

ŠIAULIŲ UNIVERSITETAS
FIZIKOS IR MATEMATIKOS FAKULTETAS
FIZIKOS KATEDRA

EDITA RIMGAILAITĖ

**KIETOJO KŪNO FIZIKOS REIŠKINIŲ KOMPIUTERINIS
MODELIAVIMAS**

MAGISTRO DARBAS

Fiziniai mokslai (fizika)

Mokslinis vadovas
dr.V. Šlekienė

Šiauliai
2005

Anotacija

Magistro darbą “Kietojo kūno fizikos reiškinių kompiuterinis modeliavimas” sudaro įvadas, 3 skyriai, išvados, 22 literatūros šaltiniai, 15 priedų ir 1 kompaktinis diskas. Darbe pateikta 3 lentelės ir 31 paveikslas. Darbo apimtis 56 puslapiai (su priedais 93 puslapiai).

Darbe siekiama pasinaudojant kompiuterine matematikos sistema sukurti kietojo kūno fizikos paskaitoms skirtas kompiuterines demonstracijas. Pirmame skyriuje nagrinėjamas fizikinių procesų bei reiškinių kompiuterinis modeliavimas ir jo panaudojimas kietųjų kūnų fizikos paskaitose. Antrajame skyriuje nagrinėjami konkretūs reiškiniai ir aprašomi sukurti tų reiškinių kompiuteriniai modeliai. Pasinaudojant kompiuterine matematikos sistema MathCAD yra modeliuojama bei analizuojama kvantinių būsenų tankio priklausomybės nuo energijos funkcija, Fermio ir Dirako bei Bolcmano skirstiniai skirtingose temperatūrose ($5\text{ K} < T < 500\text{ K}$). Pasinaudojant būsenų tankio bei Fermio ir Dirako skirstiniais gautas laisvųjų elektronų pasiskirstymas pagal energijų reikšmes. Pateikiamas dinaminis skirstinių grafikas, vaizduojantis tikimybės elektronui užimti E energijos būseną priklausomai nuo temperatūros T pokyčių kitimą. Analizuojama kietojo kūno molinės šilumos priklausomybė nuo temperatūros T . Modeliuojamas Fermi lygmuo ir krūvininkų koncentracija neišsigimusiam grynajame bei priemaišiniame puslaidininkyje. Trečiame skyriuje aptariamas modelių panaudojimas kietojo kūno fizikos paskaitose.

Summary

Master's thesis on “Simulation of processes in physic of solid state using computer programs” consists of an introduction, 3 chapters, conclusions, 22 references of literature, 15 appendixes and 1 compact disc. There are presented 3 tables and 31 pictures in the work as well. The work comprises 56 pages (with appendixes there are 93 pages).

The aim of this work is seeking to create demonstrations for lectures in physic of solid state using the mathematical computer system. The first chapter deals with the possibility to use the computer programs in simulation of varied processes and phenomena and put into practice at lectures of solid state physics. The second chapter deals with particular phenomena. There are described the simulations of these phenomena as well. The computer mathematical system *MathCAD* was used to simulate and analyze the density of band states, Fermi – Dirac and Bolcman functions in the various temperature ($5\text{ K} < T < 500\text{ K}$). If we use the state destiny, Fermi – Dirac and Bolcman functions, we will

get a distribution of free electrons by values of energy. Dynamic graph of functions is presented, which shows a variation probability of electron to be in E energy state subject to variations of temperature T . There is analyzing dependence of molar heat of solid state against to temperature T . The simulation of Fermi layer and concentration of charge at intrinsic and at impurity semiconductor are composed in this work as well. The using of simulations in lectures of physics of solid state are discussed on the third chapter.

Turinys

1. ĮVADAS.....	5
2. MODELIAVIMAS	7
2.1. MODELIO SAMPRATA.....	7
2.2. MODELIO REIKŠMĖ	7
2.3. MODELIŲ RŪŠYS.....	8
2.4. MODELIŲ KLASIFIKAVIMAS	9
2.5. MODELIAVIMO ETAPAI	14
2.6. MODELIAVIMO PANAUDOJIMAS FIZIKOJE.....	17
3. KIETOJO KŪNO FIZIKOS REIŠKINIŲ MODELIAVIMAS	21
3.1. KIETŲJŲ KŪNŲ SAVITOJI (MOLINĖ) ŠILUMA	21
3.2. BŪSENŲ TANKIS.....	26
3.3. FERMI – DIRAKO SKIRSTINYS	29
3.4. ELEKTRONINIŲ DUJŲ KONCENTRACIJA	34
3.5. FERMI LYGMUO IR KRŪVININKŲ KONCENTRACIJA NEIŠSIGIMUSIAME GRYNAJAME PUSLAIDININKYJE	38
3.6. FERMI LYGMUO IR KRŪVININKŲ KONCENTRACIJA NEIŠSIGIMUSIAME PRIEMAIŠINIAME PUSLAIDININKYJE	44
4. MODELIŲ PANAUDOJIMAS KIETOJO KŪNO FIZIKOS PASKAITOSE	52
5. IŠVADOS	54
5. LITERATŪRA	55
PRIEDAI	57
KIETŲJŲ KŪNŲ SAVITOJI (MOLINĖ) ŠILUMA 1	58
KIETŲJŲ KŪNŲ SAVITOJI (MOLINĖ) ŠILUMA 2	60
BŪSENŲ TANKIS.....	63
FERMI – DIRAKO SKIRSTINYS	65
BOLCMANO SKIRSTINYS	67
FERMI – DIRAKO IR BOLCMANO SKIRSTINIŲ PALYGINIMAS	69
FERMI – DIRAKO IR BOLCMANO SKIRSTINIŲ PALYGINIMAS 2	71
FERMI – DIRAKO SKIRSTINIO ANIMAVIMAS	73

ELEKTRONINIŲ DUJŲ KONCENTRACIJA IR JOS ANIMAVIMAS.....	76
FERMI LYGMUO IR KRŪVININKŲ KONCENTRACIJA NEIŠSIGIMUSIAME GRYNAJAME PUSLAIDININKYJE (GaAs)	80
FERMI LYGMUO IR KRŪVININKŲ KONCENTRACIJA NEIŠSIGIMUSIAME GRYNAJAME PUSLAIDININKYJE (Si).....	83
FERMI LYGMUO IR KRŪVININKŲ KONCENTRACIJA NEIŠSIGIMUSIAME GRYNAJAME PUSLAIDININKYJE (Ge)	86
FERMI LYGMUO IR KRŪVININKŲ KONCENTRACIJA NEIŠSIGIMUSIAME GRYNAJAME PUSLAIDININKYJE (PALYGINIMAS)	89
FERMI LYGMUO IR KRŪVININKŲ KONCENTRACIJA GaAs PUSLAIDININKYJE, TURINČIAME DONORINIŲ PRIEMAIŠŲ	90
KOMPAKTINIS DISKAS SU SPRENDIMAIS	93

1. Įvadas

Darbo tema: Kietojo kūno fizikos reiškinių kompiuterinis modeliavimas.

Darbo aktualumas: Didėjanti modeliavimo žinių ir įgūdžių paklausa besiformuojančioje informacinėje visuomenėje, pažinimo ir modeliavimo procesų bendrumas ir kai kurie kiti faktoriai lemia tai, kad šiandien modeliavimas tampa vienu pagrindinių mokymo metodų, ypač aukštosiose mokyklose. Tiek moksleiviai, tiek studentai mielai naudojami kompiuteriu, ir todėl, kad šiuo būdu gauta informacija priimama ir vertinama gana dėmesingai, informacinių technologijų srities pasiekimus galima gana efektyviai panaudoti mokymo procese (Kvietkauskienė, Kvietkauskas, 2001).

Tobulėjant kompiuteriams ir skaičiavimo metodams, funkcijų vertes, kurių anksčiau tekdavo ieškoti lentelėse, dabar galime dideliu tikslumu apskaičiuoti kompiuteriu. Tai labai patogiu. Naudojantis kompiuterinėmis programomis galime greitai apskaičiuoti ir vizualizuoti sudėtingą funkciją, o jos savybes panagrinėti tiesiog kompiuterio ekrane (Dargys, 2003).

Iki šiol dauguma fizikos disciplinų aukštosiose mokyklose lieka “klasikinėmis”, t. y. laikosi ant “trijų banginių”: teorinio kurso, dėstomo paskaitų forma, pratybų, kuriose sprendžiami uždaviniai, bei laboratorinių darbų. Tačiau dabar, kai yra sukurta nemažai geros techninės bei programinės įrangos, galima nesunkiai realizuoti kompiuterinio mąstymo principus fizikoje. Be to turėtų paskatinti studentą giliau pažvelgti į studijuojamą problemą, geriau įtvirtinti medžiagą ir vystyti fizikinę intuiciją (Poršnev, 2002).

Fizika, kaip mokslas, atveria plačias galimybes naujų mokymo metodų integravimui ir jų įdiegimui. Šiuo metu sukaupta didelė kompiuterinės technikos panaudojimo fizikiniuose tyrimuose patirtis. Šiuolaikinėje fizikoje vis plačiau taikomas reiškinių ir procesų kompiuterinis modeliavimas. Galima konstatuoti faktą, kad greta bendrosios ir teorinės fizikos atsirado nauja šiuolaikinės fizikos dalis – skaičiuojamoji fizika. Pagrindinis skaičiuojamosios fizikos tyrimo metodas yra kompiuterinis eksperimentas, kurio teorinė bazė yra matematinis modeliavimas, o eksperimentinė – kompiuterinė technika. Kompiuteriniame modeliavime integruojami tokie dalykai, kaip teorinė fizika, matematinė analizė ir programavimas.

Dėstant fiziką, daugelio labai svarbių reiškinių ir bandymų neįmanoma realiai pademonstruoti, o jų paaiškinimas reikalauja iš dėstytojo didelių „meninių sugebėjimų“. Kaip tik todėl atsirado tokių reiškinių kompiuterinio modeliavimo tendencija. Dabar dėstytojas, iš anksto parinkęs pradinius duomenis, aiškinimo metu gali demonstruoti visus galimus proceso vyksmo variantus.

Tai neišvengiamai atsispindi ir universitetiniame fizikos mokyme. Paskaitose vis dažniau naudojamos multimedijos projekcinės sistemos, įgalinančios atlikti kompiuterines demonstracijas. Todėl iškyla būtinybė parengti naujas didaktines priemones ir jų panaudojimo metodinius nurodymus.

Tikslas: pasinaudojant kompiuterine matematikos sistema sukurti kietojo kūno fizikos paskaitoms skirtas kompiuterines demonstracijas.

Uždaviniai:

1. Surinkti ir susisteminti medžiagą apie modeliavimą ir jo panaudojimą fizikoje.
2. Išanalizuoti modeliuojamus fizikinius reiškinius, siekiant gauti galutinius analitinius sprendinius, tinkamus kompiuteriniam modeliavimui.
3. Gautų analitinių sprendinių pagrindu sukurti kietųjų kūnų fizikos reiškinių kompiuterinius modelius.
4. Aprobuoti sukurtas kompiuterines demonstracijas Šiaulių universiteto kietųjų kūnų fizikos paskaitose.

Tyrimo objektas: kietųjų kūnų fizikos reiškinių kompiuterinis modeliavimas.

Tyrimo metodai:

1. Mokslinės ir dalykinės literatūros analizė.
2. Kompiuterinis modeliavimas.

2. Modeliavimas

2.1. Modelio samprata

Iš esmės visa, ko mokomasi, yra modeliai. Taikant kompiuterius mokyme ypatingą reikšmę įgyja modelių sudarymas, eksperimentavimas su jais. Todėl iškyla būtinybė susipažinti su pačiais modeliais, jų klasifikavimu, aptarti svarbiausias modelių charakteristikas. Modeliu gali tapti dirbtinis, žmogaus sukurtas abstraktus arba materialus objektas.

Ką reiškia žodis „modelis“? Tai ir architektų sudaryta miesto plėtros plano schema, ir naujas automobilis parodoje, ir per chemijos pamoką atliekamas bandymas, ir gražuolė, reklamuojanti naują rūbų kolekciją, ir įvairūs apskaičiavimai, prognozuojantys, kokį poveikį žmonijai turės „ozono skylių“ atsiradimas, ir visiems žinoma žemės traukos jėgos formulė $P = mgh$... Kodėl vienu žodžiu „modelis“ apibūdinama tiek įvairių sąvokų? Todėl, kad modeliu gali tapti žmogaus *dirbtinai* sukurtas abstraktus arba materialus objektas, kurį tiriant, sužinoma apie realiai egzistuojantį (dažniausiai daug sudėtingesnį) objektą, vadinamą *prototipu* arba *originalu*.

Modelis – esminių realios sistemos savybių išraiška, kuri tam tikru būdu atspindi sistemos funkcionavimą ir padeda tirti. Tai paprastesnis realaus objekto, proceso arba reiškinių pateikimas.

Modelis – tai tam tikro objekto, proceso arba reiškinių analogas, atspindintis mus dominančias originalo savybes ir charakteristikas, galintis tam tikroms sąlygoms pakeisti originalą. Be to modelis, palyginus su originalu, turi esminius privalumus ir patogumus (vaizdingumas, galimybė atlikti su juo eksperimentus, lengva operuoti ir t.t.). Kitaip sakant, tai analogas arba tam tikras supaprastintas pakaitalas realiai egzistuojančių arba įsivaizduojamų objektų, procesų, reiškinių. Modelis nėra tikslus ir išsamus sistemos aprašymas, jis tik imituoja jos kūrėją dominančią sistemos elgseną.

Modeliavimas – tai modelių kūrimas, suteikiantis galimybę tyrinėti objektą, procesą arba reiškinių.

Tai bandymas tirti realios sistemos pakaitalą.

2.2. Modelio reikšmė

Kodėl modelių kūrimas ir analizavimas yra toks svarbus? Pirma, originalo gali jau nebūti, o kartais jis išvis ir neegzistuoja. Štai, pavyzdžiui, mokslininkai sukūrė dinosauro išnykimo teorijos modelį. Pačių dinosauro tyrinėti jau nėra galimybės – jie išnykę prieš daug

amžių. Galima tik įvairiai modeliuoti jų sandarą, egzistavimą, iš to padaryti įvairių išvadų. Fizikai, chemikai tyrinėja atominės žiemos teoriją, kuria įvairius jos modelius. Pavyzdžiui, tyrinėja, kas būtų žmonijai, gamtai, visai civilizacijai, jeigu įvyktų atominis karas. Tokiu būdu stengiamasi apsaugoti žmoniją nuo galimos nelaimės.

