται, η ηλεκτρονική δομή του ατόμου του Al είναι $[Ne]3s^2p^1$).
3. Στα πλαίσια του μοντέλου των ελεύθερων ηλεκτρονίων, βρείτε την ενεργειακή πυκνότητα καταστάσεων (αριθμός καταστάσεων ανά μονάδα ενέργειας) σε 1, 2 και 3 διαστάσεις (θερμοκρασία $T=0$). Υπολογίστε τη μέση κινητική ενέργεια χρησιμοποιώντας τις αντίστοιχες ενεργειακές πυκνότητες καταστάσεων σε κάθε διάσταση.
4. **(προαιρετική)** Θεωρήστε ηλεκτρόνιο στο μονοδιάστατο περιοδικό σύστημα με τη δυναμική ενέργεια του παρακάτω σχήματος. Το μοντέλο αυτό (R.L. Kronig, W.S. Penney, Proc. R. Soc. London Ser. A **130**, 499 (1930)) περιγράφει με σχετικά απλό τρόπο τον κβαντικό χαρακτήρα των ηλεκτρονίων σε περιοδικό δυναμικό πλέγματος και αναδεικνύει, μεταξύ άλλων, τη δημιουργία των ενεργειακών ζωνών και χασμάτων.
Στο όριο $b \rightarrow 0, U_0 \rightarrow \infty$, η δυναμική ενέργεια είναι

$$U(x) = A \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - na),$$



Σχήμα 1: Η δυναμική ενέργεια στο μοντέλο Kronig-Penney (από Kittel).

όπου A είναι το εμβαδό του φράγματος και a η πλεγματική σταθερά. Λύστε την χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi$$

εφαρμόζοντας το θεώρημα Bloch και τις κατάλληλες οριακές συνθήκες (συνέχεια κυματοσυνάρτησης και ασυνέχεια πρώτης παραγώγου στο σημείο του φράγματος δυναμικού) και δείξτε ότι

$$\cos ka = \frac{P}{Ka} \sin Ka + \cos Ka,$$

όπου k είναι ο κυματαριθμός, $P = mAa/\hbar^2$ και $K = \sqrt{2mE/\hbar^2}$.

Δείξτε ότι η παραπάνω σχέση (από την οποία προκύπτει η σχέση διασποράς $E(k)$) δίδει την ενέργεια ελεύθερων ηλεκτρονίων στο όριο $P \rightarrow 0$ και απομονωμένου πηγαδιού στο όριο $P \rightarrow \infty$. Για την περίπτωση $P = 3\pi/2$, σχεδιάστε τη γραφική παράσταση της ποσότητας $(P/Ka) \sin Ka + \cos Ka$ σαν συνάρτηση της Ka και δείξτε τις περιοχές με επιτρεπτές τιμές της ενέργειας (ζώνες).

Υπόδειξη: εκτός από το βιβλίο 'Εισαγωγή στη Φυσική Στερεάς Κατάστασης' του Kittel, μπορεί να βρείτε χρήσιμο και το άρθρο 'Summary of the Kronig-Penney electron', J.C. Wolfe, Am. J. Phys. **46**, 1012 (1978).