МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ ТА НАУКИ УКРАЇНИ КРИВОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ КАФЕДРА ФІЗИКИ ТА МЕТОДИКИ ЇЇ НАВЧАННЯ

Практичний курс з фізики твердого тіла для фізичних спеціальностей педагогічних університетів (задачі з розв'язаннями та лабораторні роботи)

Укладач:

доктор фізико-математичних наук, доцент

Балабай Р. М.

Кривий Ріг

УДК 530.1

Балабай Р.М.

Практичний курс з фізики твердого тіла для фізичних спеціальностей педагогічних університетів (задачі з розв'язаннями та лабораторні роботи). – Кривий Ріг: Криворізький державний педагогічний університет, 2018, 76 с.

У навчальному посібнику наведені задачі по розділам курсу фізика твердого тіла, їх докладні розв'язання та тексти лабораторних робіт.

Посібник розрахований на студентів фізико-математичних факультетів педагогічних університетів, а також студентів фізичних спеціальностей вищих навчальних закладів.

Рецензенти: В.М. Здешиц, доктор техн. наук, професор кафедри фізики та методики її навчання; О.А. Коновал, доктор педагогічних наук, завідувач кафедри фізики та методики її навчання.

ПЕРЕДМОВА

На сьогодні у всіх технічних, класичних та педагогічних університетах, що мають фізико-математичні та фізичні факультети, в навчальні програми включена фізика твердого тіла. Іноді це курс фізики твердого тіла (ФТТ) як такий, іноді його окремі розділи, наприклад фізика напівпровідників, металофізика, іноді окремі розділи ФТТ включаються до кусів електроніки, електротехніки, радіотехніки, матеріалознавства тощо.

У численній навчальній літературі з фізики література з ФТТ займає значне місце. В епоху розвитку інформаційних технологій це цілком природно, оскільки ФТТ є їх теоретичною основою. До тематики ФТТ відноситься нині більше половини усіх фізичних досліджень, що проводяться, та відповідна доля оригінальних наукових публікацій.

Курси лекцій у вищих навчальних закладах звичайно супроводжуються семінарськими заняттями (у кращому випадку семінарськими та лабораторними заняттями), на яких вирішуються задачі, виконуються вправи, і які мають за мету засвоєння та поглиблення лекційного матеріалу. Однак у випадку ФТТ цей необхідний елемент навчального процесу досить бідно забезпечений літературою. Хоча вправи та задачі присутні в багатьох підручниках по ФТТ, але звичайно вони пристосовані спеціально до змісту курсу, котрий лежить в основі підручника, і не знімають потреби у збірнику практичних завдань більш універсального призначення. У задачниках з загальної фізики задачі по ФТТ звичайно відсутні.

Пропонуємо посібник, в якому зібрані задачі, котрі розв'язувалися на протязі ряду років на практичних заняттях з курсу фізика конденсованих середовищ в Криворізькому державному педагогічному університеті, та охоплюють теми згідно програми цього курсу для педагогічних університетів, затвердженій Міністерством освіти та науки України.

Посібник складається із 33 задач з розв'язаннями та текстів 3 лабораторних робіт. При складанні і підборі задач керівними мотивами були: зв'язок з теорією, що пропонувалася в лекційній частині курсу; послідовність в змінах

тем; доступність в розумінні. Пропонована кількість задач та розробок лабораторних робіт обумовлена кількістю годин у робочій програмі курсу.

У збірнику охоплена частина з основних розділів ФТТ як із боку властивостей (електричні, магнітні, енергетичні, оптичні, пружні), так із боку типів твердих тіл (діелектрики, напівпровідники, метали). Крім того, відображені такі суттєво важливі розділи, як кристалографія, процеси росту кристалів, роль дефектів. Звичайно, бажалось би присутність у збірнику задач з більш широкою тематикою, але наявність у ньому ґрунтовних розв`язувань, що містять багато додаткової корисної інформації, надає збірнику позитивні якості.

При складанні цього посібника були використані підручники, учбові посібники та збірники задач, список яких наведений в кінці посібника.

3MICT

Задача 1. Вивести рівняння, яке описує розподіл розчиненої речовини в	8
злитку після проходження в ньому зони розплаву	
Задача 2. Довести, що із трансляційною симетрією, властивою	12
кристалам, можуть співіснувати поворотні осі тільки 1, 2, 3, 4, 6	
порядків	
Задача 3. Розрахувати кут в між двома кристалографічними	14
напрямками $[u_1v_1\omega_1]$ та $[u_2v_2\omega_2]$	
Задача 4. Визначити відрізки, які відсікає на осях кристалічної решітки площина (123)	14
Задача 5. Скільки площин типу {hkl} та {hk0} існує в кубічних	15
системах ?	
Задача 6. Показати, що напрям [hkl] в кубічній кристалографічній	16
системі є перпендикулярним до площини (hkl)	
Задача 7. Довести, що відстань d між двома сусідніми площинами типу	17
(hkl) в кубічній гратці з ребром а знаходиться за рівнянням:	
$d = \frac{a}{(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}}$	
Задача 8. Розрахувати період кристалічної решітки за відомими	17
хімічним складом кристалу і його структурою	
Задача 9. Визначити розміри і тип оберненої решітки для кубічної та	18
ОЦК решіток	
Задача 10. Від деякого кубічного кристалу, знятого на випромінюванні	20
міді $K_{\alpha}(\lambda = 1,542 \text{ Å})$, видні дифракційні лінії під кутом Брегга θ : 12,3;	
14,1; 20,2; 24,0; 25,1; 29,3; 32,2 та 33,1° (рис.1). Проіндицирувати ці	
лінії. Визначити, чи є решітка цього кристалу примітивною, ГЦК або	

ОЦК, та розрахувати довжину ребра гратки Задача 11. Для утворення вакансії в алюмінії потрібно енергії близько 0, 75 еВ. Скільки існує вакансій при кімнатній температурі у стані

5

термодинамічної рівноваги?

Задача 12. Розрахувати енергії зв'язку та рівноважного розділення іонів 25 у кристалі NaCl. Оцінити модуль пружності для кристалу NaCl

Задача 13. За температури нижче 24,5 К, Ne – це кристалічна тверда 28 речовина з ГЦК структурою з міжатомною взаємодією типу Ван дер Ваальса. Показати, що рівноважна відстань між атомами в кристалі інертного газу задається формулою $r_0 = (1,090) \sigma$. Яка рівноважна відстань, що розділяє атоми в кристалі Ne? Знайти енергію зв'язку на атом у твердому Ne. Обчислити густину твердого Ne

Задача 14. Розглянути залізо за температури нижче 912 °С, коли 31 структура елементарної комірки - ОЦК. Використовуючи значення густини заліза 7,86 г/см³ і його атомну масу 55,85 г/моль, обчислити параметр решітки і радіус атома Fe. При температурі 912 °С, залізо змінює структуру з ОЦК (α-Fe) на ГЦК (γ-Fe). Радіус Fe відповідно, змінюється від 0,1258 нм до 0,1291 нм. Обчислити густину γ-Fe і пояснити, спостерігається збільшення чи зменшення об'єму під час цієї зміни фази

Задача 15. Si має алмазоподібну, а GaAs має цинкоподібну кристалічну 32 структуру. Враховуючи параметри гратки для Si таGaAs, *a* = 0,543 нм, *a* = 0,565 нм, відповідно; і атомні маси Si, Ga та As, що дорівнюють 28,08 г/моль, 69,73г/моль і 74,92 г/моль, відповідно, розрахувати густину Si та GaAs. Якою є атомна концентрація (кількість атомів на одиницю об'єму) у кожному кристалі?

Задача 16. Якщо відомий параметр решітки для Si: *a* = 0,543 нм, 34 обчислити число атомів Si на одиницю об'єму (в нм³). Підрахувати число атомів на м² та на нм², що знаходяться в площинах (100), (110) і (111) у кристалі Si, котрі показані на рис. 1. Яка площина має найбільшу кількість атомів на одиницю площі? Густина SiO₂ складає 2,27 г/см³. Враховуючи, що його структура аморфна, обчислити число молекул в

одиниці об'єму (в нм³). Порівняти результат з отриманим для Si та прокоментувати, що станеться коли поверхня кристала Si окислиться. Атомні маси Si та O складають 28,09 г/моль і 16 г/моль, відповідно

Задача 17. Знайти показник степеню *n* у виразах для сил 38 відштовхування у рівнянні повної енергії $U(r) = N\varepsilon_i = -N(\frac{Ae^2}{r} - \frac{B}{r^n})$ для

кристалу NaCl

Задача 18. Зразок домішкового напівпровідникового кристалу р-типу 39 вирізано у вигляді прямокутного паралелепіпеду і розміщено в однорідне постійне магнітне поле з індукцією \vec{B} . Показати, що провідність зразка зменшується зі збільшенням магнітного поля Задача 19. Дослідити характер руху квазівільного електрона в 44 періодичному потенціалу кристалу

Задача 20. Експериментальне визначення енергетичних зон. Пояснити 50 метод спектроскопії м'яких рентгенівських променів

Лабораторна робота «Дослідження ефекту Холла у напівпровідниках» 53 *Лабораторна робота* «Пряме перетворення сонячної енергії в 58 електричну. Дослідження фотоелектричних перетворювачів енергії»

Лабораторна робота «Дослідження МДН–структур методом 65 височастотних вольт-фарадних характеристик» Література 75 Задача 1. Вивести рівняння, яке описує розподіл розчиненої речовини з коефіцієнтом агрегації k злитку довжиною L після проходження зони розплаву завдовжки l зі сталою швидкістю, якщо відомо, що початковий розподіл речовини у злитку був однорідним із концентрацією C_0 . Який ступінь очистки після перших десяти проходжень для речовини із k=0.1? Вважати, що $L \gg l$. Примітка: коефіцієнт агрегації або коефіцієнт розподілу домішок – це відношення концентрації домішок у кристалі і в рідкому середовищі.

Необхідні теоретичні відомості.

Кристалізація – утворення кристалів із пари, розчинів, розплавів, із речовини у твердому стані (аморфному чи іншому кристалічному), із електролітів у процесі електролізу, а також під час хімічних реакцій. Для кристалізації необхідне порушення термодинамічної рівноваги у так званому маточному середовищі – пересичення розчину чи пари, переохолодження розплаву і т. п. Пересичення чи переохолодження, які необхідні для кристалізації, характеризуються відхиленням температури, концентрації, тиску, електричного потенціалу між фазами від їх рівноважних значень.

Кристалізація – фазовий перехід речовини із стану перехолодженого (пересиченого) маточного середовища у кристалічну фазу з меншою вільної енергією. Надлишкова *тепломісткість* виділяється у вигляді прихованої теплоти кристалізації. Частина цієї теплоти може перетворитися у механічну роботу, виділення прихованої теплоти. Кристалізація призводить до нагрівання розплаву, зменшенню переохолодження та сповільненню кристалізації, яка закінчується вичерпуванням речовини чи досягненням рівноважних значень температури, концентрації та тиску.

При досягненні деякого граничного для даних умов критичного перехолодження в рідинах чи парі виникає безліч дрібних кристаликів, які називаються зародками кристалізації.

Критичне переохолодження залежить від температури, концентрації, складу речовини, її об'єму, від наявності у ній сторонніх частинок центрів

кристалізації, від матеріалу та стану поверхні стінок посудини, від інтенсивності перемішування, дії випромінювання та ультразвуку.

Об'єднання частинок у кристалічні агрегати зменшує вільну енергію системи, а поява нової поверхні збільшує. Чим менше агрегат, тим більша доля його частинок лежить на поверхні, тим більшою є роль поверхневої енергії. Тому зі збільшенням розміру агрегату робота A, яка необхідна для його утворення спочатку збільшується, а потім спадає (рис. 1). Агрегат, для якого робота утворення максимальна, називається *критичним зародком (r*_{кр}). Чим менша робота утворення зародку, тим вигідніша його поява. З цим пов'язане переважне зародження на сторонніх частинках на поверхнях твердих тіл, головним чином, на їх неоднорідностях, на їх дефектах (гетерогенне зародження). Гомогенне зародження в об'ємі чистої рідини чи газу можливе лише при досить глибоких переохолодженнях.



Рис. 1 Залежність роботи А, яка необхідна для утворення кристалічного агрегату, від його розміру г

Зі зниженням температури та з ростом переохолодження зменшується робота утворення зародку, але одночасно збільшується в'язкість рідини, а з нею падає частота приєднання нових частинок до кристалічних агрегатів. Тому залежність швидкості від температури має максимум (рис. 2). При низьких температурах рухливість частинок рідини настільки мала, що розплав твердне, залишаючись аморфним.



Рис.2. Залежність числа зародків кристалів гліцерину, які виникають в 1 см³ розплаву за одиницю часу, від температури; пунктирна ліній – для пиперину

Найпростіша форма росту кристалів — багатогранник, причому розміри окремих граней сильно залежать від умов росту. Звідси — пластинчастості, голчасті, ниткоподібні та інші форми кристалів.

Домішки, які містяться в маточному середовищі входять до складу кристалу. Кількість захоплених домішок залежить від швидкості росту кристалів. Якщо кристал погано захоплює домішки, їх надлишок скупчується перед фронтом росту. На цьому заснований метод очистки кристалу, який називається *зонною плавкою*.

Розв'язок.

Швидкість зміни концентрації розчиненої речовини у зоні розплаву описується виразом:

$$\frac{d}{dt}(lC_L) = C_m V_m - C_f V_f \tag{1},$$

де C_L, C_m, C_f – концентрації розчиненої речовини у розплаві, в розплавленому твердому тілі і щойно закристалізованому твердому тілі ($C_f = kC_L$); V_m, V_f – швидкості руху поверхні розділення, що розчиняється, та поверхні розділення, що твердне. Далі, очевидно:

$$\frac{dl}{dt} = V_m - V_f \tag{2}$$

I, якщо V_m та V_f сталі, то $l(t) = l(0) + (V_m - V_f)t$. Звідси згідно рівнянню (1):

$$l\frac{dC_{L}}{dt} + C_{L}(V_{m} - V_{f}) = C_{m}V_{m} - C_{f}V_{f};$$

$$\frac{dC_{L}}{dt} = \frac{C_{m}V_{m} - (V_{m} - (1 - k)V_{f})C_{L}}{l(0) + (V_{m} - V_{f})t}$$
(3).

Розділимо змінні в останньому рівнянні:

$$\frac{dC_L}{C_m V_m - (V_m - (1 - k)V_f)C_L} = \frac{dt}{l(0) + (V_m - V_f)t}$$

після його інтегрування отримуємо:

$$\frac{1}{V_m - (1-k)V_f} \ln \frac{C_m V_m - (V_m - (1-k)V_f)C_L}{C_m V_m - (V_m - (1-k)V_f)C_0} = -\int \frac{dt}{l(0) + (V_m - V_f)t} \quad (4),$$

де C_0 –концентрація у розплавленій зоні при t = 0. Для зони зі сталою довжиною l(t) = l(0), тобто $V_m = V_f$, тоді рівняння (4) перепишеться у вигляді:

$$\frac{c_f}{c_0} = 1 - (1 - k) \exp\left(-\frac{kx}{l}\right) \tag{5},$$

де $C_0 = C_m = const$ (початковий однорідний розподіл) та x = Vt-відстань вздовж злитка, що відрахована від кінця звідки почався процес.

