Podstawy fizyki fazy skondensowanej II, ZMiN III rok, ćwiczenia

Zadania na ćwiczenia 27 luty 2019. Michał Rams

1. Elektron w jednym wymiarze i periodycznych warunkach brzegowych

Równanie Schrödingera dla swobodnego elektronu w jednym wymiarze można zapisać jako

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_n(x) = \mathcal{E}_n\psi_n(x).$$

Podaj rozwiązania tego równania i związane z nimi energie przy periodycznych warunkach brzegowych (Borna-von Karmana)

$$\psi_n(x) = \psi_n(x+L).$$

Gdzie znajduje się elektron będąc w stanie ψ_n? Czy się porusza? Jaki ma pęd?

2. Elektron w pudle przy periodycznych warunkach brzegowych

Funkcja falowa swobodnego elektronu w 3 wymiarach jest opisywana przez równanie

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) = \mathcal{E}\psi(\vec{r}).$$

Rozwiązanie takiego równania można zapisać w postaci fali biegnącej

$$\psi_{\vec{k}}(r) = \exp(i\vec{k}\vec{r}).$$

Jakie są dopuszczalne wartości wektora falowego $\vec{k}$ przy założonych periodycznych warunkach brzegowych (warunkach Borna-von Karmana w kostce $L \times L \times L$)

$$\psi(x,y,z) = \psi(x,y,z+L) = \psi(x,y+L,z) = \psi(x+L,y,z).$$

3. Przewodnictwo ac w modelu Drudego

a) Startując z równania

$$\frac{dp}{dt} = -eE - \frac{p}{\tau}$$

na średni pęd elektronów p w polu elektrycznym $E = E_0\exp(i\omega t)$, oraz ze związku gęstości prądu j ze średnim pędem

$$j = -\frac{ne}{m}p$$

pokaż, że przewodność σ jest równa

$$\sigma(\omega) = \sigma(0)\frac{1+i\omega\tau}{1+\omega^2\tau^2},$$

gdzie $\sigma(0) = ne^2\tau/m$.

Dla jakich częstości ω (50 Hz, UKF, swiatło, promieniowanie γ) to równanie znacząco odbiega od przewodności stałoprądowej (np. dla Cu w temperaturze pokojowej)?

b) Z równań Maxwella wynika, że dla niemagnetycznego metalu przenikalność elektryczna związana jest z przewodnością

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{i\sigma}{\epsilon_0\omega}.$$

Korzystając z tego i poprzedniego punktu zapisz wyrażenie na ϵ jako funkcję ω/ω_p, gdzie

$$\omega_p^2 = \frac{ne^2}{\epsilon_0 m}.$$

Czy fala elektromagnetyczna o częstości powyżej częstości plazmonowej ω_p jest ekranowana/odbijana/pochłaniana przez metal? Jakie jest ω_p dla sodu?

4. Ciepło Joula w modelu Drudego (jeżeli będzie nadmiar czasu)

Elektron rozpędza sie w polu E i po średnim czasie τ zderza się z jakimś atomem przekazując mu energię kinetyczną, która poprzez drgania sieci zamienia się na ciepło. Sprawdź czy w tym modelu można otrzymać wzór na wydzielaną moc $P = I^2 R$, (moc na jednostkę objętości σE^2).

Podstawy fizyki fazy skondensowanej II, ZMiN III rok, ćwiczenia

Zadania na ćwiczenia 6 marca 2019. Michał Rams

5. Gęstość stanów gazu elektronowego

Gęstość stanów definiuje się jako

$$D(\mathcal{E}) = dn(\mathcal{E})/d\mathcal{E},$$

gdzie $n(\mathcal{E})$ jest koncentracją elektronów o energiach od 0 do $\mathcal{E}$. Dla elektronów swobodnych liczbę n można powiązać z objętością kuli w przestrzeni odwrotnej $4\pi k^3/3$ liczbą stanów w przestrzeni odwrotnej na jednostkę objętości

