Физика Конденсированного состояния
Кононов Александр Михайлович
1.03.2025

Задача 1:

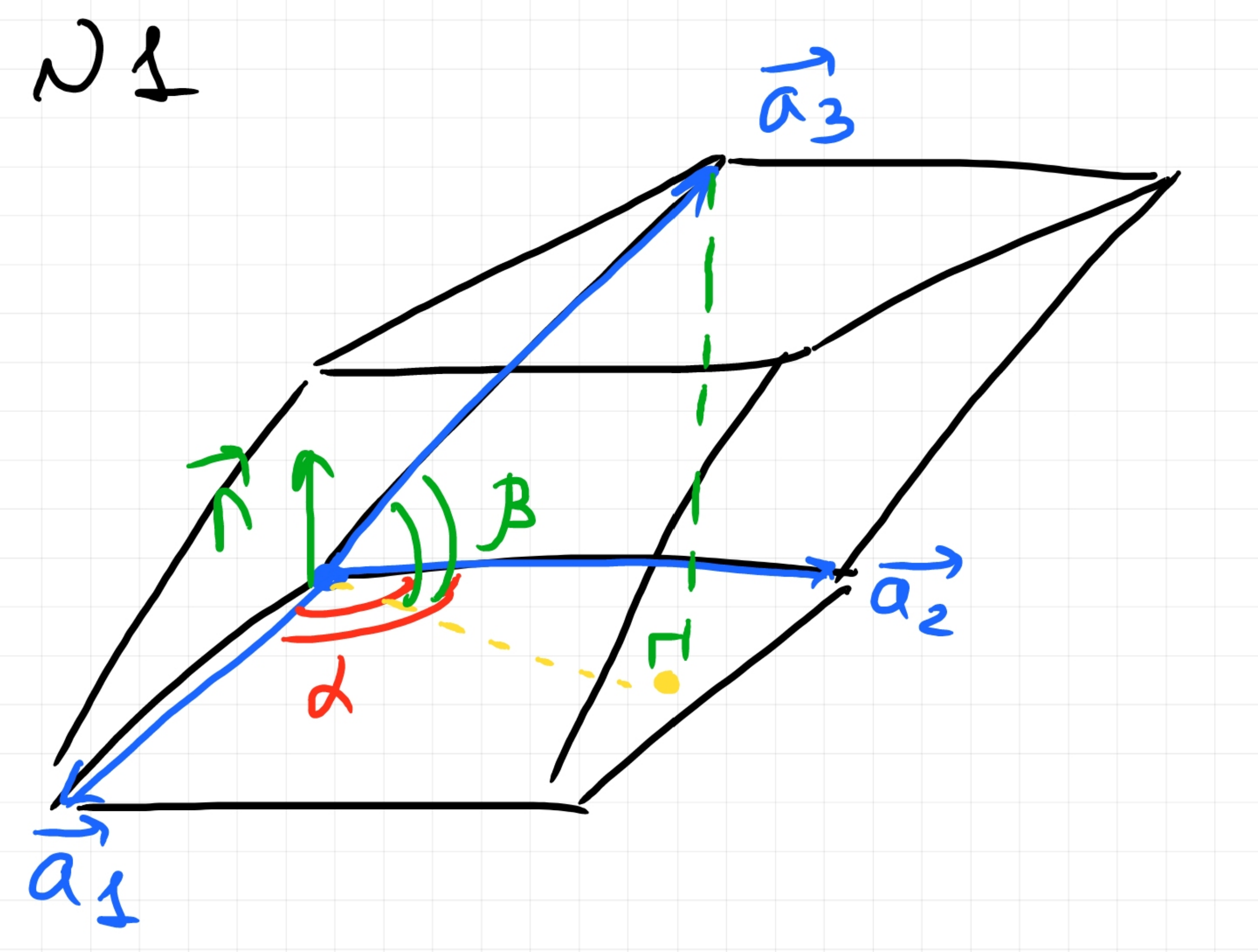
Условие:

1. Докажите, что объем элементарной ячейки, построенной на векторах трансляций $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ выражается по формуле

$$v_0 = (\boldsymbol{a}_1 \cdot [\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3]).$$

Считать, что векторы $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ образуют правую тройку.