Antra, originalas gali turėti labai daug savybių, kurių tyrinėti tiesiogiai beveik neįmanoma, tam tikrais atvejais gali trukdyti tirti originalą. Pavyzdžiui, psichologai tiria žmogaus psichiką. Tai padaryti visapusiškai neįmanoma, todėl jie pasirenka tik konkrečią psichikos sritį modeliuodami atlieka įvairius tyrimus ir iš to daro išvadas apie vienokias ar kitokias psichikos savybes. Norint išsamiau ištirti mus vieną dominančių originalo savybių verta atsisakyti kitų mažiau reikšmingų savybių ar ryšių. Modelių privalumas, kad jame sukonzentruoti pagrindiniai realaus objekto faktoriai. Neesminiai faktoriai arba iš išvis neegzistuoja, arba pavaizduoti paviršutiniškai.

Kitas modelio privalumas – galimybė paprastomis priemonėmis keisti jo parametrus, stebėti reakcijas, veikiant modelį iš išorės.

Paprastesnį modelį lengva tirti ir eksperimentuoti su juo. Tačiau kuo paprastesnis modelis, tuo mažiau jis atitinka modeliuojamą objektą arba procesą. Todėl, ką nors modeliuojant, visada egzistuoja kompromisas tarp modelio paprastumo ir jo tikslumo užtikrinimo.

2.3. Modelių rūšys

Modeliai gali būti objektai, reiškiniai arba procesai.

Objektų modeliai – tai ir architektūrinių pastatų maketai, ir meno kūrinių reprodukcijos, ir vaizdinė medžiaga mokyklos dalykų kabinetuose. Modelis gali atvaizduoti kokį nors realiai egzistuojantį objektą, pavyzdžiui, Saulės sistemą, vandenilio atomą ir pan. Tačiau modelis gali būti ir abstraktus realiai egzistuojančių objektų apibendrinimas, pavyzdžiui, modelis, demonstruojantis įžymaus dizainerio rūbų kolekciją – tai lyg ne realus žmogus su jo privalumais bei trūkumais, o apibendrintas idealas, standartas.

Reiškinų modeliai nusako ryšius tarp įvairių objektų: šitaip galima nagrinėti gyvąją gamtą, numatyti katastrofas ir jų išvengti, tinkamai panaudoti gamtines jėgas. Pavyzdžiui, kai geografijos pamokose kalbama apie gamtos reiškinius, tai nagrinėjami ne patys konkretūs reiškiniai (žemės drebėjimas, audra, lietus, žaibas ir t. t.), o šių reiškinių apibendrinimai, t. y. jų modeliai.

Procesų modeliais grindžiamas materialių objektų veikimas. Kuriant procesų modelius, modeliuojami veiksmai su materialiais objektais: eiga, nuosekli vieno objekto ar

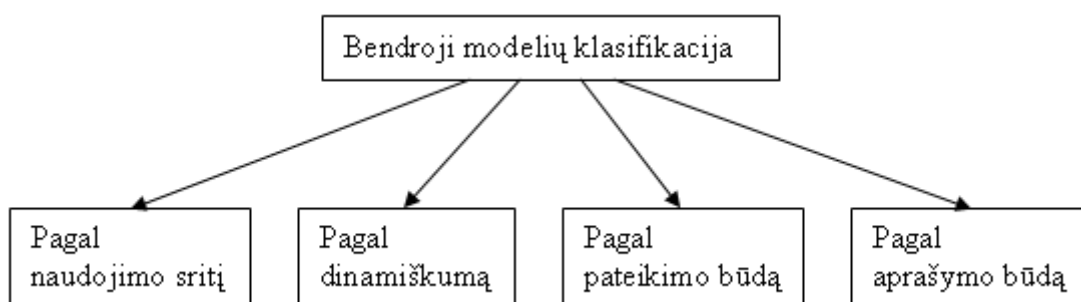
visos sistemos būsenos, plėtojimosi stadijų kaita. Pavyzdžiui, galima sukurti ekonominių arba ekologinių procesų, Visatos ar visuomenės raidos modelius ir pan.

Vienam objektui, procesui arba reiškiniui gali būti sukurta be galo daug modelių. Modelio tipas priklauso nuo pasirinkto modeliavimo tikslo – kam kuriamas šis modelis, ir nuo to, kokiais metodais (būdais) renkama informacija apie modelio prototipą.

Technologijų amžiuje mokėjimas modeliuoti padeda greitai priimti teisingus sprendimus. Negalime švaistyti savo laiko, aiškindamiesi iki smulkmenų atskirus dalykus, o turime išmokti suvokti visumą. Todėl mokykloje naujos informacijos technologijos ir programavimas galėtų būti priemonė mokytis modeliuoti plačiąja prasme. Mokymo modeliuojant metodas priskiriamas prie atvirojo ugdymo, kuris skatina moksleivių kūrybiškumą, mokymosi motyvaciją.

2.4. Modelių klasifikavimas

Klasifikacija - tai objektų sudėliojimas į grupes, kurių elementai turi vieną ar kelis bendrus požymius. Viena iš dažniausiai vartojamų klasifikacijų yra pateikta 1 pav.



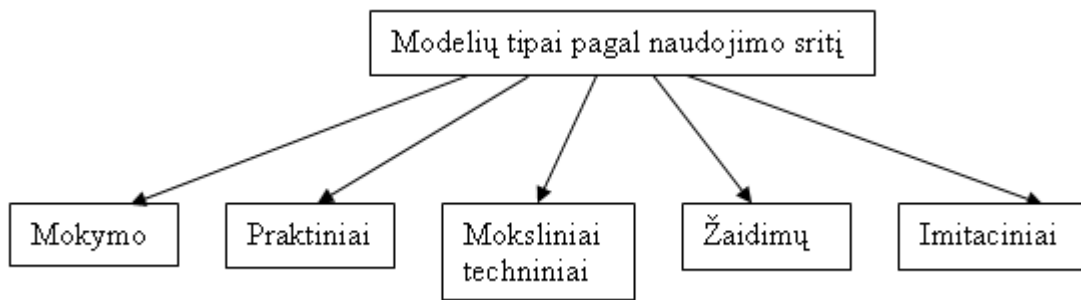
1 pav. Bendroji modelių klasifikacija

Modeliai pagal naudojimo sritį. Pagal tai, kam naudojami, modeliai gali būti skirstomi į keletą grupių (2 pav.):

Mokymo modeliai – tai vaizdinės priemonės, įvairūs treniruokliai, mokomosios programos. Pvz., matematikos pamokose naudojami erdvinių figūrų, išlankstytų iš vielučių, modeliai; informatikos pamokose - klaviatūros treniruokliai ir pan.

Praktiniai modeliai – tai sumažintos arba padidintos projektuojamo objekto kopijos. Jie naudojami objektui nagrinėti, jo savybėms prognozuoti. Pvz., laivo modelis išbandomas baseine, kad būtų nustatytas jo apatinės dalies patvarumas.

Moksliniai bei techniniai modeliai reikalingi procesams bei reiškiniams tyrinėti. Tai ir prietaisai, imituojantis žaibo iškvėpą, ir televizorių tikrinimo stendas. Įvairūs prietaisai naudojami per fizikos ir chemijos laboratorinius darbus.



2 pav. Modelių tipai pagal naudojimo sritį

Žaidimų modeliai – tai kariniai, ekonominiai, sportiniai žaidimai. Jie tarsi imituoja objektų (dažniausiai subjektų) elgesį įvairiose situacijose. Pvz., šiuo metu populiarūs vadinamieji strateginiai kompiuteriniai žaidimai, kuriuose galima įvairiai modeliuoti situacijas siekiant pergalės.

Imitaciniai modeliai – tai eksperimentai įvairiomis sąlygomis. Tokie modeliai imituoja įvairius veiksmus. Eksperimentas arba daug kartų kartojamas norint sužinoti ir įvertinti kokių nors veiksmų su objektu pasekmes, arba atliekamas vienu metu daugeliui kitų panašių objektų, esant įvairioms sąlygoms. Pvz., nauji vaistai, norint išsiaiškinti šalutinį poveikį ir nustatyti dozes, pirmiausia duodami pelėms.

Modeliai pagal dinamiškumą skirstomi į statinius ir dinامينius. Tai lengviausiai atpažįstami modeliai.

Statiniai modeliai - tai modeliai, kuriuose fiksuojama objekto padėtis konkrečiu momentu. Pvz., viena mokinių klasė apsilankė pas stomatologą. Jų medicinos kortelių įrašuose - mokinių dantų būklė šią dieną.

Dinaminiai modeliai - tai modeliai, leidžiantys pamatyti, kaip objektas kinta, bėgant laikui. Pvz., mokinio medicininė kortelė nuo gimimo iki šios dienos – dokumentas, fiksuojantis, kaip nuo gimimo kito mokinio ūgis, svoris, dantų būklė.

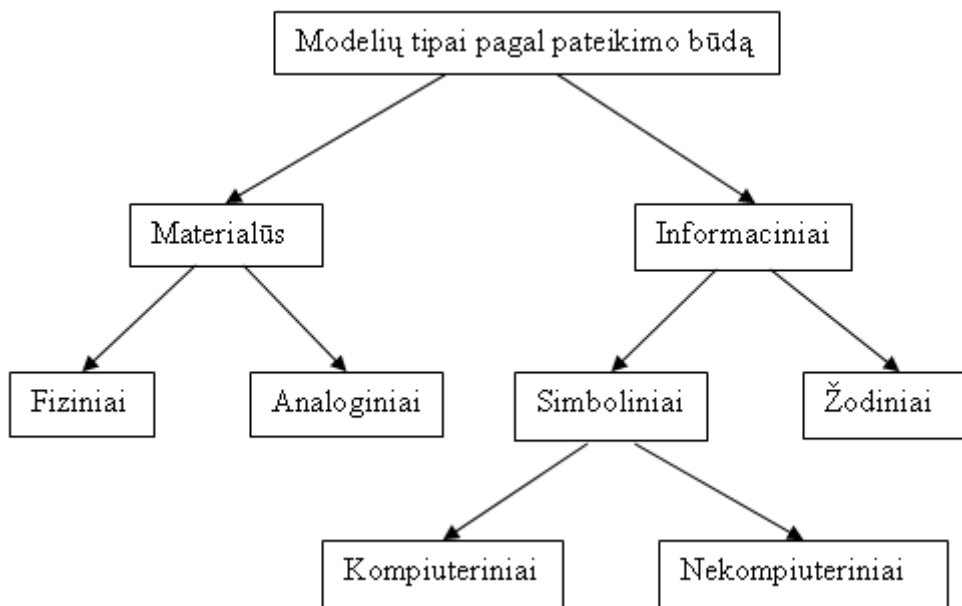
Statant namą, apskaičiuojama pamatų, sienų, blokų slėgimas. Tai statinis modelis. Tačiau reikia numatyti, kaip pamatus, sienas veiks vėjas, gruntinis vanduo. Tai jau dinaminis vanduo modelis. Kaip matome iš pavyzdžių, tą patį objektą galima nagrinėti naudodami tiek statinį, tiek dinaminį modelį.

Modeliai pagal pateikimo būdą. Modelius sutinkame įvairiais pavidalais – tai ir materialūs apskaičiuojami objektai, ir kompiuterinės programos, ir žodiniai pasakojimai (3 pav.). Schema būtų tokia:

Materialius modelius galima vadinti fizikiniais, daiktiniais modeliais. Jie atspindi geometrinės ir fizikinės originalo savybes ir visada turi realią išvaizdą. Patys paprasčiausi materialių modelių pavyzdžiai - vaikų žaislai, suteikiantys pasaulio pirmavaizdį. Iš jų vaikas gauna pirmą supratimą apie jį supantį pasaulį.

Fiziniu modeliavimu priimta vadinti modeliavimą, kada realiam objektui yra priešpastatomas jo padidinta arba sumažinta kopija, leidžianti tyrinėjimus (dažniausiai laboratorinėmis sąlygomis). Pavyzdžiui, astronomijoje – planetariumas, architektūroje – pastatų maketai, lėktuvų statyboje – skraidančių aparatų modeliai ir t. t.

Analoginis modeliavimas paremtas procesų ir reiškinių, turinčių skirtingą fizinę prigimtį, bet formaliai aprašomais vienodai (t. y. tomis pačiomis formulėmis), analogija.



3 pav. Modelių tipai pagal pateikimo būdą

Materialūs modeliai – tai paukščių iškamšos biologijos kabinete, tai saulės sistemos schemas astronomijos pamokoje ir kt. Materialūs modeliai - tai ne tik mokymo priemonės, bet ir įvairūs fizikiniai bei cheminiai bandymai. Juose modeliuojami procesai – pvz., vandenilio ir deguonies reakcija.

Informacinis modelis – tai informacija, charakterizuojanti objekto, proceso, reiškinio savybes ir jų ryšį su aplinka. Informaciniam modeliui galima priskirti žodinius modelius, gautus samprotaujant. Jie gali likti tik mintyse arba būti išreikšti žodžiu. Pvz., žmogus, nusprendęs pereiti gatvę, analizuoja situaciją kelyje: ką rodo šviesoforas, ar toli mašinos, koks jų greitis. Po to pasirenka elgesio modelį. Jeigu situacija sumodeliuota teisingai, gatvė bus pereita saugiai. Jei ne – gali įvykti avarija.

Žodinis modelis – tai minčių arba šnekos informacinis modelis. Tai paprasčiausiai žmogaus mintys bei jo pasakojimas.

Simbolinis modelis - tai informacinis modelis, išreikštas specialiais ženklais, formalios kalbos išraiškos priemonėmis. Simboliniai modeliai visur: tai piešiniai, tekstai, grafikai ir schemas. Žodiniai ir simboliniai modeliai yra susiję. Vaizdas, gimęs žmogaus

mintyse, gali įgyti simbolinę formą. Ir, atvirkščiai, simbolinis modelis padeda suformuluoti teisingą mintį.

Modelius kurti galima labai įvairiomis priemonėmis. Yra nemažai formalių kalbų, tinkančių modeliams kurti. Jeigu modelis turi materialią išvaizdą, tai jam kurti tinka tradiciniai instrumentai: skulptoriaus įrankiai, fotoaparatas, kirvis ir kt.

