Wstęp do fizyki ciała stałego	Projekt 2, zestaw 1			
Konrad Marciniak	e-mail:	konrad.marciniak.stud@pw.edu.pl		
data:		nr indeksu:	311730	grupa: W2
Oświadczam, że jestem jedynym autorem/jedyną autorką niniejszego projektu. Jestem świadomy/świadoma odpowiedzialności w przypadku podania fałszywej informacji. (podpis studenta)				

Zadanie 1 - fonony

Na podstawie mojego nr indeksu i poniższego równania został wylosowany zestaw nr 1.

$$(\text{indeks mod } 5) + 1 = 1$$

Zestaw 1			
M_1	M_2	γ_1	γ_2
4	1	2	3

Na następnej stronie przedstawione są obliczenia potrzebne do wyznaczenia zależności dyspersyjnej $\omega(q)$ dla fali fononów propagującej się w jednowymiarowym, dwuatomowym łańcuchu periodycznym.

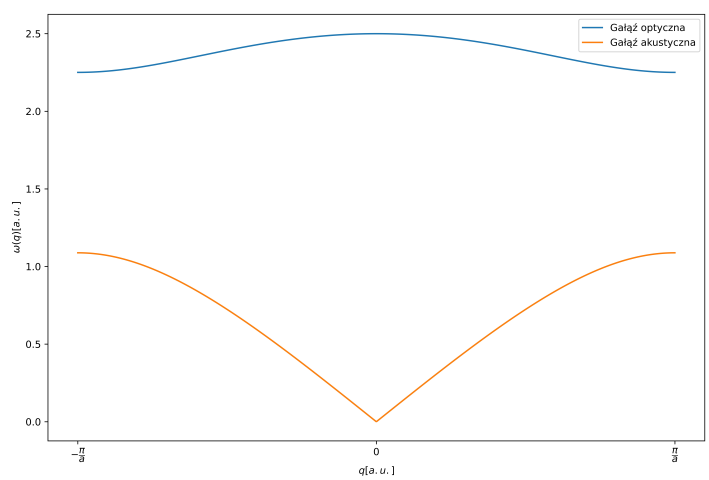
Otrzymane gałęzie fononowe:

- Gałąź optyczna

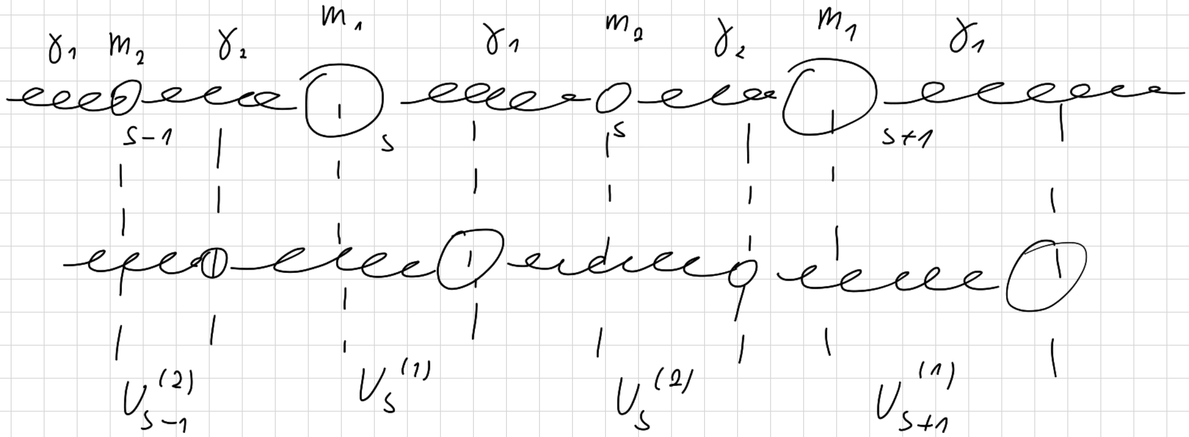
$$\omega = \sqrt{\frac{\sqrt{192cos(qa) + 433}}{8} + \frac{25}{8}}$$