Решение:



так как вектора образуют паралелепипед, его объем это

$$v_0 = S \cdot h$$

из геометрии знаем

$$|\vec{a_1} \times \vec{a_2}| = |\vec{a_1}| \cdot |\vec{a_2}| \sin\alpha = S$$

$$\vec{a_1} \times \vec{a_2} = \vec{n} \cdot S, \ \text{где} |\vec{n}| = 1$$

$$\vec{a_3} \cdot \vec{n} = |\vec{n}| \cdot |\vec{a_3}| \cdot \cos(\pi/2 - \beta) = |\vec{a_3}| \sin\beta = h$$

$$\Rightarrow (\vec{a_3} \cdot [\vec{a_1} \times \vec{a_2}]) = Sh = v_0$$

QED

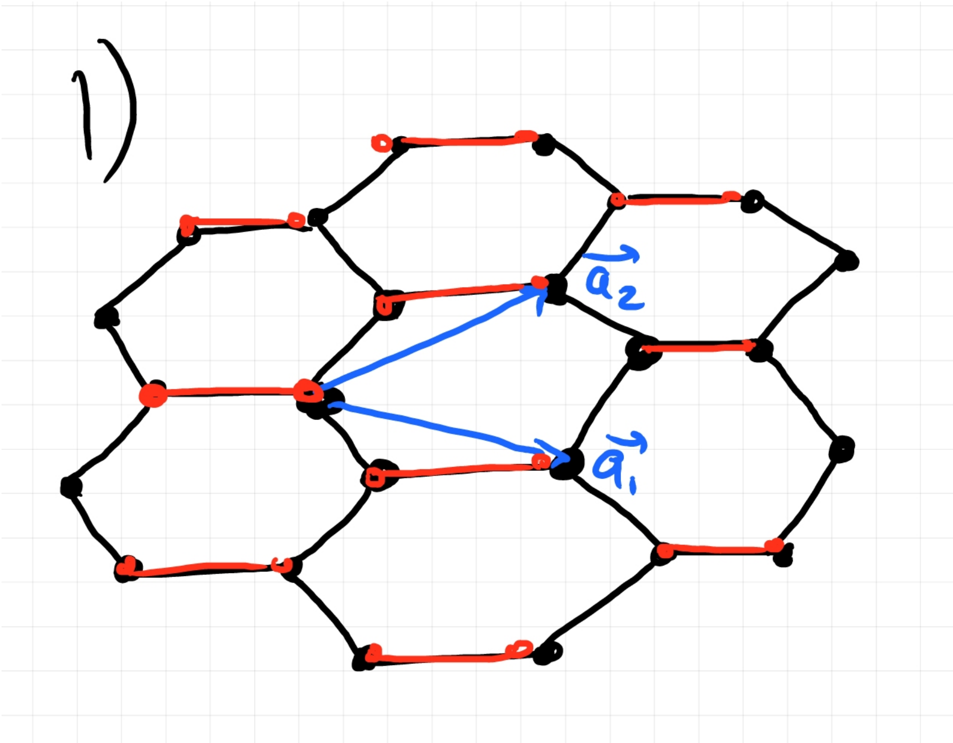
Задача 2:

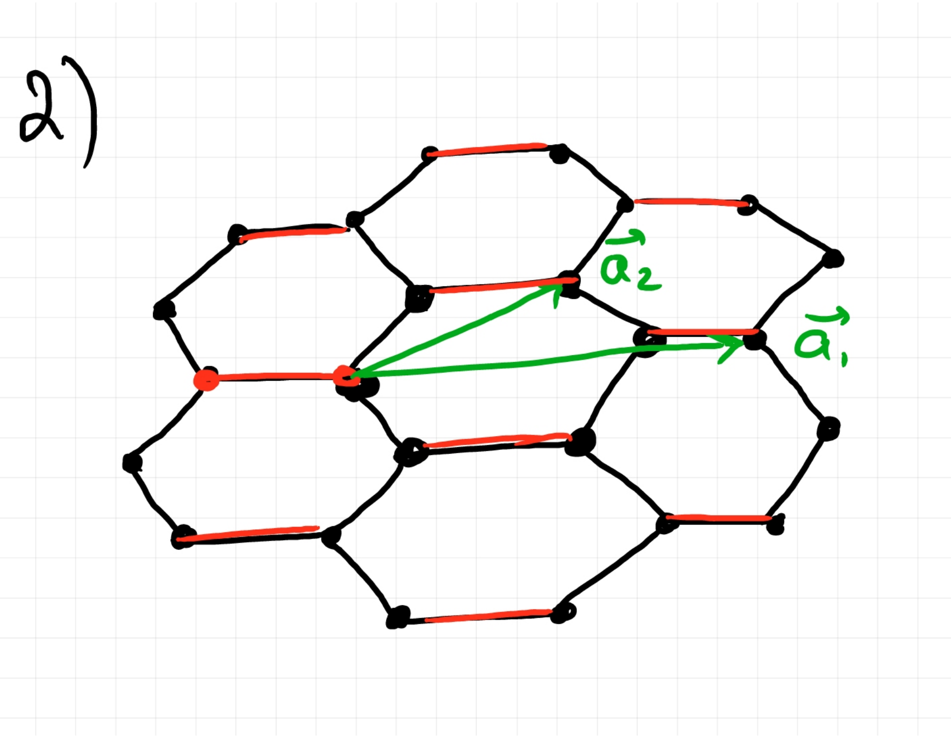
Условие:

2. Для решетки *графена* (пчелиные соты, honeycomb) предложить два базиса векторов трансляций.

Решение:

В элементарной ячейке графена 2 атома (на картине элем ячейка обозначена красным)



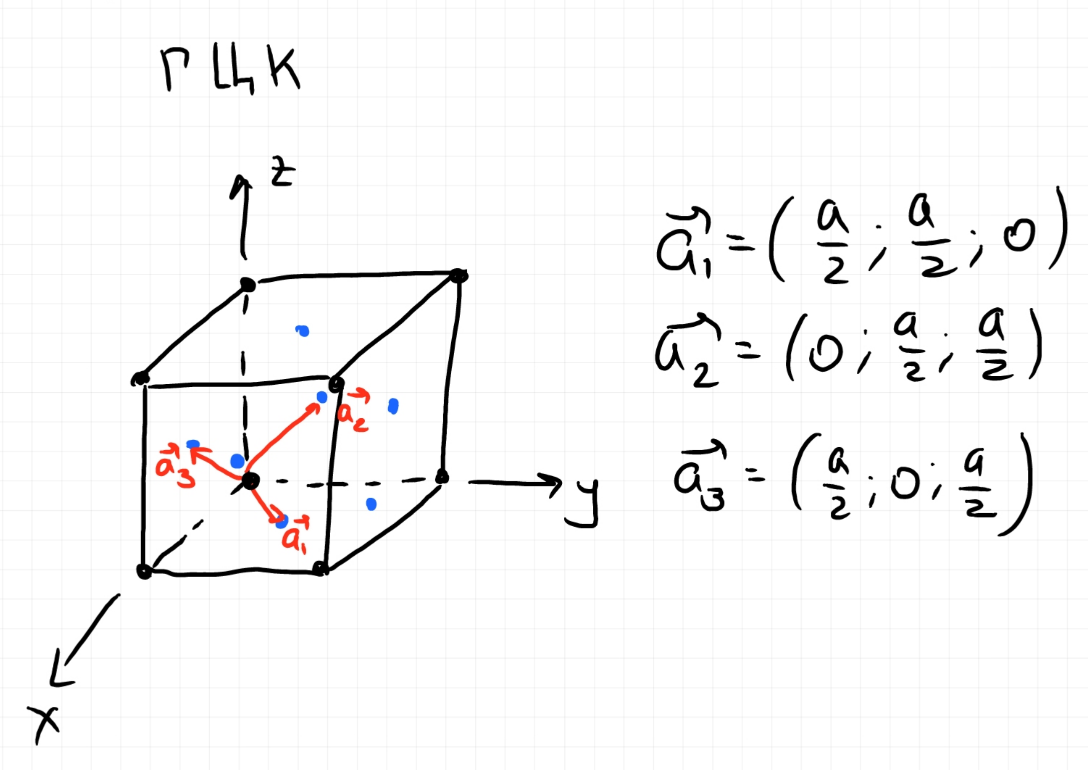


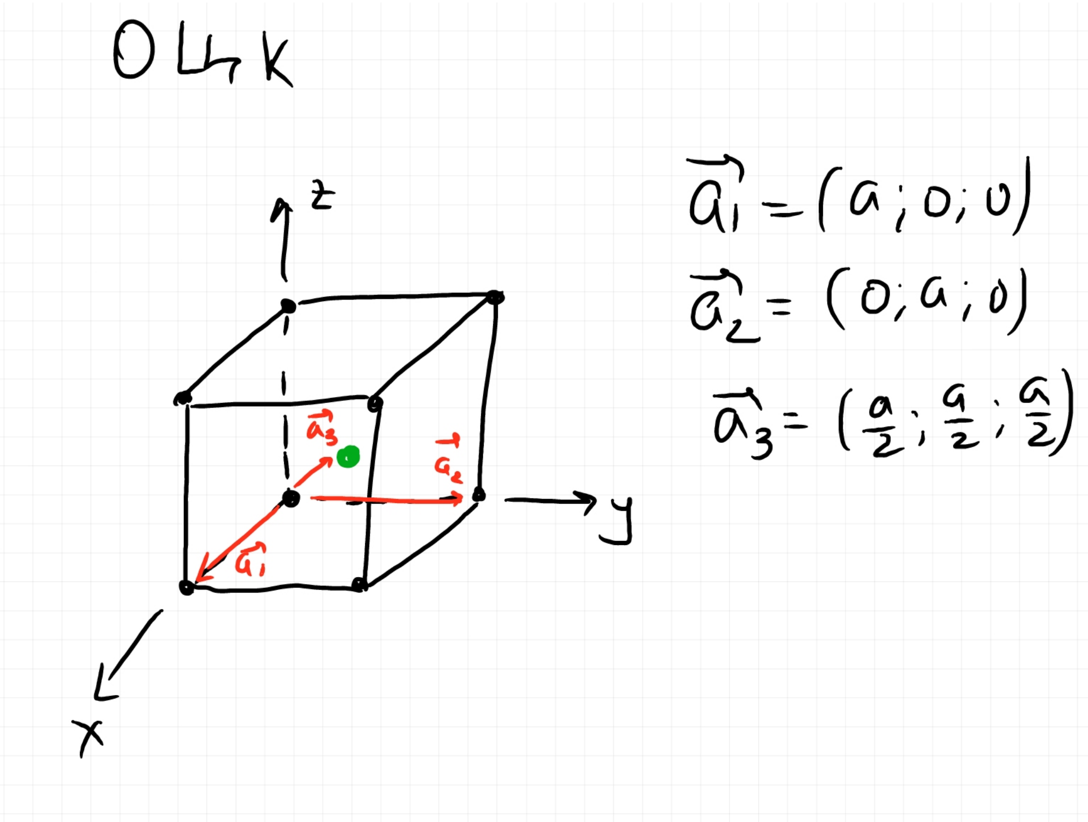
Задача 3:

Условие:

3. Построить векторы трансляций для ГЦК и ОЦК решеток. Стороны куба длиной a направлены по осям декартовой системы координат (x, y, z).

Решение:





Задача 4:

Условие:

4. Для перечисленных твердых тел определить решетку Браве и точечную группу, перечислить элементы точечной группы, классы сопряженных элементов, и ее неприводимые представления:

кремний, алмаз, нитрид бора, арсенид галлия, поваренная соль, нитрид галлия, теллур.

Решение:

1) Кремний, алмаз, поваренная соль - имеют ГЦК решетку с точечной группой O_h.

Элементы группы:

$$E; 8C_3; 6C_2; 6C_4; 3C_2; I; 6S_4; 8S_6; 3\sigma_h; 6\sigma_d$$

Классы сопряженности:

$$A_{1g}; A_{2g}; E_g; T_{1g}; T_{2g}; A_{1u}; A_{2u}; E_u; T_{1u}; T_{2u}$$

Представления

E	identity
$\bar{E}$	360° rotation
$8C_3$	8 120° rotations (around corners of cube)
$8\bar{C}_3$	8 120° rotations (around corners of cube) plus 360° rotation