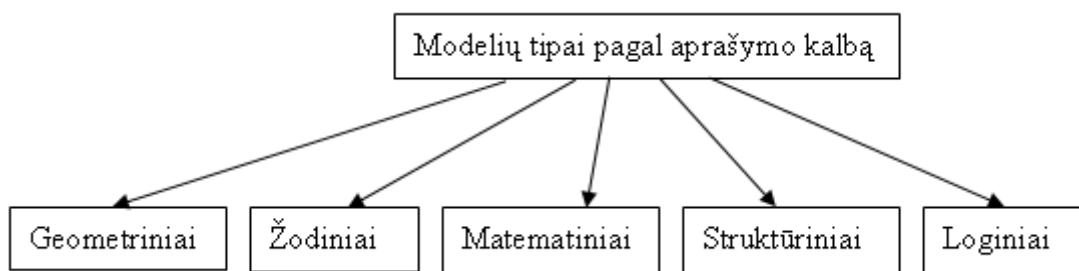
Jeigu modelis išreikštas abstrakčia forma, tai jam aprašyti reikalingos simbolių sistemos: specialios kalbos, brėžiniai, schemos, grafikai, algoritmai, matematikos formulės. Čia gali būti panaudoti du priemonių variantai: arba tradicinis inžinieriaus, arba konstruktoriaus rinkinys (pieštukas, liniuotė), arba pats galingiausias įrenginys – kompiuteris.

Pagal realizacijos formą modeliai gali būti kompiuteriniai ir nekompiuteriniai.

Kompiuterinis modelis – tai modelis, išreikštas programinės įrangos priemonėmis. Šiuolaikinis kompiuteris gali dirbti su garsu, vaizdu, animacija, tekstais, schemomis, lentelėmis ir t. t. Tam reikalinga ir techninė, ir programinė įranga. Tai kompiuterinio modeliavimo instrumentai. Pvz., dirbant su garsu reikalinga garso plokštė ir speciali programinė įranga. Kompozitoriui tai būtų profesionalus muzikinis redaktorius, kuris leidžia ne tik rinkti natas, bet ir kurti, montuoti, išklausyti kūrinį. Šiuo metu yra daug programų, suteikiančių galimybę kurti įvairius kompiuterinius simbolinius modelius: tekstų redagavimo sistemų, skaičiuotuvių, duomenų bazių apdorojimo sistemų, profesionalių projektavimo sistemų, programavimo terpių, specialių modeliavimo sistemų.

Pagrįstai sudarytas ir visapusiškai ištirtas mokomasis kompiuterinis modelis sujungia savyje tiek dalyko mokomosios programos, tiek bendrosios paskirties programos funkcijas. Todėl jis mokymo procese gali būti panaudotas įvairiai: per teorines paskaitas – kaip medžiagos pateikimo ir demonstravimo priemonė, per laboratorinius darbus – kaip virtualus laboratorinis stendas, nereikalaujantis realių medžiagų, per pratybas – kaip tam tikros dalykinės srities kalkuliatorius, namuose – kaip savarankiško darbo ir žinių patikrinimo priemonė.

Modeliai pagal aprašymo kalbą - tai yra klasifikacija pagal pateikimo formą (4 pav.). Schema yra tokia:



4 pav. Modelių tipai pagal aprašymo kalbą

Geometrinis modelis - tai realus išorinių savybių pateikimas. Geometriniai modeliai panašūs į originalą. Jie reikalingi norint mokyti projektuoti, konstruoti. Paprasčiausi modeliai – vaikų žaislai, padedantys pažinti pasaulį. Pastato, laivo maketai, vietovės planas, piešinys, nuotraukos – tai geometriniai modeliai.

Geometrinis kompiuterinis modelis – grafikos priemonėmis išreikštas informacinis modelis.

Pradedant kurti geometrinį modelį reikia išskirti objektą, nustatyti modeliavimo tikslus, suformuluoti informacinį modelį, išsirinkti modeliavimo instrumentus. Grafinė redagavimo sistema - tai viena iš modeliavimo priemonių, pakeičiančių dailininko plunksną, skulptoriaus įrankį, mokytojo kreidą.

Dažnai modeliuojamą objektą galima išskaidyti dalimis. Namas pastatytas iš statybinių blokų. Labai svarbu išnagrinėti detales, kad būtų galima sudėti įvairius objektus. Toks procesas – konstravimas. Prieš darant materialų modelį, patogiu turėti jo kompiuterinį pavidalą. Taigi daug geometrinių objektų galima sukonstruoti grafinė redagavimo terpe. Kompiuterinis konstravimas – kompiuterinio modelio sukūrimas iš elementarių objektų.

Žodiniai modeliai – tai vienas iš simbolinių modelių. Žodinius modelius kuriame nuolatos. Žodžiais nusakome įvairius objektus, procesus, situacijas, savo apmąstymus.

Žodinis modelis - tai informacinio modelio išreiškimas šnekamąja kalba, žodžiu, raštu. Jie kuriami, siekiant išsaugoti informaciją, perduoti patirtį, perteikti mintis. Geriausiai žinomas žodinio modelio pavyzdys – vadovėliai. Žodiniai modeliai gali nusakyti situacijas, įvykius, kad apmąstytume ir pritaikytume juos gyvenime. Taip nusakomi ir procesai. Šiam tikslui naudojami algoritmai. Kuriant kurią nors kompiuterinę programą, pirmiausia reikia sugalvoti algoritmą, kurį galima keisti esant konkrečiai situacijai. Žodinio modelio pagrindas – žodžių modelis. Kuriant žodinius modelius svarbu aiškiai ir tiksliai formuluoti sakinius, išskirti reikšminius žodžius, tiksliai vartoti terminus. Kas gali tapti žodinio modelio įrankiu? Seniau buvo plunksna, vėliau – rašomoji mašinėlė, dabar – kompiuteris.

Matematinis modelis – tai objekto ar proceso išreiškimas matematinėmis formulėmis, kurios susieja jo kiekybinius parametrus. Gali būti sukurti to paties reiškinio keli matematiniai modeliai. Pvz., Saulės sistemos kūnų judėjimui aprašyti galima naudoti: Keplerio modelį, Niutono modelį. Dažnai matematinis modelis naudojamas kuriant kitus modelius.

Struktūriniai modeliai. Sugebėjimas išskirti reikiamą informaciją ir ją struktūrizuoti – svarbi žmogaus intelekto savybė. Be to visas pasaulis būtų pilnas triukšmo ir netvarkos. Norint to išvengti kuriami struktūriniai modeliai- Informacinio modelio kūrimo etape surinkta informacija struktūrizuodama. Struktūra – tai kieno nors sudedamų dalių tarpusavio išdėstymas, sutvarkyta duomenų sistema. Struktūriniai modeliai kuriami norint vaizdžiau

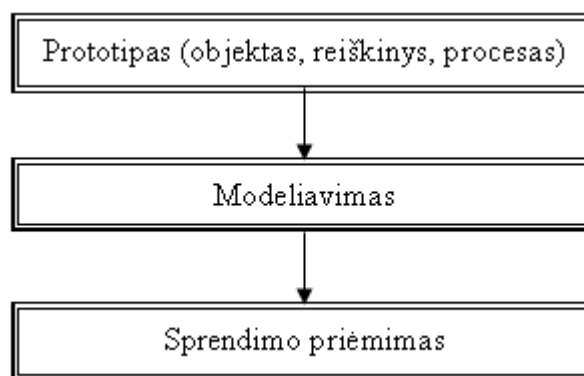
parodyti nagrinėjamo objekto sudedamas dalis ir jų ryšius. Struktūrinis modelis – informacinio simbolinio modelio išreiškimas pateikiant jį struktūra. Struktūriniai modeliai yra:

- lentelės;
- schemas - tai grafiniai blokai su tekstais ir tiesėmis, rodančiomis ryšį tarp jų. Schemas tinka, kai norime išreikšti nehierarchines struktūras. Schemoms sudaryti naudojama grafinėje terpėje arba tekstinėje redagavimo sistemoje esanti vektorinė grafika;
- grafas – tai objektas, susidedantis iš taškų, sujungtų linijomis, ypač vaizdūs grafai loginiuose modeliuose;
- blokai – tai schemas, naudojamos sprendžiamos užduoties algoritmui užrašyti. Jas galima sukurti programa „Microsoft Draw“.

Loginis modelis - tai modelis, kuriame analizuojant įvairias sąlygas gaunamas sprendimas. Loginiai modeliai kuriami apie kažką samprotaujant, ieškant loginių ryšių. Kuriant kompiuterinius loginius modelius naudojamos lentelės, grafai, schemas.

2.5. Modeliavimo etapai

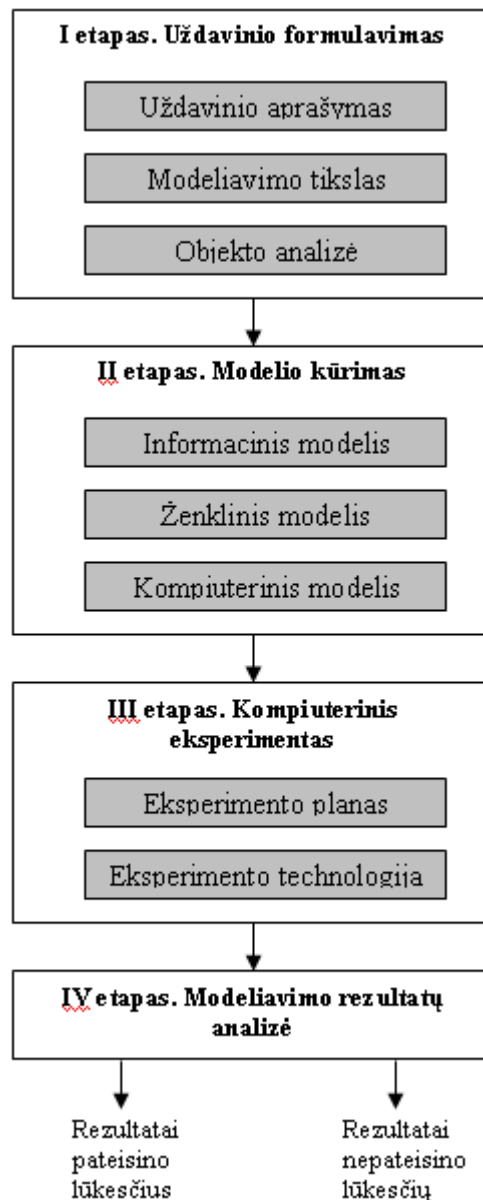
Modeliavimas – vienas iš svarbiausių žmogaus veiklos būdų. Prieš pradėdami kokį nors darbą, turime įsivaizduoti, nuo ko tą darbą pradėti, kokie galėtų būti darbo rezultatai, kokie galimi darbo atlikimo etapai, kuriais mes vadovausimės atlikdami praktinę darbo dalį. Tą patį galima pasakyti ir apie modeliavimą (5 pav.).



5 pav. Modeliavimo etapai

Modeliavimo pradžia – objekto, reiškinių prototipas. Modeliavimo pabaiga – sprendimo priėmimas: arba sukuriamas naujas objektas, kurio modelį mes nagrinėjome, arba pageriname jau egzistuojantį objektą, arba gauname apie šį objektą papildomų žinių.

Modeliavimas – tai kūrybinis procesas. Įsprausti jį formalius rėmus yra gana sunku. Bendriausia modeliavimo schema pavaizduota 6 paveiksle.



6 pav. Bendriausia modeliavimo schema

Modeliavimo etapai:

- **užduoties formulavimas** (užduoties aprašymas, modeliavimo tikslas, objekto analizė);
- **modelio kūrimas** (informacinis modelis, simbolinis modelis, kompiuterinis modelis);
- **kompiuterinis eksperimentas** (modeliavimo planas, modeliavimo technologija)
- **rezultatų analizė**: pasiektas tikslas arba nepasiektas tikslas.

Aptarsime modeliavimo etapus.

Užduoties formulavimas.

Užduoties aprašymas turi būti aiškus. Svarbiausia - įvardinti modeliavimo objektą ir žinoti, koks turi būti rezultatas. Užduotis galima skirstyti į dvi grupes. Pirma grupė – užduotys, skirtos išsiaiškinti, kaip pasikeis veikiamo objekto savybės. Reikia atsakyti į klausimą „kas bus, jeigu...“. Pvz., kaip pasikeis greitis per n sekundžių, jeigu automobilis juda tiesiai ir vienodu pagreičiu. Kita grupė – užduotys, skirtos išsiaiškinti, kaip reikia veikti objektą, kad gautume tinkamą rezultatą. Reikia atsakyti į klausimą „kaip tai padaryti, kad ...“. Pvz., kokios apimtys turi būti oro balionas, kad galėtų pakelti m kg svorį?

Realių uždavinių, priklausančių tik vienai grupei, rasti sunku. Daugelis uždavinių yra kompleksiniai.

Modeliavimo tikslas. Kodėl žmogus kuria modelis? Modeliai padeda suprasti, kaip sudarytas konkretus objektas, nustatyti jo vystymosi savybes ir sąveiką su aplinka. Tai pasaulio pažinimo modeliai. Tai leido sukurti naujus objektus. Kitas modeliavimo tikslas – objektų su norimomis savybėmis kūrimas.

Objekto analizė – nagrinėjamo objekto elementarių dalių savybių ir jų tarpusavio ryšių nustatymas. Tie ryšiai gali būti lygiaverčiai arba pavaldūs vieni kitiems. Paprastas pavaldžių ryšių objektų pavyzdys – tai sakinio skaidymas dalimis. Iš pradžių išskiriamos pagrindinės sakinio dalys, vėliau šalutinės sakinio dalys. Sudėtingi objektai gali būti sudaryti iš paprastesnių objektų, susietų įvairiais ryšiais.

Modelio kūrimas.

Informacinis modelis. Visų pirma šiame etape išsiaiškinamos savybės, būklė, veiksmai ir kitos elementarių objektų savybės, išreikštos įvairiomis formomis: žodžiu, schemomis, lentelėmis ir kt. Formuojamas supratimas apie elementarius objektus, sudarančius nagrinėjamą objektą. Tai informacinis modelis. Modeliai turi kuo tiksliau atspindėti objekto savybes. Surinkti informacijos reikia tiek, kad tikslas būtų pasiektas. Pvz., nagrinėjame objektą gėlę. Rezultatai priklausys nuo žmogaus tikslo. Bus gauta ir skirtingos informacijos. Biologas sulygins gėlę su kitomis, išnagrinės jos sandarą, ištyrinės kokios ląstelės, kokioje dirvoje auga. Medikas susidomės gėlės cheminėmis savybėmis ir t. t. Tą patį objektą galima nagrinėti iš kelių pozicijų ir aprašyti jį skirtingai. Kai savybes galima aprašyti formulėmis, kai kurias - schemomis, kitas - piešiniais.

