Pismeni ispit iz OFČS - 23. travnja 2004.

Zadatak 1. Kristal vustita (fero-oksid) uvijek je ima nestehiometrijski sastav. Npr. jedan uzorak ima omjer sadržaja Fe:O jednak 0,945:1, a gustoća mu je 5,728 10^3 kg m^{-3}. Odrediti da li je nestehiometričnist rezultat postojanja vakancija željeza ili kisikovih intersticijskih defekata. Jedinična ćelija FeO je plošno centrirana kubična rešetka s konstantom rešetke a= 4,3 Å kao i u kuhinjske soli.

(1 amu = 1,66 10^{-27} kg, M_O = 16,00 amu, M_{Fe} = 55,85 amu)

Rješenje: Odredimo gustoću za točno stehiometrijski sastav. Ako se radi o plošno centriranoj kubičnoj rešetci, onda elementarna ćelija sadrži 4 iona kisika i 4 iona željeza. Ukupna masa elementarne ćelije je:

$$M = 4 \cdot (55,85 + 16,00) \cdot 1,66\, 10^{-27}\text{kg} = 4,771\ 10^{-27}\text{kg},$$

pa je gustoća:

$$\rho = \frac{M}{a^3} = \frac{4,771\ 10^{-27}\text{kg}}{4,3^3\ 10^{-30}\ \text{m}^3} = 6000,53\text{kg/m}^3$$

Ako bi realni uzorak imao viška kisika na intersticijskim položajima, onda bi njegova gustoća sigurno bila veća od gustoće navedenog uzorka. Stoga, očito je da je nestehiometričnost rezultat postojanja vakancija željeza.

Zadatak 2.

Gustoća elektronskih stanja u nekom metalu može se opisati ovom funkcijom:

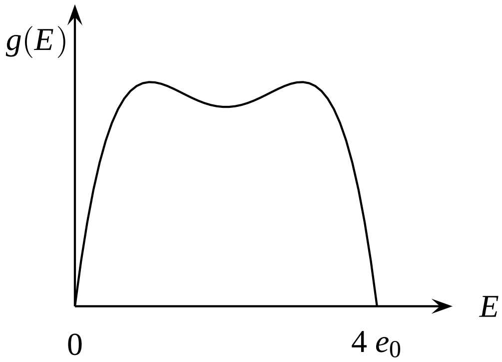
$$g(E) = \frac{g_0}{e_0^5}\left[E\ (4\ e_0 - E)\ (E^2 - 4\ e_0\ E + 6\ e_0^2)\right],$$

gdje je e_0 jednako 1 eV, a g_0 = 0,335 10^{28} m^{-3}.

a) Nacrtati (skicirati) gustoću stanja kao funkciju elektronske energije !
b) Ako je Fermijeva energija E_F jednaka 2 eV, izračunati koncentraciju elektrona.
c) Izračunati prosječnu elektronsku energiju na temperaturi T = 0.
d) Naći izraz za toplinski kapacitet C_V u granici malih temperatura $k_B T \ll E_F$.

Rješenje:

a) Gustoća stanja $g(E)$ je funkcija različita od nule samo u području između $E = 0$ i $E = 4\ e_0$. Deriviranjem se može ustanoviti da ima dva maksimuma, u točkama $E = e_0$ i $E = 3\ e_0$ simetrično raspoređena oko minimuma u $E = 2\ e_0$.



b) Koncentracija elektrona je:

$$\begin{aligned}
ZN &= \int_0^{2e_0} dE\ g(E) = \frac{g_0}{e_0^5} \int_0^{2e_0} dE\ (24\ e_0^3\ E\ -\ 22\ e_0^2\ E^2\ +\ 8\ e_0\ E^3\ -\ E^4) \\
&= \frac{g_0}{e_0^5} \left(12\ e_0^3 \cdot 4\ e_0^2\ -\ \frac{22}{3}\ e_0^2 \cdot 8\ e_0^3\ +\ 2\ e_0 \cdot 16\ e_0^4\ -\ \frac{1}{5}\ 32\ e_0^5 \right) \\
&= g_0\ \frac{224}{15} = 0,335\ 10^{28}\ \mathrm{m}^{-3} \cdot \frac{224}{15} = 5,0\ 10^{28}\ \mathrm{m}^{-3}
\end{aligned}$$

