ZBIERKA ÚLOH

Z FYZIKY TUHÝCH LÁTOK

Študijný text k prednáške FYZIKA TUHÝCH LÁTOK

OBSAH

1. Štruktúra tuhých látok

a) Väzby v tuhých látkach

1.1 Výpočtom zdôvodnite, prečo atómy inertných plynov nemôžu vytvárať molekuly s iónovou väzbou.
Pozn.: K výpočtu použite údaje z tabuliek pre ionizačné energie jednotlivých prvkov - He ... 25eV, Ne ... 21eV, Ar ... 16eV, Kr ... 14eV. Elektrónová afinita uvedených prvkov je zanedbateľná, väzbová energia molekúl (z tých istých atómov) je cca 6eV.

1.2 Nech potenciálna energia častice v poli inej častice závisí na vzdialenosti medzi ich stredmi podľa vzťahu $E(r) = -\frac{A}{r} + \frac{B}{r^8}$, kde A a B sú konštanty. Ukážte, že

a) obe častice tvoria stabilnú konfiguráciu pre $r = r_0 = \left(\frac{8B}{A}\right)^{\frac{1}{7}}$,

b) ak častice budeme od seba vzďaľovať, molekula sa rozpadne, ak pôsobiaca sila dokáže obe častice vzdialiť o $r = \left(\frac{36B}{A}\right)^{\frac{1}{7}} = 4{,}5^{\frac{1}{7}} r_0$.

1.3 Vypočítajte väzbovú energiu E_M mriežky NaCl (vztiahnutú na 1 mol kryštálu), ak konštanta n, charakterizujúca potenciálnu energiu odpudivých síl je rovná 9,4, $r_0 = 2{,}81.10^{-10}$ m a Madelungova konštanta A = 1,75.
(N_A = 6,02.10^{23} mol^{-1})

$\left[E_M = 77.10^4 \text{ Jmol}^{-1}\right]$

1.4 Experimentálna hodnota energie mriežky KCl , pripadajúca na 1 pár iónov je ε_M = 6,62 eV. Vypočítajte hodnotu n (exponent vo výraze pre odpudivú interakciu), ak poznáte r_0 = 3,1 A° a Madelungovu konštantu A = 1,75.
(1 eV = 1,602.10^{-19} J , ε_0 = 8,854.10^{-12} m^{-3}kg^{-1}s^{4}A^2)

[n = 5,37]

1.5 Stanovte hodnotu Madelungovej konštanty pre prípad jednorozmernej mriežky skladajúcej sa z pravidelne sa striedajúcich kladných a záporných iónov. Vypočítajte energiu takejto mriežky!

[A = 2.ln2]

1.6 Pomocou Evjenovej metódy vypočítajte približnú hodnotu Madelungovej konštanty pre plošnú alternujúcu mriežku a vypočítajte energiu pri stabilnej konfigurácii takejto plošnej mriežky.
Pozn.: Pozri aj návod na presné riešenie v kapitole Súbor náročnejších úloh ...

[A = 1,61]

1.7 Pomocou Evjenovej metódy vypočítajte približnú hodnotu Madelungovej konštanty pre kryštál typu NaCl.
Pozn.: Pozri aj návod na presné riešenie v kapitole Súbor náročnejších úloh ...

[A = 1,75]

1.8 Ukážte, že modul objemovej pružnosti primitívnej kubickej kryštálovej mriežky je $K = \frac{r_0^2}{9V_0}\left(\frac{d^2E}{dr^2}\right)_{r=r_0}$,
kde r_0 je vzdialenosť medzi atómami v rovnovážnom stave a V objem kryštálu.

b) Kryštalická mriežka. Kryštalické sústavy

1.9 Hustota kryštálu NaCl je $\rho = 2{,}18.10^3$ kgm^{-3}. Relatívna atómová hmotnosť sodíku je 23, chlóru 35,45. Určite mriežkovú konštantu a .
($m_u = 1{,}66.10^{-27}$ kg)

[$a = 5{,}62$ A°]

1.10 Určite počet atómov v elementárnej bunke železa, ktoré kryštalizuje v kubickej sústave. Mriežková konštanta je $a = 2{,}87.10^{-10}$ m , relatívna atómová hmotnosť Fe $A_r = 55{,}85$, hustota $\rho = 7800$ kgm^{-3} . Akého typu je elementárna bunka?

[$n = 2$, kubická priestorovo centrovaná - I]

1.11 Určite, koľko atómov pripadá na jednu elementárnu bunku kubickej mriežky
a) primitívnej P
b) priestorovo centrovanej I
c) plošne centrovanej F .
Aké je koordinačné číslo z v týchto mriežkach?

[a) $n = 1$, $z = 6$ b) $n = 2$, $z = 8$ c) $n = 4$, $z = 12$]

1.12 Predpokladajme, že elementárna bunka kubickej mriežky je vytvorená z rovnakých atómov, ktoré si predstavujeme ako pevné gule s polomerom r (gule sa navzájom dotýkajú). Ukážte, že koeficient zaplnenia objemu elementárnej bunky je u
a) primitívnej bunky $\alpha = \frac{\pi}{6} \approx 0{,}523$,
b) priestorovo centrovanej bunky $\alpha = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} \approx 0{,}68$,
b) plošne centrovanej bunky $\alpha = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} \approx 0{,}74$.

1.13 Odvoďte všeobecný vzťah pre výpočet objemu elementárnej bunky, ktorá má mriežkové parametre a , b , c , α , β , γ (triklinická mriežka).