Simbolinis modelis. Informacinis modelis išreiškiamas kokia nors simboliu forma, kuri gali būti kompiuterinė arba nekompiuterinė. Imantis kompiuterinio modeliavimo reikia pasidaryti brėžinių, schemų, užsirašyti formulių popieriuje. Kai suformuluotas informacinis simbolinis modelis galima pradėti jo kompiuterinį modeliavimą. Pradžioje kyla klausimas, kokią programinę ir techninę įrangą naudoti. Kartais žmogus jau žino, koks bus modelis. Kompiuterį, programines terpes naudoja norėdamas išreikšti tą modelį simboliu forma. Pvz.,

duomenų tvarkymo modeliams – duomenų bazes. Kuriant kompiuterinį modelį reikia nusimanyti apie programavimo terpes ir kitas programines priemones.

Kompiuterinis eksperimentas

Kad įdiegtume naujas technologijas, patikrintume naujas idėjas, reikalingas eksperimentas. Neseniai tokį eksperimentą buvo galima patikrinti tik laboratorijoje arba natūraliai. Norint iširti kokio nors prietaiso eksploatacines savybes kaitinamas arba šaldomas kameroje, kratomas, gadinamas. Laboratoriniai ir natūralūs eksperimentai neišvengiami be materialių ir laiko nuostolių. Vystantis skaičiavimo technikai buvo sukurtas unikalus tyrimo metodas - kompiuterinis eksperimentas. Galima išskirti du kompiuterinio eksperimento etapus: modeliavimo plano sudarymas ir modeliavimo technologija. Modeliavimo planas turi atspindėti darbą su modeliu. Ar kuriamas planas tikslus, būtinai reikia sukurti testą, patikrinantį modelį kompiuteriniu eksperimentu. Testas – tai rinkinys duomenų, kurių rezultatas iš anksto žinomas. Testavimas - modelio teisingumo nustatymas. Parenkame duomenis, apskaičiuojame rezultatus. Vėliau kompiuteriniu eksperimentu patikriname, ar gavome tuos pačius rezultatus. Jei rezultatai mums tinka, galime imtis modeliavimo technologijos. Modeliavimo technologija – tai vartotojo kryptingų veiksmų su kompiuteriniu modeliu visuma.

Modeliavimo rezultatų analizė.

Galutinis modeliavimo tikslas - sprendimo priėmimas. Tai lemiamas etapas: arba jūs tęsiate tyrimus, arba baigiate juos. Galbūt turite laukiamų rezultatų - tai juos reikia sulyginti su gautais modeliavimo rezultatais. Jeigu rezultatų nėra, tenka arba keisti patį modelį, arba papildyti kompiuterinį eksperimentą. Gal prastai sudarytas informacinis modelis, gal netinkamai parinkta modeliavimo terpė? Tada grįžtame prie ankstesnių etapų. Procesas kartojamas tol, kol pasiekama laukiamų rezultatų. Nereikia pamiršti klaidos – tai taip pat rezultatas.

Skirtinguose modeliavimo proceso stadijose gali dalyvauti įvairų dalykinių sričių specialistai, kurių darbas turi būti gerai suderintas ir koordinuotas. Modeliavimas (kaip ir programavimas) – tai kolektyvinis projektinis darbas, kurio dalyviai turi susipažinti su sistemų inžinerijos metodais ir standartais, skirtais projekto vadybai bei grupiniam darbui organizuoti.

2.6. Modeliavimo panaudojimas fizikoje

Užtenka pavartyti pirmą po ranka papuolusį mokslinį leidinį arba pereiti per fizikos laboratoriją, ir visur sutiksime kompiuterius. Kompiuteriai tapo labai svarbiu instrumentu eksperimentinėje fizikoje. Dažnai jie susiję su visomis laboratorinio eksperimento fazėmis:

nuo aparatūros projektavimo, tos aparatūros valdymo eksperimento metu ir iki duomenų rinkimo bei jų apdorojimo. Tai leido eksperimentatoriams ne tik geriau miegoti naktimis, bet ir įgalino atlikti eksperimentus, kurie kitaip būtų neįmanomi. Atliekant laboratorinius darbus pamokų metu kompiuteris disciplinuoja eksperimentatorių, skatina jį gauti kokybiškus duomenis (Starovikov, 2004). Kai kurios užduotys (kaip aparatūros projektavimas ar duomenų apdorojimas) artimos užduotims, sutinkamoms teoriniuose skaičiavimuose. Tačiau užduotys, susijusios su valdymu ir interaktyvia duomenų analize, kokybiškai skiriasi ir reikalauja programavimo realiame laike (Guld, Tobočnik, 1990).

Kalbant apie kompiuterių panaudojimą fizikoje, galima išskirti keturias kategorijas:

1. skaitinė analizė;
2. simbolinis pertvarkymas;
3. modeliavimas;
4. valdymas realiame laike.

Kodėl modeliavimas tampa toks svarbus fizikoje? Viena iš priežasčių yra tame, kad dauguma mūsų naudojamų analizinių priemonių, kaip diferencialinis skaičiavimas, dažniausiai tinka tiesinėms užduotims spręsti. Pavyzdžiui, gana lengva analizuoti dalelės, pakabintos ant spyruoklės, judėjimą, sprendžiant judėjimo lygtis. Tačiau dauguma gamtoje vykstančių procesų yra netiesiniai, todėl maži vieno kintamojo pokyčiai gali privesti prie didelių kito kintamojo pokyčių. Kadangi netiesines užduotis analiziniu būdu galima išspręsti tik atskirais atvejais, kompiuteris suteikia galimybę tyrinėti netiesinius reiškinius. Kita kompiuterinio modeliavimo svarbos priežastis susijusi su tuo, kad mus domina sistemos su daug laisvės laipsnių arba su daug kintamųjų.

1 lentelė

Laboratorinio ir skaičiuojamojo eksperimentų analogija

Laboratorinis eksperimentas	Skaičiuojamasis eksperimentas
Pavyzdys	Modelis
Fizikinis prietaisas	Kompiuterinė programa
Kalibravimas	Programos testavimas
Matavimas	Skaičiavimas
Duomenų analizė	Duomenų analizė

Kartais kompiuterinį modeliavimą dar vadiname skaičiuojamuoju eksperimentu, kadangi jis turi daug bendro su laboratoriniu eksperimentu. Kai kurie analogai pateikti 1 lentelėje. Modeliavimo pradiniu punktu yra nagrinėjamos fizikinės sistemos idealizuoto modelio sukūrimas. Tada būtina nustatyti to modelio realizacijos kompiuteryje procedūrą arba

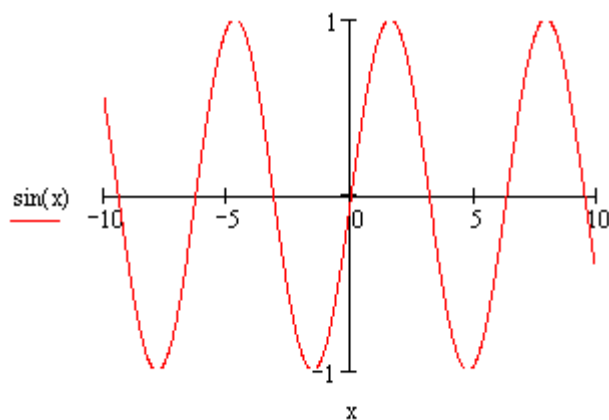
algoritmą. Kompiuterinė sistema modeliuoja fizikinę sistemą ir aprašo skaičiuojamąjį eksperimentą. Toks skaičiuojamasis eksperimentas yra kaip tiltas tarp laboratorinio eksperimento ir teorinių skaičiavimų. Pavyzdžiui, mes norime gauti tikslius rezultatus modeliuodami idealizuotą modelį, kuris neturi laboratorinio analogo. Modeliavimo rezultatų palyginimas su egzistuojamais teoriniais skaičiavimais skatina skaičiavimo metodų vystimąsi. Iš kitos pusės, galima modeliuoti realų modelį tam, kad atlikti išsamesnį palyginimą su laboratoriniu eksperimentu (Guld, Tobochnik, 1990).

Kompiuterinis modeliavimas, kaip ir laboratoriniai eksperimentai, nepakeičia samprotavimų, o yra tik instrumentas, kuris naudojamas sudėtingų reiškinių nagrinėjimui.

Kadangi šiuo metu kompiuteriai keičia tradicinius fizikinių tyrinėjimų būdus, tai negali neatsiliepti tam, kaip tyrinėti fiziką. Pavyzdžiui, kadangi kompiuteris vaidina vis didesnę vaidmenį fizikinių reiškinių suvokime, sudėtingų skaitinių rezultatų vizualizacija įgyja vis didesnę svarbą. Žmogaus akis kartu su smegenų sugebėjimu apdoroti vaizdus, yra labai sudėtingas videoinformacijos analizavimo aparatas. Dauguma iš mūsų gali labai greitai nubrėžti tiesę per eksperimento metu gautus taškus. Ir ta tiesė mums daugiau reiškia nei kažkokia „geriausio priartėjimo“ kreivė, nubrėžta kokio nors statistinio paketo, kuriame mes visai nesusigaudome, pagalba. Mūsų akis skiria struktūras, galbūt iš karto nepastebimas iš duomenų lentelių, ir sugeba pastebėti pasikeitimus laike, kurie gali padėti suvokti svarbių mechanizmų suvokimą.

Tačiau grafinių priemonių panaudojimas gali palengvinti analitinių sprendinių charakterio suvokimą. Pavyzdžiui, kaip įsivaizduojame sinuso funkciją? Vargu ar atsakysite,

jog tai eilutė, t. y. $\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \dots$; greičiau jūs pasakysite, kad tai periodinės funkcijos, turinčios pastovią amplitudę, grafikas (7 pav.).



7 pav. Sinuso funkcijos grafikas

Čia svarbu funkcijos formos vaizdinis suvokimas.

Negalima nepaminti ir modeliavimo reikšmingumo ugdomajam procesui. Šiuolaikinės informacijos technologijos suteikia daug galimybių įvairinti ir efektyvinti ugdymo procesą, jį keisti, skatina mokinius dirbti, lavinti ir įtvirtinti įgūdžius, padeda patikrinti ir objektyviai įvertinti moksleivių žinias bei įgūdžius, suteikia galimybę integruoti įvairius dalykus (Informacijos ir komunikacijos technologijos. <http://www.ipc.lt> (žiūrėta 2005 m. balandžio mėn.)).

Kompiuterio panaudojimo būdai aukštojoje mokykloje yra labai įvairūs. Fizika supažindina su bendriausiais gamtos judėjimo dėsniumais, kurie valdo procesus, vykstančius Žemėje ir Visatoje. Fizikos tikslas – nustatyti tuos bendriausius gamtos dėsnius ir remiantis jais paaiškinti konkrečius procesus. Pasaulis yra ne pakrikų, vienas nuo kito nepriklausomų įvykių visuma, o įvairūs ir gausūs bendrybės pasireiškimai. Visa turtinga kiekybinė pasaulio įvairovė – tai dalelių judėjimo įvairovė, kurią sunku pertekti be kompiuterio. Neįmanoma pažvelgti į sudėtingą atomo sandarą kūne ir nustatyti, kad kūnus sudaro ne tik vienos rūšies dalelės. Daugelį fizikinių reiškinių (pvz. fotoefektą, pnp sandūrą, silpnąsias sąveikas ir t. t.) detalai stebėti galimas tik modeliuojant juos kompiuterinėse programose. Tik šių programų dėka kvantinė fizika, apibūdinanti mikrodalelių judėjimą, atskleidė naujus fizikinio pasaulio vaizdo elementus. Sujungti viena kitą neigiančias dalelių ir bangų savybes vienoje teorijoje pasirodė įmanoma dėl to, kad visų be išimties mikrodalelių judėjimas yra statistinio pobūdžio. Modeliuoti jį naudojantis optiniu suoleliu neparanku, kadangi tai reikalauja labai didelio tikslumo. Kompiuterinėje programoje tai įmanoma atlikti labai greitai ir net keičiant įvairius parametrus.

Nemažas fizikos indėlis ir į dabartinę skaičiavimo techniką, kuri yra materialus informatikos pagrindas. Visos trys elektroninių skaičiavimo mašinų kartos (vakuuminių lempų, puslaidininkių ir integrinių schemų) buvo sukurtos fizikos laboratorijose. Tikriausiai ir dėl šių priežasčių, fizikos kompiuterinių programų yra ir Lietuvoje.

3. Kietojo kūno fizikos reiškinių modeliavimas

Kietojo kūno fizikos reiškinių kompiuteriniam modeliavimui buvo pasirinkta kompiuterinės matematikos sistema *MathCad*, turinti daug patogių palečių. Tai viena iš dažniausiai naudojamų matematinių programų. Ji turi galingą matematinį aparatą, leidžiantį spręsti sudėtingas užduotis, vaizduoti informaciją grafiškai, kurti animacijas.

3.1. Kietųjų kūnų savitoji (molinė) šiluma

Tobulųjų dujų molinė šiluma

$$C_V = \frac{d}{dT} \left(\frac{3}{2} RT \right) = \frac{3}{2} R .$$

Jei be kinetinės energijos kūnas turi ir kitokios energijos, tai jo molinė šiluma C_V bus didesnė. Tai stebime dujose, sudarytose iš molekulių, kurios be slenkamojo judėjimo energijos turi ir sukamojo bei svyruojamojo judėjimo energijos.

Iki kvantinės teorijos atsiradimo buvo manoma, kad analogišką paprastą teoriją galima taikyti ir kietiesiems kūnams. Bandymai rodo, kad esant pakankami didelėms temperatūroms, visų kietųjų kūnų molinė šiluma lygi

$$C_\mu = 3R .$$

Ši išraiška žinoma, kaip **Diulongo ir Pti** dėsnis, kuris tinka daugeliui medžiagų netgi kambario temperatūroje.

Kiekvienas kietojo kūno atomas turi 6 laisvės laipsnius, t.y. be kinetinės energijos $\left(\frac{3}{2} kT \right)$, turi dar tiek pat potencinės energijos $\left(\frac{3}{2} kT \right)$, nes atomai kietajame kūne yra ne laisvi, o pastoviose pusiausvyros padėtyse ir atlieka paprastus harmoninius svyravimus apie pusiausvyros padėtis.

Todėl pilna tokio atomo energija lygi:

$$E_{at.k} = 3kT , \left(E = \frac{i}{2} kT, \quad i = 6 \right);$$

arba vieno molio: $E_{mol.k} = 3RT .$

Gauname, kad kietųjų kūnų molinė šiluma lygi

$$C_{\mu V} = \frac{dE_{mol.k}}{dT} = 3R .$$

Bangos energija gali kisti tik proporcingai $h\nu$ dydžiui. Juo aukštesnė kristalo temperatūra, juo daugiau ir įvairesnių dažnių ($10^4 - 10^{13}$) Hz fononų “laksto” tuo pačiu metu

po kristalą. Esant aukštomis temperatūroms bangų energijų diskretiškumas jau neturi jokios reikšmės (galime sakyti, kad energija kinta tolygiai, o ne diskretiškai) ir tuomet sąryšis $C_V = 3R$ teisingas. Visai kitokius rezultatus gauname esant žemoms temperatūroms. Eksperimentiškai nustatyta, kad mažėjant temperatūrai kietojo kūno molinė šiluma mažėja.