Рівняння (5) буде справедливим до тих пір, поки поверхня розплаву не досягне кінця злитка. Тоді остання зона буде поступово тверднути (так зване ,,нормальне затвердіння "), і розподіл домішки у цій області буде задаватись розв'язком рівняння (4) при, $V_m = 0$.

Середній ступінь очистки при перших *n* зонних проходженнях виражається як

$$\overline{C}/C_0$$
, $\exists e \ \overline{C} = \frac{1}{nl} \int_0^{nl} C_f(x) dx = C_0 \left\{ 1 - \frac{1-k}{kn} \left[1 - e^{-kn} \right] \right\}$.

Якщо n = 10, а k = 0.1, то $\frac{\bar{c}}{c_0} = 0.41309$.

Задача 2. Довести, що із трансляційною симетрією, властивою кристалам, можуть співіснувати поворотні осі тільки 1, 2, 3, 4, 6 порядків.

Доведення.

Існують багато доказів цього фундаментального положення кристалографії. Наведемо деякі із них.

Розглянемо низку атомів, відстань між якими рівна *a* (рис. 1), а осі симетрії порядку "n" є перпендикулярними до площини рисунка і за наявності трансляційної симетрії проходить через точки A, A₁, A₂, A₃... Поворот точок A, A₁, A₂, A₃... на кут $\varphi = \frac{2\pi}{n}$ приведе до їхнього змішення в положення B,

В₁, В₂, ... відповідно.



Рис. 1. До виведення можливих осей симетрії

3 факту існування трансляційної симетрії випливає, що відстань B₁B₂ повинна бути кратною довжині трансляції, тобто величині *a*. 3 рис.1 бачимо, що: $B_1B_2 = a - 2a\cos\varphi = Na$ (1), Звідки: $\cos\varphi = \frac{(1-N)}{2}$ (2).

Оскільки $|\cos \varphi| \le 1$, то з рівності (2) випливає, що N може приймати тільки значення: -1,0,1,2,3, яким відповідають кути $\varphi = 0,60^{\circ},90^{\circ},120^{\circ}$ та 180°. Це означає, що з трансляційною симетрією сумісні осі 1,2,3,4 та 6-го порядку.

Інше доведення ґрунтується на принципі щільної укладки кристалів: укладка кристалів повинна бути такою, щоб заповнюваний елементарними комірками простір не мав пустот. У двовимірному випадку цей принцип реалізується так: пошук правильних багатокутників, якими можна покрити повністю площину. Очевидно, площину можна покрити іншою площиною (n=1) або двома півплощинами (n=2). Для інших багатокутників умову повного покриття площини такими фігурами записують у вигляді: $\left(\pi - \frac{2\pi}{n}\right)m = 2\pi$ (3), де $\pi - \frac{2\pi}{n}$ –величина внутрішнього кута багатокутника, m –кількість багатокутників, які сходяться в одній вершині.

Останню рівність можна записати у вигляді: (m-2)(n-2) = 4 (4). Аналіз рівняння (4) показує, що його розв'язок можливий при таких комбінаціях як *m* та **n**:

$$m = 3$$
 Ta $n = 6; m = 4$ Ta $n = 4; m = 6$ Ta $n = 3$ (5).

З цього випливає, що площину повністю можна покрити тільки правильними шестикутниками, квадратами та трикутниками. Їм відповідають осі 3, 4 та 6 порядків (а також 1-го та 2-го порядків, які відповідають вищеозначеним двом випадкам).

Доведення Барлоу (1901).



Рис. 2. До доведення неможливості існування вісі симетрії п'ятого порядку

На рис. 2 А' – вихід вісі симетрії n-го порядку, В –ближчий до нього вихід вісі симетрії того ж порядку n. Так як В володіє обертальною симетрією n –го порядку, то повинна існувати точка А' така, що кут ABA' = $2\pi/n$. Точно також існує точка B', тому що A' (симетрична точці A) має обертальну симетрію n –го порядку. Якщо n = 5, то $2\pi/n = 72^{\circ}$ та BA' < BA, що заперечує умові, відповідно якому В –точка, найближча до A. Якщо n > 6, то $2\pi/n < 60^{\circ}$ та BA' < BA, тобто приходимо до того ж протиріччя. Можливими значеннями n є

тільки n = 2 (пряма лінія), n = 3 (показана на рис. 2), n = 4 (квадрат), n = 6 (рівносторонній трикутник).

Задача 3. Розрахувати кут θ між двома кристалографічними напрямками $[u_1v_1\omega_1]$ та $[u_2v_2\omega_2]$.

Розв'язок.

Скориставшись правилом позначення напрямків в кристалі, котре наголошує, що для цього застосовується набір найменших цілих чисел, які відносяться між собою, як компоненти вектора, паралельного даному напрямку у відповідній системі координат, будемо вважати дані кристалографічні напрямки векторами, що задані своїми координатами. Згадавши правила обчислення скалярного добутку двох векторів $1 \cdot 2 = u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2$ та $1 \cdot 2 = (u_1^2 + v_1^2 + w_1^2)^{1/2} \cdot (u_2^2 + v_2^2 + w_2^2)^{1/2} \cdot \text{Соз}\theta$, визначимо з цих рівнянь:

$$\cos\theta = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + \omega_1 \omega_2}{(u_1^2 + v_1^2 + \omega_1^2)^{1/2} (u_2^2 + v_2^2 + \omega_2^2)^{1/2}}$$

Задача 4. Визначити відрізки, які відсікає на осях кристалічної решітки площина (123).

Необхідні теоретичні відомості.

До визначення індексів Міллера площини.

Позначимо відрізки, які площина відсікає на вісях решітки як A, B, C. Рівняння такої площини має вид: $\frac{x}{A} + \frac{y}{B} + \frac{z}{c}$, де x, y, z –координати точки, що лежить у цій площині. Якщо площина проходе крізь вузли решітки, а лише така площина має інтерес, то координати вузлів повинні задовольняти рівнянню (1):

Вузол 1 (
$$x_1 = m_1 a$$
; $y_1 = n_1 b$; $z_1 = p_1 c$),

Вузол 2 $(x_2 = m_2 a ; y_2 = n_2 b ; z_2 = p_2 c)$,

$$\frac{m_2 a}{A} + \frac{n_2 b}{B} + \frac{p_2 c}{c} = 1,$$
(1)
$$\frac{m_1 a}{A} + \frac{n_1 b}{B} + \frac{p_1 c}{c} = 1$$

Так як m, n, p —цілі або раціональні числа, тоді рівність (1) можливе лише при умові, що $\frac{a}{A}$, $\frac{b}{B}$, $\frac{c}{c}$ раціональні числа, відношення яких можна замінити відношенням трьох цілих чисел h, k, l: $\frac{a}{A} : \frac{b}{B} : \frac{c}{c} = h: k: l$. Це робиться приведенням дробів до спільного знаменнику. Нехай таким буде D. Тоді цілі числа $\frac{Da}{A}$, $\frac{Db}{B}$, $\frac{Dc}{c}$ і представляють собою індекси площини h, k, l. Звідси випливає, що відрізки відсічні площиною на осях решітки, виражаються через індекси цієї площини так: $A = \frac{Da}{h}, B = \frac{Db}{k}, C = \frac{Dc}{l}$.

За одиницю вимірювань довжин вздовж осей решітки прийняти параметри решітки, то відрізки відсічні на осях площиною (*hkl*) виражаємо:

$$A = \frac{\mathsf{D}}{\mathsf{h}}, B = \frac{\mathsf{D}}{\mathsf{k}}, C = \frac{\mathsf{D}}{\mathsf{l}}.$$

Розв'язок.

Описуємо величини, обернені індексам площини: 1/1, 1/2, 1/3. Загальний знаменник 6. Тому A=6, B=3, C=2.

Задача 5. Скільки площин типу $\{hkl\}$ та $\{hk0\}$ існує в кубічних системах ?

Розв'язок.

Розміщення з **n** елементів по *k* позиціям (комбінації відрізняється або елементами, або їх порядком) обчислюється за формулою: $A_n^k = \frac{n!}{(n-k)!}$.

Для площин типу {*hkl*} n=6, k=3, для площин типу {*hk0*} n=5, k=3.

Задача 6. Показати, що напрям [hkl] в кубічній кристалографічній системі є перпендикулярним до площини (hkl).

Розв'язок.

Рис. 1 (а) показує [hkl] напрям, позначений як **ON**, і площину (hkl) в кубічному кристалі. \mathbf{u}_x , \mathbf{u}_y та \mathbf{u}_z – одиничні вектори вздовж осей координат *x*, *y*, *z*. Для кубічної решітки координатами є декартові координати й тому $\mathbf{u}_x \mathbf{u}_x = 1$, а також $\mathbf{u}_x \mathbf{u}_y = 0$ і т. д., *a* - параметр решітки.



Рис. 1. Кристалографічні напрямки і площини

З означення індексів Міллера ($h = 1/x_1$, $k = 1/y_1$, $l = 1/z_1$), площини перетинаються у точках:

$$x_o = ax_1 = a/h; y_o = ay_1 = a/k; z_o = az_1 = a/l.$$

Вектор **ОN** дорівнює:

$$\mathbf{ON} = ah\mathbf{u}_x + ak\mathbf{u}_y + al\mathbf{u}_z$$

Якщо **ON** перпендикулярний до площини (hkl), то добуток цього вектора з будь-яким вектором на площині (hkl) повинен дорівнювати нулю. Нам залишається тільки вибрати 2 непаралельних вектори (наприклад, **AB** i **BC**) у площині та показати, що їх скалярний добуток з вектором **ON** дорівнює нулю.

$$\mathbf{AB} = \mathbf{OB} - \mathbf{OA} = (a/k)\mathbf{u}_v - (a/h)\mathbf{u}_x$$

$$\mathbf{ON} \bullet \mathbf{AB} = (ah\mathbf{u}_x + ak\mathbf{u}_y + al\mathbf{u}_z) \bullet ((a/k)\mathbf{u}_y - (a/h)\mathbf{u}_x) = a^2 - a^2 = 0$$

Нагадаємо, що:

$$\mathbf{u}_x \mathbf{u}_x = \mathbf{u}_y \mathbf{u}_y = 1$$
 and $\mathbf{u}_x \mathbf{u}_y = \mathbf{u}_x \mathbf{u}_z = \mathbf{u}_y \mathbf{u}_z = 0$

Аналогічно:

$$\mathbf{ON} \bullet \mathbf{BC} = (ah\mathbf{u}_x + ak\mathbf{u}_y + al\mathbf{u}_z) \bullet ((a/l)\mathbf{u}_z - (a/k)\mathbf{u}_y) = 0$$

Тому **ON**, або [hkl] є перпендикулярним до площини (hkl).

Задача 7. Довести що відстань d між двома сусідніми площинами типу (*hkl*) в кубічній гратці з ребром a знаходиться за рівнянням: $d = \frac{a}{(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}}$.

Розв'язок.

Припустимо, що вектор **OD** є перпендикулярним до площини від самого початку, як показано на Рис. 1(б). Переміщення площини за кратними параметрами ґратки не змінює індексів Міллера. Припустимо, що сусідні площини проходять через О. Тоді відстань, що відокремлює сусідні площини, є відстанню **OD** на Рис. 1(б), *Задача* 6. Нехай α , β та γ – кути, які утворює вектор **OD** з осями *x*, *y* та *z*. Розглянемо напрямні косинуси вектора **OD**:

$$\cos\alpha = d/(ax_1) = dh/a; \ \cos\beta = d/(ay_1) = dk/a; \ \cos\gamma = d/(az_1) = dl/a$$

У 3-вимірному просторі: $(\cos \alpha)^2 + (\cos \beta)^2 + (\cos \gamma)^2 = 1$ таким чином: $(d^2h^2/a^2) + (d^2k^2/a^2) + (d^2l^2/a^2) = 1$ після перегрупування: $d^2 = a^2 / [h^2 + k^2 + l^2]$ або $d = a / [h^2 + k^2 + l^2]^{1/2}$

Задача 8. Розрахувати період кристалічної решітки за відомими хімічним складом кристалу і його структурою.

Розв'язок.

Якщо відомий хімічний склад кристалу і визначена його кристалічна структура, то можна обчислити період решітки цього кристалу. Задача зводиться до того, щоб встановити число молекул (атомів, іонів) в елементарній комірці, виразити її об'єм через період решітки і, знаючи густину кристалу, провести відповідний розрахунок.

Знайдемо період решітки хлористого натрію. Період решітки d відповідає ребру куба елементарної комірки. Розраховуємо число іонів натрію і хлору в цьому елементарному кубі. По вершинам куба розташовано вісім іонів натрію, але кожний із них є вершиною восьми суміжних елементарних кубів, отже, даному об'єму d³ належить лише одна восьма частина іона. Всього таких іонів вісім: $\frac{1}{8}$ *8=1. Шість іонів натрію розташовані в центрах граней куба, але кожний із них належить розглянутому кубу лише наполовину: $\frac{1}{2}$ *6=3. Всього іонів Na – 4. Один іон хлору розташований на перетині просторових діагоналей куба, він цілком належить виділеному елементарному кубу. Крім того 12 іонів хлору розміщено посередині ребер куба, кожен із них на одну четверту належить об`єму d³ тому, що одночасно належить чотирьом сусуднім елементарним кубам: $\frac{1}{4}$ *12=3. Всього в елементарному об`ємі d³ міститься 4 іона Na і 4 іона Cl, тобто 4 молекули NaCl.

Відтак, 4 молекули NaCl займають об'єм d³, а на один моль кристалу приходиться об'єм:

$$V_{\mu} = d^3 \frac{N_A}{4}$$

де V_{μ} – молярний об'єм, N_A – число Авогадро. З іншої сторони, молярний обєм можна знайти, якщо масу моля μ розділити на густину кристалу ρ :

$$V_{\mu} = \frac{\mu}{\rho}$$

Звідси:
$$\frac{\mu}{\rho} = d^3 \frac{N_A}{4}$$
 і $d = \sqrt[3]{\frac{4\mu}{N_A\rho}}$.
 $\mu = 58,45\kappa c/\kappa MORb$
 $\rho = 2,17 \cdot 10^3 \kappa c/m^3$
 $d = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot 58,45\kappa c \cdot \kappa MORb^{-1}}{2,17 \cdot 10^3 \kappa c \cdot 10^{-3} \cdot 6,02 \cdot 10^{26} \kappa MORb^{-1}}} = 5,64 \cdot 10^{-10} M = 5,64 \text{ Å}$

Задача 9. Визначити розміри і тип оберненої решітки для кубічної та ОЦК решіток.

Розв'язок.

Вектори примітивних трансляцій простої кубічної решітки можна представити:

$$\vec{a} = a\vec{x}, \vec{b} = b\vec{y}, \vec{c} = c\vec{z} \tag{1}$$

 $\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}$ – одиничні вектори вздовж осей координат *x*, *y*, *z*.