$$w_k = \frac{2}{(2\pi)^3}.$$

Korzystając z relacji dyspersji

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

wylicz gęstość stanów dla gazu elektronów swobodnych w 3-wymiarach. Sprawdź, że w tym przypadku

$$D(\mathcal{E}) = \frac{3}{2}\frac{n}{\mathcal{E}}.$$

6. Gęstość stanów cd.

Wylicz gęstość stanów $D(\mathcal{E})$ gazu elektronowego w d wymiarowym pudle o boku L dla $d = 2$. Powinno otrzymać się zależność spełniającą

$$D^{(d)}(\mathcal{E}) \sim m^{d/2}\mathcal{E}^{d/2-1}.$$

7. Wykres funkcji F-D

Zrób wykres funkcji Fermiego-Diraca dla potencjału chemicznego $\mu = 7$ eV, dla temperatur 10, 100, 1000 K.

8. Rozwinięcie Sommerfelda

Wartość potencjału chemicznego $\mu(T)$ dla gazu elektronów musi być taka, żeby liczba (koncentracja) elektronów n była równa

$$n = \int_0^\infty D(\mathcal{E}) f_{FD}(\mathcal{E})\, d\mathcal{E},$$

gdzie funkcja Fermiego-Diraca

$$f_{FD}(\mathcal{E}) = \frac{1}{\exp((\mathcal{E}-\mu)/k_BT)+1}.$$

Dla $k_BT/\mu \ll 1$ takie całki można wyliczać korzystając z rozwinięcia Sommerfelda

$$\int_{-\infty}^{\infty} h(\mathcal{E}) f_{FD}\, d\mathcal{E} \simeq \int_{-\infty}^{\mu} h(\mathcal{E})\, d\mathcal{E} + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2 \left.\frac{dh(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}}\right|_{\mathcal{E}=\mu},$$

prawdziwego dla dowolnej funkcji $h(\mathcal{E})$, dla której $h(-\infty) = 0$, oraz $h(\mathcal{E})$ nie ma osobliwości dla $\mathcal{E} = \mu$ oraz $h(\mathcal{E})$ rośnie nie szybciej niż wielomian dla $\mathcal{E} \to \infty$.

Pokaż, że potencjał chemiczny dla 3-wymiarowego gazu elektronowego zależy od temperatury jak

$$\mu(T) \simeq \mathcal{E}_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\mathcal{E}_F} \right)^2 \right],$$

gdzie $\mathcal{E}_F = \mu(T = 0)$.
Wsk.1: Dla elektronów w 3 wymiarach gęstość stanów $D(\mathcal{E}) \sim \mathcal{E}^{1/2}$.
Wsk.2: Liczba elektronów n jest stała niezależnie od T, taka sama dla $T = 0$ jak i dla $T > 0$.
Wsk.3: Całka

$$\int_0^{\mu} h(\mathcal{E})\, d\mathcal{E} \simeq \int_0^{\mathcal{E}_F} h(\mathcal{E})\, d\mathcal{E} + (\mu - \mathcal{E}_F) h(\mathcal{E}_F).$$

Podstawy fizyki fazy skondensowanej II, ZMiN III rok, ćwiczenia

Zadania na ćwiczenia 13 marca 2019. Michał Rams

9. Wielkość liczbowa energii Fermiego

Energia Fermiego dana jest wzorem

$$\mathcal{E}_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{2/3}.$$

gdzie n jest koncentracją elektronów przewodnictwa. Znajdź dane krystalograficzne dla złota. Przyjmując, że w Au jest jeden elektron przewodnictwa/atom, wylicz n oraz $\mathcal{E}_F$.

10. Ciecz kwantowa ^{3}He

Atom ^{3}He ma spin 1/2 więc jest fermionem. W pobliżu zera bezwzględnego ciekły ^{3}He jest cieczą kwantową, którą można opisywać podobnie jak gaz elektronowy, tylko z inną efektywną masą cząstek. Oblicz energię Fermiego i temperaturę Fermiego dla tego układu znając jego gęstość 0.081 g/cm^3. W oparciu o koncepcję gazu fermionowego oblicz

- jego energię Fermiego i temperaturę Fermiego T_F,
- współczynnik γ liniowego ciepła właściwego dla 1 mola gazu.
- Znajdź dane doświadczalne dla γ. Wyniki pomiarów ciepła właściwego dla ^{3}He są w artykule D.S. Greywall, Physical Review B 27 (1983) 2747. To jest najważniejszy punkt w tym zadaniu.