$3C_2$	3 180° rotations (around midpoint of cube faces)
$3\bar{C}_2$	3 180° rotations (around midpoint of cube faces) plus 360° rotation
$6C_4$	6 90° rotations (around midpoint of cube faces, left and right)
$6\bar{C}_4$	6 90° rotations (around midpoint of cube faces, left and right) plus 360° rotation
$6C_2^1$	6 180° rotations (around midpoint of cube edges)
$6\bar{C}_2^1$	6 180° rotations (around midpoint of cube edges) plus 360° rotation
I	inversion
$\bar{I}$	inversion plus 360° rotation
$8S_6$	8 120° rotations (around corners of cube) with reflection
$8\bar{S}_6$	8 120° rotations (around corners of cube) with reflection plus 360° rotation
$3\sigma_h$	3 reflections (across plane parallel to cube faces)
$3\bar{\sigma}_h$	3 reflections (across plane parallel to cube faces) plus 360° rotation
$6S_4$	6 90° rotations (around midpoint of cube faces, left and right) with reflection
$6\bar{S}_4$	6 90° rotations (around midpoint of cube faces, left and right) with reflection plus 360° rotation
$6\sigma_d$	6 reflections (across plane containing cube edges)
$6\bar{\sigma}_d$	6 reflections (across plane containing cube edges) plus 360° rotation