Об'єм елементарної комірки дорівнює $a^3 = [\vec{a} \times \vec{b}] \cdot \vec{c}$. Вектори примітивних трансляцій оберненої решітки знаходяться за допомогою співвідношень:

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}, \quad \vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}, \quad \vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

та дорівнюють:

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a} \vec{x}$$
, $\vec{B} = \frac{2\pi}{a} \vec{y}$, $\vec{C} = \frac{2\pi}{a} \vec{z}$ (2)

Таким чином, обернена гратка також є простою кубічною, але з постійною гратки, що рівна $\frac{2\pi}{a}$. Перша зона Бриллюена буде обмежена площинами, перпендикулярними до таких шести векторам:

$$\pm \underset{A}{\rightarrow} = \pm \underset{a}{\pi} \underset{x}{\rightarrow}; \quad \pm \underset{B}{\rightarrow} = \pm \underset{a}{\pi} \underset{y}{\rightarrow}; \quad \pm \underset{C}{\rightarrow} = \pm \underset{a}{\pi} \underset{z}{\rightarrow}$$
(3)

Ці шість площин є гранями кубу з ребрами $\frac{2\pi}{a}$ і об'ємом $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$; цей куб і буде першою зоною Бриллюена простої кубічної кристалічної решітки.

Векторами примітивних трансляцій ОЦК решітки (вони показані на рис.1) є: $\vec{a}' = \frac{1}{2}a(\vec{x} + \vec{y} - \vec{z}), \vec{b}' = \frac{1}{2}b(-\vec{x} + \vec{y} + \vec{z}), \vec{c}' = \frac{1}{2}c(\vec{x} - \vec{y} + \vec{z}),$ (4)

де *а* – сторона елементарного кубу; *x*, *y*, *z* - ортогональні одиничні вектори, що паралельні ребрам кубу. Об'єм примітивної елементарної комірки:

$$V = \left| \underset{a}{\rightarrow'} \cdot \left(\underset{b}{\rightarrow'} \times \underset{c}{\rightarrow'} \right) \right| = \frac{1}{2} a^3.$$
(5)

Використовуючи визначення примітивних трансляцій $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$ оберненої решітки і співвідношення (4) та (5), маємо:

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a}(\vec{x} + \vec{y}), \vec{B} = \frac{2\pi}{a}(\vec{y} + \vec{z}), \vec{C} = \frac{2\pi}{a}(\vec{x} + \vec{z}).$$
(6)

Ці вектори э векторами примітивних трансляцій ГЦК решітки. Таким чином, ГЦК решітка є оберненою для ОЦК решітки.



Рис. 1 Примітивні базисні вектори ОЦК решітки

Задача 10. Від кубічного кристалу, знятого на випромінюванні міді $K_{\alpha}(\lambda = 1,542 \text{ Å})$, видні дифракційні лінії під кутом Брегга θ : 12,3; 14,1; 20,2; 24,0; 25,1; 29,3; 32,2 та **33,1°** (рис.1). Проіндицирувати ці лінії. Визначити, чи є решітка цього кристалу примітивною, ГЦК або ОЦК, та довжину ребра гратки.



Рис. 1. Камера, що використовується для рентгенівської дифракції у методі порошку

Відбиті промені виходять із зразка за напрямком твірних сімейства конусів, вісь яких співпадає з напрямком падаючого променю. Фотографічна плівка, що лежить у площині, перпендикулярній до падаючого променя, регеструє дифракційну картину, що складається з серії концентричних кілець, наприклад як на рентгенограмі кремнію (рис.2).



Рис. 2. Проіндицировані рентгенограми кремнію, що отримані методом порошку: верхня шляхом регистрації відбитих променів на плівку, нижня за допомогою лічильника відбитих променів

Iз закону Брегга (для кубічного кристалу): $2d\sin\theta = n\lambda \Rightarrow (\sin\theta)^2 \sim \frac{1}{d^2}$.

Із зв'язку відстані *d* між двома сусідніми площинами типу (*hkl*) в кубічній гратці з ребром *a* отримуємо:

$$d \cong \frac{d}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \Rightarrow \frac{1}{d^2} \sim (h^2 + k^2 + l^2) \Rightarrow (\sin \theta)^2 \sim (h^2 + k^2 + l^2).$$

Із значень (θ), що дані в умові, отримуємо (sin θ)². Для даних восьми дифракційних ліній:

 $(\sin\theta)^2 \sim (h^2 + k^2 + l^2) \sim 3,4,8,11,12,16,19,20$. З цього маємо, що шукані індекси Міллера площин, від яких відбулося відбиття, будуть: (111), (200), (220), (311), (222), (400), (331), (420).

3 рівнянь: $d^{-2} = (h^2 + k^2 + l^2)/a^2$; $\lambda = 2d \sin \theta$ знаходимо a = 6,3Å.

Для визначення того, чи є решітка цього кристалу примітивною, ГЦК або ОЦК потрібні *додаткові теоретичні відомості*.

Залежність інтенсивності різних відбиттів від атомного складу елементарної комірки.

Рівняння дифракції Лауе: $\vec{a} \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi h; \vec{b} \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi k; \vec{c} \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi l$ визначають усі можливі відбиття для певної кристалічної решітки. Ці відбиття можливо описати за допомогою вузлів оберненої решітки, які задаються векторами оберненої решітки $\vec{G}_{hkl} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$, і позначити ці відбиття як (*hkl*).

Припустимо, що кожна комірка містить S атомів і положення j-го атома у комірці визначається вектором: $\vec{\rho}_j = x_j \vec{a}_j + y_j \vec{b}_j + z_j \vec{c}_j$, кожний із яких проведено із вузла решітки: $\vec{\rho}_{mnp} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$.

Запишемо вираз, який називається структурним фактором базису вказаного (*hkl*) відбиття: $F_{\vec{G}\,hkl} = \sum_{j=1}^{s} f_j \exp\left(-\stackrel{\rightarrow}{\rightarrow} \stackrel{\rightarrow}{}_{\vec{G}\,hkl}\right)$. Скористаємося означенням $\vec{G}_{hkl} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$, тоді:

$$F_{(hkl)} = \sum_{j=1}^{s} f_j \exp(-i2\pi(x_j h + y_j k + z_j l)), \quad (*)$$

де *f_j –атомний фактор розсіювання* або *форм-фактор* атому є мірою здатності розсіювати j-го атому елементарної комірки.

Нас цікавить нульові значення величини $F_{(hkl)}$. При нулі $F_{(hkl)}$ інтенсивність відбиття, що визначається \overrightarrow{g}_{hkl} і є дозволеним просторовою решіткою, дорівнює нулю. Виявляється структурний фактор може знищувати деякі відбиття, що дозволені просторовою решіткою, і ці відбиття, яких не достає, допомагають при визначенні структури.

Структурний фактор ОЦК решітки.

ОЦК решітку можна представити як просту кубічну з атомним базисом з двох однакових атомів. Їх координати в простій кубічній комірці дорівнюють 000 і $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$. Тоді рівняння (*), приймає вигляд:

$$F_{(hkl)} = f(1 + \exp(-i\pi(h+k+l))). \quad (**)$$

Величина $F_{(hkl)}$ (**) дорівнює нулю в тих випадках, коли значення експоненти дорівнює -1, тобто у всіх тих випадках, коли її показник є непарне число, яке помножене на $-i\pi$. Тоді $F_{(hkl)} = 0$, якщо доданок (h + k + l) дорівнює непарному цілому числу, і $F_{(hkl)} = 2f$, якщо цей доданок дорівнює цілому парному числу.

Так, наприклад, в дифракційній картині металічного Na, який має ОЦК решітку, відсутні відбиття від площин (100), (300), (111), (221), але відбиття від площин (200), (110), (221) присутні (всі приведені індекси площини відповідають кубічній комірці).

Який же фізичний зміст того, що в дифракційній картині від ОЦК решітки відсутнє відбиття (100). Відбиття (100) має місце тоді, коли промені відбиті від першої і третьої площин на рис.3 мають різницю фаз 2π . Ці площини обмежують куб. В ОЦК решітці має місце додаткова атомна площина, яка позначається на рис. 3 як 2. Але так як ця площина розташована посередині між першою і третьою площинами, відбитий від неї промінь зсунутий за фазою відносно променя, відбитого $1^{ою}$ площиною на π радіанів, внаслідок чого відбиття від неї гасить відбиття від першої площини.



Рис. 3. Схема для пояснення відсутності відбиття (100) для ОЦК – решітки

Гасіння відбиття (100) в ОЦК решітці Na відбуваються тому, що площини складаються з однакових атомів. А от в структурі CsCl такого

гасіння не буде, бо площини іонів Cs і Cl чередуються, а здатність розсіювати у іонів Cs і Cl відрізняються .

Структурний фактор ГЦК решітки.

Представимо ГЦК решітку як просту кубічну з базисом із 4 атомів, координати яких в межах комірки: 000, $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$. Тоді (*) приймає вигляд: $F_{(hkl)} = f(1 + \exp[-i\pi(k+l)] + \exp[-i\pi(h+l)]) + \exp[-i\pi(h+k)])$. Якщо усі індекси є парні цілі числа, то $F_{(hkl)} = 4f$; теж саме буде, якщо усі індекси непарні. Але якщо тільки один із індексів парний, то в показнику двох експонент буде добуток непарного числа на $-i\pi$, тоді F буде дорівнювати нулю. Таке саме буде, якщо один із індексів непарний. Таким чином, в ГЦК решітці не мають місце відбиття від площин, для яких частина індексів – парні числа, а частина – ні.

Задача 11. Для утворення вакансії в алюмінії потрібно енергії близько 0, 75 еВ. Скільки існує вакансій при кімнатній температурі у стані термодинамічної рівноваги?

Розв'язок

Розрахунки теплової енергії атомів в решітці показують, що їх середня коливальна енергія при звичайних температурах набагато менше 1 еВ. З цього випливає, що атом решітки набуває енергію утворення вакансії тільки в результаті великої флуктуації, величина якої досягає або перевищує значення E_v . Ймовірність перебування атома в стані з енергією E_v пропорційна еxp ($-E_v/kT$). Тому, і імовірність існування вакансії підкорюється тієї ж закономірності. У кристалі, що має N атомних вузлів, кількість вакантних місць n_v дорівнює: $n_v = Ne^{-E_v/kT}$.

Задача 12. Енергія взаємодії між іонами Na⁺ і Cl⁻ у кристалі NaCl може бути записана як:

$$E(r) = -\frac{4.03 \times 10^{-28}}{r} + \frac{6.97 \times 10^{-96}}{r^8}$$

де енергія дається в джоулях на іонні пари, а відстань, що розділяє іони r – в метрах. Розрахувати енергію зв'язку та рівноважного розділення іонів у кристалі, включаючи енергію переносу електронів від Cl⁻ в Na⁺. Також оцінити модуль пружності Y для NaCl, враховуючи, що:

$$Y \approx \frac{1}{6r_o} \left[\frac{d^2 E}{dr^2} \right]_{r=r_o}$$

Розв'язок.

Потенціальна крива для NaCl задається наступною формулою:

$$E(r) = -\frac{4.03 \times 10^{-28}}{r} + \frac{6.97 \times 10^{-96}}{r^8}$$

де *Е* являє собою потенціальну енергію, а *r* – відстань, що розділяє іони.

Продиференціюємо цей вираз і прирівняємо до нуля, щоб знайти мінімум на потенціальній кривій, і, отже, мінімальне (рівноважне) розділення (*r*₀).

$$\frac{dE(r_o)}{dr_o} = 0$$

-55.76 $\frac{1}{10^{96}r_o^9} + 4.03\frac{1}{10^{28}r_o^2} = 0$

звідси r_0 : $r_0 = 2,81 \times 10^{-10}$ м або 2,81 Å.

Нехай q = 1,602 × 10⁻¹⁹ Дж/еВ. Тоді очевидно, що «іонна енергія зв'язку» (E_b) для поодиноких іонів (виражена у еВ) буде:

$$E_{b}(eB) = -\frac{E(r_{o})}{q} = -\left(\frac{-4.03 \times 10^{-28}}{r_{o}} + \frac{6.97 \times 10^{-96}}{r_{o}^{8}}\right)\left(\frac{1}{q}\right)$$
$$E_{b}(eB) = -\left(\frac{-4.03 \times 10^{-28}}{(2.81 \times 10^{-10} \text{ M})} + \frac{6.97 \times 10^{-96}}{(2.81 \times 10^{-10} \text{ M})^{8}}\right)\left(\frac{1}{1.602 \times 10^{-19} \text{Дж/eB}}\right)$$
$$E_{b}(eB) = 7.83 \text{ eB}$$

Зауважимо, однак, що це енергія, необхідна для розділення іонів Na⁺ і Cl⁻ в кристалі і розведення їх до нескінченності, тобто – енергія розбиття кристалу на його іони. Фактична енергія зв'язку передбачається для кристала NaCl, складовими якого є *нейтральні* атоми Na і Cl. Ми повинні перенести електрон з Cl⁻ на Na⁺. Енергія для цього перенесення, згідно з рисунку 1, становить -1,5 eB (негативне значення вказує на вивільнення енергії). Таким чином, енергія зв'язку 7,83 - 1,5 = 6,33 eB, як показано на рис. 1.



Рис. 1. Потенціальна енергія взаємодії іонів у твердому NaCl. Нульова енергія відповідає нейтральним атомам Na і Cl, розведених на нескінченність

Якщо *r* визначається як змінна, яка виражає відстань, що розділяє іони, то модуль Юнга знаходиться за формулою:

$$Y = \frac{1}{6r} \left[\frac{d}{dr} \left(\frac{dE(r)}{dr} \right) \right]$$

$$Y = \frac{1}{6} \left(\frac{-8.06 \frac{1}{10^{28} r^3} + 501.84 \frac{1}{10^{96} r^{10}}}{r} \right) = 8.364 \times 10^{-95} \frac{1}{r^{11}} - 1.3433 \times 10^{-28} \frac{1}{r^4}$$

Підставляючи значення для рівноважного розподілу (r_0) в це рівняння (2,81 × 10⁻¹⁰ м), маємо:

$$Y = 7,54 \times 10^{10}$$
 Πa = 75 ΓΠa.

Це значення трохи більше, ніж близько 40 ГПа, але й відрізняється від нього не надто сильно. В загальному випадку об'ємний модуль пружності K може бути знайдений з потенціальної кривої E=E(r), використовуючи формулу:

$$K = \frac{1}{9cr_o} \left[\frac{d^2 E}{dr^2} \right]_{r=r_o}$$

де *с* являє собою постійну величину порядку одиниці, яка залежить від кристалічної структури. (Наприклад, для CsCl, *c* = 1,5, для NaCl, *c* = 2). Модуль пружності Y і об'ємний модуль пружності K пов'язані через Коефіцієнт Пуасона v:

$$K = Y/[3(1-2\nu)]$$

 $\upsilon \approx 1/4$, так що $Y \approx (3/2)K$ i, отже:

$$Y = \frac{1}{6cr_o} \left[\frac{d^2E}{dr^2} \right]_{r=r}$$

Докладний аналіз, зроблений з урахуванням того, що c = 2 для структури NaCl, і, отже, результат підрахунку буде уточнений з Y = 75 ГПа до Y = 37,5 ГПа, що є близьким до експериментального значення.

Задача 13. За температури нижче 24,5 К, Ne – це кристалічна тверда речовина з ГЦК структурою. Енергія міжатомної взаємодії (зв'язок Ван дер Ваальса) на атом може бути записана як:

$$E(r) = -2\varepsilon \left[14.45 \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 - 12.13 \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} \right] \qquad (eB/atom)$$

де є і σ є постійними величинами, які залежать від поляризаційності, середнього дипольного моменту і ступеня накладання основних електронів. Для кристалічного Ne, $\varepsilon = 3,121 \times 10^{-3}$ eB і $\sigma = 0,274$ нм.