Debajaus teorijos matematiniai skaičiavimai duoda tokią kietojo kūno molinės šilumos formulę:

$$C_V = 9R \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^x \frac{e^x x^4 dx}{(e^x - 1)^2}.$$

Šioje išraiškoje įskaityta pilna fononų energija kaip temperatūros funkcija. Parametras θ vadinamas charakteringąja Debajaus temperatūra. Jis skirtingas skirtingiems kietiesiems kūnams. θ apskaičiuojamas iš sąlygos $h\nu_{max} = k\theta$. Iš čia

$$\theta = h\nu_{max}/k.$$

Debajaus temperatūra kiekvienam kūnui apibūdina sritį, kur energijos kvantavimas jau daro įtaką.

$$\text{Kintamasis } x = \frac{h\nu}{kT} = \frac{\theta}{T}.$$

Panagrinėkime kietojo kūno molinės šilumos priklausomybę nuo temperatūros.

$$C_V = 9R \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^x \frac{e^x x^4 dx}{(e^x - 1)^2}.$$

Žemose temperatūrose, t.y. kai $T \ll \theta$, integralo viršutinė riba bus labai didelė, $x \rightarrow \infty$. Tada integralas bus kažkoks skaičius.

Pavyzdžiui, jei $\theta/T = x > 24$,

$$\int_0^x \frac{e^x x^4 dx}{(e^x - 1)^2} = 4\pi^4/15 = 26.$$

Tokiais atvejais $C_V \sim T^3$.

Ši apytikslė priklausomybė žinoma kaip T^3 Debajaus dėsnis. Žemose temperatūrose šis dėsnis eksperimentiškai patvirtinamas labai gerai.

Aukštose temperatūrose, t.y. kai $T \gg \theta$, ir $h\nu/kT \ll 1$, $x \rightarrow 0$.

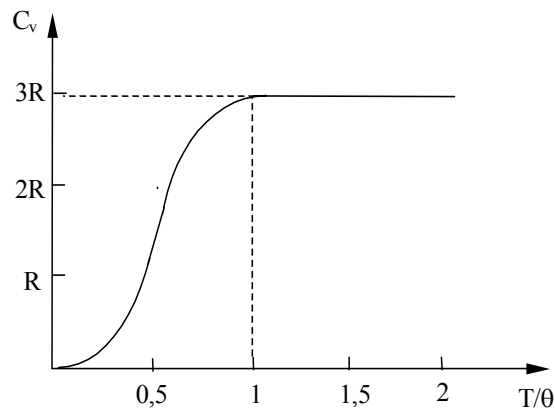
Tada $e^x \approx 1 + x$

ir $\int_0^x \frac{e^0 x^4 dx}{x^2} = \frac{1}{3} x^3$.

Tokiu atveju kietojo kūno šiluminė talpa

$$C_V = 3R.$$

Gavome mums jau žinomą Diulongo ir Pti dėsnį.



8 pav.

Debajaus lygtis – tai integralas, kuris neturi analitinio sprendinio. Šiame sprendime savitoji šiluma pateikta kaip absoliutinės temperatūros santykio su charakteringąja Debajaus temperatūra funkcija.

Sprendžiant šį uždavinį programa Mathcad 12, savitoji šiluma aprašomas lygtimi užrašoma taip:

$$C_V(T) = 9R \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta}{T}} \frac{e^x x^4 dx}{(e^x - 1)^2};$$

čia R – universali dujų konstanta, T – absoliutinė temperatūra, θ – charakteringoji Debajaus temperatūra.

Toliau pateikiami kontroliniai skaičiavimo pavyzdžiai, kai $R = 8,314 \text{ (J/molK)}$.

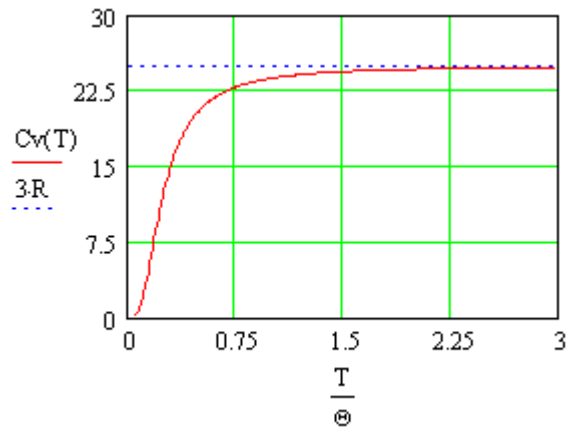
$$C_V(100) = 23.738 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$C_V(200) = 24.633 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$C_V(900) = 24.927 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Norint nubrėžti C_V priklausomybės nuo absoliutinės temperatūros santykio su charakteringąja Debajaus temperatūra grafiką, reikia apibrėžti temperatūros T intervalą:

$$T := 0,1..1000.$$



9 pav. $C_v / 3R$ priklausomybė nuo T/θ .

9 paveikslas iliustruoja kietų kūnų savitosios šilumos priklausomybę nuo T/θ .

Pabandykite nubraižyti tose pačiose koordinačių ašyse kelių medžiagų savitųjų šilumų grafikus. Pasirinkime šias medžiagas (2 lentelė).

2 lentelė

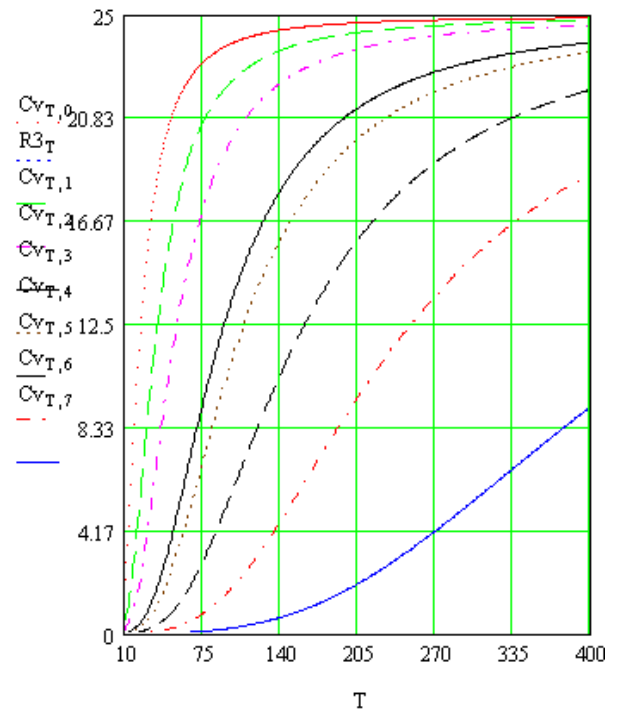
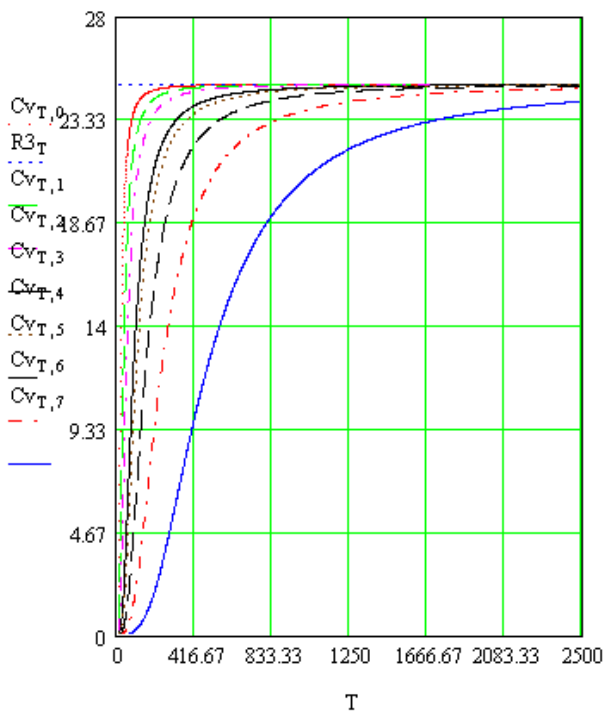
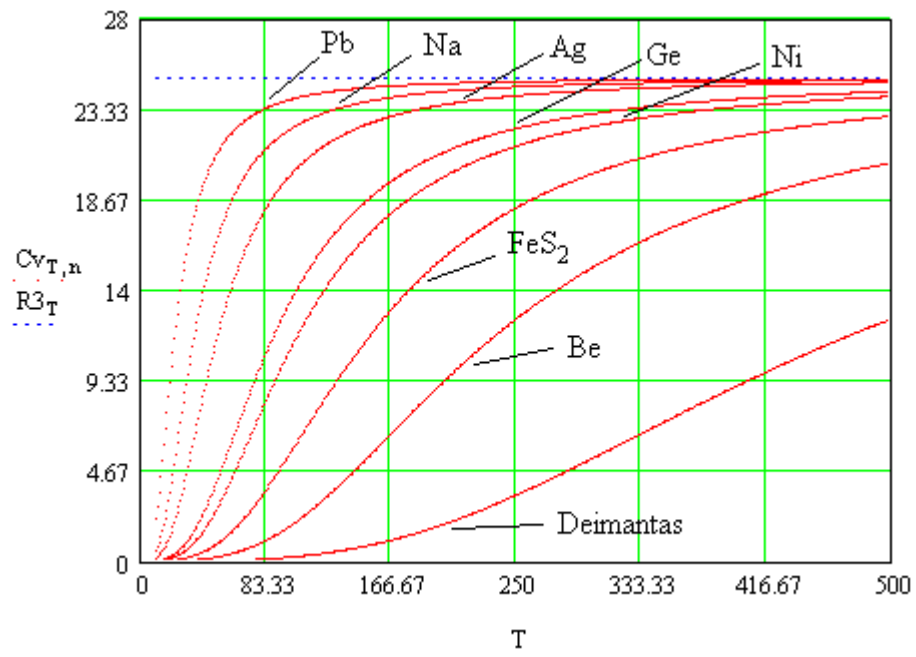
Kai kurių medžiagų Debajaus charakteringosios temperatūros

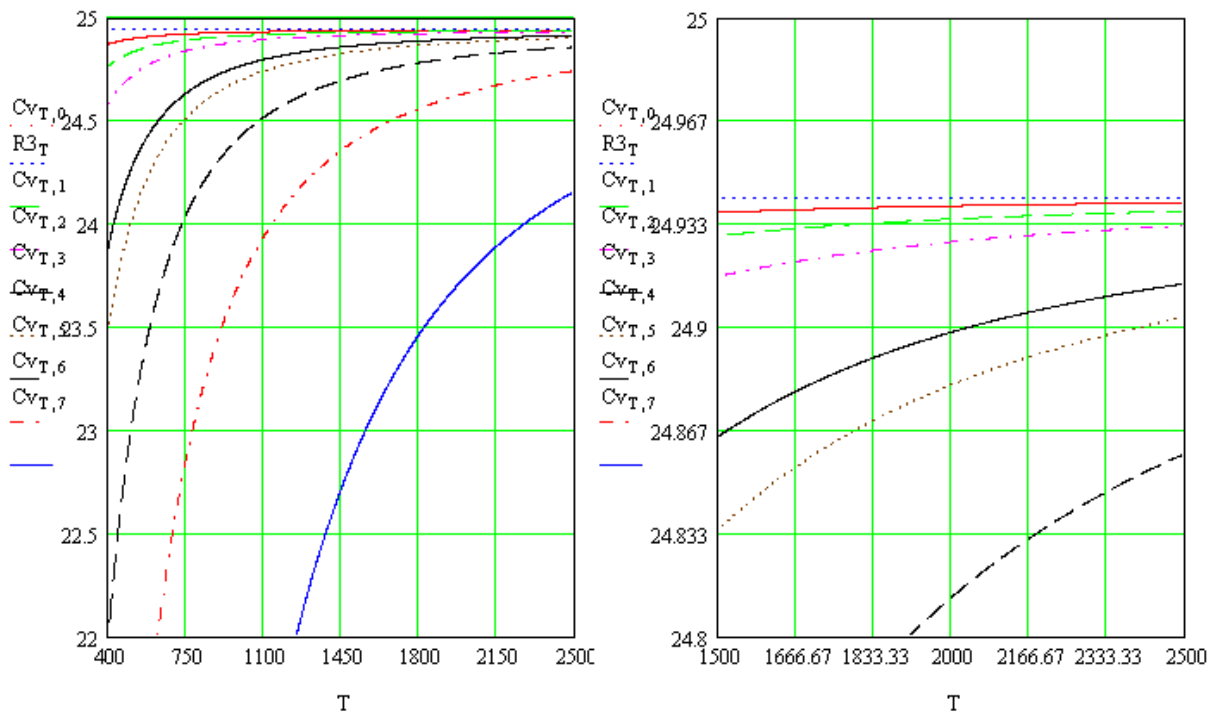
Medžiaga	Pb	Na	Ag	Ge	Ni	FeS ₂	Be	Deimantas
θ, K	94,5	150	215	374	441	645	1000	2000
Žymėjimas grafike	$C_{vT,0}$	$C_{vT,1}$	$C_{vT,2}$	$C_{vT,3}$	$C_{vT,4}$	$C_{vT,5}$	$C_{vT,6}$	$C_{vT,4}$

Visas uždavinio sprendimas atrodys taip pat. Tik šiuo atveju matricos pavidalu užduodamos konkrečios Debajaus charakteringosios temperatūros vertės:

$$\theta := \begin{pmatrix} 94.5 \\ 150 \\ 215 \\ 374 \\ 441 \\ 645 \\ 1000 \\ 2000 \end{pmatrix}.$$

Įvedamas naujas kintamasis n (nuo 0 iki 7) ir braižomas grafikas.





10 pav. Skirtingų medžiagų molinės šilumos priklausomybės nuo temperatūros grafikas

Iš grafiko matome (10 pav.), kad molinės šilumos priklausomybė nuo temperatūros ir konkrečių kūno savybių iš tikrųjų egzistuoja, ir ypač žemose temperatūrose. Esant gana žemoms temperatūroms, kai temperatūra mažėja, visų kūnų molinė šiluma greitai mažėja. Tai paaiškina Debajaus dėsnis.

Tuo būdu, absoliutinei temperatūrai artėjant prie nulio, kietųjų kūnų molinė šiluma taip pat artėja prie nulio. Kai kurių kūnų molinė šiluma pastebimai priklauso nuo temperatūros net ir palyginti aukštose temperatūrose (deimantas).