[$V = a.b.c.\sqrt{1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2.\cos\alpha.\cos\beta.\cos\gamma}$]

1.14 Využitím všeobecného vzťahu pre objem elementárnej bunky (viď 1.14), odvoďte vzťah pre objem elementárnej bunky kryštalickej sústavy

a) kubickej ,
b) ortorombickej ,
c) monoklinickej ,
d) trigonálnej ,
e) hexagonálnej .

$$\left[V_1 = a^3, \quad V_2 = abc, \quad V_3 = abc\sin\gamma, \quad V_4 = a^3\sqrt{1-3\cos^2\alpha - 2\cos^3\alpha}, \quad V_5 = a^2 c\frac{\sqrt{3}}{2} \right]$$

1.15 Určite počet elementárnych buniek v 1 cm^3 kryštálu Mg s mriežkovými parametrami a = 3,21 A° a c = 5,21 A° (Mg kryštalizuje v hexagonálnej sústave).

[n = 2,15.10^{22}]

1.16 Nájdite Millerove indexy rovín, v ktorých ležia steny elementárnej bunky a Millerove indexy uhlopriečnych rovín.

[(010) atď., (110) atď., (111) atď.]

1.17 Nájdite Millerove indexy roviny, ktorá na kryštalografických osiach vytína úseky A = 6, B = 2, C = 3 (údaje A, B, C sú uvedené v násobkoch veľkostí odpovedajúcich vektorov elem. bunky).

[(132)]

1.18 Určite úseky, ktoré vytína na kryštalografických osiach rovina (125).

[A = 10, B = 5, C = 2 – v násobkoch veľkostí odpovedajúcich vektorov elem. bunky]

c) Recipročná mriežka, kryštalografické výpočty

1.19 Z definičných vzťahov pre vektory recipročnej mriežky $\vec{a}_i . \vec{a}_j^* = \delta_{ij}$ odvoďte

$$\vec{a}_1^* = \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1.(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \vec{a}_2^* = \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1.(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \vec{a}_3^* = \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1.(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} .$$

1.20 Ukážte, že translačný vektor recipročnej mriežky $\vec{T}_{hkl}^* = h.\vec{a}_1^* + k.\vec{a}_2^* + l.\vec{a}_3^*$ je kolmý na roviny (hkl) a jeho veľkosť je rovná recipročnej hodnote medzirovinných vzdialeností rovín (hkl).

1.21 Elementárna bunka kryštálu Mg patrí do hexagonálnej sústavy a je charakterizovaná mriežkovými parametrami a = 3,21 A° a c = 5,21 A°. Určite parametre recipročnej mriežky.

$$\left[a^* = b^* = \frac{2\sqrt{3}}{3a}, \quad c^* = \frac{1}{c} \right]$$

1.22 Dokážte vzťah $V^* = 1/V$, kde V^* je objem elementárnej bunky recipročnej mriežky, V – objem elem. bunky priestorovej mriežky.
(Pozn.: K úpravám môžete použite vzťah (**A**x**B**).(**C**x**D**) = (**A**.**C**)(**B**.**D**) - (**A**.**D**)(**B**.**C**))

1.23 Vyjadrite uhly medzi jednotlivými vektormi recipročnej mriežky pomocou uhlov priestorovej mriežky.
(Pozn.: K úpravám môžete použiť vzťah (**A**x**B**).(**C**x**D**) = (**A**.**C**)(**B**.**D**) - (**A**.**D**)(**B**.**C**))

$$\left[\cos\alpha^* = \frac{\cos\beta.\cos\gamma - \cos\alpha}{\sin\beta.\sin\gamma}, \cos\beta^* = \frac{\cos\alpha.\cos\gamma - \cos\beta}{\sin\alpha.\sin\gamma}, \cos\gamma^* = \frac{\cos\alpha.\cos\beta - \cos\gamma}{\sin\alpha.\sin\beta}\right]$$

1.24 Dokážte, že recipročná mriežka k mriežke trigonálnej je tiež trigonálna.

1.25 Odvoďte všeobecný vzťah pre výpočet medzirovinnej vzdialenosti d_{hkl} sústav rovín s Millerovými idexami (hkl) (pre triklinickú mriežku).

1.26 Odvoďte vzťah pre medzirovinnú vzdialenosť d_{hkl} sústav rovín (hkl) pre ortorombickú a kubickú mriežku.
Pomocou odvodených vzťahov vyčíslite vzdialenosti medzi rovinami (110) , (111) a (125) v kubickej mriežke ak je známa mriežková konštanta a .

$$\left[d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}, \quad d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad d_1 = \frac{a}{\sqrt{2}}, \quad d_2 = \frac{a}{\sqrt{3}}, \quad d_3 = \frac{a}{\sqrt{30}}\right]$$

1.27 Určite uhol medzi rovinami ($h_1\, k_1\, l_1$) a ($h_2\, k_2\, l_2$) v ortorombickej mriežke.

$$\left[\cos\varphi = \frac{\frac{h_1h_2}{a^2} + \frac{k_1k_2}{b^2} + \frac{l_1l_2}{c^2}}{\sqrt{\left(\frac{h_1}{a}\right)^2 + \left(\frac{k_1}{b}\right)^2 + \left(\frac{l_1}{c}\right)^2} \cdot \sqrt{\left(\frac{h_2}{a}\right)^2 + \left(\frac{k_2}{b}\right)^2 + \left(\frac{l_2}{c}\right)^2}}\right]$$

1.28 Určite uhol medzi rovinami (201) a (310) ortorombickej síry s mriežkovými parametrami a = 10,437 A° , b = 12,845 A° a c = 24,369 A°.
(Pozn.: K riešeniu použite výsledok príkladu 1.27)

$[\varphi \approx 19°]$

d) Difrakcia žiarenia v kryštáloch

1.29 Určite mriežkovú konštantu kryštálu LiJ, ak je známe, že reflexia prvého rádu rtg. žiarenia s vlnovou dĺžkou λ = 2,1 A° od prirodzenej plochy kryštálu nastáva pri uhle odrazu Θ = 10°5′.