A). Покажіть, що рівноважна відстань між атомами в кристалі інертного газу задається формулою r₀ = (1,090) σ. Яка рівноважна відстань, що розділяє атоми в кристалі Ne?

Б). Знайдіть енергію зв'язку на атом у твердому Ne.

B). Обчислити густину твердого Ne (атомна маса = 20,18 г/моль).

Розв'язок

A)

Нехай *E* – потенціальна енергія, *x* – змінна, що дорівнює відстані між атомами. Енергія *E* задається як сказано в умові:

$$E(x) = -2\varepsilon \left[14.45 \left(\frac{\sigma}{x}\right)^6 - 12.13 \left(\frac{\sigma}{x}\right)^{12} \right]$$

Сила F на кожний атом може бути отримана наступним чином:

$$F(x) = -\frac{dE(x)}{dx} = 2\varepsilon \left[145.56 \frac{\sigma \left(\frac{\sigma}{x}\right)^{11}}{x^2} - 86.7 \frac{\sigma \left(\frac{\sigma}{x}\right)^5}{x^2} \right]$$
$$F(x) = 2\varepsilon \left[145.56 \frac{\sigma^{12}}{x^{13}} - 86.7 \frac{\sigma^6}{x^7} \right]$$

Якщо атоми знаходяться в рівновазі, то ця сила зв'язку повинна бути нульовою. Позначимо як *r*₀ відстань, що розділяє атоми в рівноважному стані. Маємо:

$$F(r_o) = 0$$

$$2\varepsilon \left[145.56 \frac{\sigma^{12}}{r_o^{13}} - 86.7 \frac{\sigma^6}{r_o^7} \right] = 0$$

$$145.56 \frac{\sigma^{12}}{r_o^{13}} = 86.7 \frac{\sigma^6}{r_o^7}$$

$$\frac{r_o^{13}}{r_o^7} = \left(\frac{145.56}{86.7} \right) \frac{\sigma^{12}}{\sigma^6}$$

$$r_o = 1.090 \sigma$$

Для кристала Ne, $\sigma = 2,74 \times 10^{-10}$ м і $\varepsilon = 0,003121$ eB. Тому: $r_{\theta} = 1,090 \ (2,74 \times 10^{-10} \text{ м}) = 2,99 \times 10^{-10}$ м для Ne.

Б)

Розрахуємо енергію на атом при рівновазі:

$$E(r_o) = -2\varepsilon \left[14.45 \left(\frac{\sigma}{r_o}\right)^6 - 12.13 \left(\frac{\sigma}{r_o}\right)^{12} \right]$$
$$E(r_o) = -2(0.003121 \text{ eB})(1.602 \times 10^{-19} \text{Дж/eB}) \left[14.45 \left(\frac{2.74 \times 10^{-10} \text{ M}}{2.99 \times 10^{-10} \text{ M}}\right)^6 - 12.13 \left(\frac{2.74 \times 10^{-10} \text{ M}}{2.99 \times 10^{-10} \text{ M}}\right)^{12} \right]$$

 $E(r_0) = -4,30 \times 10^{-21}$ Дж або -0.0269 eB. Тому енергія зв'язку в твердому Ne становить 0,027 eB на атом.

B)

Щоб розрахувати густину, згадаємо, що елементарна комірка є гранецентрованою кубічною, а густина дорівнює масі атомів в елементарній комірці віднесеній до об'єму елементарної комірки. В елементній комірці типу ГЦК знаходиться 4 атоми, а атомна маса Ne 20,18 г/моль.



Рис. 1. Зліва: елементарна комірка типу ГЦК з щільною упаковкою атомів. Справа: Представлення ГЦК комірки зі зменшеними сферами атомів. Приклади: Ag, Al, Au, Ca, Cu, γ-Fe (> 912 ° C), Ni, Pd, Pt, Rh

Для цієї кристалічної структури ГЦК типу, нехай a = параметр решітки (сторона кубічної комірки) і R = радіус атома. Найкоротша міжатомна відстань дорівнює $r_0 = 2 R$ (атоми, що перебувають в контакті один з одним, знаходяться на відстані 2 R (див. рис. 1).

$$R = r_o/2, \qquad 2a^2 = (4R)^2$$
$$a = 2\sqrt{2}R = 2\sqrt{2}\left(\frac{r_o}{2}\right) = \sqrt{2}\left(2.99 \times 10^{-10} \text{ M}\right)$$
$$a = 4,228 \times 10^{-10} \text{ M}.$$

Таким чином, об'єм (V), елементарної комірки:

 $V = a^3 = (4,228 \times 10^{-10} \text{ м})^3 = 7,558 \times 10^{-29} \text{ м}^3.$

Маса (*m*) одного атома Ne в грамах – це атомна маса (M_{at}), поділена на N_A , оскільки N_A – це така кількість атомів, яка має масу M_{at} .

$$m = M_{at} / N_A$$
$$m = \frac{(20.18 \,\text{г/моль})(0.001 \,\text{ кг/r})}{6.022 \times 10^{23} \,\text{ моль}^{-1}} = 3.351 \times 10^{-26} \,\text{ кг}$$

У ГЦК комірці є 4 атоми на елементну комірку. Тому густину (ρ), можна знайти наступним чином:

$$\rho = (4m) / V = [4 \times (3.351 \times 10^{-26} \text{ Kr})] / (7.558 \times 10^{-29} \text{ m}^3)$$
$$\rho = 1774 \text{ Kr/m}^3.$$

В одиницях г/см³ ця густина:

$$\rho = \frac{1774 \text{ KF/M}^3}{(100 \text{ cM/M})^3} \times (1000 \text{ F/KF}) = 1.77 \text{ F/cM}^3$$

Отже, густина твердого Ne становить 1,77 г/см³.

Задача 14. Розглянути залізо за температури нижче 912 °С, коли структура елементарної комірки - ОЦК. Використовуючи значення густини заліза 7,86 г/см³ і його атомну масу 55,85 г/моль, обчислити параметр решітки і радіус атома Fe. При температурі 912 °С, залізо змінює структуру з ОЦК (α -Fe) на ГЦК (γ -Fe). Радіус Fe відповідно, змінюється від 0,1258 нм до 0,1291 нм. Обчислити густину γ -Fe і пояснити, спостерігається збільшення чи зменшення об'єму під час цієї зміни фази.

Розв'язок

Отже за умовою дано: густина заліза при кімнатній температурі: $\rho = 7,86 \times 10^3$ кг/м³, атомна маса заліза: $M_{at} = 55,85$ г/моль

Для ОЦК структури густина визначається:

$$\rho = \frac{2 \frac{M_{at} \times (10^{-3} \text{ KF/r})}{N_A}}{a^3}$$

Таким чином, параметр решітки а знаходимо як:

$$a = \left(\frac{1}{(500 \text{ r/kr})} \frac{M_{at}}{N_{A}\rho}\right)^{\frac{1}{3}}$$
$$a = \left(\frac{1}{(500 \text{ r/kr})} \frac{(55.85 \text{ r/mojb})}{(6.022 \times 10^{23} \text{ mojb}^{-1})(7.86 \times 10^{3} \text{ kr/m}^{3})}\right)^{\frac{1}{3}} = 2.87 \times 10^{-10} \text{ m}$$

Радіус атома Fe - *R*, і параметр решітки - *a*, пов'язані між собою наступним чином:

$$a\sqrt{3} = 4R$$

$$R = \frac{\sqrt{3}}{4} a = \frac{\sqrt{3}}{4} \left(2.87 \times 10^{-10} \text{ M} \right) = 1.24 \times 10^{-10} \text{ M}$$

Fe має ОЦК структуру лише при температурі нижче 912 °C (α-Fe). Атом Fe в α-Fe стані має радіус $R_{OUK} = 0,1258 \times 10^{-9}$ м. Тому, густина α-Fe:

$$\rho_{\text{оцк}} = \frac{2 \frac{M_{at} \times (10^{-3} \text{ K}\Gamma/\Gamma)}{N_{A}}}{\left(\frac{4R_{\text{оцк}}}{\sqrt{3}}\right)^{3}} = \frac{2 \frac{(55.85 \text{ }\Gamma/\text{МОЛЬ})(10^{-3} \text{ }K\Gamma/\Gamma)}{(6.022 \times 10^{23} \text{ }\text{MO}\text{,}\text{I}\text{,}^{-1})}}{\left(\frac{4(0.1258 \times 10^{-9} \text{ }\text{M})}{\sqrt{3}}\right)^{3}}$$

= 7564 кг/м³ (менше, ніж при кімнатній температурі)

Fe набуває ГЦК структури як тільки температура стає трохи вищою за 912 °C (γ -Fe). Атом заліза в γ -Fe стані має радіус $R_{\Gamma \amalg K} = 0,1291 \times 10^{-9}$ м (пам'ятаємо, що для ГЦК структури, $a\sqrt{2} = 4R_{\Gamma \amalg K}$). Отже, густина γ -Fe:

$$\rho_{\text{ГЩK}} = \frac{4 \frac{M_{at} \times (10^{-3} \text{ KF/F})}{N_{A}}}{\left(\frac{4R_{\text{ГЩK}}}{\sqrt{2}}\right)^{3}} = \frac{4 \frac{(55.85 \text{ F/MOJL})(10^{-3} \text{ KF/F})}{(6.022 \times 10^{23} \text{ MOJL}^{-1})}}{\left(\frac{4(0.1291 \times 10^{-9} \text{ M})}{\sqrt{2}}\right)^{3}} = 7620 \text{ KF/M}^{3}$$

Коли густина збільшується, об'єм повинен зменшуватись (Fe зберігає свою масу).

Задача 15. Si має алмазоподібну, а GaAs має цинкоподібну кристалічну структуру. Враховуючи параметри гратки для Si та GaAs, a = 0,543 нм, a = 0,565 нм, відповідно; і атомні маси Si, Ga та As, що дорівнюють 28,08 г/моль, 69,73г/моль і 74,92 г/моль, відповідно, розрахувати густину кристалів Si та GaAs. Якою є атомна концентрація (кількість атомів на одиницю об'єму) у кожному кристалі?

Розв'язок

Посилаючись на структуру кристалів алмазу, що вказана на рис. 1, ми можемо ідентифікувати наступні типи атомів:

8 вершинних атомів, що позначені як К,

6 атомів в центрах граней (позначені ГЦ) і

4 внутрішні атоми, помічені як 1,2,3,4.

Ефективна кількість атомів всередині елементарної комірки:

(8вершин) × (1/8 К-атоми) + (6 граней) × (1/2 ГЦ-атоми) + 4 атома всередині комірки (1,2,3,4) = 8.



Рис. 1. Кристалічна структура алмазу

Параметр решітки (довжина сторони куба) елементарної комірки – *а*. Таким чином, концентрація атомів у кристалі Si (*n*_{Si}):

$$n_{\rm Si} = \frac{8}{a^3} = \frac{8}{(0.543 \times 10^{-9} \,{\rm m})^3} = 5.0 \times 10^{28}$$
атоми на м³

Якщо $M_{\rm at}$ – це атомна маса в періодичній таблиці, то маса атома ($m_{\rm at}$) в кілограмах:

$$m_{at} = (10^{-3} \text{ kr/r}) M_{at} / N_A$$
 (1)

де N_A – число Авогадро. Для Si, $M_{at} = M_{Si} = 28,09$ г/моль, тому густина Si:

 $\rho = ($ число атомів в одиниці об'єму $) \times ($ маса на атом $) = n_{Si} \times m_{at}$

або

$$\rho = \left(\frac{8}{a^3}\right) \left[\frac{(10^{-3} \text{ Kr/r})M_{\text{Si}}}{N_A}\right]$$

тобто

$$\rho = \left[\frac{8}{\left(0.543 \times 10^{-9} \text{ m}\right)^3}\right] \left[\frac{(10^{-3} \text{ kr/r})(28.09 \text{ r/molg})}{(6.022 \times 10^{23} \text{ molg}^{-1})}\right] = 2.33 \times 10^3 \text{ kr/m}^3 \text{ ago } 2.33 \text{ r/cm}^3$$

У випадку GaAs, очевидно, що в елементній комірці є 4 Ga та 4 As атоми. Концентрація атомів Ga (або As) в одиниці об'єму (n_{Ga}):

$$n_{\rm Ga} = \frac{4}{a^3} = \frac{4}{(0.565 \times 10^{-9} \,\mathrm{M})^3} = 2.22 \times 10^{28} \,\mathrm{M}^{-3}$$

Загальна концентрація атомів (включаючи і Ga і As атоми) отримується подвоєнням значення *n*_{Ga}:

$$n_{3ar} = 2n_{Ga} = 4,44 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}.$$

Маємо 2,22 × 10²⁸ Ga-As пар в м³. Ми можемо обчислити масу атомів Ga і As за їхніми відносними атомними масами з періодичної таблиці використовуючи рівняння (1), а також те, що $M_{at} = M_{Ga} = 69,72$ г/моль для Ga і $M_{at} = M_{As} = 74,92$ г/моль для As. Таким чином:

$$\rho = \left(\frac{4}{a^3}\right) \left[\frac{(10^{-3} \text{ KG/r})(M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}})}{N_A}\right]$$

або

$$\rho = \left[\frac{4}{(0.565 \times 10^{-9} \text{ m})^3}\right] \left[\frac{(10^{-3} \text{ Kr/r})(69.72 \text{ r/моль} + 74.92 \text{ r/моль})}{6.022 \times 10^{23} \text{ моль}^{-1}}\right]$$

Тобто $\rho = 5,33 \times 10^3$ кг/м³ або 5,33 г/см³.

Задача 16. Якщо відомий параметр решітки для Si: a = 0,543 нм, обчислити число атомів Si на одиницю об'єму (в нм³). Підрахувати число атомів на м² та на нм², що знаходяться в площинах (100), (110) і (111) у кристалі Si, котрі показані на рис. 1. Яка площина має найбільшу кількість атомів на одиницю площі? Густина SiO₂ складає 2,27 г/см³. Враховуючи, що його структура аморфна, обчислити число молекул в одиниці об'єму (в нм³). Порівняти результат з отриманим для Si та прокоментувати, що станеться коли поверхня кристала Si окислиться. Атомні маси Si та O складають 28,09 г/моль і 16 г/моль, відповідно.



Рис. 1. Алмазоподібна кубічна кристалічна структура і площини. Чорні атоми належить заштрихованій площині

Розв'язок

Si має кристалічну структуру алмазу з 8 атомами в елементарній комірці та відомим параметром решітки $a = 0,543 \times 10^{-9}$ м. Атомна мас кремнію $M_{at} = 28,09 \cdot 10^{-3}$ кг/моль. Концентрація атомів на одиницю об'єму (*n*) в нм³:

$$n = \frac{8}{a^3} \frac{1}{\left(10^9 \text{ HM/M}\right)^3} = \frac{8}{\left(0.543 \times 10^{-9} \text{ M}\right)^3} \frac{1}{\left(10^9 \text{ HM/M}\right)^3} = 50.0 \text{ atomu/HM}^3$$

Густину ρ можна визначити наступним чином:

$$\rho = \frac{8\frac{M_{at}}{N_A}}{a^3} = \frac{8\frac{28.09 \times 10^{-3} \text{ Kr/моль}}{6.022 \times 10^{23} \text{ моль}^{-1}}}{\left(0.543 \times 10^{-9} \text{ M}\right)^3} = 2331 \text{ Kr/m}^3 \text{ afo } 2.33 \text{ r/cm}^3$$

Площина (100) має 4 вершинних атома, які поділені між сусідніми комірками, і 1 не розділений атом у центрі. Вершинний атом входить в площину типу (100) в долі 1/4. Кількість атомів на квадратний нм на площині (100) показано на рис. 2.