c) Ukupna elektronska energija (koncentracija) na T = 0 je jednaka:

$$\begin{aligned}
U &= \int_0^{2e_0} dE\ E\ g(E) = \frac{g_0}{e_0^5} \int_0^{2e_0} dE\ E\ (24\ e_0^3\ E\ -\ 22\ e_0^2\ E^2\ +\ 8\ e_0\ E^3\ -\ E^4) \\
&= \frac{g_0}{e_0^5} \left(8\ e_0^3 \cdot 8\ e_0^3\ -\ \frac{11}{2}\ e_0^2 \cdot 16 e_0^4\ +\ \frac{8}{5}\ e_0\ \cdot 32 e_0^5\ -\ \frac{1}{6}\ 64 e_0^6 \right) \\
&= g_0\ e_0\ \frac{248}{15}.
\end{aligned}$$

Podjelivši ukupnu energiju s koncentracijom, dobivamo prosječnu energiju po čestici:

$$\overline{E} = \frac{U}{ZN} = \frac{31}{28}\ e_0 = 1,11\ eV.$$

d) Toplinski kapacitet u granici niskih temperatura općenito je dan ovim izrazom:

$$C_V = \frac{\pi^2}{3}\ \mathrm{k}_B^2\ g(E_F)\ \mathrm{T},$$

što uvrštavanjem izraza za gustoću stanja na Fermijevom novou daje:

$$\begin{aligned}
C_V &= \frac{\pi^2}{3}\ \mathrm{k}_B^2\ \frac{g_0}{e_0^5}\ \mathrm{T} = \frac{g_0}{e_0^5}\ e_0^4 (24 \cdot 2 - 22 \cdot 4 + 8 \cdot 8 - 1 \cdot 16) = \\
&= \frac{8\pi^2}{3} g_0\ \frac{\mathrm{k}_B^2 \mathrm{T}}{e_0}
\end{aligned}$$

Zadatak 3.

Polazeći od općeg izraza za broj čestica:

$$N_e = \int dE\ g(E)\ \rho(E),$$

izračunati broj elektrona u vodljivoj vrpci nekog poluvodiča, uz uvjete da

(i) *dno* vodljive vrpce odgovara energiji $E = 0$,

(ii) kemijski potencijal μ je negativan i po iznosu je puno veći od temperature: $|\mu| \gg \mathrm{k}_B\mathrm{T}$ i

(iii) da je gustoća stanja $g(E)$ dana približno Sommerfeldovim izrazom za slobodne elektrone, korigiranim s efektivnom masom koju elektroni u stvari imaju u vodljivoj vrpci.

$$\left(\int_0^\infty dx\ \sqrt{x}\ e^{-x} = \sqrt{\pi}/2 \right)$$

Rješenje:

Gustoća stanja po pretpostavci *(iii)* je:

$$g(E) = \frac{m^{\star 3/2}}{\pi^2 \hbar^3}\ \sqrt{2E},$$

a Fermi-Diracova funkcija raspodjele je:

$$\rho(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \approx e^{-\beta(E-\mu)},$$

budući da je za sve $E > 0$ vrijedi (pretpostavka *(ii)*):

$$e^{\beta(E-\mu)} \gg 1.$$

Prema tome broj čestica u vodljivoj vrpci je:

$$\begin{aligned} N_e &= \frac{m^{\star 3/2}}{\pi^2 \hbar^3}\ \sqrt{2} \int_0^\infty dE\ \sqrt{E}\ e^{-\beta(E-\mu)} = \frac{m^{\star 3/2}}{\pi^2 \hbar^3}\ \sqrt{2}\ (\mathrm{k}_B\mathrm{T})^{(3/2)}\ e^{\beta\mu} \int_0^\infty dx\ \sqrt{x}\ e^{-x} \\ &= \frac{2}{h^3}\ (2\pi\ m^\star\ \mathrm{k}_B\mathrm{T})^{(3/2)}\ e^{\beta\mu} = \frac{2}{h^3}\ (2\pi\ m^\star\ \mathrm{k}_B\mathrm{T})^{(3/2)}\ e^{-\beta|\mu|} \end{aligned}$$