[$a = 6.10^{-10}$ m]

1.30 Od akých sústav rovín (*hkl*) sa môžu objaviť reflexie na röntgenograme od primitívnej kubickej mriežky s mriežkovou konštantou a = 0,286 nm, ak je použité žiarenie z Co anódy s λ = 0,1789 nm?
(Pozn.: Uvažujte iba reflexie 1. rádu)

$\left[\ h^2 + k^2 + l^2 \leq 10{,}2\ \right]$

1.31 Stanovte hodnotu uhlu Θ , pod ktorým sa v rtg. difraktograme objaví reflexia od kryštalických rovín (110) kryštálu s ortorombickou symetriou. Vlnová dĺžka použitého žiarenia λ = 0,154 nm, mriežkové konštanty a = 11,878 A° , b = 14,246 A° a c = 6,218 A°.

[Θ = 4°50′]

1.32 Ukážte, že pri pozorovaní zmien mriežkovej konštanty a je najvýhodnejšia difrakcia rtg. pod veľkými Braggovými uhlami.
(Pozn.: Uvažujte kubickú mriežku)

1.33 Pri dopade žiarenia s vlnovou dĺžkou λ = 0,154 nm na kryštál Al bola pozorovaná difrakcia od kryštalografických rovín (111) pod Braggovým uhlom Θ = 19,2°. Hliník má plošne centrovanú kubickú mriežku, jeho hustota je ρ = 2699 kgm^{-3}, relatívna atómová hmotnosť A_r = 26,98. Z daných experimentálnych údajov stanovte hodnotu Avogadrovho čísla N_A .

[$N_A \approx 6.10^{23}$ mol^{-1}]

1.34 Na prípade primitívnej kubickej mriežky ukážte, že Braggova rovnica je dôsledkom Laueho rovníc.

1.35 Ukážte, že interferenčné maximá od primitívnej kubickej mriežky pre daný smer dopadajúceho žiarenia nastávajú iba pre niektoré vlnové dĺžky λ .

1.36 Z Laueho rovníc odvoďte podmienku pre Evaldovu konštrukciu.

[$\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{G}^*$, kde $\vec{G}^*$ je vektor recipročnej mriežky]

2. Poruchy v tuhých látkach

a) Bodové poruchy. Termodynamika bodových porúch

2.1 Uvažujte prípad mriežky obsahujúcej N_A atómov typu A a N_B atómov typu B. Určite, koľko je možných spôsobov rozmiestnenia týchto atómov do ($N_A + N_B$) mriežkových bodov.

$$\left[Z_k = \frac{(N_A + N_B)!}{N_A!\, N_B!} \right]$$

2.2 Určite konfiguračnú entrópiu mriežky popísanej v príklade 2.1.

$$[S_k = k \ln Z_k]$$

2.3 Odvoďte vzťah pre rovnovážny počet vakancií v kryštále pri teplote T. Aktivačná energia vakancie je E_v , nárast tepelnej entrópie pri vzniku jednej vakancie ΔS_t , počet obsadených bodov mriežky kryštálu N .
(Pozn.: K úpravám použite Stirlingov vzťah ... $\ln x! \approx x \ln x - x$)

$$\left[n \approx N e^{\frac{\Delta S_t}{k}} e^{-\frac{E_v}{kT}} \approx N e^{-\frac{E_v}{kT}} \right]$$

2.4 Pre vytvorenie vakancie v hliníku je potrebná energia 0,75 eV. Koľko vakancií pripadá na jeden atóm kryštálu v stave termodynamickej rovnováhy a) pri izbovej teplote,
b) pri 600 °C ?

$$[\text{a) } n' \approx 3.10^{-13}, \quad \text{b) } n' \approx 5.10^{-7}]$$

2.5 Vypočítajte, o koľko % sa zväčší objem elementárnej bunky primitívnej kubickej mriežky ak do jej stredu umiestnime intersticiálne atóm s rovnakým atómovým polomerom. Uvažujte tesné usporiadanie atómov!

[54%]

2.6 Odvoďte vzťah pre rovnovážny počet Frenkelových porúch v kryštále pri teplote T. Aktivačná energia Frenkelovej poruchy je E_F , nárast tepelnej entrópie pri vzniku jednej poruchy ΔS_t , počet uzlov mriežky kryštálu N , počet intersticiálnych polôh N'.
(Pozn.: K úpravám použite Stirlingov vzťah ... $\ln x! \approx x \ln x - x$)

$$\left[n^* \approx \sqrt{NN'} e^{\frac{\Delta S_t}{2k}} e^{-\frac{E_F}{2kT}} \approx \sqrt{NN'} e^{-\frac{E_F}{2kT}} \right]$$

2.7 Vypočítajte pomer počtu Schottkyho porúch (vakancií) k počtu porúch Frenkelovho typu v kryštále pri izbovej teplote, ak energia potrebná k vytvorení vakancie je 0,75 eV , k vytvoreniu intersticiály 3 eV. Uvažujte $N \approx N'$, $T = 300$ K .

$$\left[\frac{n}{n^*} \approx e^{29} \approx 3{,}9.10^{12} \right]$$

2.8 Energia potrebná na vznik jednej vakancie v kryštále Na je $E_v = 1\text{eV}$. Vypočítajte časť mólového tepla C_v spojeného s tvorbou vakancií, pri izbovej teplote.
($1\text{eV} = 1{,}602.10^{-19}$ J, $N_A = 6{,}02.10^{23}$ mol^{-1} , $k = 1{,}38.10^{-23}$ JK^{-1})