2) Нитрид бора - имеет гексоганальную решетку с точечной группой D_{6h}. Элементы группы:

$$E; 2C_6; 2C_3; C_2; 3C_2'; 3C_2''; I; 2S_3; 2S_6; \sigma_h; 3\sigma_d; 3\sigma_v$$

Классы сопряженности:

$$A_{1g}; A_{2g}; B_{1g}; B_{2g}; E_{1g}; E_{2g}; A_{1u}; A_{2u}; B_{1u}; B_{2u}; E_{1u}; E_{2u}$$

Представления

E	identity
$\bar{E}$	360° rotation
$2C_3$	2 120° rotations (around c-axis, left and right)
$2\bar{C}_3$	2 120° rotations (around c axis, left and right) plus 360° rotation
C_2	180° rotation (around c axis)
$\bar{C}_2$	180° rotation (around c axis) plus 360° rotation
$2C_6$	2 60° rotations (around c axis, left and right)
$2\bar{C}_6$	2 60° rotations (around c axis, left and right) plus 360° rotation
$3C_2'$	3 180° rotations (around midpoint of hexagon edges)
$3\bar{C}_2'$	3 180° rotations (around midpoint of hexagon edges) plus 360° rotation
$3C_2''$	3 180° rotations (around midpoint of hexagon corners)
$3\bar{C}_2''$	3 180° rotations (around midpoint of hexagon edges) plus 360° rotation
I	inversion
$\bar{I}$	inversion plus 360° rotation
$2S_6$	2 60° rotations (around c axis) with reflection
$2\bar{S}_6$	2 60° rotations (around c axis) with reflection plus 360° rotation
σ_h	reflection (across hexagon plane)
$\bar{\sigma}_h$	reflection (across hexagon plane) plus 360° rotation
$2S_3$	2 120° rotations (around c axis, left and right) with reflection
$2\bar{S}_3$	2 120° rotations (around c axis, left and right) with reflection plus 360° rotation
$3\sigma_d$	3 reflections (across plane containing two hexagon corners)
$3\bar{\sigma}_d$	3 reflections (across plane containing two hexagon corners) plus 360° rotation
$3\sigma_v$	3 reflections (across plane parallel to hexagon edges)
$3\bar{\sigma}_v$	3 reflections (across plane parallel to hexagon edges) plus 360° rotation

3) Арсенид галлия - имеет ГЦК решетку с точечной группой T_d.
Элементы группы:

$$E; 2C_6; 8C_3; 3C_2; 6S_4; 6\sigma_d$$

Классы сопряженности:

$$A_1; A_2; E; T_1; T_2$$

Представления

E	identity
$\bar{E}$	360° rotation
$8C_3$	8 120° rotations (around corners and faces of tetrahedron)
$8\bar{C}_3$	8 120° rotations (around corners and faces of tetrahedron) plus 360° rotation
$3C_2$	3 180° rotations (around midpoint of tetrahedron edges)
$3\bar{C}_2$	3 180° rotations (around midpoint of tetrahedron edges) plus 360° rotation
$6S_4$	6 90° rotations (around tetrahedron edges, left and right) with reflection
$6\bar{S}_4$	6 90° rotations (around tetrahedron edges, left and right) with reflection plus 360° rotation
$6\sigma_d$	6 reflections (across plane containing tetrahedron edge and bisecting opposite edge)
$6\bar{\sigma}_d$	6 reflections (across plane containing tetrahedron edge and bisecting opposite edge) plus 360° rotation

4) Нитрид галлия - имеет гексоганальную решетку с точечной группой C_{6v}.