Рис. 2. Площина (100) в алмазоподібній кристалічній структурі

Отже, число атомів в $\text{нм}^2 n_{100}$:

$$n_{100} = \frac{4\left(\frac{1}{4}\right) + 1}{a^2} \frac{1}{\left(10^9 \text{ HM/M}\right)^2} = \frac{4\left(\frac{1}{4}\right) + 1}{\left(0.543 \times 10^{-9} \text{ M}\right)^2} \frac{1}{\left(10^9 \text{ HM/M}\right)^2}$$

 $n_{100} = 6,78$ атомів/нм² або $6,78 \times 10^{18}$ атомів/м².

Площина (110) показана на рисунку 3. У кутах є 4 атома, які поділені між розглядуваною і сусідніми площинами (звідси, кожен з них дає внесок – чверть), 2 атоми на верхній і нижній сторонах, які розділені з верхньою та нижньою площинами (звідси, внесок кожного атома складає 1/2) і 2 атоми, що повністю знаходяться в площині.



Рис. 3. Площина (110) в алмазоподібній кристалічній структурі

Отже, число атомів в $\text{нм}^2 n_{110}$:
$$n_{110} = \frac{4\left(\frac{1}{4}\right) + 2\left(\frac{1}{2}\right) + 2}{\left[a\left(a\sqrt{2}\right)\right]} \left(\frac{1}{\left(10^{9} \text{ HM/M}\right)^{2}}\right)$$
$$n_{110} = \frac{4\left(\frac{1}{4}\right) + 2\left(\frac{1}{2}\right) + 2}{\left[\left(0.543 \times 10^{-9} \text{ M}\right)\left(\left(0.543 \times 10^{-9} \text{ M}\right)\sqrt{2}\right)\right]} \left(\frac{1}{\left(10^{9} \text{ HM/M}\right)^{2}}\right)$$

 $n_{110} = 9,59$ атомів/нм² або $9,59 \times 10^{18}$ атомів/м².

Площина (111) показана на рисунку 4.



Рис. 4. Площина (111) в алмазоподібній кристалічній структурі

Число атомів в нм² n₁₁₁:

$$n_{111} = \frac{3\left(\frac{60}{360}\right) + 3\left(\frac{1}{2}\right)}{\left[2\left(\frac{1}{2}\right)\left(a\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\left(a\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}\right)\right]} \left(\frac{1}{\left(10^{9} \text{ HM/M}\right)^{2}}\right)$$
$$3\left(\frac{60}{360}\right) + 3\left(\frac{1}{2}\right)$$
$$\left[2\left(\frac{1}{2}\right)\left(\left(0.543 \times 10^{-9} \text{ M}\right)\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\left(\left(0.543 \times 10^{-9} \text{ M}\right)\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}\right)\right]} \left(\frac{1}{\left(10^{9} \text{ HM/M}\right)^{2}}\right)$$

 $n_{111} = 7,83$ атомів/нм² або 7,83 × 10¹⁸ атомів/м².

Площина (110) містить найбільшу кількість атомів на одиницю площі.

Далі, з умови відомо молярна маса SiO₂: $M_{at} = 28,09 \times 10^{-3}$ кг/моль + 2 × 16 × 10⁻³ кг/моль = 60,09 · 10⁻³ кг/моль, густина SiO₂: $\rho = 2,27 \times 10^3$ кг/м³. Нехай n – кількість молекул SiO₂ на одиницю об'єму, тоді:

$$\rho = n \frac{M_{at}}{N_A}$$

$$n = \frac{N_A \rho}{M_{at}} = \frac{\left(6.022 \times 10^{23} \text{ моль}^{-1}\right)\left(2.27 \times 10^3 \text{ кг/м}^3\right)}{\left(60.09 \times 10^{-3} \text{ кг/моль}\right)} = 2.27 \times 10^{28} \text{ молекул на м}^3$$

Або, перетворюючи в (молекули на нм³):

$$n = \frac{2.27 \times 10^{28} \text{ молекул/м}^3}{(10^9 \text{ нм/м})^3} = 22.7 \text{ молекули на нм}^3$$

Оксид Si має менш щільну упаковку й тому має більш відкриту структуру. На кожні 1 мкм оксиду, утвореного на поверхні кристала, витрачається частина кристалу Si товщиною лише близько 0,5 мкм.

Задача 17. Знайти показник степеню *n* у виразах для сил відштовхування у рівнянні повної енергії $U(r) = N\varepsilon_i = -N(\frac{Ae^2}{r} - \frac{B}{r^n})$ для кристалу NaCl, якщо відомо, що ущільнення цієї речовини дорівнює 3, 3·10¹² см² · дін⁻¹, постійна Маделунга A=1,75, а рівноважна відстань між найближчими сусідами $r_0 = 2,81$ Å. Абсолютна величина е заряду іона прийнята рівною заряду електрона: $e = 4,8 \cdot 10^{-10}$ од. СГСЕ.

Вказівка. Ущільнення кристалу за визначенням є:

$$\chi == -\frac{1}{v} \frac{dv}{dP} \tag{1},$$

де V —об'єм кристалу, P —тиск. При **0**° К dU = -pdV, тобто

$$\frac{1}{\chi} = V \frac{d^2 U}{dV^2} \tag{2}$$

Виразити V через r_0 .

Розв'язок.

Розраховуючи $\frac{d^2 U}{dv^2} = \frac{dU}{dr} \frac{d^2 r}{dv^2} + \frac{d^2 U}{dr^2} (\frac{dr}{dv})^2$, відмітимо, що в решітці NaCl куб з ребром рівним міжатомній відстані *r*, містить "половину " молекули. З цього випливає, об'єм *V* кристалу, що складається з N молекул, дорівнює:

$$V = 2Nr^3 \tag{3}$$

Звідси $(\frac{dr}{dv})^2 = \frac{1}{36N^2r^4}$. Згадуючи, що $(\frac{dU}{dr})_{r_0} = 0$, отримаємо

$$\frac{1}{\chi} = \frac{1}{18Nr_0} \left(\frac{d^2 U}{dr^2}\right)_{r_0}$$
(4),

а з рівняння повної енергії:

$$\frac{d^2 U}{dr^2} = -N\left(\frac{2Ae^2}{r^3} - \frac{n(n+1)B}{r^{n+2}}\right)$$
(5).

Постійну *B* можна розрахувати з рівняння $\left(\frac{dv}{dr}\right)_{r_0} = 0$, тоді для $\frac{1}{\chi}$ отримуємо:

$$\frac{1}{\chi} = \frac{(n-1)Ae^2}{18r_0^4} \tag{6}.$$

Підставляючи сюди задані значення χ , A, r_0 , е знаходимо n=8..

Задача 18. Зразок домішкового напівпровідникового кристалу р-типу вирізано у вигляді прямокутного паралелепіпеду і розміщено в однорідне постійне магнітне поле з індукцією \vec{B} (рис.1). Показати, що провідність зразка зменшується зі збільшенням магнітного поля. Зокрема, якщо $\omega_0 \tau_{\varphi} \ll 1$ $(\omega_0 = \frac{eB}{m_p^* c})$, а середня довжина вільного пробігу не залежить від швидкості, то

$$\delta(B) = \delta_0 \left(1 - \frac{e^2 B^2}{m_p^* c^2} \frac{\lambda^2}{kT} \frac{4 - \pi}{8} \right),$$

де **δ**₀ – провідність у відсутності магнітного поля, а λ – середня довжина вільного пробігу. Передбачається, що ефективна маса ізотропна, і відповідно, ізоенергетичні поверхні в імпульсному просторі мають сферичну форму.



Рис. 1. Зразок домішкового напівпровідникового кристалу р-типу, розміщений в однорідному постійному магнітному полі з індукцією *В*

Розв'язок

Для зразка, заряди носіїв якого позитивні й на які діють постійне електричне $\vec{E} = \vec{i_x} E_x + \vec{i_y} E_y$ й магнітне $\vec{B} = \vec{i_z} B$ поля, як показано на рис. 1. Силу, що діє на такі носії, можна записати у вигляді:

$$\vec{F} = m_p^* \, \frac{dv}{dt} = e\vec{E} + \frac{e}{c}\vec{v} \times \vec{B} \tag{1}$$

(У виразі для електричного поля, передбачена ймовірність того, що *У*компонента може з'являтися всякий раз, коли носії заряду, які відхиляються вгору або вниз силою Лоренца, накопичуються біля верхнього або нижнього краю кристалу).

Перепишемо рівняння (1) через складові по координатним осям:

$$\frac{dv_x}{dt} = \frac{eE_x}{m_P^*} + \varpi_0 v_y \tag{2}$$

$$\frac{dv_y}{dt} = \frac{eE_y}{m_P^*} + \varpi_0 v_x \tag{3}$$

$$\frac{dv_z}{dt} = \mathbf{0} \tag{4}$$

$$\omega_0 = \frac{eB}{m_p^* c} \tag{5}$$

Рівнянні (4) показує, що прикладені поля не створюють ^z -компоненту прискорення, тому відкинемо його.

Рівняння (2) і (3) розв'язуються диференціюванням кожного з них за часом і підстановкою необхідної величини $\frac{dv_x}{dt}$ або $\frac{dv_y}{dt}$ з другого рівняння цієї системи:

$$\frac{d^2 v_x}{dt^2} + \omega_0^2 v_x = \frac{\omega_0 e E_y}{m_p^*} \tag{6}$$

$$\frac{d^2 v_y}{dt^2} + \omega_0^2 v_y = -\frac{\omega_0 e E_x}{m_p^*} \tag{7}$$

розв'язок яких має вигляд:

$$v_x(t) = ACos\omega_0 t + BSin\omega_0 t + \frac{eE_y}{\omega_0 m_p^*}$$
(8)

$$v_{y}(t) = CCos\omega_{0}t + DSin\omega_{0}t - \frac{eE_{x}}{\omega_{0}m_{p}^{*}}$$
⁽⁹⁾

де *А*, *В*, *С*, *D* – довільні сталі.

Необхідні теоретичні відомості

Однорідне диференціальне рівняння $a_0 \frac{d^2 y}{dt^2} + a_1 \frac{dy}{dt} + a_2 y = 0$ має розв'язок:

$$y = C_1 e^{S_1 t} + C_2 e^{S_2 t}, \quad S_{1,2} = \frac{-a_1 \pm \sqrt{a_1^2 - 4a_0 a_2}}{2a_0}$$

Загальний розв'язок неоднорідного рівняння $a_0 \frac{d^2 y}{dt^2} + a_1 \frac{dy}{dt} + a_2 y = f(t)$ можна представити у вигляді суми загального розв'язку однорідного і будь-якого часткового розв'язку неоднорідного рівняння.

Продовження розв`язку.

Диференціюючи розв'язки (8) та (9) і підставляючи їх знов в (2) і (3), видно, що рівняння задовольняються для всіх значень t тільки при C = B і D = -A. Використовуючи цей факт та обираючи в якості граничних умов початкові швидкості: $v_x = v_{0x}$, $v_y = v_{0y}$ (при t = 0), приводимо (8) і (9) до вигляду:

$$v_{x}(t) = \left(v_{0x} - \frac{eE_{y}}{\omega_{0}m_{p}^{*}}\right)Cos\omega_{0}t + \left(v_{0y} + \frac{eE_{x}}{\omega_{0}m_{p}^{*}}\right)Sin\omega_{0}t + \frac{eE_{y}}{\omega_{0}m_{p}^{*}}$$
(10)

$$v_{y}(t) = \left(v_{0y} + \frac{eE_{x}}{\omega_{0}m_{p}^{*}}\right)Cos\omega_{0}t + \left(v_{0x} - \frac{eE_{y}}{\omega_{0}m_{p}^{*}}\right)Sin\omega_{0}t - \frac{eE_{x}}{\omega_{0}m_{p}^{*}}$$
(11)

Ці компоненти швидкості має сенс усереднити за експоненціальним розподіленням середніх часів вільного пробігу. Середні за часом значення $(v_x)_t$ і $(v_y)_t$ (для дірок) записуються у наступному вигляді:

$$(v_{x,y})_t = \frac{\int_0^\infty v_{x,y}(t) \exp\left(-\frac{t}{\tau_p}\right) dt}{\int_0^\infty \exp\left(-\frac{t}{\tau_p}\right) dt}$$
(12)

де ^{*т*}*р* – час релаксації для дірок.

Зазначимо, що так як $(v_x)_t$ і $(v_y)_t$ мають потім ще раз усереднюватися за Максвелівським розподілом початкових швидкостей, а ці середні $(\overline{v}_{0x} i \overline{v}_{0y})$ дорівнюють нулю, то члени, що містять ці величини у виразах (10) і (11), можна відкинути із самого початку.

Після неважких перетворень, що включають находження табличних визначених інтегралів, отримаємо

$$\langle v_x \rangle_t = \frac{e}{m_p^*} \left(\frac{\tau_p}{1 + \omega_0^2 \tau_p^2} E_x + \frac{\omega_0 \tau_p^2}{1 + \omega_0^2 \tau_p^2} E_y \right) = \frac{e}{m_p^* \left[\left(\tau_p - \frac{\omega_0^2 \tau_p^2}{1 + \omega_0^2 \tau_p^2} \right) E_x + \frac{\omega_0 \tau_p^2}{1 + \omega_0^2 \tau_p^2} E_y \right] }$$
(13)

$$(v_y)_t = \frac{e}{m_p^*} \left(\frac{\omega_0 \tau_p^2}{1 + \omega_0^2 \tau_p^2} E_x + \frac{\tau_p}{1 + \omega_0^2 \tau_p^2} E_y \right)$$
(14)

Тепер ці величини можна усереднити за розподілом початкових швидкостей. Результати значно спрощуються, якщо припустити, що

$$\omega_0^2 \tau_p^2 \ll 1 \tag{15}$$

Це припущення виконується для досить слабких магнітних полів B_0 , тому умова (15) називають «умовою слабкого поля». Найбільші значення напруженостей B_0 для яких нерівність (15) ще має силу, можна визначити, якщо відомі $\bar{\tau}_p$ і m_p^* ; ці параметри можна оцінити з результатів вимірювань рухливості і даних циклотронного резонансу. Використовуючи загальноприйняті значення цих величин для Ge, можна показати, що (15) при при кімнатних температурах виконується для полів ~10кE. При більш низьких

температурах час релаксації стає більшим, але і гранична величина ^{*B*} може бути значно нижчою.

Якщо (15) виконується, то (13) і (14) спрощується. Тоді після усереднення за розподілом початкових швидкостей отримаємо:

$$\overline{v}_{x} = \frac{e}{\left(m_{p}^{*}\right)\left(\overline{\tau}_{p}E_{x} - \overline{\omega_{0}^{2}\tau_{p}^{3}}E_{x} + \overline{\omega_{0}\tau_{p}^{2}}E_{y}\right)}$$
(16)

$$\overline{v}_{e} = \frac{e}{\left(m_{p}^{*}\right)\left(\overline{\tau}_{p}E_{y} - \overline{\omega_{0}\tau_{p}^{2}}E_{x}\right)}$$
(17)

для густини струму:

$$I_x = p_0 e \overline{v}_x; \quad I_y = p_0 e \overline{v}_y \tag{18}$$

де *p*_• – рівноважна концентрація дірок.