[$C_v \approx 3{,}7.10^{-13}$ Jmol^{-1}K^{-1}]

3. Tepelné kmity atómov kryštálu

a) Kmity a vlny v jednorozmernej mriežke. Disperzný vzťah, frekvenčné spektrum

3.1 Odvoďte strednú hodnotu energie harmonického oscilátoru kmitajúceho po priamke podľa klasickej teórie.

$\left[\,\overline{E} = kT\,\right]$

3.2 Podľa kvantovej teórie môže lineárny harmonický oscilátor nadobúdať iba diskrétne hodnoty energie $E_n = n\hbar\omega$. S uvažovaním Boltzmannovho rozdelenia energií podľa teploty, vypočítajte strednú hodnotu energie oscilátoru pri teplote T.

$$\left[\,\overline{E} = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}\,\right]$$

3.3 Ukážte, že pri vysokých teplotách prechádza kvantový výraz pre strednú hodnotu energie lineárneho harmonického oscilátoru v klasický.
(Pozn.: Pozri riešenia príkladov 3.1 a 3.2)

3.4 Ukážte, že výraz pre strednú hodnotu energie klasickej sústavy môžeme zapísať v tvare

$$\overline{E} = kT^2 \frac{d \ln z}{dT} \;,$$

kde $z = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{E(p,q)}{kT}} dp\, dq$ je stavový integrál, p impulz a q súradnica.

3.5 Odvoďte disperzný vzťah pre prípad kmitov jednorozmerného reťazca z rovnakých atómov. Uvažujte iba pozdĺžne kmity a silové interakcie (kvázielastické) iba medzi najbližšími susedmi. Hmotnosť atómov je m , ich rovnovážna vzdialenosť a .

$$\left[\,\omega = \sqrt{\frac{4\beta}{m}} \left| \sin\frac{ka}{2} \right|\,\right]$$

3.6 Vychádzajúc z disperzného vzťahu (viď príklad 3.5), určite minimálnu vlnovú dĺžku vlny, ktorá sa môže šíriť jednorozmerným kryštálom z rovnakých atómov.

$\left[\,\lambda_{\min} = 2a\,\right]$

3.7 Vychádzajúc z disperzného vzťahu pre kmitanie konečného lineárneho reťazca z G atómov odvoďte frekvenčné spektrum. Získané frekvenčné spektrum zobrazte v grafe.

$$\left[\, f(\omega) = \frac{2G}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}} \quad \text{, kde} \quad \omega_m = \sqrt{\frac{4\beta}{m}}\,\right]$$

3.8 Pre lineárny reťazec atómov odvoďte závislosť fázovej v_f a grupovej v_g rýchlosti od vlnového čísla k, resp. od vlnovej dĺžky λ reťazcom sa šíriaceho pozdĺžneho vlnenia. Závislosti znázornite graficky!

$$\left[v_f = \frac{1}{k}\sqrt{\frac{4\beta}{m}}\sin\frac{ka}{2}, \quad v_g = \frac{a}{2}\sqrt{\frac{4\beta}{m}}\cos\frac{ka}{2}, \quad \text{kde } k = \frac{2\pi}{\lambda} \right]$$

3.9 Použitím riešenia príkladu 3.8, stanovte limitné hodnoty fázovej a grupovej rýchlosti pre vlnový vektor k v strede a na hranici Brillouinovej zóny.

$$\left[\begin{array}{ll} \text{pre } k \to 0 & v_f \to \dfrac{a\omega_m}{2}, \quad v_g \to \dfrac{a\omega_m}{2}, \qquad \text{kde } \omega_m = \sqrt{\dfrac{4\beta}{m}} \\ \text{pre } k \to \dfrac{\pi}{a} & v_f \to \dfrac{a\omega_m}{\pi}, \quad v_g \to 0 \end{array} \right]$$

b) Kmity trojrozmernej kryštalickej mriežky. Kmitové módy. Fonóny

3.10 Vyčíslite frekvenčné spektrum $f(\omega)$ trojrozmerného kryštálu s kubickou symetriou a primitívnou elementárnou bunkou. Uvažujte lineárne disperzné vzťahy ($\omega = v_{\parallel}.k$, resp. $\omega = v_{\perp}.k$).

$$\left[f(\omega) = \frac{V\omega^2}{2\pi^2}\left(\frac{1}{v_{\parallel}^3} + \frac{2}{v_{\perp}^3}\right) \right] \quad , \text{ kde } V \text{ je objem kryštálu.}$$

3.11 Vypočítajte maximálnu kruhovú frekvenciu kmitov atómov kryštálu uvažovaného v príkl. 3.10, za predpokladu $v_{\parallel} \approx v_{\perp} = v$.

$$\left[\omega_D = \sqrt[3]{\frac{6N\pi^2 v^3}{V}} \right] \quad , \text{ kde } N \text{ je počet častíc kryštálu.}$$

3.12 Odvoďte výraz pre všeobecný výpočet celkovej energie tepelných kmitov kryštálu.

$$\left[E = \int_0^{\omega_{\max}} f(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega \right]$$

3.13 Určite počet fonónov v kmitovom móde s frekvenciou ω, pri teplote T.

$$\left[n = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \right]$$

3.14 Ukážte, že počet fonónov v danom kmitovom móde je pri vysokých teplotách úmerný teplote *T*.

$$\left[n \rightarrow \frac{k}{\hbar\omega} \cdot T \right]$$

3.15 Uvažujte *N* atómov kryštálu, kmitajúcich nezávisle v troch vzájomne kolmých smeroch. Použitím klasickej štatistiky určite celkovú tepelnú energiu takéhoto kryštálu.