Элементы группы:

$$E; 2C_6; 2C_3; C_2; 3\sigma_d; 3\sigma_v$$

Классы сопряженности:

$$A_1; A_2; B_1; B_2; E_1; E_2$$

Представления

E	identity
$\bar{E}$	360° rotation
C_2	180° rotation (about side edges (a-axis), right)
$\bar{C}_2$	180° rotation (about a-axis, right) plus 360° rotation
$2C_3$	120° rotation (about midpoint of hexagon face (c-axis), right)
$2\bar{C}_3$	120° rotation (about c-axis, right) plus 360° rotation
$2C_6$	60° rotation (about c-axis, right)
$2\bar{C}_6$	60° rotation (about c-axis, right) plus 360° rotation
$3\sigma_d$	3 reflections (across plane containing c-axis and bisecting two sides)
$3\bar{\sigma}_d$	3 reflections (across plane with c-axis and bisecting two sides) plus 360° rotation
$3\sigma_v$	3 reflections (across plane with c-axis and through side edges)
$3\bar{\sigma}_v$	3 reflections (across plane with c-axis and through side edges) plus 360° rotation

5) Теллур - имеет гексоганальную решетку с точечной группой D_3.
Элементы группы:

$$E; 3C_3; 3C_2'$$

Классы сопряженности:

$$A_1; A_2; E$$

Представления

E	identity
$\bar{E}$	360° rotation
$2C_3$	2 120° rotations (around three-fold c-axis)
$2\bar{C}_3$	2 120° rotations (around c-axis) plus 360° rotation
$3C_2'$	3 180° rotations (across axis through an edge and midpoint of opposite side)
$3\bar{C}_2'$	3 180° rotations (across axis through edge and midpoint of opposite side) plus 360° rotation

Задача 5:

Условие:

5. Найти плотность состояний $D(E)$ электронов (параболический закон дисперсии $E_k = \hbar^2 k^2/2m$, где k – волновой вектор, m – эффективная масса) и акустических фононов (линейный закон дисперсии $E_k = \hbar s k$, s – скорость звука) в n-мерном полупроводнике. Построить зависимости $D(E)$ для $n = 1, 2$ и 3.

Решение:

$$D(E) = g\frac{1}{v}\frac{v}{(2\pi)^n}\int d^n k\delta(E - E(k)) =$$

$$= g\frac{1}{(2\pi)^n}S_n\int k^{n-1}dk\delta(k-k(E))\left|\frac{dk}{dE}\right| =$$

S_n - площадь (n-1) сферы в n-мерном пр-ве; $S_n = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)}$

$$= g\frac{1}{(2\pi)^n}\frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)}k(E)^{n-1}\left|\frac{dk}{dE}\right|$$

для электрона $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$; $k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}$; $\frac{dk}{dE} = \left(\frac{m}{2\hbar^2 E}\right)^{1/2}$

$$D(E) = g\frac{1}{2^{n-1}\pi^{n/2}\Gamma(n/2)}\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{n-1}{2}}\left(\frac{m}{2E\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$n = 1 : D(E) \sim \frac{1}{\sqrt{E}}$$

$$n = 2 : D(E) \sim const(E)$$

$$n = 3 : D(E) \sim \sqrt{E}$$

для фотона $E = \hbar sk$; $k = \frac{E}{s\hbar}$; $\frac{dk}{dE} = \frac{1}{\hbar s}$

$$D(E) = g\frac{1}{2^{n-1}\pi^{n/2}\Gamma(n/2)}\left(\frac{E}{s\hbar}\right)^{n-1}\frac{1}{\hbar s}$$

$$n = 1 : D(E) \sim const(E)$$

$$n = 2 : D(E) \sim E$$

$$n = 3 : D(E) \sim E^2$$

Задача 6:

Условие:

6. Найти плотность состояний электронов в объемном (трехмерном) полупроводнике, если их закон дисперсии $E_k = \sqrt{(E_g/2)^2 + (Pk)^2}$, где E_g и P – параметры, k – волновой вектор.