11. Ciśnienie gazu elektronowego

Energia gazu elektronowego w $T = 0$ K i odpowiadające temu ciśnienie policzone były na wykładzie. Proszę pokazać, że moduł sprężystości objętościowej

$$B = -V\frac{\partial P}{\partial V}$$

gazu elektronowego w $T = 0$ K wynosi $10U/9V$ lub $5P/3$. Oznaczenia: U – energia całkowita gazu elektronowego, P – ciśnienie, V – objętość. W podręczniku C. Kittla są tablice modułów sprężystości pierwiastków. Proszę porównać te dane z otrzymaną wartością w przypadku sodu.

12. Rozwinięcie potencjału w krysztale na szereg Fouriera

Proszę pokazać, że w rozwinięciu na szereg Fouriera

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r})$$

funkcji $V(\vec{r})$ periodycznej w sieci krystalicznej niezerowe mogą być tylko współczynniki $V_{\vec{k}}$ dla $\vec{k} = \vec{G}$, gdzie $\vec{G}$ są wektorami sieci odwrotnej. Współczynniki rozwinięcia są równe

$$V_{\vec{G}} = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \int\limits_{V_{\text{cell}}} V(\vec{r}) \exp(-i\vec{G}\vec{r}) d^3r$$

gdzie V_{cell} jest objętością komórki prymitywnej sieci rzeczywistej.

Podstawy fizyki fazy skondensowanej II, ZMiN III rok, ćwiczenia

Zadania na ćwiczenia 20 marca 2019. Michał Rams

Zaległe zadania z poprzedniego tygodnia:

Rozwinięcie potencjału w krysztale na szereg Fouriera

13. Związek pojemności cieplnej fermionów z masą cząstek

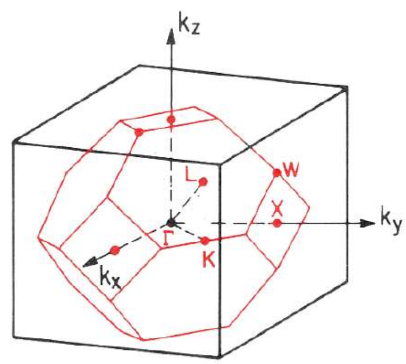
Wychodząc z zależności

$$C_v = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 D(\mathcal{E}_F) T = \gamma T$$

pokaż, że współczynnik Sommerfelda γ jest proporcjonalny do masy elektronu.

Powyższe równanie prawdziwe jest również dla silnie skorelowanych układów elektronowych (SCES) w których efektywne masy elektronów mogą znacznie się różnić od masy swobodnego elektronu. Dla $CeAl_3$ $\gamma = 1.6$ J/K^{2}mol. Jaka jest masa efektywna elektronów m^*/m_e w tym materiale?

14. Strefy Brillouina sieci fcc i bcc oraz rozmiar kuli Fermiego



Proszę znaleźć (np. Kittel) jak wygląda pierwsza strefa Brillouina dla sieci regularnej fcc, oraz dla sieci regularnej bcc. Pierwsza strefa Brillouina to komórka prymitywna Wignera-Seitza w sieci odwrotnej. Jakie ma rozmiary wyrażone poprzez stałą kublicznej (centrowanej) sieci rzeczywistej a?

Rozważmy metal o strukturze sieci rzeczywistej fcc, w którym każdy atom daje α elektronów. Czy cała kula Fermiego mieści się w pierwszej strefie Brillouina? Sprawdź dla $\alpha = 1$ oraz $\alpha = 2$. W tym celu trzeba porównać promień kuli Fermiego z odległością ΓL.