$$\left[E = 3NkT \right]$$

3.16 Vychádzajúc z Einsteinovho modelu kmitov a použitím kvantovej štatistiky určite energiu tepelných kmitov kryštálu s N arómami.

$$\left[E = 3N \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \right]$$

3.17 Debyeova teplota tuhej látky je definovaná vzťahom $\Theta = \hbar\omega_{\max} / k$. Určite približne rýchlosť zvuku v diamante, ak poznáte mriežkovú konštantu d = 1,54.10^{-10} m a Θ = 1860 K .
($\hbar = 1{,}05.10^{-34}$ Js^{-1})

$$\left[v = \frac{kd\Theta}{\pi\hbar}, \quad v \approx 1{,}2.10^{4}\,\mathrm{ms}^{-1} \right]$$

3.18 Vychádzajúc z Debyeovho modelu kmitov atómov kryštálu odvoďte vzťah pre celkovú energiu tepelných kmitov tuhej látky s *N* atómmi. Upravte tento výraz do tvaru vhodného pre numerický výpočet, s použitím Debyeovej teploty.

$$\left[E = \frac{3V\hbar}{2\pi^2 v^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega \ , \quad resp. \quad E = 9NkT \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 \int_0^{\frac{\Theta}{T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \right]$$

c) Tepelné kapacity tuhých látok. Klasický, Einsteinov a Debyeov model

3.19 Uvažujte *N* atómov kryštálu, kmitajúcich nezávisle v troch vzájomne kolmých smeroch (tzv. klasický model). Použitím klasickej štatistiky odvoďte molárnu tepelnú kapacitu takéhoto kryštálu.

$\left[C_v = 3R \right]$ – tzv. Dulong-Petitov zákon

3.20 Vychádzajúc z Einsteinovho modelu kmitov a použitím kvantovej štatistiky odvoďte vzťah pre teplotnú závislosť molárnej tepelnej kapacity tuhej látky.
(Pozn.: Výsledok je uvedený na ďalšej strane.)

$$\left[C_v = 3R\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1\right)^2} \right]$$

3.21 Rozoberte závislosť molárnej tepelnej kapacity C_v podľa Einsteinovho modelu kmitov pri a) vysokých,
b) nízkych teplotách.
(Pozn.: Pozri riešenie príkladu 3.20)

[a) $C_v \to 3R$, b) $C_v \to 0$]

3.22 Vychádzajúc z Debyeovho modelu kmitov atómov kryštálu odvoďte vzťah pre teplotnú závislosť molárnej tepelnej kapacity tuhej látky.

$$\left[C_v = \frac{3V\hbar^2}{2\pi^2 v^3 kT^2} \int_0^{\omega_\mathrm{D}} \frac{\omega^4 e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1\right)^2} d\omega \right]$$

3.23 Upravte vzťah pre molárnu tepelnú kapacitu z Debyovho modelu (viď riešenie - príkl. 3.22) do tvaru vhodného pre numerický výpočet, s použitím Debyeovej teploty.

$$\left[C_v = 9Nk\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \int_0^{\frac{\Theta}{T}} \frac{x^4 e^x}{\left(e^x - 1\right)^2} dx \right]$$

3.24 Stanovte teplotnú závislosť molárnej tepelnej kapacity tuhej látky podľa Debyovej teórie v oblasti vysokých teplôt.

[$C_v \to 3R$]

3.25 Stanovte teplotnú závislosť molárnej tepelnej kapacity tuhej látky podľa Debyovej teórie v oblasti nízkych teplôt.

[$C_v \approx konšt.T^3$]

3.26 Uvažujte jednorozmerný reťazec G vzájomne viazaných atómov Fe, ktorým sa môžu šíriť iba pozdĺžne vlny (pozri model jednorozmerného kryštálu z príkl. 3.5). Určite:
a) maximálnu frekvenciu kmitových módov $\omega_{\max}$,
b) Debyovu teplotu kryštálu,
c) vzťah pre výpočet celkovej tepelnej energie kryštálu.
Poznáme: $\beta = 26{,}33\ \mathrm{Nm^{-1}}$, $m_{\mathrm{Fe}} = 1{,}538.10^{-25}$ kg , $h = 6{,}626.10^{-34}$ Js , $k = 1{,}38.10^{-23}\ \mathrm{JK^{-1}}$.

$$\left[\omega_m = 2{,}62.10^{13}\,\mathrm{s}, \quad \Theta \approx 200\ \mathrm{K}, \quad E = \int_0^{\omega_m} \frac{2G}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega \right]$$

4. Elektrické vlastnosti tuhých látok

a) Elektrické vlastnosti kovov

4.1 Vypočítajte hustotu voľných elektrónov v jednomocnej medi pri teplote 20 °C ak je hustota medi pri tejto teplote ρ = 8960 kg m^{-3} a jej relatívna atómová hmotnosť A_r = 55,85. (m_u = 1,66.10^{-27} kg)

[n = 8,5.10^{28} m^{-3}]

4.2 Medeným vodičom s prierezom S = 0,2 cm^2 prechádza prúd I = 1 A. Koncentrácia voľných elektrónov vo vodiči je n = 8,5.10^{28} m^{-3}. Určite strednú driftovú rýchlosť elektrónov.
(e = 1,6.10^{-19} C)

[v_d = 3,7.10^{-6} ms^{-1}]

4.3 Riešením Schrödingerovej rovnice pre voľné elektróny $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi$ odvoďte disperzný vzťah.

$$\left[E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \right]$$

4.4 Riešením rovnice pre vlastné hodnoty operátora $\hat{\vec{p}}$ odvoďte, čomu sa rovná hybnosť elektrónu, ktorý je charakterizovaný rovinnou vlnou $\psi_{\vec{k}} = C.e^{i\vec{k}\vec{r}}$.

