Άσκηση (Παράδοση 2/4/2020)

Θεωρήστε ένα μονοδιάστατο μοντέλο του κοινού αλατιού (NaCl), όπου οι θέσεις των ατόμων του Na και του Cl είναι αντιστοίχως $x_n = 2dn$ και $d + 2dn$ (η απόσταση μεταξύ γειτόνων είναι d= 2,36 A και n είναι η υπ' αριθ. n θεμελιώδης κυψελίδα (ΘΚ) μήκους $2d$ (η κάθε ΘΚ περιέχει ένα ατομικό τροχιακό ϕ_A με κέντρο το σημείο x_n και ένα ατομικό τροχιακό ϕ_B με κέντρο το σημείο x_n+d).

(βλ.Σχ. 6.5). Το ϕ_A είναι το ατομικό τροχιακό 3s του Na και το ϕ_B είναι το ατομικό τροχιακό $3p_x$ του Cl. Λάβετε υπόψη ότι $\langle \phi_A | H | \phi_B \rangle = \pm 1,42 \frac{\hbar^2}{m_e d^2}$ (ΠΡΟΣΟΧΗ! Το συν ισχύει όταν το τροχιακό s είναι στα αριστερά του p_x, (όπως στο Σχ. 6.2), ενώ το πλην όταν το p_x είναι στα αριστερά του s).

1. Γράψτε τις σχέσεις που προσδιορίζουν την ιδιοενέργεια E(k) και τους συντελεστές c_A και c_B στο τροχιακό (του 1D στερεού) που έχει την ακόλουθη μορφή: $|k\rangle = \sum \{c_A e^{ikx_n} |\phi_A(x - x_n)\rangle + c_B e^{ikx_n} |\phi_B(x - d - x_n)\rangle\}$ (Στο μοντέλο του Σχ. 6.5 και το ϕ_A και το ϕ_B είναι τύπου s, ενώ εδώ το ϕ_B είναι τύπου p_x).

2. Ποια είναι η τιμή του χάσματος E_g σε eV; Πώς συγκρίνεται με την πειραματική τιμή;

3. Σχεδιάστε στον υπολογιστή τους δύο κλάδους της E(k) ως συναρτήσεις του k, όπου $-(\pi/2d)<k<(\pi/2d)$, δηλαδή το k να περιοριστεί στη πρώτη ζώνη Brillouin.
4. Υπολογίστε την ενεργό μάζα στο ανώτερο μέρος της Ζώνης Σθένους (ΖΣ) και στο κατώτατο μέρος της Ζώνης Αγωγιμότητας (ΖΑ) ως ποσοστό του m_e.
5. Υπολογίστε τις τιμές c_A και c_B στο ανώτερο μέρος της Ζώνης Σθένους (ΖΣ) και στο κατώτατο μέρος της Ζώνης Αγωγιμότητας (ΖΑ).
6. Ο μονωτής που προέκυψε είναι άμεσου ή έμμεσου χάσματος;

   Υποδείξεις: τα διαγώνια στοιχεία να τα πάρετε από τον Πιν.6.1. Είναι απαραίτητο και πολύ σημαντικό να μάθετε να γράφετε ένα πρόγραμμα στον υπολογιστή που να κάνει γραφήματα. Αν δεν ξέρετε, συμβουλευτείτε ένα συμμαθητή σας που ξέρει,