Необхідні теоретичні відомості

Циклотронний резонанс

При або накладанні однофазного магнітного поля на метал напівпровідник електрони, з енергією із зони провідності речовини, починають описувати кола у площинах, перпендикулярних до напрямку магнітного поля, або спіралі (якщо електрони мають компоненти швидкості вздовж магнітного поля). Частота обертання по колу: $v_y = \frac{eB}{2\pi m^*}$ (СІ). При одночасному прикладанні до речовини змінного електричного поля спостерігається сильне вибіркове поглинання енергії поля при частоті у, що називається циклотронним резонансом. За допомогою циклотронного резонансу можна визначити ефективну масу m^* електронів у напівпровіднику, металі; довжину вільного пробігу електрону і т. д.

Задача 19. Дослідити характер руху квазівільного електрона в періодичному потенціалу кристалу.

Розв'язок

На рис. 1.а показано характер зміни потенціальної енергії електрона при переміщенні уздовж осі ОХ, що проходить через ланцюжок рівновіддалених один від одного позитивних іонів, розташованих у вузлах решітки кристала.



Рис.1. Зміна потенціальної енергії електрона при переміщенні уздовж лінійного ланцюжка позитивних іонів (а); найпростіша модель лінійного кристалу (б)

З рисунка 1 видно, що V(x) є періодичною функцією координати з періодом, що дорівнює параметру решітки *d*. Рівняння Шредінгера, що описує рух електрона в такому полі, має вигляд:

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + (E - V)\Psi = 0 \tag{1}$$

Як показав Блох, рішенням цього рівняння є хвильова функція виду:

$$\Psi_k(x) = U_k(x) \cdot e^{ikx} \tag{2},$$

тобто добуток функції e^{ikx} , яка описує рух вільного електрона в полі з постійним потенціалом (рівняння плоскої біжучої хвилі), на періодичну функцію $U_k(x)$, що залежить від хвильового числа k і має той же період, що і період потенціалу V(x) - період решітки d.

Спростимо задачу (1) до лінійної моделі кристала, показаної на рис. 1.6 і вперше розглянутої Кронігом і Пенні. У цій моделі атоми кристала представлені прямокутною потенціальною ямою шириною a; в ямі потенціальна енергія електрона V = 0. Атоми відокремлені один від одного потенціальними бар'єрами заввишки V і шириною b. Довжина ланцюжка атомів дорівнює L. У рамках такої моделі з (1) отримуємо диференціальне рівняння для $U_k(x)$:

$$\frac{d^2 U_k}{dx^2} + 2ik \frac{dU_k}{dx} + \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} (E - W_k - V) U_k = 0$$
(3),

де

$$W_k = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} k^2 \tag{4}$$

В області 0 < x < a, в якій V = 0, розв'язок рівняння (3) має такий вигляд (див. Квант. Мех. Задача «Проходження частинки через потенціальний бар`єр»):

$$U_k = A \cdot e^{i(\alpha - k)x} + B \cdot e^{-i(\alpha + k)x}$$
(5),

де

$$\alpha = \left(\frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} E\right)^{1/2} \tag{6}$$

В області a < x < (a + b), в якій $V \neq 0$ і E < V (висота бар'єру вище кінетичної енергії електрона), рівняння (3) має вигляд:

$$U_k = \mathbf{C} \cdot e^{i(\beta - ik)x} + D \cdot e^{-i(\beta + ik)x}$$
(7),

де

$$\beta = \left[\frac{8\pi^2 m(U-E)}{\hbar^2}\right]^{1/2} \tag{8}$$

Постійні A, B, C, D, співвідношення між k і α з (5) і (7) знаходяться з умови безперервності функції $U_k(x)$ та її першої похідної в місцях стрибка потенціалу, тобто в точках x = 0 та x = a. Якщо далі вважати, що ширина бар'єру $b \to 0$, і його висота $V \to \infty$, так, що вираз $b \cdot V$ стає постійним (такий перехід не викликає суттєвої зміни прозорості бар'єру), то зв'язок між k і α має вираз:

$$\frac{P\sin\alpha a}{\alpha a} + \cos\alpha a = \cos ka, \tag{9}$$

де

$$P = \frac{4\pi^2 ma}{\hbar^2} V \cdot b \tag{10}$$

завжди додатне і характеризується висотою бар'єру, що розділяє ями: при $b \to 0$ відстань *а* дорівнює параметру решітки *d*.

Так як α пов'язаний з енергією електрона *E* (рівняння 6), то рівняння (9) показує залежність енергії електрона від хвильового числа *k*. Тому, вирішуючи рівняння (9) відносно *E*, можна визначити власні значення енергії електронів як функцію *k*. На рис. 2 представлено графічне розв'язання (рівняння 9). Так як *coska* в правій частині (9) може змінюватися тільки в межах від +1 до –1, то αa може приймати тільки такі значення, при яких ліва частина (9) не виходить за межі області діапазону від +1 до –1. Можливі значення αa показані на рис. 2 відрізками $\Delta 1, \Delta 2, \Delta 3...$ Відповідно до формули (6) вони визначають дозволені значення енергії електрона. 3 рис. 2 видно, що зі збільшенням $|\alpha a|$, довжина відрізків ⊿ збільшується. Це означає, що чим вище розташована енергетична зона, тим вона ширше.



Рис.2. Графічне розв'язання рівняння: $\frac{P \sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a = \cos ka$

Зони дозволених енергій відокремлені одна від одної смугами заборонених енергій. Ці смуги відповідають областям *αa*, в яких ліва частина (9) більше +1 і менше –1.

Всередині першої смуги дозволених енергій *coska* змінюється від +1 до -1. Цьому відповідає зміна *ak* в межах від 0 до $\pm \pi$, або зміна *k* від $-\frac{\pi}{a}$ до $+\frac{\pi}{a}$:

$$-\frac{\pi}{a} \le k \le \frac{\pi}{a},\tag{10}$$

Нерівність (10) виражає область простягання першої енергетичної зони, першої зони Бриллюена. Всередині другої енергетичної зони *coska* змінюється від + 1 до -1; *ka* - від - π до -2 π і від π до 2 π ; *k* - від - $\frac{\pi}{a}$ до $-\frac{2\pi}{a}$ і від $\frac{\pi}{a}$ до $\frac{2\pi}{a}$. Ця область простягання другої енергетичної зони або зони Бриллюена і т.д. На рис. 3. показана залежність енергії електрона, що рухається в періодичному полі лінійного ланцюжка прямокутних потенціальних ям від хвильового числа *k*.

З'ясуємо фізичну природу розривів в енергії E(k). З цією метою виразимо хвильовий вектор k через довжину хвилі λ : $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ і підставимо цей вираз у співвідношення:

$$k = n \frac{\pi}{a} (n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, ...)$$
(11),

яке визначає області розриву в енергії. Тоді умова, при якій відбувається порушення безперервності функції E(k) і виникнення заборонених зон, перепишеться так: $n\lambda = 2a$ (12)

Видно, що (12) являє собою умову брегівського відбиття хвиль λ від атомних площин решітки.



Рис.3. Залежність енергії електрона, що рухається уздовж лінійного ланцюжка, від хвильового числа (а); енергетичний спектр електрона (б)

Згадаймо умови відбиття і дифракції Брегга.



Рис.4. Кристалічна решітка, з направленим на неї пучком паралельних монохроматичних променів

На рис. 4 показана кристалічна решітка. Направимо на цю решітку паралельний пучок монохроматичних променів з довжиною хвилі *λ*. Промені, відбиті від атомних площин, інтерферують між собою і підсилюють або послаблюють один одного. З рис. 4 видно, що умова посилення запишеться так:

$$2asin \gamma = n\lambda \tag{13}$$

Промені, які падають на атомні площини під кутом, що задовольняє умові (13), повністю відбиваються й не можуть пройти через решітку.

Електрони мають хвильові властивості. Якщо для цих хвиль умова Вульфа-Брегга (13) не виконується, то рух електрона описується плоскою хвилею *e^{ikx}* і зв'язок енергії *E* з хвильовим вектором однозначний.

При виконанні умови Вульфа-Брегга, тобто в точках $k_n = n \frac{\pi}{a}$ настає відбиття електронних хвиль від атомних площин, інтерференція відбитих хвиль e^{-ikx} з біжучими e^{ikx} та утворення стоячих хвиль. Тому в точках $k_n = n \frac{\pi}{a}$ ці хвилі дають два розв'язання рівняння:

$$\psi_1 = e^{i\frac{\pi}{a}x} - e^{-i\frac{\pi}{a}x}; \ \psi_2 = e^{i\frac{\pi}{a}x} + e^{-i\frac{\pi}{a}x}$$
(14)

Розв'язкам ψ_1 і ψ_2 відповідають різні енергії: розв'язку ψ_2 відповідає енергія E_{min} , яка відповідає верхній межі першої зони (точки A, рис. 3); розв'язку ψ_1 - енергія E_{max} , що відповідає нижній межі другої зони (точки B, рис. 3).

У тривимірному кристалі періодичність решітки в різних напрямках неоднакова. Тому значення хвильового вектора k, при яких настає брегівське відбиття і виникає розрив в енергетичному спектрі E(k) електрона для різних напрямків в решітці різні.

Задача 20. Експериментальне визначення енергетичних зон. Пояснити метод спектроскопії м'яких рентгенівських променів.

Описання метода

Рентгенівські промені виникають при бомбардуванні анода рентгенівської трубки потоком швидких електронів. При зіткненні з атомами речовини анода цей потік вибиває електрони із їх внутрішніх оболонок. "Пусті місця", що виникають, практично миттєво заповнюються електронами, що переходять з вищих енергетичних рівнів. Такі переходи супроводжуються випромінюванням рентгенівських променів. На рис.1 показана схема електронних оболонок ізольованого атома і виникнення спектральних серій рентгенівських променів.

Якщо електрон був вибитий з оболонки К, то "пусте місце", що там виникло, заповнюється шляхом переходів електронів із оболонок L, M, N і т.д. Ці переходи призводять до випромінювання К-серії.

Якщо електрон був вибитий з оболонки L, то "пусте місце", що там виникло, заповнюється шляхом переходів електронів із оболонок M, N і т.д. Ці переходи призводять до випромінювання L- серії і т.д.



Рис. 1. Схеми електронних оболонок ізольованого атома і виникнення спектральних серій рентгенівських променів

Якщо енергетичні рівні різкі (не розмиті), то перехід електрона з одного із них на інший, наприклад з рівня E_1 на рівень E_2 , супроводжується випромінюванням кванта зі строго визначеною частотою $v = \frac{E_1 - E_2}{h}$. Спектр такого рентгенівського випромінювання складається із набору різко окреслених спектральних ліній.

У твердих тілах енергетичні рівні внутрішніх електронів залишаються такими ж різкими, як і в ізольованих атомів. А рівні валентних електронів розмиваються в смуги шириною в декілька електрон-вольт. На рис. 2а наведено схему енергетичних рівнів твердого металу, у якого рівень 3s розмитий в зону.

Нехай анод рентгенівської трубки виготовлений із такого металу і енергія падаючих електронів підібрана так, що вони спроможні вибивати електрони з рівня 2р і не можуть вибити електрони із більш глибоких рівнів (2s i 1s). Тоді вільні місця можуть виникати тільки на рівні 2р. Внаслідок того, що над цим рівнем розташовується ціла енергетична зона 3s і електрон будь-якого підрівня цієї зони може перейти на вільний рівень 2р, то замість однієї різко окресленої спектральної лінії, що відповідає переходу 3s→2p, має виникнути велика кількість близько розташованих спектральних ліній, що утворюють майже неперервну смугу.



Рис. 2. Схема енергетичних рівнів твердого металу, у якого рівень 3s розмитий в зону (а); спектральна смуга випромінювання (б)

Такого роду дослідження безпосередньо доводять, що енергетичні спектри твердих тіл складаються із зон дозволених енергій, відділених один від одного смугами заборонених енергій. При переміщенні вздовж спектральної смуги зліва направо (рис. 26) частота випромінювання неперервно збільшується. Виділимо на смузі випромінювання вузьку смужку між частотами v₁ i v₂. Інтенсивність цієї смужки залежить від того, як часто відбуваються переходи електронів, що призводять до виникнення випромінювання з частотами v1 i v2. Це в свою чергу залежить від числа електронів в енергетичній зоні 3s, енергія яких замкнена між E₁ і E₂. Тобто, досліджуючи розподіл інтенсивності в смугах випромінювання м'яких рентгенівських променів, можна вивчити розподіл електронів в енергетичних зонах (в даному випадку в зоні 3s).

Лабораторна робота «Дослідження ефекту Холла у напівпровідниках»

Мета роботи: ознайомитися з явищем Холла, визначити постійну Холла і концентрацію електронних носіїв у напівпровіднику.

Обладнання: джерело постійного струму, реостат, міні блок «Датчик Холла», мультиметри, з'єднувальні провідники, електричні затискачі.

Теоретичні відомості

Ефе́кт Хо́лла – явище, при якому виникає поперечна різниця потенціалів під час розміщення провідника з постійним струмом у магнітному полі.

Відкритий Едвіном Холлом у 1879 році в тонких пластинах золота.

Нехай через металевий брусок у слабкому магнітному полі *В* протікає електричний струм під дією напруженості *E*. Магнітне поле буде відхиляти носії заряду (для визначеності електрони) від їхнього руху вздовж або протии електричного поля до однієї з граней бруса.



Рис.1. Ефект Холла на тонкій пластині

Таким чином, сила Лоренца призведе до накопичення від'ємного заряду біля однієї грані бруса та додатного – біля протилежної грані. Накопичення заряду продовжуватиметься доти, поки зарядів E_1 , яке виникло під дією магнітного поля, не врівноважить магнітну складову сили Лоренца:

$$eE_1 = evB \Rightarrow E_1 = vB.$$

Швидкість електронів v можна виразити через густину струму:

$$j = nev \Rightarrow v = \frac{j}{ne},$$

де *п* — концентрація носіїв заряду. Тоді

$$E_1 = \frac{1}{ne}jB.$$

Коефіцієнт $R_H = \frac{1}{ne}$ пропорційності між E_1 та $jB_{\text{називається}}$ коефіцієнтом Холла. У такому наближенні знак коефіцієнта Холла залежить від знака носіїв заряду, що дозволяє визначати їхній тип для великого числа металів. Для деяких металів (наприклад, таких як свинець, цинк, залізо, кобальт,вольфрам), у сильних полях спостерігається додатний знак R_H , що пояснюється в напівкласичній і квантовій теоріях твердого тіла.