[$\vec{p} = \hbar\vec{k}$]

4.5 Určite polomer Fermiho sféry k_F pre volné elektróny v kove pri teplote T = 0 K.

[$k_F = \left(3\pi^2 n\right)^{1/3}$, kde n je koncentrácia elektrónov]

4.6 Nájdite maximálnu energiu elektrónov v kove pri teplote T = 0 K (tzv. Fermiho energiu pri T = 0 K).

$$\left[E_F^0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3} \right]$$

4.7 Vypočítajte maximálnu hodnotu energie elektrónov v striebre, ak koncentrácia elektrónov v striebre je n = 6.10^{22} cm^{-3}. Energiu vyjadrite v elektrónvoltoch.
(h = 6,626.10^{-34}, m = 9,1.10^{-31} kg , 1eV = 1,602.10^{-19} J)

$\left[E_F^0 \approx 9\ \text{eV} \right]$

4.8 Vypočítajte rýchlosť elektrónov z Fermiho hladiny (sféry) pri teplote T = 0 K.

$$\left[v_F = \frac{\hbar}{m}\left(3\pi^2 n\right)^{1/3} \right]$$

4.9 Použitím disperzného vzťahu pre voľné elektróny v kove $\left[E = \hbar^2 k^2 / 2m\right]$ odvoďte hustotu energetických stavov $D(E)$.

$$\left[\, D(E) = \frac{1}{V}\frac{dZ}{dE} = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2} \,\right]$$

4.10 Odvoďte všeobecný vzťah pre hustotu energetických stavov elektrónov v kryštáli.

$$\left[\, D(E)dE = \frac{2}{(2\pi)^3}\int_S \frac{dS\; dE}{\left|\operatorname{grad}_{\vec{k}} E(\vec{k})\right|} \,\right]$$

4.11 Pomocou všeobecného vzťahu pre hustotu energetických stavov (pozri príklad 4.10), odvoďte výraz pre hustotu energetických stavov pre prípad sféricky symetrických izoenergetických hladín.

$$\left[\, D(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2} \,\right]$$

4.12 Určite počet elektrónov v kove s energiami z intervalu (E_1, E_2) pri teplote $T = 0$ K.

$$\left[\, N = V \int_{E_1}^{E_2} D(E)dE \,\right]$$

4.13 Odvoďte vzťah pre celkovú energiu elektrónového plynu v základnom stave (pri teplote $T = 0$ K).

$$\left[\, E_{\text{celk}} = V \int_0^{E_F^0} D(E) E\, dE = \frac{3}{5} N E_F^0 \,\right]$$

4.14 Vypočítajte strednú hodnotu energie pripadajúcu na 1 elektrón v kove pri $T = 0$ K.

$$\left[\, \overline{E} = \frac{3}{5} E_F^0 \,\right]$$

4.15 Nech energia elektrónu $E = E_F + \delta$. Ukážte, pre ľubovolné δ platí:
$f_F(\delta) = 1 - f_F(-\delta)$,
kde $f_F(\delta)$ je hodnota Fermi-Dirakovej rozdeľovacej funkcie pre energiu $E = E_F + \delta$.

4.16 Aké sú pravdepodobnosti toho, že pri teplote miestnosti (kT = 0,025 eV) elektrón obsadí stav ležiaci o 0,1 eV nad, resp. pod Fermiho hladinou?

[≈ 1.8 % , resp. ≈ 98.2 %]

4.17 Aká je pravdepodobnosť toho, že v kove bude elektrón s energiou, ktorá sa rovná Fermiho energii?

[p = 0,5 - pri ľubovolnej teplote]

4.18 Odvoďte súvis medzi koncentráciou elektrónov v kove n a jeho Fermiho energiou E_F pri ľubovolnej teplote T.

$$\left[\; n = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty \frac{E^{1/2}}{e^{\frac{E-E_F}{kT}}+1}\,dE \;\right]$$

4.19 Odvoďte približný vzťah pre teplotnú závislosť Fermiho energie v kovoch.

$$\left[\; E_F(T) \approx E_F^0\left\{1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{kT}{E_F^0}\right)^2\right\} \;\right]$$

4.20 Pri absolútnej nule teploty je Fermiho energia pre meď rovná 7,04 eV. Určite hodnotu Fermiho energie pri izbovej teplote (T = 300 K).
(Pozn.: K riešeniu použite výsledok príkladu 4.19.)

