ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β

ΠΥΚΝΟΤΗΤΑ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ

DOS

Density Of States

DOS

- Η DOS περιγράφει τον αριθμό των καταστάσεων που είναι προσιτές σε ένα σύστημα και είναι σημαντική για να προσδιορίσουμε
- αρκετές ιδιότητες ενός συστήματος όπως:
- Την ενέργεια στο στερεό — Κ6: Ταλαντώσεις πλέγματος
- Τα ελεύθερα ηλεκτρόνια στα μέταλλα, — Κ11:Ηλεκτρόνια αγωγιμότητας
- Τις οπτικές ιδιότητες (εκπομπή, απορρόφηση),
- Την συγκέντρωση φορέων ημιαγωγό…,
- Την ακτινοβολία μέλανος σώματος — Κ10

Απαρίθμηση τρόπων

Για το συνεχές μέσο κάθε μορφή ταλάντωσης =τρόπος =mode

Για κατανομή μάζας που είναι διακριτή (= κρύσταλλο) είναι δυνατοί μόνο διακριτοί (= αριθμήσιμοι) τρόποι ταλάντωσης.

Καταμετρώντας τους τρόπους και βρίσκοντας την f(ω)

Θέλουμε να προσδιορίσουμε πόσες καταστάσεις υπάρχουν σε ένα συγκεκριμένο διάστημα συχνοτήτων, ενεργειών ή κυματοδιανυσμάτων

$$(\omega, E, \vec{k}) \qquad (\omega + d\omega, E + dE, \vec{k} + d\vec{k})$$

$$dN() = f(\omega)d\omega = f(E)dE = \boxed{f(k)}dk$$

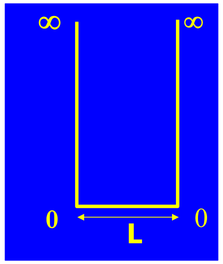
Το πρόβλημα ταυτίζεται με αυτό της εύρεσης των κανονικών τρόπων ταλάντωσης των αρμονικών χορδής που εκτελεί ταλαντώσεις.

αρχικά υπολογίζουμε τις επιτρεπόμενες καταστάσεις στον k-χώρο *f(k)dk* .

ελεύθερο σωματίδιο σε μονοδιάστατο κουτί (1-D)

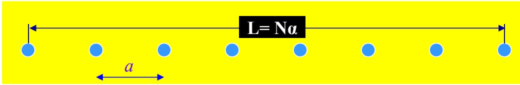
Θεωρούμε ένα σωματίδιο μέσα σε ένα

μεγάλο (ενεργειακή κβαντοποίηση)



- **πεπερασμένο** κουτί (φρεάτιο δυναμικού): V=0
- Για μακροσκοπικό *L*
- οι ενεργειακές στάθμες είναι πολύ κοντά η μια στην άλλη ($\Delta E \sim 1/L^2$) και
- η "συνεχής" περιγραφή λειτουργεί καλά

1-D



Η κυμα. εξίσωση του Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}+V(x)\varphi(x)=E\varphi(x)$$

μας δίνει τις επιτρεπτές κβαντικές καταστάσεις

Οριακές συνθήκες

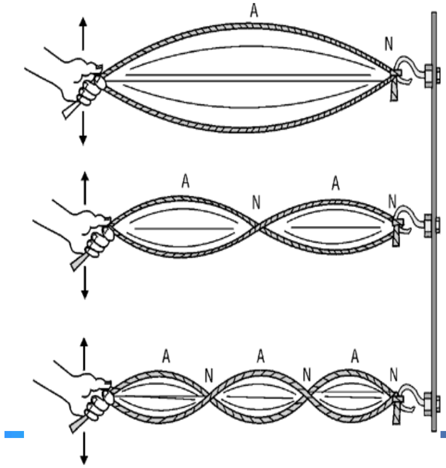
Πρώτο βήμα: απλοποιούμε το πρόβλημα χρησιμοποιώντας οριακές συνθήκες