Решение:

$E = \sqrt{\left(\frac{E_g}{2}\right)^2 + (Pk)}$; $k = \left(\frac{E^2 - E_g^2/4}{P^2}\right)^{1/2}$; $\frac{dk}{dE} = \frac{E}{P^2}\left(\frac{E^2 - E_g^2/4}{P^2}\right)^{-1/2}$; $n = 3$

$$D(E) = g\frac{1}{4\pi^{3/2}\Gamma(3/2)}\frac{E}{P^2}\left(\frac{E^2 - E_g^2/4}{P^2}\right)^{1/2}$$

$$\Gamma(3/2) = \frac{sqrt\pi}{2};\ g = 2s + 1 = 2$$

$$D(E) = \frac{1}{\pi^2}\frac{E}{P^2}\left(\frac{E^2 - E_g^2/4}{P^2}\right)^{1/2}$$

Задача 7:

Условие:

7. Найти плотность состояний электронов в объемном (трехмерном) полупроводнике, если их закон дисперсии $E_k = (\hbar^2/2)\sum_{\alpha\beta} m_{\alpha\beta}^{-1} k_\alpha k_\beta$, где $\alpha, \beta = x, y, z$ – декартовы индексы, k_α –

2

компоненты волнового вектора, $m_{\alpha\beta}^{-1}$ – компоненты тензора обратных эффективных масс.

Решение:

:(

Задача 8:

Условие:

8. Для кубического кристалла

   (a) Доказать, что вектор $[hkl]$ и плоскость (hkl) взаимно перпендикулярны.

   (b) Найти угол между плоскостями $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$.

Решение:

1) Кубический кристалл:

$$\vec{a_1} \perp \vec{a_2} \perp \vec{a_3}$$

$$|\vec{a_1}| = |\vec{a_2}| = |\vec{a_3}|$$

$$\vec{g} = \sum_i g_i\vec{a_i}\,;\ \ g_1; g_2; g_3 = h; k; l$$

Из курса Никиты Сергеевича знаем, что все вектора в плоскости можно представить ввиде суммы векторов:

$$\vec{c_1} = \frac{\vec{a_1}}{h} - \frac{\vec{a_2}}{k}\,;\ \vec{c_2} = \frac{\vec{a_1}}{h} - \frac{\vec{a_3}}{l}\,;\ \vec{c_3} = \frac{\vec{a_2}}{k} - \frac{\vec{a_3}}{l}$$

$$\vec{g}\cdot\vec{c_1} = \frac{g_1\vec{a_1}\cdot\vec{a_1}}{h} - \frac{g_2\vec{a_2}\cdot\vec{a_2}}{k} = |\vec{a_1}|^2 - |\vec{a_2}|^2 = 0$$

ан-но для $\vec{c_1}; \vec{c_2}$

QED

2) из прошлого пункта теперь знаем что угол между плоскостями $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$ равен углу между векторами $[h_1k_1l_1]$ и $[h_2k_2l_2]$

$$\cos\alpha = \frac{|h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2|}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}\sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

Задача 9:
Условие:
9. Определите, какая решетка будет обратной к гранецентрированной кубической (ГЦК)?

Решение:

$$\vec{b_1} = \frac{2\pi}{v_0}\left[\vec{a_2} \times \vec{a_3}\right]$$

$$\vec{b_2} = \frac{2\pi}{v_0}\left[\vec{a_3} \times \vec{a_1}\right]$$

$$\vec{b_3} = \frac{2\pi}{v_0}\left[\vec{a_1} \times \vec{a_2}\right]$$

$$v_0 = (\vec{a_1} \cdot [\vec{a_2} \times \vec{a_3}])$$

$$\text{ГЦК} \Rightarrow \vec{a_1} = (a/2; 0; a/2)$$

$$\vec{a_2} = (a/2; a/2; 0)$$

$$\vec{a_3} = (0; a/2; a/2)$$

$$\Rightarrow v_0 = \begin{vmatrix} a/2 & 0 & a/2 \\ 0 & a/2 & a/2 \\ 0 & a/2 & a/2 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{4}$$

$$\Rightarrow \vec{b_1} = \frac{8\pi}{a^3}\left(a^2/4; -a^2/4; a^2/4\right) = \frac{2\pi}{a}(1; -1; 1)$$

$$\vec{b_2} = \frac{8\pi}{a^3}\left(a^2/4; a^2/4; -a^2/4\right) = \frac{2\pi}{a}(1; 1; -1)$$

$$\vec{b_3} = \frac{8\pi}{a^3}\left(-a^2/4; a^2/4; a^2/4\right) = \frac{2\pi}{a}(-1; 1; 1)$$

ОЦК со стороной $b = \frac{4\pi}{a}$