

Задачи к курсу «Принципы квантовой теории твердого тела»

1. Построить объемную модель плотноупакованного кристалла из одинаковых шаров. Что изменится, если шары будут двух разных цветов? Построить модели сфалерита и вюрцита.
2. Используя решение предыдущей задачи, разобраться в вопросе о том, почему плоскости одинаковых атомов {111} в кристаллической структуре типа сфалерита распределены в пространстве не равномерно, а парами.
3. Построить первые зоны Бриллюэна для периодической 1D, квадратной 2D и простой кубической 3D решеток.
4. Построить первые зоны Бриллюэна для кубических гранецентрированной и объемноцентрированной решеток.
5. Построить законы дисперсии электрона в 1D периодическом потенциале в приближении пустой решетки.
6. Построить законы дисперсии электрона в 2D квадратной решеткой (в приближении почти свободных электронов или пустой решетки).
7. Построить законы дисперсии электрона в 3D простой кубической решеткой (в приближении пустой решетки).
8. Построить законы дисперсии электрона в 3D гранецентрированной кубической решеткой (в приближении пустой решетки). Использовать стандартные обозначения основных направлений в fcc кристалле и изобразить законы дисперсии вдоль этих направлений.
9. Рассчитать закон дисперсии фононов в простой одноатомной цепочке. Построить приближение сплошной среды для такой решетки.
10. Рассчитать законы дисперсии фононов в двухатомной цепочке. Рассмотреть предельный переход к одноатомной решетке, когда атомы становятся одинаковыми, и ответить на вопрос, куда девается оптический фонон.
11. Рассчитать законы дисперсии электрона в 1D кристалле одинаковых прямоугольных квантовых ям, разделенных прямоугольными барьерами (модель Кронига — Пенни). Использовать характерные для полупроводниковых кристаллов межатомные расстояния и масштабы энергии электронов (единицы нанометров и эВ).
12. Оценить величины получаемых эффективных электронных масс трех нижних зон в задаче 10, в том числе на границе первой зоны Бриллюэна.
13. Рассмотреть задачу 10 для 1D кристалла из пары разных прямоугольных квантовых ям (например, разной глубины и/или с разным расстоянием до соседней ямы направо и налево). Смоделировать эволюцию ширины нижних разрешенных и запрещенных зон с ростом такой разницы и сравнить с наблюдаемыми особенностями электронных спектров кремния и сфалеритов A_3B_5 , A_2B_6 .