23 stycznia 2024

Zadanie 45

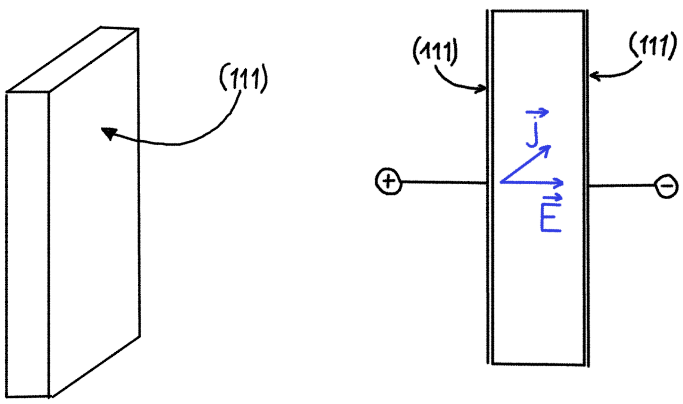
Z kryształu półprzewodnika o strukturze heksagonalnej wycięto płytkę równolegle do płaszczyzny (111). Do tak wyciętej płytki przyłożono napięcie wywołując przepływ prądu elektrycznego. Jaki kąt utworzy kierunek gęstości prądu, $\mathbf{j}$, z kierunkiem przyłożonego pola elektrycznego, $\mathbf{E}$, jeśli związek między tymi wielkościami opisany jest równaniem $\mathbf{j} = \hat{\sigma}\mathbf{E}$? Tensor przewodności elektrycznej $\hat{\sigma}$ w układzie kartezjańskim ma postać

$$\begin{pmatrix} j_1 \\ j_2 \\ j_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{pmatrix}.$$

Ponadto spełnione są warunki:

1) $\sigma_{33} = 2\sigma_{11}$,
2) stałe sieciowe układu krystalograficznego spełniają zależność $c = 2a$,
3) oś OZ układu kartezjańskiego pokrywa się z osią OZ układu krystalograficznego.

Rozwiązanie



Aby obliczyć kąt między wektorami $\mathbf{j}$ i $\mathbf{E}$, $\measuredangle(\mathbf{E}, \mathbf{j})$, skorzystamy z definicji iloczynu skalarnego.

$$\cos \measuredangle(\mathbf{E}, \mathbf{j}) = \frac{\mathbf{E} \cdot \mathbf{j}}{Ej} \tag{1}$$

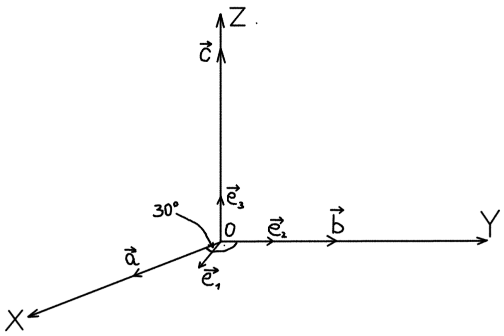
gdzie j i E oznaczają odpowiednio długości wektorów $\mathbf{j}$ oraz $\mathbf{E}$. Używając wektora jednostkowego $\mathbf{n}$ w kierunku wektora $\mathbf{E}$ możemy zapisać $\mathbf{E} = E\mathbf{n}$, a ponieważ $\mathbf{j} = \hat{\sigma}\mathbf{E} = E\hat{\sigma}\mathbf{n}$, to równanie (1) możemy przedstawić w postaci

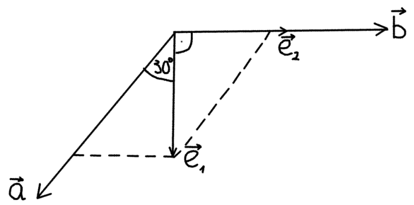
$$\cos \measuredangle(\mathbf{E}, \mathbf{j}) = \frac{\mathbf{n} \cdot \hat{\sigma}\mathbf{n}}{|\hat{\sigma}\mathbf{n}|} \tag{2}$$

gdzie $|\hat{\sigma}\mathbf{n}|$ oznacza długość wektora $\hat{\sigma}\mathbf{n}$.
Ponieważ tensor $\hat{\sigma}$ wyrażony jest w układzie kartezjańskim, musimy wyrazić w tym samym układzie współrzędne wektora $\mathbf{n}$. Żeby to uczynić można wybrać jedną z dwu dróg: 1) skonstruować wektor $\mathbf{n}$ w układzie krystalograficznym korzystając np. z faktu, że wektor

sieci odwrotnej o współczynnikach hkl jest prostopadły do płaszczyzny o takich samych współczynnikach, a następnie przetransformować taki wektor do układu kartezjańskiego, lub 2) przetransformować wskaźniki Millera płaszczyzny (hkl) do układu kartezjańskiego, a następnie w tym układzie skonstruować wektor prostopadły. Wybierzemy ten drugi sposób.

Do tego potrzebna nam jest relacja między heksagonalnym układem krystalograficznym opartym na wektorach bazowych $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ i $\mathbf{c}$, a układem kartezjańskim opartym na wektorach $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$ i $\mathbf{e}_3$. Wiemy, że osie OZ obu układów pokrywają się. Ze względu na izotropię właściwości fizycznych w płaszczyźnie XY (układ heksagonalny) orientację pozostałych osi układu kartezjańskiego moglibyśmy w tej płaszczyźnie wybrać dowolnie, ale w celu uproszczenia obliczeń wybieramy oś OY układu kartezjańskiego wzdłuż osi OY układu heksagonalnego. Oczywiście oś OX układu kartezjańskiego musi być prostopadła do poprzednich dwu osi. Opisaną sytuacje ilustrują poniższe rysunki.