I. Σταθερά άκρα — Στάσιμα κύματα

II. Ταύτιση των άκρων-Κυκλική συνθήκη
Περιοδικές οριακές συνθήκες — Οδεύοντα κύματα

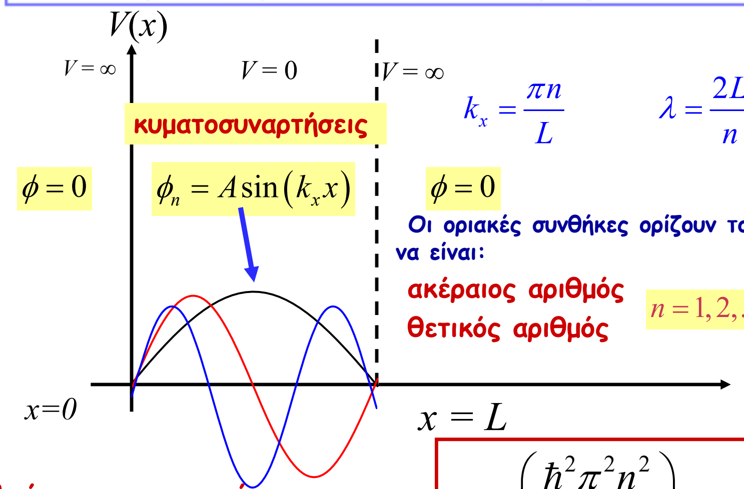
I. Σταθερά άκρα $\varphi(x)=0 \qquad x=0,L$

Οριακές συνθήκες ίδιες με μιας χορδής με σταθερά άκρα



Στάσιμα κύματα

Ένα σωματίδιο μέσα σε ένα κουτί μιας διάστασης



$$k_x=\frac{\pi n}{L} \qquad \lambda=\frac{2L}{n}$$

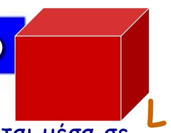
Οι οριακές συνθήκες ορίζουν το n να είναι:

ακέραιος αριθμός
θετικός αριθμός $\quad n=1,2,.....$

Από τις κυμ.συν παίρνουμε και τις ενεργειακές ιδιοτιμές

$$\varepsilon_n=\left(\frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2mL^2}\right)=\alpha n^2$$

Σωματίδιο σε τρισδιάστατο κουτί 3-D



Φανταζόμαστε το ελεύθερο σωματίδιο να παγιδεύεται μέσα σε ένα κύβο πλευράς L .

Οι τρείς διευθύνσεις είναι ανεξάρτητες οπότε η κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου είναι το γινόμενο των χωριστών συναρτήσεων:

$$\phi_i(x,y,z)=A\sin\left(\frac{n_1\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{n_2\pi y}{L}\right)\sin\left(\frac{n_3\pi z}{L}\right)$$

$$n_1,n_2,n_3=1,2,3.....$$

Αυτό είναι ένα στάσιμο κύμα σε τρεις διαστάσεις
Το i στη κυματοσυνάρτηση δηλώνει ένα μοναδικό σύνολο κβαντικών αριθμών (n_1,n_2,n_3) :
μια μικροκατάσταση

$$\vec{k} = \hat{i}k_x + \hat{j}k_y + \hat{k}k_z$$ κυματοδιάνυσμα

$$k_x = \frac{\pi n_1}{L} \qquad k_y = \frac{\pi n_2}{L} \qquad k_z = \frac{\pi n_3}{L}$$

Όπου $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ είναι μοναδιαία διανύσματα κατά μήκος των διευθύνσεων x,y και z

Η κυματοσυνάρτηση σε όρους των συνιστωσών του κυματοδιανύσματος:

$$\varphi_i(x,y,z) = A\sin(k_x x)\sin(k_y y)\sin(k_z z)$$

το μέτρο του **κυματοδιανύσματος *k*** δίνεται απο:

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{\pi^2}{L^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right)$$

$$\vec{k} = \hat{i}k_x + \hat{j}k_y + \hat{k}k_z$$

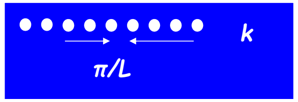
$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{\pi^2}{L^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right)$$