Esant aukštomis temperatūroms kietojo kūno molinės šilumos priklausomybė nuo temperatūros išnyksta. Tokiu atveju kieto kūno šiluminė talpa $C_v = 3R$. Gavome mums jau žinomą Diulongo ir Pti dėsnį. Taigi, molinė šiluma, pasiekusi tam tikrą temperatūrą, nebekinta, ji lieka pastovi.

Iš 10 pav. matome, kad, kietų kūnų molinės šilumos priklausomybės nuo temperatūros kreivės pastebimai viena nuo kitos skiriasi. Taip yra todėl, kad kietų kūnų molinės šilumos priklauso ne tik nuo temperatūros, bet ir nuo medžiagos savybių.

3.2. Būsenų tankis

Svarbus statistinės ir kietųjų kūnų fizikos uždavinys – rasti dalelių, kurių energijos yra tam tikrame apibrėžtame intervale, skaičių. Tam reikia žinoti kvantinių būsenų skaičių ir tų būsenų užimtumo dalelėmis tikimybę.

Vadinasi, norint nustatyti puslaidininkio krūvininkų koncentraciją, reikia žinoti faktinį būsenų, užimtų elektronais arba skylėmis, skaičių.

Kaip žinome, Heizenbergo neapibrėžtumas charakterizuoja mikrodalelės lokalizacijos sritį, esant apibrėžtam impulsų intervalui.

X, y ir z kryptimi neapibrėžtumo ryšys atitinkamai:

$$dx \cdot dp_x \geq h ;$$

$$dy \cdot dp_y \geq h ;$$

$$dz \cdot dp_z \geq h .$$

Sudauginę kairiąsias ir dešiniąsias puses, gauname mikrodalelės fazinį narvelį šešiamatėje koordinatės - impulso erdvėje:

$$dx \cdot dy \cdot dz \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z \geq h^3 .$$

Minimalų leistiną fazinį narvelį šešiamatėje koordinatėse - impulso erdvėje pažymėkime

$$dx^0 \cdot dy^0 \cdot dz^0 \cdot dp_x^0 \cdot dp_y^0 \cdot dp_z^0 = h^3 .$$

Apskaičiuokime dZ - minimalių fazinių narvelių skaičių tam tikrame šešiamatės erdvės tūryje $dx \cdot dy \cdot dz \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z$:

$$dZ = \frac{dx \cdot dy \cdot dz \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z}{dx^0 \cdot dy^0 \cdot dz^0 \cdot dp_x^0 \cdot dp_y^0 \cdot dp_z^0}$$

arba

$$dZ = \frac{dV \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z}{h^3} .$$

Toliau skaičiavimuose naudosime vienetinį trimatės erdvės tūrį, t.y. laikysime, kad turime vienetinį metalo ar puslaidininkio tūrį. Todėl apibrėšime elementarių fazinių narvelių skaičių dz esančių vienetiniame tūryje:

$$dz = \frac{dZ}{dV} = \frac{dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z}{h^3} .$$

Rasime dydį dz impulsų erdvės rutuliniame sluoksnyje, apribotame sferomis, kurių spinduliai yra p ir (p+dp) (kaip parodyta 11 pav.).

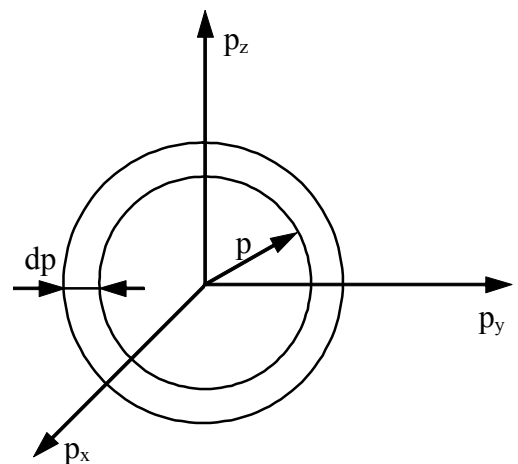
Tokio sluoksnio tūris

$$dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z = 4\pi p^2 dp .$$

$$\left(\int dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z = \frac{4}{3} \pi p^3 \right) .$$

Be to

$$p^2 = 2mE_k = 2mE ;$$



11 pav.

čia $E_k = E$, t.y. dalelės kinetinė energija lygi pilnai energijai, kadangi laisvos dalelės potencinė energija lygi nuliui.

Randame dp :

$$p = \sqrt{2mE}, \quad dp = \sqrt{2m} \frac{1}{2} E^{-\frac{1}{2}} dE.$$

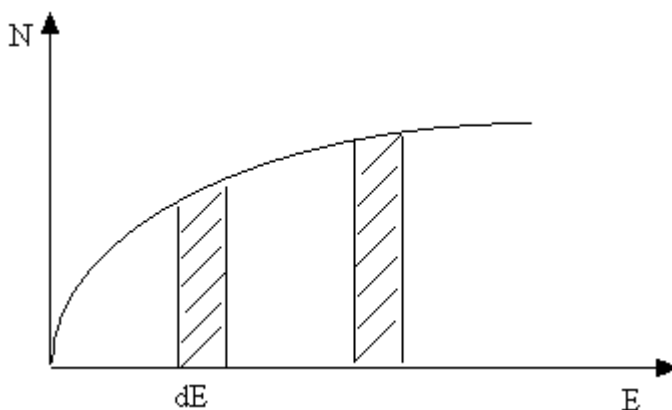
Tuomet

$$dz = \frac{4\pi p^2 dp}{h^3} = \frac{4\pi 2mE}{2h^3} \sqrt{\frac{2m}{E}} dE = \frac{2\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} E^{\frac{1}{2}} dE.$$

Apibrėžkime elementarių fazinių narvelių skaičių tenkančių vienetiniam energijų intervalui, t. y. rasime **būsenų tankį**:

$$N(E) = \frac{dz}{dE} = \frac{2\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} E^{\frac{1}{2}}.$$

Matome, kad būsenų tankis N yra pusiau kvadratinė E funkcija (12 pav.).



12 pav.

Fiksuotam energijų intervalui apibrėžus sandaugą

$$NdE = dz,$$

matome, kad augant energijai didėja ir elementarių fazinių narvelių skaičius.

Sprendžiant šį uždavinį programa Mathcad 12, būsenų tankis aprašomas lygtimi (Kireev, 1975):

$$N(E) = \frac{2\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} E^{\frac{1}{2}};$$

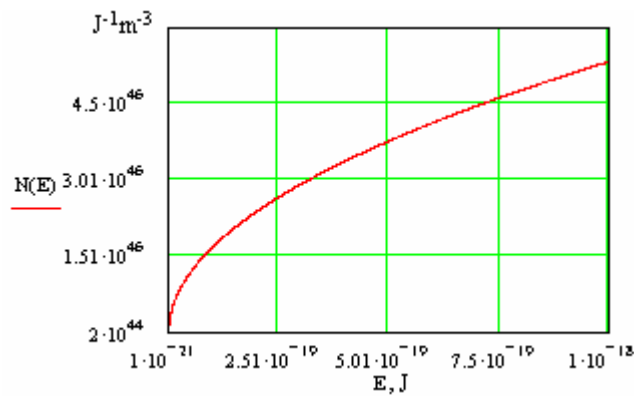
čia h – Planko konstanta, m – elektrono masė:

$$h := 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$m := 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

Būsenų tankio modeliavimui pasirenkame energijų E intervalą nuo $E_l = 0.01 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ iki $E_n = 1 \cdot 10^{-18} \text{ J}$. Energiją matuosime džauliais.

Pagal turimus duomenis brėžiamas grafikas.



13 pav. Būsenų tankio N priklausomybė nuo energijos E .

Iš grafiko (13 pav.) matome, kad būsenų tankis N yra pusiau kvadratinė E funkcija, t.y. didėjant energijai didėja ir būsenų tankis. Tačiau tiksliai paskaičiuoti būsenų tankį bendru atveju yra sudėtinga, kadangi pastovios energijos paviršiai turi sudėtingą formą. Fiksuotam energijų intervalui apibrėžus sandaugą $NdE = dz$, matome, kad didėjant energijai, didėja ir elementariųjų fazinių narvelių skaičius vienetiniame metalo arba puslaidininkio tūryje.

3.3. Fermi – Dirako skirstinys

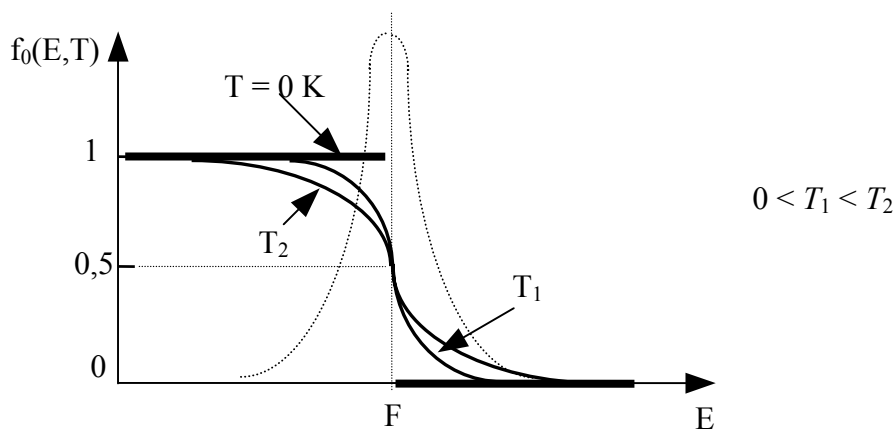
Norint nustatyti dalelių, turinčių energiją intervale dE , skaičių be kvantinių būsenų tankio $N(E)$, reikia žinoti tikimybę, kad ši būsena su energija E bus užimta dalele, t.y. reikia žinoti dalelių pasiskirstymo funkciją $f(E)$.

Kvantinėje statistikoje pateikiama tokia sistemos pusiausvyros būsenos išraiška (Bonč-Bruevič, 1977):

$$f_0(E, T) = \frac{1}{e^{\frac{E-F}{kT}} + 1} ;$$

čia E – pilna energija, apibūdinanti elektrono būseną, T – sistemos, kurioje yra dalelė, absoliutinė temperatūra, F – Fermi energija, k – Bolcmano konstanta. Dydis $f_0(E, T)$ – tai Fermi ir Dirako pasiskirstymo funkcija, galiojanti dalelėms, kurios paklūsta Paulio draudimo principui, teigiančiam, kad du elektronai atome vienu metu negali būti vienoje ir toje pačioje kvantinėje būsenoje.

Tikimybė elektronui užimti E energijos būseną priklauso nuo energijos E ir nuo temperatūros T . Be to, tikimybė priklauso nuo Fermi energijos F .



14 pav.

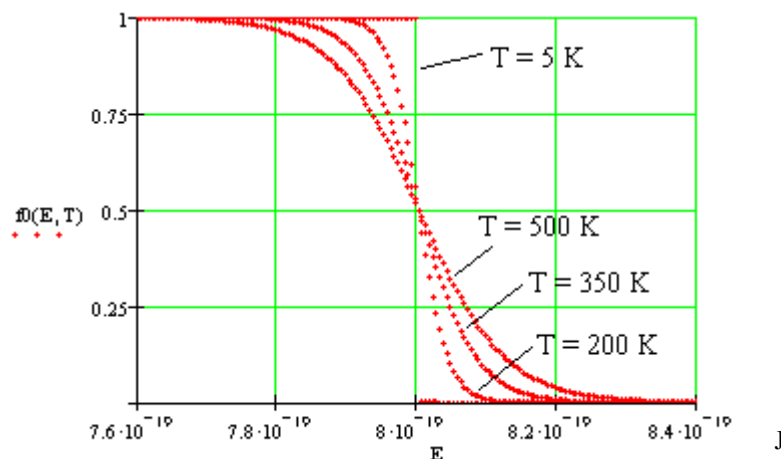
Tegu $T \rightarrow 0$, tai

$$\lim_{T \rightarrow 0} f_0 = \begin{cases} 1, & \text{kai } E < F & (e^{-\infty} \rightarrow 0) \\ 0, & \text{kai } E > F & (e^{\infty} \rightarrow \infty) \end{cases}$$

Pabandykime sukurti Fermi ir Dirako pasiskirstymo funkcijos modelį. Fermi ir Dirako pasiskirstymo funkciją vaizduosime temperatūrų intervale nuo $T_1 = 5 \text{ K}$ iki $T_n = 500 \text{ K}$. Dydžius E ir F toliau matuosime džauliais. Fermi lygmens energiją imame lygią $F = 8 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.

Pagal užduotus parametrus ir pateiktą lygtį braižome grafiką (15 pav.).

Brėžinyje gauname kreivių šeimą, vaizduojančią Fermi ir Dirako pasiskirstymo funkciją skirtingose temperatūrose. Matome, kad visos kreivės kertasi viename taške, kai energija $F = 8 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, o $f_0(E, T) = 0,5$ (nepriklausomai nuo temperatūros). Ši energija ir yra Fermi energija, kurią turi elektronai metale absoliutinio nulio temperatūroje ($T = 0 \text{ K}$). Šiuo atveju $E = F = 8 \cdot 10^{-19} \text{ J}$. Tokiu būdu ties Fermi energija pasiskirstymo funkcija yra lygi vienai antrajai. Būseną $E = F$ galima laikyti užimta su tikimybe 0,5. Ir kaip matyti iš brėžinio, šio taško aplinkoje funkcija keičiasi sparčiausiai. Bendras elektronų skaičius (kreivių plotas) išlieka nepakitęs bet kuriai temperatūrai.



15 pav. Sistema *Mathcad* gautas Fermi ir Dirako skirstinys skirtingose temperatūrose

Jei $T \neq 0$,

$$f_0(F, T) = \frac{1}{2}, \quad \text{kai } E = F.$$

Tą teigėmę, kai $T = 0$, t.y. $f_0(E = F, T = 0) = \frac{1}{2}$.

Kai $E \ll F$, $f_0(E, T) \approx 1$;

kai $E \gg F$, $f_0(E, T) = \frac{1}{\frac{E-F}{e^{kT}} + 1} \approx e^{\frac{F-E}{kT}} \approx e^{\frac{F}{kT}} \cdot e^{-\frac{E}{kT}}$.