[E = 7,03994 eV]

4.21 Odvoďte súvis medzi koncentráciou elektrónov v kove n a hodnotou Fermiho energie pre nedegenerovaný elektrónový plyn.

$$\left[\; n = 2\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_F}{kT}} \;\right]$$

b) Elektrické vlastnosti polovodičov

4.22 Vypočítajte rezistivitu (merný odpor) polovodiča z germánia typu P pri koncentrácií dier n_p = 3.10^{20} m^{-3}. Výsledok porovnajte s rezistivitou polovodiča typu N pri tej istej koncentrácií elektrónov. Pohyblivosť elektrónov je μ_e = 0,38 m^2/Vs a dier μ_d = 0,18 m^2/Vs.

$$\left[\; \rho_p = \frac{1}{n_p e \mu_p},\quad \rho_n = \frac{1}{n_e e \mu_e},\quad \rho_p = 0{,}115\ \Omega\text{m},\quad \rho_e = 0{,}055\ \Omega\text{m} \;\right]$$

4.23 Rezistivita vlastného polovodiča Ge pri teplote 27 °C je ρ = 0,47 Ωm. Za predpokladu, že pohyblivosť elektrónov je μ_e = 0,38 m^2/Vs a pohyblivosť dier μ_d = 0,18 m^2/Vs, vypočítajte hustoty nositeľov prúdu pri teplote 27 °C.

$$\left[\; n_e = n_p = \frac{1}{\rho e(\mu_e+\mu_p)},\quad n_e = n_p = 2{,}4.10^{19}\ \text{m}^{-3} \;\right]$$

4.24 Určite konduktivitu germánia, ktoré obsahuje indium s koncentráciou N_{In} = 2.10^{22} m^{-3} a antimón s koncentráciou N_{Sb} = 1.10^{21} m^{-3}, za predpokladu, že všetky atómy prímesí sú ionizované.

$$\left[\sigma = e(N_{In}-N_{Sb})\mu_p,\quad \rho = 546\,(\Omega\text{m})^{-1}\right]$$

4.25 Vypočítajte driftovú rýchlosť elektrónov a dier v germániu pri izbovej teplote v elektrickom poli s intenzitou $E = 1000\ \mathrm{Vm^{-1}}$.
($\mu_\mathrm{e} = 0{,}38\ \mathrm{m^2/Vs}$, $\mu_\mathrm{d} = 0{,}18\ \mathrm{m^2/Vs}$)

[$v_{\mathrm{d,e}} = 380\ \mathrm{ms^{-1}}$, $v_{\mathrm{d,p}} = 180\ \mathrm{ms^{-1}}$]

4.26 Vzorka polovodiča pravouhlého tvaru o rozmeroch 0,2 cm x 0,2 cm a hrúbke $h = 0{,}05$ cm má $n = 10^{21}$ voľných nábojov v 1 $\mathrm{m^3}$ pri 20 °C. K dvom protiľahlým úzkym stranám je priložené napätie $U = 20$ V. Vypočítajte intenzitu prúdu ak pohyblivosť nosičov prúdu je $\mu = 0{,}03\ \mathrm{m^2V^{-1}s^{-1}}$.

$$\left[I = ne\mu Uh\,, \quad I = 4{,}8.10^{-2}\,\mathrm{A} \right]$$

4.27 Vzorka germánia typu N o hrúbke $h = 1$ mm s koncentráciou elektrónov $n = 10^{20}\ \mathrm{m^{-3}}$ je umiestnená v magnetickom poli s indukciou $B = 0{,}1\ \mathrm{Wb/m^2}$. Určite Hallove napätie pri prúde 1 mA, ktorý preteká vzorkou.

$$\left[U = \frac{1}{ne}\frac{IB}{h}\,, \quad U = 6.10^{-3}\,\mathrm{V} \right]$$

4.28 Konduktivita arzenidu india je $\sigma = 4.10^2\ \Omega^{-1}\mathrm{m^{-1}}$ a jeho Hallova konštanta $R = 10^{-2}\ \mathrm{m^3/C}$. Za predpokladu, že vodivosť spôsobujú iba náboje jedného znamienka, určite ich koncentráciu a pohyblivosť.

[$n = 6.10^{20}\ \mathrm{m^{-3}}$, $\mu = 4\ \mathrm{m^2V^{-1}s^{-1}}$]

4.29 Rezistivita monokryštálu kremíka typu P pri izbovej teplote (300 K) je $\rho = 9.10^{-4}\ \Omega\mathrm{m}$. Čomu sa rovná Hallova konštanta, ak pohyblivosť dier je $\mu = 0{,}04\ \mathrm{m^2V^{-1}s^{-1}}$?

$$\left[R = \rho\mu_\mathrm{p}\,, \quad R = 3{,}6.10^{-5}\ \mathrm{m^3C^{-1}} \right]$$

4.30 Hallova konštanta polovodiča je $R = -\,3{,}66.10^{-4}\ \mathrm{m^3/C}$ a rezistivita $\rho = 8{,}93.10^{-3}\ \Omega\mathrm{m}$. Pre určenie Hallovho javu je vzorka vložená do magnetického poľa s magnetickou indukciou $B = 0{,}5\ \mathrm{Wb/m^2}$. Vypočítajte Hallov uhol.

$$\left[\mathrm{tg}\Theta = -\frac{BR}{\rho}\,, \quad \Theta = 1°10' \right]$$

4.31 Odvoďte všeobecný výraz pre Hallovu konštantu polovodiča. Ako sa zjednoduší tento výraz pre vlastný polovodič?

$$\left[R = \frac{1}{e}\frac{p\mu_\mathrm{p}^2 - n\mu_\mathrm{e}^2}{\left(p\mu_\mathrm{p} + n\mu_\mathrm{e}\right)^2}\,, \quad \text{pre vlastný polovodič } n = p = n_i \ \Rightarrow\ R = \frac{1}{en_i}\frac{\mu_\mathrm{p} - \mu_\mathrm{e}}{\mu_\mathrm{p} + \mu_\mathrm{e}} \right]$$

4.32 Vypočítajte Hallovu konštantu pre kryštál germánia s koncentráciou india $N_\mathrm{a} = 10^{23}\ \mathrm{m^{-3}}$ a antimónu $N_\mathrm{d} = 10^{24}\ \mathrm{m^{-3}}$.