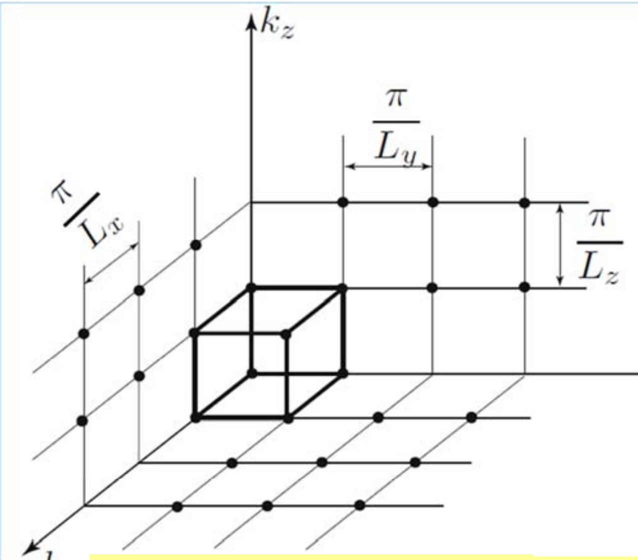
Επομένως…

Για κάθε λύση της εξίσωσης (επιτρεπτή κατάσταση) που καθορίζεται από τις τιμές των ακεραίων αριθμών (n_1, n_2, n_3) υπάρχει **μια** μοναδική κατάσταση, αυτή μπορεί να αναπαρασταθεί στον τριδιάστατο k-χώρο,

από **ένα σημείο**

τα σημεία αυτά είναι ομοιόμορφα κατανεμημένα και απέχουν μεταξύ τους απόσταση π/L





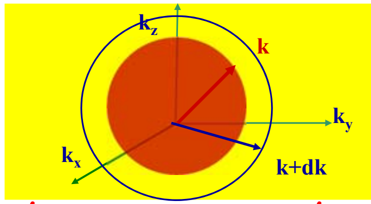
$$k_x = \frac{n_1\pi}{L_x}$$

$$k_y = \frac{n_2\pi}{L_y}$$

$$k_z = \frac{n_3\pi}{L_z}$$

ο όγκος που καταλαμβάνει κάθε σημείο: $(\pi/L)^3 = \pi^3/V$

$$\vec{k} = \hat{i}k_x + \hat{j}k_y + \hat{k}k_z$$



Αυτό το διάνυσμα k θα «αναπτύσσεται» συνεχώς.

Ψάχνουμε να βρούμε:

 # κανονικών τρόπων ταλάντωσης των στασίμων κυμάτων, που έχουν κυματοδιάνυσμα με μέτρο στο διάστημα k και k+dk =

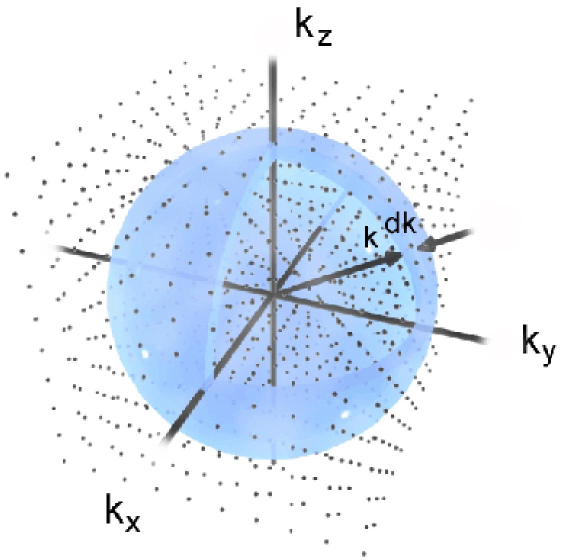
Πόσοι τέτοιοι τρόποι (λύσεις) υπάρχουν που να έχουν κυματοδιάνυσμα με μέτρο ανάμεσα στο k, k+dk?

= # των πλεγματικών σημείων του χώρου k που βρίσκονται σε ένα σφαιρικό φλοιό πάχους dk

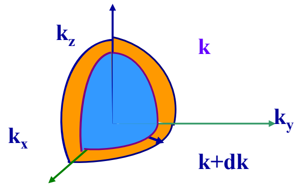
και αφού $n_i > 0$

$k_x > 0$, $k_y > 0$ και $k_z > 0$

Μας ενδιαφέρει μόνο το θετικό ογδοημόριο :



$$\#\sigma\eta\mu\varepsilon\iota\omega\nu = \frac{V_{\varepsilon\nu\delta\iota\alpha\varphi\acute{\varepsilon}\rho\varepsilon\iota}}{V_{\sigma\eta\mu\varepsilon\iota o\upsilon}} = \frac{\frac{1}{8}V_{\sigma\varphi.\varphi\lambda}}{V_{\sigma\eta\mu\varepsilon\iota o\upsilon}}$$