Funkcija $f_0(E, T)$ smarkiai kinta srityje, kur $E \approx F$, kelių kT energijų intervale. Tegu

$$E = F + \xi kT,$$

čia ξ - kintamasis dydis;

$$\xi = \frac{E - F}{kT}.$$

Tada

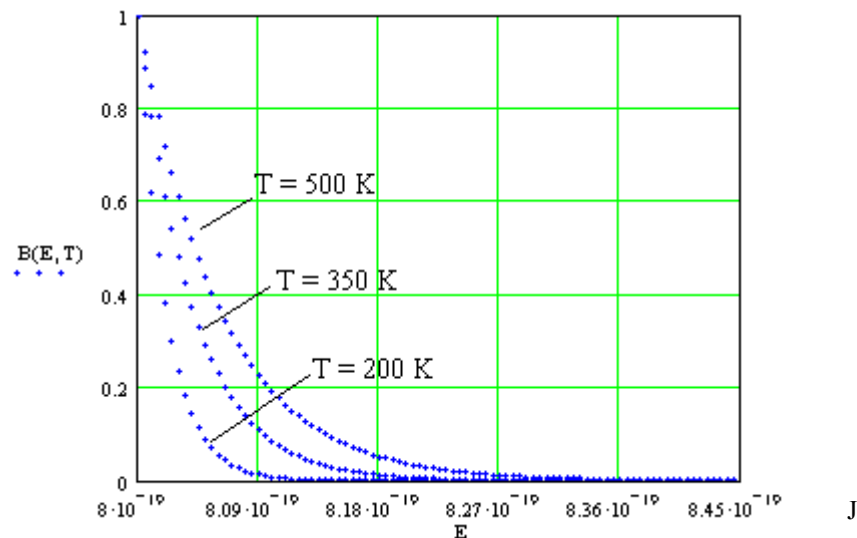
$$f_0 = \frac{1}{e^{\xi} + 1}.$$

Esant didelėms ξ vertėms funkciją f_0 galime užrašyti taip:

$$f_0(E, T) = \frac{1}{e^{\xi} + 1} \approx e^{-\xi} \approx e^{-\frac{F-E}{kT}} \quad \text{arba}$$

$$f_0(E, T) = e^{\frac{F}{kT}} \cdot e^{-\frac{E}{kT}}.$$

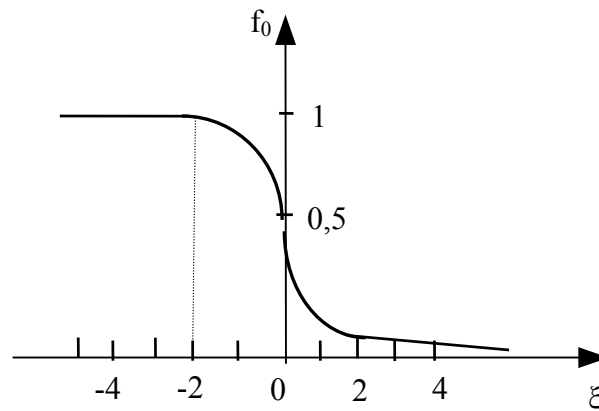
Tai klasikinė Bolcmano pasiskirstymo funkcija. Šios funkcijos grafikas energijoms, aukštesnėms už Fermi energiją, prie skirtingų temperatūrų pateiktas 16 pav.



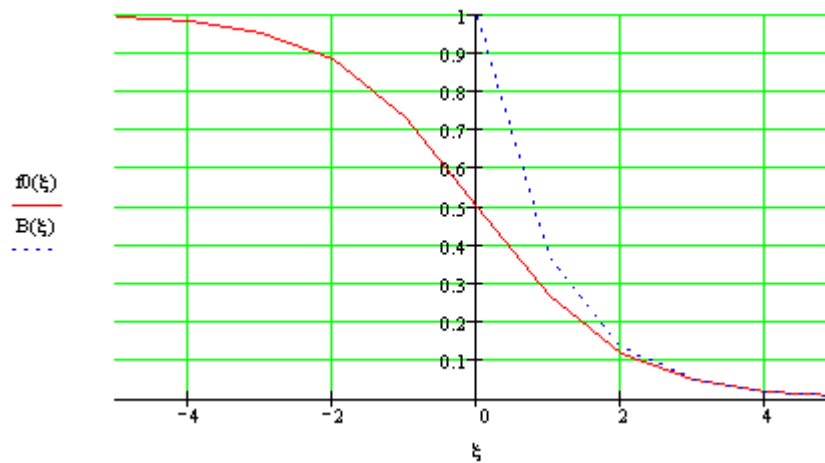
16 pav. Sistema *Mathcad* gauta Bolcmano pasiskirstymo funkcija skirtingose temperatūrose

Kelioms ξ vertėms apskaičiuojame funkciją f_0 ir nubraižome grafiką $f_0(\xi)$ (17 pav.):

ξ	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
f_0	0,993	0,980	0,952	0,882	0,730	0,5	0,27	0,118	0,048	0,019	0,007



17 pav.



18 pav. Sistema *MathCad* gauti Fermio ir Dirako (—) bei Bolcmano (----) skirstinių grafikai

Tą patį atliekame pasinaudodami sistema *Mathcad* ir nubraižome Fermio ir Dirako bei Bolcmano skirstinių grafikus $f_0(\xi)$ (18 pav.).

Iš grafikų matome, kad Fermi ir Dirako funkcija sparčiai kinta (nuo 0,882 iki 0,118), kai ξ pakinta nuo -2 iki 2.

T.y. $f_0(\xi)$ kinta, kai $(F - 2kT) < E < (F + 2kT)$;

$f_0(\xi) \approx 1$, kai $\xi < -2$;

$f_0(\xi) \approx 0$, kai $\xi > 2$.

Kai $\xi > 2$ Fermio ir Dirako bei Bolcmano skirstiniai sutampa.

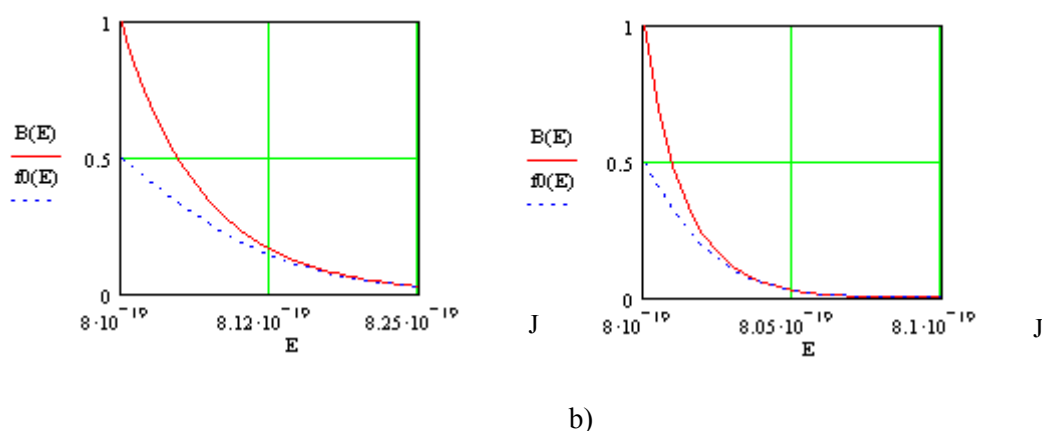
Energijų intervalas, kai funkcija f_0 smarkiai kinta, priklauso nuo temperatūros T . Kylant temperatūrai šis intervalas plėtėja.

Pažymėsime, kad elektroninės dujos, kurių savybės aprašomos Fermi - Dirako funkcija vadinamos išsigimusiomis arba kvantinėmis. Kai Fermi - Dirako funkcija pereina į

Bolcmano pasiskirstymo funkciją, tuomet elektroninės dujos tampa klasikinėmis arba neišsigimusiomis (Bonč-Bruevič, 1977). Tai įmanoma tuo atveju, kai leistinų energetinių būsenų skaičius daug didesnis už elektronų skaičių: kvantmechaniniai draudimai “užsitsuvoja” ir galima naudoti Bolcmano statistiką. Jei elektronų skaičius sulyginamas su energetinių būsenų skaičiumi, reikia naudoti Fermi statistiką.

$$\begin{cases} e^{\frac{E-F}{kT}} \gg 1; & \text{elektron. dujos neišsigim. } (E \gg F); \\ e^{\frac{E-F}{kT}} \ll 1; & \text{elektron. dujos išsigim. } (E \ll F). \end{cases}$$

Palyginimui nubraižysime Fermio ir Dirako bei Bolcmano, skirstinius, kai elektrono energija $E > F$, o $T_1 = 500 \text{ K}$, $T_2 = 100 \text{ K}$.

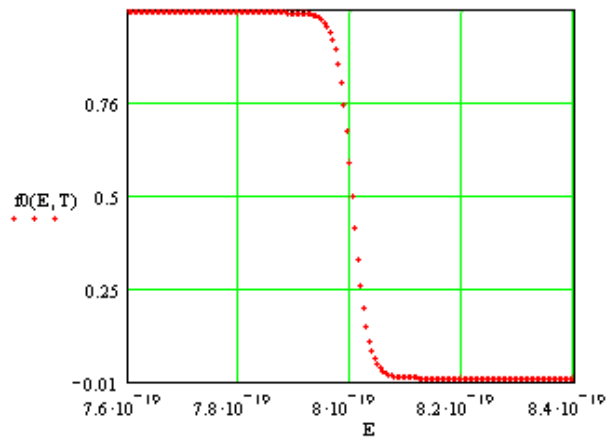


19 pav. Sistema *Mathcad* gauti Fermio ir Dirako (----) bei Bolcmano (—) skirstiniai
a) $T = 500 \text{ K}$, b) $T = 100 \text{ K}$

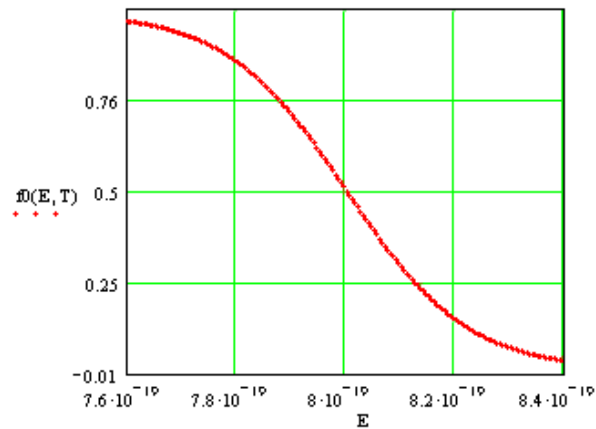
Kaip matyti iš grafiko, kuo didesnė dalelės energija, tuo abu skirstiniai geriau sutampa.

Ieškodami tikimybės elektronui užimti E energijos būseną skaitiniais metodais, mes gauname statinį grafiką (15 pav.). O dabar pabandykime gauti dinaminį grafiką, vaizduojantį, kaip kinta tikimybė tikimybės elektronui užimti E energijos būseną priklausomai nuo temperatūros T pokyčių. Tam tiesiog pasinaudojame jau turimais duomenimis ir turimu grafiku. Reikia tik įvesti kintamąjį FRAME, pagal kurį programa apskaičiuotų temperatūros T kitimą ir brėžti grafiką. 20 pav. pavaizduotas Fermio ir Dirako skirstinys esant skirtingoms FRAME reikšmėms, t. y. esant skirtingai temperatūrai.

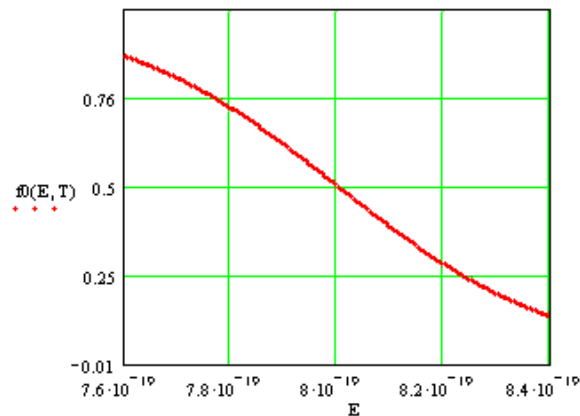
Pateikti animacinio klipo fragmentai – tai bandymas “sustabdyti” procesą ir iliustruoti realaus proceso modelį. Taigi, ganėtinai nesudėtinga grafikų animacijos technika suteikia galimybę vizualizuoti ganėtinai sudėtingus skaičiavimus ir tapo neatsiejama priemone fizikinių reiškinių modeliavime.



a)



b)



c)

14 pav. Fermio ir Dirako skirstinys kai a) FRAME = 1; b) FRAME = 7; c) FRAME = 15.

3.4. Elektroninių dujų koncentracija

Jau apibrėžėme būsenų tankį N kaip elementarių fazinių narvelių skaičių, tenkančių vienetiniam energijų intervalui ir apskaičiuotą vienetiniam tūriui. Be to, žinoma E energijos elektrono būsenos užimtumo tikimybė. Vadinasi, galima nustatyti laisvų elektronų, kurių energijos nuo E iki $(E + dE)$, skaičių dn_0 .

$$dn_0 = dz2f_0 \text{ arba}$$

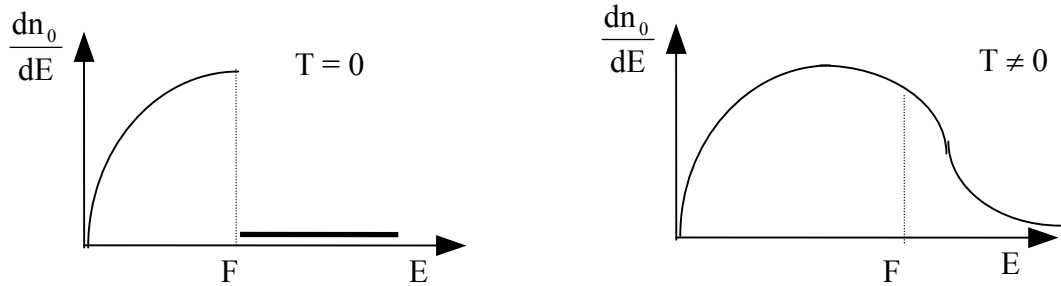
$$dn_0 = N2f_0dE .$$

Daugiklis 2 atsiranda dėl Pauli draudimo principo.

$$dn_0 = \frac{4\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} E^{\frac{1}{2}} f_0 dE.$$

Iš čia laisvų elektronų skaičius energijų intervale dE :

$$\frac{dn_0}{dE} = \frac{4\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} E^{\frac{1}{2}} f_0.$$



20 pav.

Norint gauti laisvų išsigimusių elektroninių dujų koncentraciją reikia suintegruoti dn_0 išraišką.

Kai $T = 0$, gauname

$$n_0 = \frac{4\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_0^{F_0} E^{\frac{1}{2}} dE;$$

$$n_0 = \frac{8\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{3h^3} F_0^{\frac{3}{2}}.$$

Matome, kad dydį F_0 (Fermi energiją 0 K temperatūroje) apibūdina elektronų koncentracija.