Опис методу дослідження

Холловська напруга, згідно з теорією, лінійно залежить від магнітної індукції *B* і від протікаючого в зразку струму *I*. Якщо досвідченим шляхом отримати ці залежності, то по кутовому коефіцієнту експериментальної прямої к можна визначити постійну Холла. Дійсно, так як:

$$U_{\rm XOJJI} = R_{\rm XOJJI} \cdot \frac{I}{d} \cdot B = k \cdot B \quad , \tag{1}$$

то величина кутового коефіцієнта:

$$k = R_{\rm XOJII} \cdot \frac{I}{d} \,. \tag{2}$$

Звідси для постійної Холла отримуємо:

$$R_{\rm XOJIJ} = k \cdot \frac{d}{I} \tag{3}$$

Як джерело постійного магнітного поля використовують два дископодібні магніти. Величина індукції магнітного поля *B*, магнітне поле створюване магнітами визначається формулою:

$$B = \frac{3\mu_0 p_m}{4\pi Z^4} \tag{4}$$

де *R* – радіус магніта, *Pm* – магнітний момент магніта, *µ*₀ – магнітна стала.

Хід роботи

1. Встановити границі вимірювання мультиметрів: 2 В та 200 мА.

2. Скласти схему, зображену на рис.2.

3. Перевести повзунок реостату в максимальне положення.

4. Занести до табл.1 початкові значення струму та напруги та радіус магніта R_{M} .

5. Піднести до датчика магніти, так як це вказано на рис.3

6. Виміряти відстань між магнітами z та покази вимірювальних приладів.

7. Змінюючи відстань між магнітами внести до таблиці відповідні значення *U*.

8. Змінити полярність магнітів (рис.4) та здійснити вимірювання аналогічно до пункту 6-7.

9. За формулою (4) розрахувати значення магнітної індукції В для кожного значення *I*_{ем}.

10. Побудувати графік залежності $U_{\text{холл}} = f(B)$. Для цього на графіку відкласти експериментальні точки і провести по них найкращу пряму.

11. Розрахувати кутовий коефіцієнт k цієї прямої. Для цього на кінцях прямої вибрати дві довільні точки 1 і 2 та спроектувати їх на координатні осі (рис. 5). Тоді $k = \frac{U_{2xолл} - U_{1xолл}}{B_2 - B_1}$.

13. За формулою (3) розрахувати середнє значення постійної Холла для досліджуваного напівпровідника.

14. Обчислити концентрацію дірок n в досліджуваному напівпровіднику за формулою $n = \frac{r}{R_{\text{холл}} \cdot Q}$, де Q = e – елементарний заряд.

15. Зробити висновки.



Рис.2. Схема установки для дослідження ефекту Холла у напівпровідниках



Рис.3.Розміщення датчика Холла відносно полюсів магніту (а)



Рис.4. Розміщення датчика Холла відносно полюсів магніту (б)



Рис.5. Залежність Холлівської напруги від індукції магнітного поля

Табл.1.

Параметры установки: $I =$ мА, $R_{M} =$ мм, $d =$ мм								
	Положення г	юлюсів 1	Положення полюсів 2					
Ζ,	U _{холл} , В	<i>В</i> , Тл	Ζ,м	U _{холл} , В	<i>В</i> , Тл			

Лабораторна робота «Пряме перетворення сонячної енергії в електричну. Дослідження фотоелектричних перетворювачів енергії »

Мета роботи: визначити принцип перетворення сонячної енергії в електричну та дослідити основні технічні характеристики фотоелектричної батареї.

Прилади і матеріали: амперметр, вольтметр, реостат, ключ, люксометр, сонячні елементи, лампа розжарення.

Теоретичні відомості

Сонце є основним джерелом енергії, що забезпечує існування життя на Землі. Внаслідок реакцій ядерного синтезу в активному ядрі Сонця досягаються температури до 107 К. При цьому поверхня Сонця має температуру близько 6000 К. Електромагнітним випромінюванням сонячна енергія передається в космічному просторі і досягає поверхні Землі. Вся поверхня Землі отримує від Сонця потужність біля 1,2 · 1017 Вт Це еквівалентно тому, що менше однієї години отримання цієї енергії достатньо, щоб задовольнити енергетичні потреби всього населення земної кулі протягом року. Максимальна щільність потоку сонячного випромінювання, що припадає на Землю, становить приблизно 1 кВт/м². Для населених районів залежно від місця, часу доби і погоди потоки сонячної енергії змінюються від 3 до 30 МДж/м² на день. У середньому для створення комфортних умов життя потрібно приблизно 2 кВт енергетичної потужності на людину або приблизно 170 МДж енергії на день. Чи прийняти ефективність перетворення сонячної енергії в зручну для споживання форму 10% і потік сонячної енергії 17 МДж/м² на день, то необхідну для однієї людини енергію можна отримати з 100 м² площі земної поверхні. При середній щільності населення в містах 500 чоловік на 1 км² на одну людину припадає 2000 м² земної поверхні. Таким чином, достатньо всього 5% цієї площі, щоб за рахунок знімається з сонячної енергії задовольнити енергетичні потреби людини. Для характеристики сонячного випромінювання використовуються такі основні величини. Потік випромінювання - величина,

що дорівнює енергії, яку переносять електромагнітними хвилями за одну секунду через довільну поверхню. Одиниця виміру потоку випромінювання -Дж / с = Вт Щільність потоку випромінювання (енергетична освітленість) величина, що дорівнює відношенню потоку випромінювання до площі рівномірно опромінюваної ним поверхні. Одиниця виміру щільності потоку опромінюваної - Вт/м². Щільність потоку випромінювання від Сонця, що падає на перпендикулярний йому майданчик поза земної атмосфери, називається сонячної константи тієї S, яка дорівнює 1367 Вт/м². Світловий потік. Світловим потоком називається потік випромінювання, оцінюваний за його впливу на людське око. Людське око неоднаково чутливий до потоків світла з різними довжинами хвиль. Зазвичай при денному освітленні очей найбільш чутливий до світла з довжиною хвилі 555 нм. Тому однакові за потужністю потоки випромінювання, але різні довжини хвиль викликають різні світлові відчуття у людини. Одиницею виміру світлового потоку з точки зору сприйняття його людським оком (яскравості) є люмен (лм). Світловий потік в 1 лм білого світла дорівнює 4,6 · 10^3 Вт (або 1 Вт = 217 лм). Освітленість - величина, що дорівнює відношенню світлового потоку, що падає на поверхню, до площі цієї поверхні. Освітленість вимірюється в люксах (лк). 1 лк = 1 лм/м². Для білого світла 1 лк = 4,6 · 10⁻³ Вт/м² (Або 1 Вт/м² = 217 лк). Прилади, призначені для вимірювання освітленості, називаються люксметрами. Дані про освітленість, створюваної різними джерелами, наведено в табл. 1

Джерело	Освітлення лк	Освітлення, Вт/м ²
Сонячне світло опівдні	100000	460
(середовища широти)		
Сонячне світло взимку	10000	46

Таблиця 1. Освітленість, створювана різними джерелами

Хмарне небо влітку	5000-20000	23-92
Хмарне небо взимку	1000-2000	4,6-9,2
Розсіяне світло в світлій	1000	0.46
кімнаті (поблизу вікна)		
Світильники, що	30-50	0,14-0,23
створюють необхідну		
для читання освітленість		
Повний Місяць,	0,2	0,92 · 10 ⁻³
опромінювали поверхні		
Землі		

У зв'язку з великим потенціалом сонячної енергії надзвичайно принадним максимально можливе безпосереднє використання її для потреб людей. При цьому найоптимальнішим представляється пряме перетворення сонячної енергії в найбільш поширену в користуванні електричну енергію. Це стає можливим при користуванні такого фізичного явища, як фотоефект. Фотоефектом називаються електричні явища, що відбуваються при висвітленні речовини світлом, а саме: вихід електронів з металів (Фотоелектрична емісія або зовнішній фотоефект); переміщення зарядів через кордон розділу напівпровідників з різними типами провідності (р-п) (вентильний фотоефект); зміна електричної провідності (фотопровідність). При висвітленні кордону розділу напівпровідників з різними типами провідності (p-n) між ними встановлюється різниця потенціалів (фотоЕДС). Це явище називається фотоефектом, і на його використанні засновано створення вентильним фотоелектричних перетворювачів енергії (сонячних елементів і батарей). Найбільш поширеним напівпровідником, використовуваним для створення сонячних елементів, є кремній.

Сонячні елементи характеризуються коефіцієнтом перетворення сонячної енергії в електричну, який являє собою відношення падає на елемент потоку

випромінювання до максимальної потужності вироблюваної їм електричної енергії. Кремнієві сонячні елементи мають коефіцієнт перетворення 10-15% (тобто при освітленості 1 кВт/м² виробляють електричну потужність 1-1,5 Вт) при створюваної різниці потенціалів близько 1 В.

Типова структура сонячного елемента з p-n-переходом, зображена на рис. 1, містить: шар напівпровідника (товщиною 0,2-1,0 мкм) з n-провідністю 1; шар напівпровідника (товщиною 250-400 мкм) з p- провідністю 2; додатковий потенційний бар'єр (товщиною 0,2 мкм) 3; металевий контакт з тильного боку 4; з'єднувальний провідник з лицьовою поверхнею попереднього елемента 5; проти відбиваюче покриття 6; лицьової контакт 7; з'єднувальний провідник до заднього контакту наступного елемента 8. Характерний розмір сонячного елемента 10 см.



Рис. 1 Структура сонячного елемента

Сонячні елементи послідовно з'єднуються в сонячні модулі, які, у свою чергу, паралельно з'єднуються в сонячні батареї, як зображено на рис. 2



Рис. 2. Сонячний елемент (Е); сонячний модуль (М); сонячна батарея (Б)

У 1958 році вперше сонячні батареї були використані в США для енергозабезпечення штучного супутника Землі Vanguard 1. У подальшому вони стали невід'ємною частиною космічних апаратів. Широко відомі мікрокалькулятори, годинник, радіоприймачі і багато інші електронні апарати, що працюють на сонячних батареях.

Основні компоненти сонячної енергетичної установки зображені на рис. 3 А - акумуляторна батарея; Б - сонячна батарея з приборами контролю та управління; І - інвентор для перетворення постійного струму сонячної батареї в змінний струм промислових параметрів, споживаний більшістю електричних пристроїв.



Рис. 3 Сонячна енергетична установка

Незважаючи на нерівномірність добового потоку сонячного випромінювання і його відсутність у нічний час, акумуляторна батарея, накопичуючи виробляє

сонячною батареєю електрику, дозволяє забезпечити неперервну роботу сонячної енергетичної установки.

Хід роботи

Експериментальна установка (рис. 4) містить: сонячний модуль 1; амперметр 2 і вольтметр 3 для визначення сили струму і напруги, що виробляються сонячним модулем; джерело світла, що імітує сонячне випромінювання, 4; люксметр для визначення освітленості поверхні сонячного модуля 5; реостат, представляє собою регульоване навантаження в електричному ланцюзі 6



Рис. 4. Схема експериментальної установки

Порядок виконання роботи

Визначення люкс-вольтної характеристики сонячного елемента

1. Скласти схему за рис.4.

2. Упевнитися, що навантаження на сонячний модуль від'єднаний.

3. Встановити джерело світла. Включити його.

4. Люксметром виміряти освітленість Е, вольтметром - напругу U,В сонячного модуля.

5. За свідченнями вольтметра визначити вироблювану сонячним елементом ЕРС.

6. Всі результати занести в табл.2

7. Побудувати графік залежності напруги U,В від освітленості Е,Лк.

Таблиця 2

Е,Лк	U,B					
	Е,Лк					

Визначення вольт-амперної характеристики сонячного модуля

- Підключити навантаження (реостат) до ланцюга сонячного елемента та під єднати необхідні вимірювальні прилади.
- 2. Встановити джерело світла на пряме випромінювання на поверхню сонячного модуля (нульова відмітка на лімбі джерела).
- Включити джерело світла. За свідченнями вольтметра визначити напруга U в ланцюзі. За свідченнями амперметра визначити струм I в ланцюзі.
- 4. Переміщаючи рухоме джерело світла виконати вимірювання. За свідченнями вольтметра визначити напругу U в ланцюзі. За свідченнями амперметра визначити струм I в ланцюзі. Провести вимірювання 3 рази для кожного сонячного елемента.
- Для кожного вимірювання обчислити електричну потужність в ланцюзі W = I U.
- Всі дані занести в табл. 3 Таблиця 3

Номер	Освітлення лк	Напруга U, B	Струм I, А	Потужність
вимірювання				W, Bt

7. Побудувати вольтамперну характеристику (графік залежності U від I).

Лабораторна робота: Дослідження МДН – структур методом височастотних вольт-фарадних характеристик Теоретичні відомості

метал-діелектрик-напівпровідник, МЛН-Структури або скорочено структури. широким інтересом до вивчення їх фізичних властивостей, зобов'язані появі технології планарної i розвитку нового класу напівпровідникових приладів, що працюють на основі ефекту поля, таких як прилади з зарядовим зв'язком, польові транзистори з ізольованим затвором, репрограмовані елементи пам'яті з плаваючим затвором і т.п. МДН-структури є основними керуючими елементами даних пристроїв і надійність їх роботи визначається надійністю самої структури метал-діелектрик-напівпровідник. Вони дозволяють аналізувати основні процеси, що протікають у такого роду приборах, і є надзвичайно зручними об'єктами дослідження.

МДП-структура представляє собою монокристалічну пластину напівпровідника, що називається підкладкою, закритою з планарного боку діелектриком. Металевий електрод, нанесений на діелектрик, називається <u>затвором</u>, а сам діелектрик називається <u>підзавтвором</u>. На зворотну непланарну сторону напівпровідникової пластини наноситься металевий електрод, що називається омічним контактом. Досить часто в якості діелектрика в МДНструктурах використовують оксиди, тому замість МДН використовується назва МОН-структура. МДН-структура, показана на рис.1, складається із затвора, діелектрика підзатвора, напівпровідникової підкладки,омічного контакту.



Рис.1. Будова МДН-структури: 1 - затвор, 2 - діелектрик, 3 – напівпровідник, 4 - омічний контакт

При подачі напруги V_g до затвору в напівпровіднику створюється область просторового заряду (ОПЗ). Таке явище називається ефектом поля. Таким чином, ефект поля – це зміна концентрації вільних носіїв в приповерхневій області напівпровідника під дією зовнішнього електричного поля. Залежно від знаку і величини напруги V_g на затворі, може реалізуватися 4 енергетичних стани приповерхневій області напівпровідника: збагачення, збіднення, слабка і сильна інверсія.

Збагачення – стан поверхні напівпровідника, коли поверхнева концентрація основних носіїв більша, ніж концентрація основних носіїв в нейтральному об'ємі.

Збіднення – стан поверхні напівпровідника ,коли поверхнева концентрація основних носіїв менша, ніж концентрація основних носіїв в квазінейтральному об'ємі, але більша, ніж поверхнева концентрація неосновних носіїв.

Перехід від стану збагачення до стану збіднення відбувається при значенні поверхневого потенціалу $\varphi_s = 0$, що отримав назву потенціалу «плоских» зон. При цьому концентрація основних і неосновних носіїв на поверхні і в об'ємі співпадають

Слабка інверсія – стан поверхні напівпровідника, коли поверхнева концентрація неосновних носіїв більша, ніж поверхнева концентрація основних, але менша, ніж концентрація основних носіїв в квазінейтральному об'ємі.

Сильна інверсія – стан поверхні напівпровідника, коли поверхнева концентрація неосновних носіїв більша, ніж концентрація основних носіїв в квазінейтральному об'ємі.