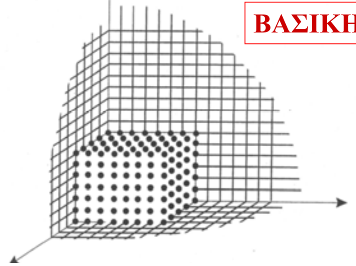


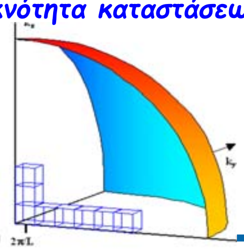
$$f(k)dk = \frac{\frac{1}{8}4\pi k^2 dk}{\left(\frac{\pi}{L}\right)^3} = \frac{Vk^2}{2\pi^2}dk = g(k)dk$$

g(k) ή D(k):

πυκνότητα καταστάσεων

ΒΑΣΙΚΗ ΣΧΕΣΗ





Από το f(k)dk στο f(ω)dω

$$f(k)dk = \frac{Vk^2 dk}{2\pi^2}$$

 # κανονικών τρόπων ταλάντωσης με συχνότητα ω και ω+dω

$$f(\omega)d\omega = \frac{Vk^2}{2\pi^2}\frac{dk}{d\omega}d\omega$$

Η ταχύτητα φάσης των κυμάτων:

$$\upsilon = \frac{\omega}{k} \quad \rightarrow k = \frac{\omega}{\upsilon}$$

Η ταχύτητα ομάδας των κυμάτων: $\upsilon_g = \frac{d\omega}{dk}$,

$$f(\omega)d\omega = \frac{V}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{\upsilon^2\upsilon_g}d\omega$$

στα μέσα δίχως διασπορά: $\upsilon_g = \upsilon$

$$f(\omega)d\omega = \frac{V\omega^2 d\omega}{2\pi^2\upsilon^3}$$

Από το f(k)dk στα f(p) dp και f(ε)dε

$$f(k)dk = \frac{Vk^2 dk}{2\pi^2}$$

$$p = \hbar k$$

$$E = \frac{1}{2m}p^2$$

$$f(p)dp = \frac{V 4\pi p^2 dp}{h^3}$$

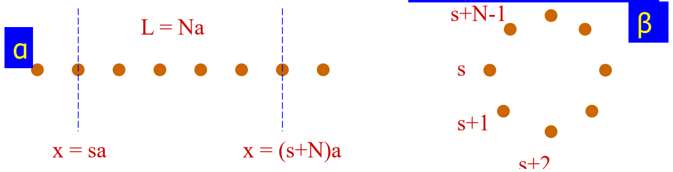
$$f^{3D}(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\varepsilon^{1/2}d\varepsilon$$

Οριακές συνθήκες

ΙΙ. Κυκλική συνθήκη- Περιοδικές οριακές συνθήκες

Ταύτιση των άκρων

Οδεύοντα κύματα



Υποθέτουμε ότι τα άτομα s και s+N έχουν την ίδια μετατόπιση, το πλέγμα έχει **περιοδική συμπεριφορά**, όπου το N είναι πολύ μεγάλο

$$\varphi(0,y,z)=\varphi(L,y,z)$$
$$\varphi(x,0,z)=\varphi(x,L,z)$$
$$\varphi(x,y,0)=\varphi(x,y,L)$$

$$\varphi_{n_1,n_2,n_3}(r)=const.e^{ikr}$$

$$k=(\frac{2\pi}{L}n_1,\frac{2\pi}{L}n_2,\frac{2\pi}{L}n_3) \qquad n_1,n_2,n_3=0,\pm1,\pm2,.....$$

$$\varphi_{n_1,n_2,n_3}(r)=const.e^{ikr}$$

$$k=(\frac{2\pi}{L}n_1,\frac{2\pi}{L}n_2,\frac{2\pi}{L}n_3) \qquad n_1,n_2,n_3=0,\pm1,\pm2,.....$$