- Gałąź akustyczna

$$\omega = \sqrt{-\frac{\sqrt{192cos(qa) + 433}}{8} + \frac{25}{8}}$$



Wykres 1: przedstawia wyżej wyznaczone gałęzie dla pierwszej strefy Brillouina $q \in (\frac{-\pi}{a}; \frac{\pi}{a})$



m_i – masy atomów

γ_i – stałe sprężystości

$U_s^{(i)}$ – wychylenia atomów

Zakładamy falę płaską.

$$U_s^{(i)} = U_0 \exp[i(k\underbrace{as}_{x} - wt)]$$

$$\frac{dU_s^{(i)}}{dt} = -iw\, U_0 \exp[i(kx - wt)]$$

$$\frac{d^2U_s^{(i)}}{dt^2} = -w^2 U_0 \exp[i(kx - wt)] = -w^2 U_s^{(i)}$$

$$U_{s-1}^{(i)} = U_0 \exp[i(kas - ka - wt)] = U_s^{(i)} \exp(-ika)$$

$$U_{s+1}^{(i)} = U_s^{(i)} \exp(ika)$$

Z prawa Hooke'a i 2 zas. dynamiki

$$F = -\gamma \Delta x \quad , F = ma$$

stąd:

$$m_1 \frac{d^2U_s^{(1)}}{dt^2} = -\gamma_2 (U_s^{(1)} - U_{s-1}^{(2)}) - (-\gamma_1 (U_s^{(2)} - U_s^{(1)}))$$

$$m_2 \frac{d^2U_s^{(2)}}{dt^2} = -\gamma_1 (U_s^{(2)} - U_s^{(1)}) - (-\gamma_2 (U_{s+1}^{(1)} - U_s^{(2)}))$$

Podstawiając

$$\begin{cases} m_1(-\omega^2 U_s^{(1)}) = \gamma_1(U_s^2 - U_s^1) - \gamma_2(U_s^1 - U_s^2\exp(-ika)) \\ m_2(-\omega^2 U_s^2) = \gamma_2(U_s^1\exp(ika) - U_s^2) - \gamma_1(U_s^2 - U_s^1) \end{cases}$$

$$\begin{cases} -\omega^2 m_1 U_s^1 = \gamma_1 U_s^2 - \gamma_1 U_s^1 - \gamma_2 U_s^1 + \gamma_2\exp(-ika)U_s^2 \\ -\omega^2 m_2 U_s^2 = \gamma_2 U_s^1\exp(ika) - \gamma_2 U_s^2 - \gamma_1 U_s^2 + \gamma_1 U_s^1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} [\gamma_1 + \gamma_2\exp(-ika)]U_s^2 + (\omega^2 m_1 - \gamma_1 - \gamma_2)U_s^1 = 0 \\ [\gamma_2\exp(ika) + \gamma_1]U_s^1 + (\omega^2 m_2 - \gamma_1 - \gamma_2)U_s^2 = 0 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} \omega^2 m_1 - \gamma_1 - \gamma_2 & \gamma_1 + \gamma_2\exp(-ika) \\ \gamma_2\exp(ika) + \gamma_1 & \omega^2 m_2 - \gamma_1 - \gamma_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_s^1 \\ U_s^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Szukamy takiej ω, że wyznacznik $= 0$

$$(\omega^2 m_1 - \gamma_1 - \gamma_2)(\omega^2 m_2 - \gamma_1 - \gamma_2) - (\gamma_1 + \gamma_2\exp(-ika))(\gamma_2\exp(ika) + \gamma_1) = 0$$

$$m_1 m_2\omega^4 + (-\gamma_1 - \gamma_2)\omega^2 m_2 + (-\gamma_1 - \gamma_2)m_1\omega^2 + (-\gamma_1 - \gamma_2)^2 + \\ - (\gamma_1 + \gamma_2\exp(-ika))(\gamma_2\exp(ika) + \gamma_1) = 0$$

$z = \omega^2$

$$m_1 m_2 z^2 + (-\gamma_1 - \gamma_2)(m_1 + m_2)z + (-\gamma_1 - \gamma_2)^2 - (\gamma_1 + \gamma_2\exp(-ika))(\gamma_2\exp(ika) + \gamma_1) = 0$$

$$m_1 m_2 z^2 + (-\gamma_1 - \gamma_2)(m_1 + m_2)z + \cancel{\gamma_1^2} + 2\gamma_1\gamma_2 + \cancel{\gamma_2^2} - (\gamma_1\gamma_2[\exp(ika) + \exp(-ika)] + \cancel{\gamma_1^2} + \cancel{\gamma_2^2}) = 0$$