$$\left[R = -\frac{1}{e\left(N_\mathrm{d} - N_\mathrm{a}\right)}\,, \quad R = 7.10^{-6}\ \mathrm{m^3C^{-1}} \right]$$

4.33 Určite polohu Fermiho hladiny pri teplote 27 °C pre vlastný polovodič InSb, ak šírka zakázaného pásma je rovná 0,2 eV a pomer efektívnych hmotností diery a elektrónu je 20.

$$\left[E_{\mathrm{F}} = -\frac{\Delta E}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \frac{m_{\mathrm{p}}^{*}}{m_{\mathrm{e}}^{*}} \,, \quad E_{\mathrm{F}} = -0{,}042 \text{ eV} \right]$$

4.34 Vzorka germánia obsahuje 10^{23} m^{-3} atómov antimónu. Za predpokladu, že pri izbovej teplote sú všetky atómy antimónu ionizované, vypočítajte koncentráciu elektrónov n a dier p.

$$\left[n = N_{\mathrm{d}} = 10^{23} \text{ m}^{-3} \,, \quad p = \frac{4\left(2\pi m_{\mathrm{e}} kT\right)^{3} e^{-\frac{\Delta E}{kT}}}{n h^{6}}, \quad p = 6{,}2.10^{14} \text{m}^{-3} \right]$$

4.35 Vypočítajte rezistivitu vzorky germánia z príkladu 4.34 , ak pohyblivosť elektrónov je $\mu_{\mathrm{e}} = 0{,}38$ m^2/Vs a pohyblivosť dier $\mu_{\mathrm{d}} = 0{,}18$ m^2/Vs .

$$\left[\rho = \frac{1}{ne\mu_{\mathrm{e}} + pe\mu_{\mathrm{d}}} , \quad \rho = 1{,}67.10^{-2} \ \Omega\mathrm{m} \right]$$

4.36 Vypočítajte polohu Fermiho hladiny v germániu pri teplote 500 K ak koncentrácia prímesí je a) 10^{23} atómov In v 1 m^3 , b) 10^{22} atómov Sb v 1 m^3 (všetky atómy prímesí sú ionizované).

a) $$\left[E_{\mathrm{F}} = kT \ln \frac{N_{\mathrm{d}} h^{3}}{2\left(2\pi m_{\mathrm{e}}^{*} kT\right)^{\frac{3}{2}}} \,, \quad E_{\mathrm{F}} = -0{,}28 \text{ eV} \right]$$

b) $$\left[E_{\mathrm{F}}' = kT \ln \frac{N_{\mathrm{a}} h^{3}}{2\left(2\pi m_{\mathrm{p}}^{*} kT\right)^{\frac{3}{2}}} \,, \quad E_{\mathrm{F}}' = -0{,}34 \text{ eV} \right]$$

4.37 Koncentrácia akceptorov v polovodiči je $N_{\mathrm{a}} = 10^{18}$ cm^{-3}. Energetická hladina týchto akceptorov sa nachádza o 0,5 eV nad vrcholom valenčného pásma. Vypočítajte konduktivitu polovodiča pri izbovej teplote (300 K) a pri teplote kvapalného kyslíka (90 K), ak pohyblivosť dier vo valenčnom pásme kryštálu je $\mu_{\mathrm{p}} = 100$ cm^2/Vs a $m_{\mathrm{p}}^{*} = m_{\mathrm{e}}$. Zanedbajte vlastnú vodivosť polovodiča.

$$\left[\begin{array}{l} \sigma = pe\mu_{\mathrm{p}} = \left(2N_{\mathrm{a}}\right)^{\frac{1}{2}} e\mu_{\mathrm{p}} \left(\dfrac{2\pi m_{\mathrm{p}}^{*} kT}{h^{2}} \right)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{\Delta E_{\mathrm{a}}}{2kT}} , \\ \sigma_{300} = 1{,}95.10^{-2} \ \Omega^{-1}\mathrm{m}^{-1}, \qquad \sigma_{90} = 3{,}6.10^{-11} \ \Omega^{-1}\mathrm{m}^{-1} \end{array} \right]$$

4.38 Vypočítajte koncentráciu vlastných nosičov prúdu v germániu, ktoré obsahuje 5.10^{23} atómov arzénu v 1 m^3 pri izbovej teplote.
($m_{\mathrm{e}}^{*} = 0{,}412\, m_{\mathrm{e}}$, $m_{\mathrm{p}}^{*} = 0{,}216\, m_{\mathrm{e}}$, šírka zakázaného pásma pre Ge - $\Delta E = 0{,}66$ eV .)

$$\left[\quad n_i = \frac{2\left(2\pi\sqrt{m_e^* m_p^*}\,kT\right)^{\frac{3}{2}}}{h^3} e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}, \quad n_i = 2.10^{19}\ \mathrm{m^{-3}} \quad\right]$$

4.39 Hallova konštanta polovodiča typu N má pri 100 K hodnotu R = 0,28.10^{-2} m^{3}C^{-1}. Vypočítajte hustotu elektrónov a donorov ak sa jedná o kremík a zanedbávame príspevok valenčného pásma ($m_e^* = 1{,}129\ m_e$, ionizačná energia donorov $\Delta E_d = 0{,}04\ \mathrm{eV}$).

$$\left[\quad n = \frac{r_H}{Re}, \quad N_d = \frac{n^2 e^{\frac{\Delta E_d}{kT}}}{2\left(\frac{2\pi m_e^* kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}}, \quad n \approx 2{,}2.10^{21}\ \mathrm{m^{-3}},\ N_d \approx 10^{22}\ \mathrm{m^{-3}}\ \left(\text{pre } r_H \approx 1\right) \quad\right]$$