Επίπεδο τρέχον (οδεύον) κύμα με κυματοδιάνυσμα k

Η πυκνότητα καταστάσεων: $\#\sigma\eta\mu\varepsilon\iota\omega\nu=\frac{V_{\sigma\varphi.\varphi\lambda}}{V_{\sigma\eta\mu\varepsilon\iota o\upsilon}}$

$$f(k)dk=\frac{4\pi k^2dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}=\frac{Vk^2dk}{2\pi^2}$$

ΙΔΙΑ

Από το f(k)dk στα f(p)dp και f(ω)dω

$$f(k)dk=g\frac{Vk^2dk}{2\pi^2}$$

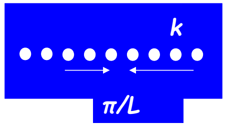
$$f(p)dp=g\frac{V4\pi p^2dp}{h^3}$$

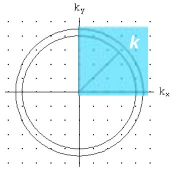
$$f(\omega)d\omega=g\frac{V\omega^2d\omega}{2\pi^2\upsilon^3}$$

Όπου g ένας παράγοντας εκφυλισμού που καθορίζεται από το σύστημα

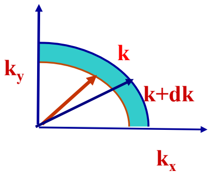
Πυκνότητα καταστάσεων (DOS) σε 2-D , 1-D και 0-D

2-D:
Λεπτά υμένια





$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 = \frac{\pi^2}{L^2}\left(n_1^2 + n_2^2\right)$$



Ο αριθμός καταστάσεων με μέτρο k στο διάστημα k μέχρι k+dk:

$$f^{2D}(k)dk = \frac{\frac{1}{4}S_{\delta\alpha\kappa\tau.}}{S_{\sigma\eta\mu\varepsilon\acute{\iota}o}} = \frac{1}{4}\frac{2\pi k dk}{\left(\frac{\pi}{L}\right)^2}$$

$$\boxed{f^{2D}(k)dk = \frac{L^2 k dk}{2\pi}}$$

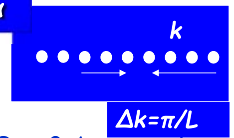
Για τα ηλεκτρόνια (σωματίδιο μάζας m)

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}, p = \hbar k \rightarrow \hbar k = \sqrt{2m\varepsilon}$$

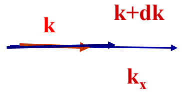
$$f^{2D}(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{Sm}{\hbar^2\pi}d\varepsilon$$

1-D:
Λεπτά νήματα

$$k^2 = k_x^2 = \frac{\pi^2}{L^2}n_1^2$$



Ο αριθμός καταστάσεων με μέτρο k στο διάστημα k μέχρι k+dk:



$$f^{1D}(k)dk = \frac{dk}{L_{\sigma\eta\mu\varepsilon\acute{\iota}o}} = \frac{dk}{\frac{\pi}{L}}$$

$$\boxed{f^{1D}(k)dk = \frac{Ldk}{\pi}}$$

Για τα ηλεκτρόνια

$$\boxed{f^{1D}(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{L}{\pi}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2}\varepsilon^{-1/2}d\varepsilon}$$

0-D:
Quantum dot

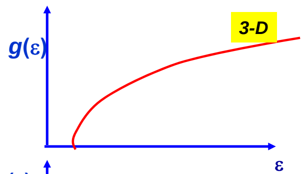
η DOS θα περιγράφεται με μια δέλτα συνάρτηση

Για τα ηλεκτρόνια

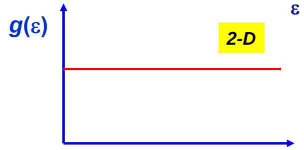
$$\boxed{f^{0D}(\varepsilon)d\varepsilon = 2\delta(\varepsilon - E_c)}$$

Ηλεκτρονική πυκνότητα καταστάσεων:

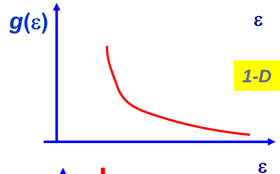
$$g^{3D}(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\varepsilon^{1/2}$$



$$g^{2D}(\varepsilon) = \frac{L^2 m}{\hbar^2\pi}$$



$$g^{1D}(\varepsilon) = \frac{L}{\pi}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2}\varepsilon^{-1/2}$$



$$g^{0D}(\varepsilon) = 2\delta(\varepsilon - E_c)$$