Z powyższego rysunku łatwo zauważyć, że wektory bazowe układu kartezjańskiego wyrażają się poprzez wektory układu krystalograficznego w następujący sposób:

$$\begin{array}{lcccccc} \mathbf{e}_1 & = & \frac{2}{\sqrt{3}a}\mathbf{a} & + & \frac{1}{\sqrt{3}a}\mathbf{b} & + & 0\mathbf{c} \\ \mathbf{e}_2 & = & 0\mathbf{a} & + & \frac{1}{a}\mathbf{b} & + & 0\mathbf{c} \\ \mathbf{e}_3 & = & 0\mathbf{a} & + & 0\mathbf{b} & + & \frac{1}{c}\mathbf{c} \end{array} \tag{3}$$

W postaci macierzej możemy powyższą relację zapisać następująco:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{e}_1 \\ \mathbf{e}_2 \\ \mathbf{e}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{3}a} & \frac{1}{\sqrt{3}a} & 0 \\ 0 & \frac{1}{a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{bmatrix} \tag{4}$$

Wiadomo, że wskaźniki Millera transformują się według tej samej macierzy co wektory bazowe. Możemy zatem za jej pomocą obliczyć współczynniki płaszczyzny sieciowej $(t_1 t_2 t_3)$ w układzie kartezjańskim:

$$\begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{3}a} & \frac{1}{\sqrt{3}a} & 0 \\ 0 & \frac{1}{a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} \tag{5}$$

Ponieważ dla układu kartezjańskiego sieć odwrotna jest tożsama z siecią przestrzenną to wartości t_1, t_2, t_3 są jednocześnie składowymi wektora prostopadłego do opisywanej płaszczyzny $[t^1 t^2 t^3]$. A zatem wektor o współrzęnych

$$
\begin{aligned}
t^1 &= \frac{2}{\sqrt{3}a}h + \frac{1}{\sqrt{3}a}k \\
t^2 &= \frac{1}{a}k \\
t^3 &= \frac{1}{c}l
\end{aligned}
\tag{6}
$$

jest wektorem prostopadłym do płaszczyzny sieciowej (hkl).
Ostatecznie możemy więc w układzie kartezjańskim skonstruować jednostkowy wektor prostopadły do ścian kryształu za pomocą relacji $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{t}}{t}$, gdzie t jest długością wektora $\mathbf{t}$.
Zapisując równanie (2) za pomocą wektora $\mathbf{t}$ otrzymujemy:

$$
\cos\measuredangle(\mathbf{j},\mathbf{E}) = \frac{1}{t}\frac{\mathbf{t}\cdot\hat{\sigma}\mathbf{t}}{|\hat{\sigma}\mathbf{t}|} \tag{7}
$$

Wykorzystując relacje (6) obliczamy licznik prawej strony równania (7):

$$
\mathbf{t}\cdot\hat{\sigma}\mathbf{t} = \sigma_{11}\left(\frac{2}{\sqrt{3}a}h + \frac{1}{\sqrt{3}a}k\right)^2 + \sigma_{11}\left(\frac{k}{a}\right)^2 + \sigma_{33}\left(\frac{l}{c}\right)^2 \tag{8}
$$

oraz długość wektora $\mathbf{t}$, która w układzie kartezjańskim jest po prostu pierwiastkiem z sumy kwadratów jego składowych:

$$
t = \sqrt{\left(\frac{2}{\sqrt{3}a}h + \frac{1}{\sqrt{3}a}k\right)^2 + \left(\frac{k}{a}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2} \tag{9}
$$

i podobnie długosc wektora $\hat{\sigma}\mathbf{t}$:

$$
|\hat{\sigma}\mathbf{t}| = \sqrt{\sigma_{11}^2\left(\frac{2}{\sqrt{3}a}h + \frac{1}{\sqrt{3}a}k\right)^2 + \sigma_{11}^2\left(\frac{k}{a}\right)^2 + \sigma_{33}^2\left(\frac{l}{c}\right)^2} \tag{10}
$$

Jeśli przyjmiemy, zgodnie z warunkami zadania, że $h = 1$, $k = 1$, $l = 1$, $c = 2a$ oraz $\sigma_{33} = 2\sigma_{11}$, to równanie (7) przyjmuje postać:

$$
\cos\measuredangle(\mathbf{j},\mathbf{E}) = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{3}{\sqrt{3}a}\right)^2 + \left(\frac{1}{a}\right)^2 + \left(\frac{1}{2a}\right)^2}}\frac{\sigma_{11}\left(\frac{3}{\sqrt{3}a}\right)^2 + \sigma_{11}\left(\frac{1}{a}\right)^2 + 2\sigma_{11}\left(\frac{1}{2a}\right)^2}{\sqrt{\sigma_{11}^2\left(\frac{3}{\sqrt{3}a}\right)^2 + \sigma_{11}^2\left(\frac{1}{a}\right)^2 + 4\sigma_{11}^2\left(\frac{1}{2a}\right)^2}} \tag{11}
$$

Po przekształceniach otrzymamy:

$$
\cos\measuredangle(\mathbf{j},\mathbf{E}) = \frac{1}{\sqrt{3+1+\frac{1}{4}}}\frac{3+1+\frac{1}{2}}{\sqrt{3+1+1}} \tag{12}
$$

i ostatecznie:

$$
\cos\measuredangle(\mathbf{j},\mathbf{E}) = \frac{9}{\sqrt{85}} \tag{13}
$$

Stąd kąt między wektorami $\mathbf{j}$ i $\mathbf{E}$ wynosi

$$
\measuredangle(\mathbf{j},\mathbf{E}) = 13{,}9^\circ. \tag{14}
$$