Рис.2. Зонні діаграми ідеальної МДН- структури при $V \neq 0$: а – режим збагачення (акумуляції); б – режим збіднення; в – режим інверсії (E_v - верхній рівень валентної зони, E_c – нижній рівень зони провідності, E_F – рівень Фермі, E_i – власний рівень)

Напруга на затворі V_g рівна сумі падінь напруги на оксиді (діелектрику) V_{ox} і напівпровіднику ψ_s (рівняння електронейтральності)

$$V_{g} = V_{ox} + \psi_{S} \tag{1}$$

Поверхневий потенціал ψ_s – одна з основних кількісних характеристик при описі ефекту поля. Розв'язуючи рівняння Пуассона для ОПЗ, можна знайти залежність заряду в ОПЗ Q_{sc} від ψ_s :

$$Q_{SC} = \varepsilon_{s}\varepsilon_{0}E_{s} = \pm \frac{\sqrt{2\varepsilon_{s}\varepsilon_{0}kT}}{qL_{d}} \cdot F(\psi_{s},\varphi_{0})$$
(2)

Де $L_D = \sqrt{\frac{kT}{q} \frac{\varepsilon_s \varepsilon_0}{q N_D}}$ довжина екранування Дебая.

Функція $F(\psi_S, \varphi_0)$ для не виродженого напівпровідника р-типу :

$$F(\psi_{S},\varphi_{0}) = \sqrt{(e^{-\beta\Psi_{S}}) + \beta\Psi_{S} - 1} + e^{-2\beta\Psi_{S}}(e^{\beta\Psi_{S}} - \beta\Psi_{S} - 1)$$

 $\beta = \frac{q}{kT}$, N_{d} – концентрація легуючої домішки в підкладці, φ_{0} – положення рівня Фермі в квазінейтральному об'ємі напівпровідника, відрахована від середини забороненої зони, $\varepsilon_{s} = 11,7 \pm 0,2$ – діелектрична проникність кремнієвого напівпровідника, Т – температура, ε_{0} – електрична стала, k – стала Больцмана, q – заряд електрона.

Для визначення розглядаємого напівпровідника р-типу, для якого основними носіями заряду є дірки, збагачення при поверхневої області наступає при $V_g < 0$, а заряд в ОПЗ при $V_g > 0$ обумовлений наявністю іонів акцепторної домішки. Оскільки зміна поверхневого потенціалу ψ_S викликає зміну заряду Q_{SC} , то за визначенням ємності, можна ввести величину C_{SC} - ємність ОПЗ:

$$C_{sc} = \frac{\partial Q_{sc}}{\partial \psi_s} = \frac{\varepsilon_s \varepsilon_o}{\sqrt{2}L_D} \cdot \frac{\sqrt{(1 - e - \beta \psi_s) + e^{-2\beta \varphi_0} (e^{\beta \psi_s} - 1)}}{F(\psi_s, \varphi_0)}$$
(3)

Вираз (3) можна спростити :

а) у разі збагачення ($\psi_{S} < 0$) :

$$C_{SC} = C_p = \frac{\varepsilon_S \varepsilon_0}{L_d} e^{-\beta \psi_S}$$

-*C*_{SC} обумовлена ємністю вільних дірок

б) у разі збіднення ($\varphi_0 > \Psi_s > 0$) і слабкої інверсії ($2\varphi_0 > \Psi_s > 0$)

$$C_{SC} = C_B = \sqrt{\frac{\varepsilon_s \varepsilon_o q N_B}{2\left(\varphi_o - \frac{kT}{q}\right)}} = \frac{\varepsilon_s \varepsilon_o}{W}$$

де W – ширина ОПЗ, –*C*_{SC} обумовлена ємністю іонізованих акцепторів в) у разі сильної інверсії ($\psi_{S} > 2\varphi_{0}$)

$$C_{SC} = C_n = \frac{\varepsilon_s \varepsilon_0}{L_d} e^{\frac{\beta(\Psi_s - \varphi_0)}{2}}$$

-*Csc* обумовлена смністю вільних електронів,

г) у разі плоских зон ($\psi_{S} = \mathbf{0}$)

$$C_{SC} = C_{FB} = \sqrt{\frac{\varepsilon_s \varepsilon_{\mathbf{o}} q N_B}{\frac{kT}{q}}} = \frac{\varepsilon_s \varepsilon_{\mathbf{o}}}{L_d}$$

Смність всієї МДН структури можна представити як ланцюжок послідовно сполучених ємностей C_{0X} (геометрична ємність діелектрика пі затвора) і *Csc* (ємність ОПЗ). За наявності поверхневих станів ємність *Css*, пов'язана з їх перезарядкою, включаючи паралельно з ємністю ОПЗ, рис.3.



Рис.3. Еквівалентна схема МДН структури (р-типу) в сильній інверсії $C_{\mathbf{B}} + C_{\mathbf{n}} = C_{SC}$

Тоді ємність структури С буде рівна:

$$C = C_{0X} (1 - C_{0X} / (C_{0X} + C_{SC} + C_{SS}))$$
(4)

Напругу на затворі *Vg* можна представити у вигляді:

$$V_g = V_{FB} + \Psi_s + \frac{qN_{SS}\Psi_s}{C_{ox}} - \frac{Q_{sc}}{c_{ox}}$$
(5)

де напруга плоских зон:

$$V_{FB} = \Delta \varphi_{ms} - \frac{Q_{ox}}{c_{ox}} + \frac{q N_{ss} \varphi_{\mathbf{o}}}{c_{ox}}$$

Фтs - контактна різниця потенціалів затвор- підкладка,

*Q*ox – фіксований заряд в діелектрику,

*N*_{ss} – щільність поверхневих станів.

Височастотні вольтфарадні характеристики

У даному методі дослідження МДН структур вимірювання ємності здійснюється при змінній напрузі з періодом, істотно меншим, ніж час життя неосновних носіїв і час перезарядки поверхневих станів. Тоді відповідні ємності C_n і C_{ss} в еквівалентній схемі (рис.4.) можна виключити. Прикладена до затвору напруга V_g викликає зміну поверхневого потенціалу

 $\Psi_{s}(1)$ і, отже, ємності ОПЗ С_{SC} (3), а також ємності всієї структури С (4). Аналізуючи експериментально отриману залежність С(V_{g}), можна визначити ряд важливих параметрів:

p-SI



Рис.4. Вольтфарадна характеристика МОН-структури за відсутності поверхневих станів (теоретична крива) для кремнія n-типу (зліва), p-типу (справа)

а) Тип підкладки (n або p) по положенню верхньої "полиці" ВВФХ: якщо $C=C_{max}$ при $V_g>0$, то підкладка n-типу, а якщо $C=C_{max}$ при $V_g<0$ то підкладка p-типу (див. рис.4).

б) Товщина діелектрика d_{ox} по величині C_{max}= C_{ox}:

n-Si

$$d_{ox} = \varepsilon_s \varepsilon_0 S / C_{max}, \tag{6}$$

де S – площа затвора,

 $\epsilon_s = 11,7 \pm 0,2 \approx 12$ – діелектрична проникність напівпровідника,

 $\epsilon_0 - \phi$ ізична константа.

в) Ємність збідненої зони можна розрахувати з максимальної виміряної ємності(ємності насичення):

$$1/C_{36} = 1/C_{\text{мін}} - 1/C_{\text{макс}},$$

де С_{мін} – ємність МДН-структури в режимі сильної інверсії.

г) Товщина збідненої області становитиме:

$$d_{ox} = \varepsilon_s \varepsilon_0 S / C_{3\delta} = \varepsilon_s \varepsilon_0 S (1/C_{\text{min}} - 1/C_{\text{make}}).$$

д) 3 іншого боку,

$$d_{ox} \approx 2(\varepsilon_s \varepsilon_0 \varphi_0 / q N_D)^{1/2} \tag{7}$$

де N_D – концентрація носіїв, $\phi_0 = (kT/q)Ln(N_Dn_i)$ (8)

n_i – концентрація основних носіїв заряду в напівпровідниковій підкладці. Для кремнію n_i (при T=300 K) = 1.5*10₁₀ см⁻³.

З системи рівнянь (7) та (8) можна знайти N_D. Для розв`язку такої системи рівнянь використовують метод послідовної підстановки. Згідно цього методу рівняння (7) записується як:

$$N_{\rm D} = 4\epsilon_{\rm s}\epsilon_0 \varphi_0 / q d_{\rm 36}^2 \tag{9}$$

Використовуючи метод ітерацій, підставимо в рівняння всі значення, припустимо, що стартове значення ϕ_0 =-0.2 eB. Розрахувавши таким чином N_D, підставимо його в рівняння (8) та знайдемо ϕ_0 , яке буде точніше за стартове припущення. Після кількох таких підстановок значення розраховуються з необхідною точністю. З отриманих значень можна розрахувати довжину Дебая:

$$L_D = (\epsilon_s \epsilon_0 kT/q^2 N_A)^{1/2}$$

е) З довжини Дебая ємність плоских зон визначається:

$$C_{\Pi 3} = C_{\Pi \Pi} C_{\Pi} / (C_{\Pi} + C_{\Pi \Pi}) = \epsilon_{\Pi} / (\epsilon_{\Pi \Pi} d_{\Pi} + \epsilon_{\Pi} L_{\Pi}).$$
ж) З отриманих вольтфарадних характеристик можна розрахувати діелектричну проникність прошарку діелектрика МДН-структури в наближенні плоского конденсатора: $\varepsilon_{e\phi} = C_{MDH} d_{ox} / \varepsilon_0 S$,

де S площа МДН-структури, С_{МДН} – ємність насичення МДН-структури (максимальна ємність), d_{ox} – товщина діелектричного шару.

Отримати експериментальну високочастотну вольтфарадну характеристику можна за допомогою установки, блок-схема якої представлена на рис. 5. Подаємо напругу зміщення через вхідні фільтри вимірювача Е7-8 на зразок. Значення ємності, виміряні Е7-8, зчитуються з його дисплея.



Рис.5. Блок-схема установки для вимірювання високочастотних вольтфарадних характеристик (ВВФХ)

Порядок виконання роботи і обробки результатів

- Ознайомитися з установкою для вимірювання ВВФХ та інструкцією до неї. Прогріти прилад Е7-8 «Цифровий вимірювач R, L, C». Особливо звернути увагу на сторінку 61 інструкції.
- 2. Провести вимірювання ВВФХ, для цього підключити клеми ГU до затвору, а клеми IU до тильного контакту. Напругу подавати в спадаючому порядку, починаючи з U_{max}=10 В з кроком 0.5 В. Отримуємо ВФХ при зворотному зміщенні. Далі, змінивши клеми, збільшувати напругу до 10 В з кроком 0.5. Отримана ВФХ описуватиме ємність при прямому зміщенні.

- 3. З отриманих ВВФХ визначити:
- а) тип підкладки, побудувавши графік;
- б) товщину діелектрика d_{ox},
- в) ємність збідненої зони С_{зб},
- г) товщину збідненої зони d_{зб},
- д) рівень легування підкладки N_D,
- е) визначити ємність плоских зон $C_{\Pi 3}$,

ж) розрахувати діелектричну проникність прошарку діелектрика МДНструктури в наближенні плоского конденсатора є_{еф}.

Література

1. Ашкрофт М. Физика твердого тела / М. Ашкрофт, Н. Мермин. – М.: Мир, 1979. – 600 с.

2. Блеймор Дж. Физика твердого тела / Дж. Блеймор. – М.: Мир, 1988. – 267 с.

 Голдсмид Г. Дж. Задачи по физике твердого тела / Г. Дж. Голдсмид. – М.: Наука, 1976. – 431 с.

4. Жданов Т. С. Лекции по физике твердого тела / Т. С. Жданов, А. Г. Худжуа. – М.: Изд. Моск. университета, 1988. – 393 с.

Бонч-Бруевич В. Л. Физика полупроводников / В. Л. Бонч-Бруевич, С.
 Г. Калашников. – М.: Наука, 1977. – 672 с.

6. Вычислительные методы в теории твердого тела: пер. с англ. / [под ред.
А. Власенко и В. Рабин]. – М.: Мир, 1974. – 400 с.

7. Займан Дж. Принципы теории твердого тела / Дж. Займан. – М.: Мир, 1974. – 378 с.

 Киттель Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель.; [пер. с англ. А. А. Гусева]. – М.: Наука, 1978. – 356 с.

9. Панин В. Е. Атом - вакансионные состояния в кристалах / В. Е. Панин,
В. Е. Егорушкин, Ю. А. Хон // Изв. вузов. Физика. – 1982. – №12. – С. 5–28.

10. Слэтер Дж. Диэлектрики, полупроводники, металлы / Дж. Слэтер – М: Мир, 1969. – 467 с.

Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. / У.
 Харрисон; [пер. с англ. Ж. И.Алферова]. – М.: Мир, 1983. – 289 с.

12. Ястребов Л. И. Основы одноэлектронной теории твердого тела / Л. И. Ястребов, А. А. Кацнельсон. – М.: Наука, 1981. – 189 с.

13. Кацнельсон А. А. Введение в физику твердого тела / А. А. Кацнельсон. – М.: Изд. Моск. университета, 1984. – 289 с.

14. Павлов П. В. Физика твердого тела / П. В. Павлов, А. Ф. Хохлов. – М.: Высш. шк., 1985. – 384 с.

15. Шаскольская М. П. Кристаллография / М. П. Шаскольская. – М.: Высш. шк., 1976. – 459 с.

16. Болеста I. М. Фізика твердого тіла : навчальний посібник / І. М. Болеста. – Львів.: Видавн. Центр ЛНУ імені Івана Франка, 2003. – 480 с.

17. Гусев М. Б. Физические основы твердотельной электроники / М. Б. Гусев, Г. М. Дубинина. – М.: Изд. Моск. университета, 1986. – 312 с.

18. Киреев А.С. Физика полупроводников /А.С. Киреев. М.: Высшая школа, 1969. 590 с..

19. Бонч-Бруевич В.Л. Физика полупроводников /В.Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников. М.: Наука, 1977. 672 с.

20. Орешкин П.Г. Физика полупроводников и диэлектриков /П.Г. Орешкин. М.: Высшая школа, 1972. 448 с.

21. Гуртов В.А. Основы физики структур металл - диэлектрик - полупроводник /В.А. Гуртов. Петрозаводск. 1983. 92 с.

22. Федосов Я.Л. Основы физики полупроводниковых приборов /Я.Л. Федосов. 2-е изд. М.: Советское радио, 1969. 592 с.

23. Гуртов В.А. Электронные процессы в структурах металл - диэлектрик - полупроводник /В.А. Гуртов. Петрозаводск. 1984. 116 с

24. Streetman B.G. Solid state electronic devices /B.G. Streetman, S. Banerjee, New Jersey: Prentice Hall, 2000. 558 p

25. Полупроводниковые приборы: Справочник. Транзисторы. А.В. Нефедов, В.И. Гордеева. М.: КубК-а, 1996. 420 с.

26. Гаман В.И. Физика полупроводниковых приборов: Учебное пособие. /В.И. Гаман. Томск: Изд-во НТЛ, 2000. 426 с.

27. Пасынков В.В. Полупроводниковые приборы: Учебник для вузов /В.В. Пасынков, Л.К. Чиркин. 6-е изд., стер. СПб.: Лань, 2002. 480 с.

28. Зи С. Физика полупроводниковых приборов /С. Зи. М.: Мир, 1984. T.1, 456 c; T.2, 456 c