$\Delta = b^2 - 4ac$

$z = \dfrac{-b \pm \sqrt{\Delta}}{2a}$

$$\Delta = (\gamma_1 + \gamma_2)^2(m_1 + m_2)^2 - 4m_1 m_2(2\gamma_1\gamma_2 - \gamma_1\gamma_2 \cdot 2\cos(ka))$$

$$\Delta = (\gamma_1 + \gamma_2)^2(m_1 + m_2)^2 - 8m_1 m_2\gamma_1\gamma_2(1 - \cos(ka))$$

$$z = \frac{(\gamma_1 + \gamma_2)(m_1 + m_2) \pm \sqrt{(\gamma_1 + \gamma_2)^2(m_1 + m_2)^2 - 8m_1 m_2\gamma_1\gamma_2(1 - \cos(ka))}}{2m_1 m_2}$$

$\omega = \pm\sqrt{z}$ $\leftarrow$ odrzucamy wartości ujemne

ostatecznie

$$\omega = \sqrt{\frac{(\gamma_1 + \gamma_2)(m_1 + m_2) \pm \sqrt{(\gamma_1 + \gamma_2)^2(m_1 + m_2)^2 - 8m_1 m_2\gamma_1\gamma_2(1 - \cos(ka))}}{2m_1 m_2}}$$

Zadanie 2 - nanostruktury półprzewodnikowe

Projekt nanostruktury półprzewodnikowej opartej na studni kwantowej, która dzięki zjawisku elektroluminescencji emituje światło o długości λ policzonej ze wzoru:

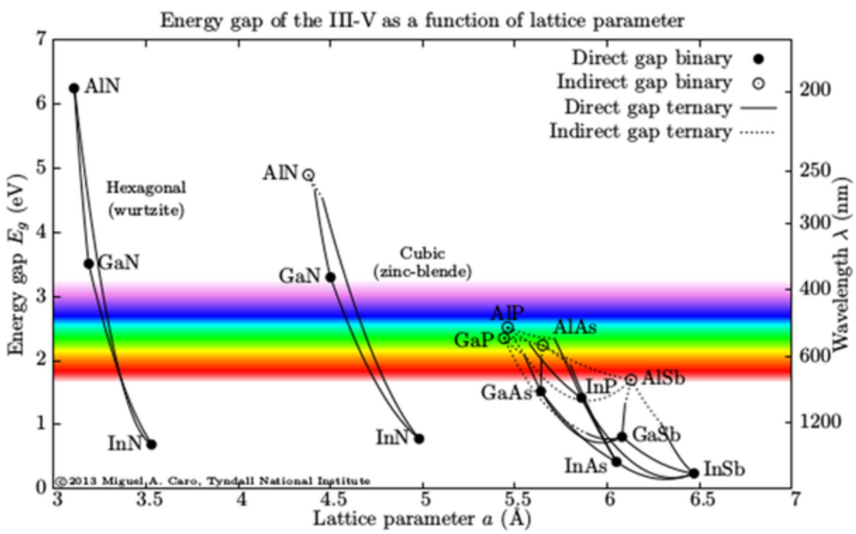
$$\lambda = [\text{index } (\text{mod } 6) + 2] \cdot 100 + \text{index } (\text{mod } 100) = 230 \text{ [nm] - światło nadfioletowe}$$

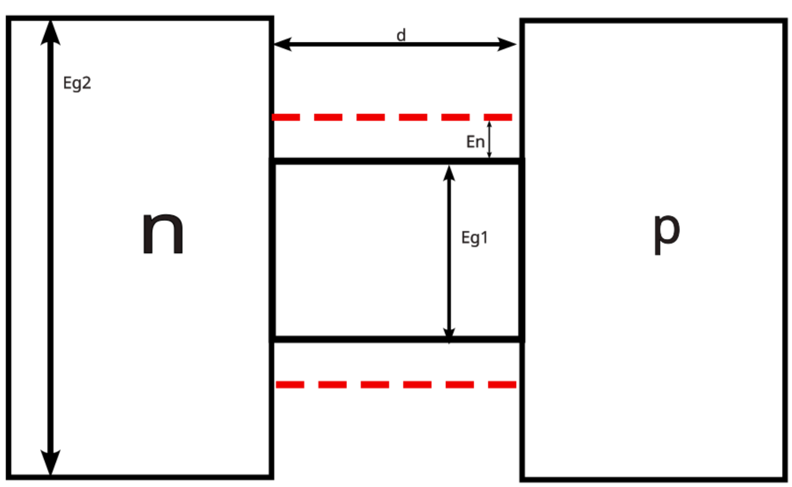
Ta długość fali odpowiada energii fotonu:

$$E_f = \frac{hc}{\lambda} = 5.39eV$$

Założenia:

- szerokość studni musi być nie mniejsza niż 5 krotność stałej sieciowej materiału
- różnica stałych sieci związków nie może przekraczać 10% wartości maksymalnej





Schemat 1: Budowa nanostruktury

- E_n - poziom energetyczny studni (w tym zadaniu przyjmujemy n=1)
- E_{g1} - przerwa energetyczna studni
- E_{g2} - przerwa energetyczna okładek
- d - szerokość studni

Wiedząc, że:

$$E_n = \frac{E_f - E_{g1}}{2} \tag{1}$$

Szukamy na powyższym wykresie takiego materiału dla którego $E_{g1} < E_f$ Za materiał studni został wybrany związek $Al_{0.6}Ga0.4N$ w strukturze heksagonalnej

- przerwa energetyczna $E_{g1} = 5.3\ eV$
- stała sieciowa $a_1 = 3.12$ Å

Za materiał okładek został wybrany związek AlN w strukturze heksagonalnej

- przerwa energetyczna $E_{g2} = 6.3\ eV$
- stała sieciowa $a_2 = 3.10$ Å

Proporcje związków i stałe sieciowe zostały wyznaczone metodą liczenia pikseli.
Wiedząc, że:

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8 m_e d^2} \tag{2}$$

oraz korzystając ze wzoru 1, możemy wyznaczyć szerokość studni d = 28.8 Å.
Sprawdzając pierwsze założenie:

$$\frac{d}{a_1} = 9.29 \approx 9$$

Sprawdzając drugie założenie:

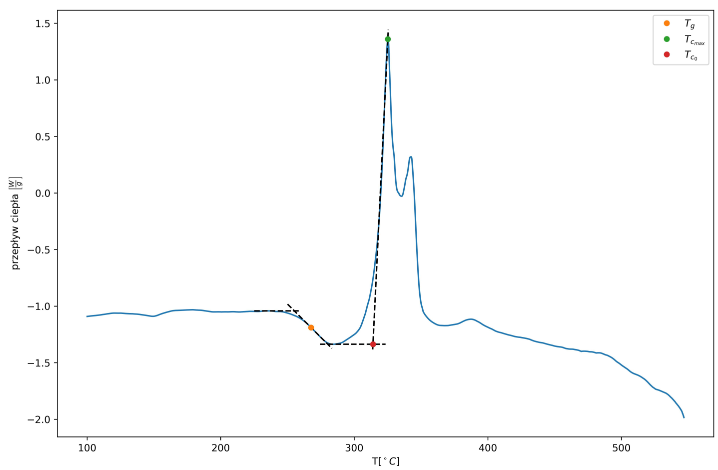
$$\frac{\Delta a}{a_1} = 0.64\% << 10\%$$

Wiedząc, że szerokość studni musi być wielokrotnościa wielkości atomu możemy podstawić d = 9a = 27.9Å do wzoru 2, a następnie ze wzoru 1 wyznaczyć długość fali emitowanego przez zaprojektowany laser.

$$E_f = 5.4eV \rightarrow \lambda = 229.7nm$$

Zadanie 3 - analiza termiczna

Na podstawie danych z pliku $zad1_d ta_1$ została wykreślona krzywa DSC:



Dopasowując odpowiednie proste można odczytać temperatury:

- T_g - temperatura przjeścia szklistego wyznaczona jako środek odcinka nachylenia pierwszego spadku
- T_{c_0} - temperatura początkowa krystalizacji wyznaczona jako przecięcie prostej horyzontalnej wychodzącej z minimum pierwszego spadku i prostej ekstrapolowanej z piku
- $T_{c_{max}}$ - temperatura maksymalna krystalizacji wyznaczona jako maksimum piku

Jak można zauważyć, na wykresie nie widnieje proces topnienia.