Jei tarsime, kad $n_0 \approx 10^{28} \text{ m}^{-3}$, tai $F \approx 5\text{eV}$. Vidutinė išsigimusių elektroninių dujų energija 0 K temperatūroje apskaičiuavus gaunama $3F/5$.

Vadinasi, esant $T = 0$ išsigimę elektronai gali turėti skirtingas energijas nuo 0 iki F , kai tuo tarpu klasikinėse dujose, esant $T = 0$, $E = 0$ (šiluminis judėjimas nutrūksta ir dalelių energija lygi nuliui).

Kai $T \neq 0$, apskaičiuosime neišsigimusių elektroninių dujų koncentraciją:

$$n_0 = \frac{4\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} e^{\frac{F}{kT}} \int_0^{F_0} e^{-\frac{E}{kT}} E^{\frac{1}{2}} dE.$$

Įvedame kintamųjų pakeitimą:

$$\frac{E}{kT} = x \quad \text{ir} \quad \frac{dE}{kT} = dx,$$

tada

$$n_0 = \frac{4\pi(2mkT)^{\frac{3}{2}}}{h^3} e^{\frac{F}{kT}} \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\frac{1}{2}} dx.$$

Kadangi

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^{\frac{1}{2}} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2},$$

tai

$$n_0 = \frac{2(2\pi m kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3} e^{\frac{F}{kT}}.$$

Metalo laisvųjų elektronų skaičių energijos intervale $[E, E + dE]$ galime rasti, padauginę kvantinių būsenų skaičių šiame intervale iš jų užpildymo tikimybės. Dar reikia atsižvelgti į tai, kad būseną gali užimti du elektronai su priešingais sukiniiais. Tada

$$dn_0 = 2N(E)f_0(E)dE.$$

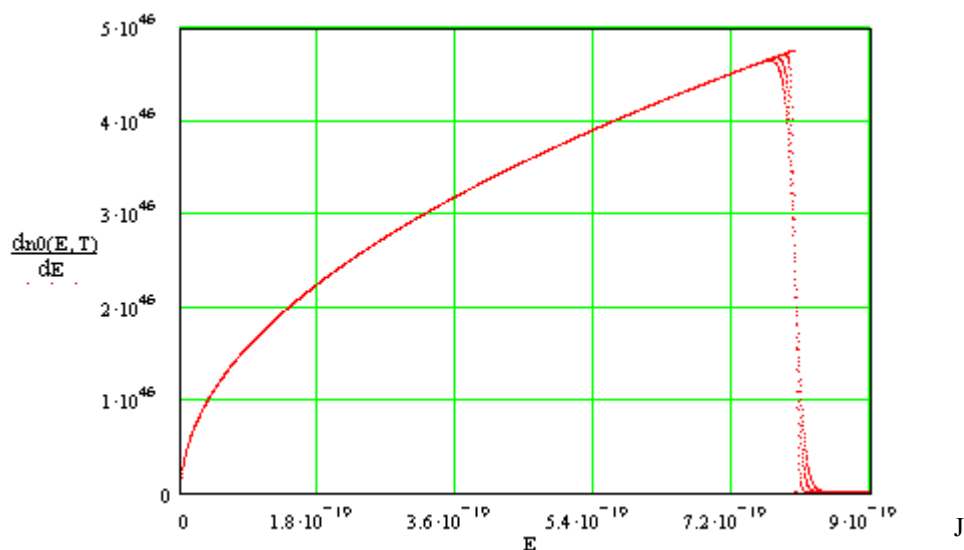
Įrašę į šią formulę būsenų tankio bei Fermio ir Dirako funkcijos išraiškas, gauname metalo laisvųjų elektronų energijų pasiskirstymo funkciją:

$$\frac{dn_0}{dE} = \frac{4\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} E^{\frac{1}{2}} f_0(E).$$

Pasiskirstymo funkcijos pobūdį lengva nustatyti, turint funkcijų $N(E)$ ir $f_0(E)$ grafikus. Pasiskirstymo funkcijos grafikas sudaromas, sudauginus kreivių, atvaizduotų 13 ir 15 paveiksle, ordinačių reikšmes (Štaras, Kirvaitis, 1995).

Vadinasi, esant $T = 0$ K išsigimę elektronai gali turėti skirtingas energijas nuo 0 iki F , kai tuo tarpu klasikinėse dujose, esant $T = 0$, $E = 0$ (šiluminis judėjimas nutrūksta ir dalelių energija lygi nuliui).

21 paveiksle laisvųjų elektronų pasiskirstymo pagal energijos reikšmes funkcija skaičiuojama temperatūros T intervale nuo 5 K iki 500 K.



21 pav. Sistema *Mathcad* gauta laisvųjų elektronų pasiskirstymo pagal energijos reikšmes funkcija

Norint gauti laisvųjų išsigimusių elektroninių dujų koncentraciją reikia suintegruoti dn_0 išraišką:

$$n_0 = \int_0^{\infty} 2N(E)f_0(E)dE$$

arba

$$n_0 = \int_0^{\infty} \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} E^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{e^{\frac{E-F}{kT}} + 1} dE.$$

Tarkime, kad $T = 0$. Apskaičiuokime laisvųjų elektronų koncentraciją:

$$n_0 = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^F E^{\frac{1}{2}} dE.$$

Pagal turimas reikšmes (kai $F = 8 \cdot 10^{-19}$ J) gauname, kad

$$n_0 = 5,082 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}.$$

Iš kitos pusės galime teigti, kad F_0 (Fermio energija 0 K temperatūroje) priklauso nuo laidumo elektronų skaičiaus tūrio vienetė (tikslėniame artutinyje F dar priklauso nuo elektrono efektyvios masės):

$$F_0 = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3n_0}{\pi} \right)^{2/3}.$$

Vadinasi, žinodami metalų tankį bei molinę masę, nesunkiai galime įvertinti jų Fermio energiją, t.y. maksimalią energiją, kurią gali įgyti elektronai metale 0 K temperatūroje.

Apskaičiavus kelių šarminių metalų Fermio energijas, gauti tokie rezultatai:

Ličio (Li) $F_0 = 5,22$ eV, natrio (Na) $F_0 = 3,15$ eV, kalio (K) $F_0 = 2,05$ eV, rubidžio (Rb) $F_0 = 1,78$ eV, cezio (Cs) $F_0 = 1,59$ eV.

3.5. Fermi lygmuo ir krūvininkų koncentracija neišsigimusiam grynajame puslaidininkyje

Puslaidininkiuose laisvųjų elektronų koncentracija yra daug mažesnė nei metaluose. Todėl dažniausiai puslaidininkio laisvųjų elektronų sistema esti neišsigimusi.

Grynajame puslaidininkyje priemaišų nėra, t. y. $N_A = N_D = 0$. Šiuo atveju neutralumo lygtis užrašoma taip:

$$n_i = p_i .$$

Ši formulė rodo, kad kiekvieną valentinės juostos elektroną sužadinant perkėlus į laidumo juostą, valentinėje juostoje atsiranda skylė, o laisvųjų elektronų ir skylių tankiai yra lygūs. Paprastai šie tankiai žymimi indeksu i vietoje 0.

Neišsigimimo kriterijus:

elektronams $E_C - F \gg kT$;

skylutėms $F - E_V \gg kT$.

Absoliučiojo nulio temperatūroje puslaidininkiai yra izoliatoriai. Taip yra todėl, kad visi puslaidininkio atomų valentiniai elektronai dalyvauja kovalentiniuose ryšiuose. Pagal juostinį modelį absoliučiojo nulio temperatūroje visi valentiniai elektronai yra valentinėje juostoje. Visi valentinės juostos lygmenys užimti. Laidumo juosta tuščia. Taigi absoliučiojo nulio temperatūroje puslaidininkyje laisvųjų elektronų nėra.

Kylant temperatūrai, intensyvėja kristalo atomų šiluminiai virpesiai gali įgyti papildomos energijos. Įgijęs pakankamai energijos, elektronas gali išsilaisvinti iš kovalentinio ryšio ir tapti laisvuju – laidumo elektronu, kuris gali judėti erdvėje tarp kristalą sudarančių atomų.

Elektrono išsilaisvinimą iš kovalentinio ryšio atitinka jo šuolis iš valentinės juostos į laidumo juostą. Pagal juostinį modelį minimali energija, kurios reikia elektronui, kad jis išsilaisvintų iš ryšio ir taptų laidumo elektronu, lygi draudžiamosios juostos pločiui ΔW . Kuo siauresnė puslaidininkio draudžiamoji juosta, tuo žemesnėje temperatūroje jame atsiranda laidumo elektronų. Pvz.: silicio draudžiamos juostos plotis – apie 1,1 eV. Laidumo elektronų koncentracija silicyje 300 K kubiniame centimetre yra $5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$. Atsižvelgdami, kad 300 K kubiniame centimetre yra $5 \cdot 10^{22}$ silicio atomų ir atomas turi 4 valentinius elektronus, galime įsitikinti, kad 300 K temperatūroje tik 1 elektronas iš maždaug $1,5 \cdot 10^{13}$ valentinių elektronų yra tapęs laidumo elektronu.

Išsilaisvinus elektronui, valentinių ryšių sistemoje atsiranda vakuojanti vieta, o praradęs elektroną atomas tampa teigiamu jonu. Vakuojančią kovalentinio ryšio vietą gali užimti gretimo atomo elektronas. Tada teigiamu jonu tampa šio elektrono netekęs atomas. Toks estafetinis valentinių elektronų judėjimas tolygus teigiamą krūvį turinčios vakuojančios vietos – teigiamo krūvininko – skylės – judėjimui.

Iš aptarimo aišku, kad skylės judėjimas yra atomų jonizacijos ir elektronų judėjimo rezultatas.

Energijos lygmenų diagramoje skylę atitinka neužimtas energijos lygmuo valentinėje juostoje. Kai valentinėje juostoje yra neužimtų energijos lygmenų, juos gali užimti žemesnių lygmenų elektronai. Vadinasi, tada elektronų energija gali kisti, ir valentinės juostos elektronai, veikiami išorinio elektrinio lauko, įgiję kryptingo judėjimo greitį, gali pernešti krūvį.

Taigi grynojo puslaidininkio elektrinį laidumą lemia dviejų tipų laisvieji krūvininkai – laidumo elektronai ir skylės, kurių koncentracijos yra vienodos. Grynajame puslaidininkyje laisvieji krūvininkai atsiranda kaip puslaidininkio atomų jonizacijos rezultatas.

Kai elektronai atsipalaiduoja iš kovalentinių ryšių ir atsiranda savųjų puslaidininkio krūvininkų, sakoma, kad vyksta savųjų krūvininkų generacija. Šį reiškinį lydi priešingas procesas – rekombinacija. Kai priešingo ženklo krūvininkai, judėdami kristale, suartėja tiek, jog pradeda veikti jų tarpusavio traukos jėga, laisvasis elektronas gali užimti vakuojančią kovalentinio ryšio vietą. Tada abu laisvieji krūvininkai išnyksta. Pagal juostinį modelį krūvininkų rekombinaciją atitinka elektrono šuolis iš laidumo juostos į valentinę juostą. Šio proceso metu elektrono atiduodama energija virsta šiluma arba išspinduliuojama šviesos pavidalu.

Neišsigimusių elektroninių dujų pusiausvyrosi koncentracija:

$$n_0 = N_C f_e = N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} ;$$

čia N_C - būsenų tankis laidumo juostoje.

Neišsigimusių skylių pusiausvyrosi koncentracija:

$$p_0 = N_V e^{-\frac{F - E_V}{kT}} ;$$

čia N_V - būsenų tankis valentinėje juostoje.

Šias formules gauname suintegravę $dn_0 = N(E) 2f_o dE$ ($dn_0 = dz 2f_o$).

Kadangi grynajame puslaidininkyje $n_i = p_i$,

$$N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} = N_V e^{-\frac{F - E_V}{kT}} .$$

Abi lygybės puses padaliję iš $N_C e^{-\frac{E_C + E_F}{kT}}$ gauname:

$$e^{\frac{2F}{kT}} = \frac{N_V}{N_C} e^{\frac{E_C + E_V}{kT}}.$$

Vadinasi,

$$\frac{2F}{kT} = \frac{E_C + E_V}{kT} + \ln\left(\frac{N_V}{N_C}\right).$$

Tada

$$F = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_V}{N_C}\right)$$

Kai $T = 0$, gauname

$$F = \frac{E_C + E_V}{2} = E_i$$

Ši formulė rodo, kad absoliutinio nulio temperatūroje grynojo puslaidininkio Fermio lygmuo F yra draustinės energijos juostos viduryje. Ji tinka ir kai $T \neq 0$, jei $N_V \approx N_C$.

Elektronų tankį grynajame puslaidininkyje apskaičiuojame Fermio lygmens išraišką įrašę į pusiausvyrosios elektronų koncentracijos išraišką:

$$n_i = N_C e^{-\frac{E_C - F}{kT}} = N_C e^{-\frac{E_C - \frac{1}{2}E_C - \frac{1}{2}E_V - kT - \ln\left(\frac{N_V}{N_C}\right)^{\frac{1}{2}}}{kT}} = N_C e^{-\frac{E_C - E_V}{2kT}} \cdot \sqrt{\frac{N_V}{N_C}} = \sqrt{N_V N_C} e^{-\frac{E_C - E_V}{2kT}}$$

$$n_i = \sqrt{N_V N_C} e^{-\frac{\Delta E_0}{2kT}}$$

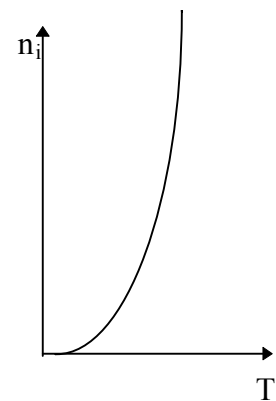
Laisvųjų krūvininkų tankio priklausomybę nuo temperatūros $n_i(T)$ nulemia eksponentinis narys. Sandauga $(N_C N_V)^{1/2}$ priklauso nuo temperatūros tik $T^{3/2}$. Eksperimentiškai nustatę $n_i(T)$ ir išmatuotą $\ln(n_i)$ pavaizdavę kaip $1/T$ funkciją, turėtume gauti tiesę.

$$\ln n_i = \ln A - \frac{\Delta E}{2kT};$$

čia $\ln A = \ln \sqrt{N_V N_C}$ - dydis, kuris mažai keičiasi nuo temperatūros.

Vadinasi, $\ln n_i$ yra tiesinė priklausomybė nuo $1/T$.

Iš šios tiesės polinkio galima eksperimentiškai rasti draustinės juostos plotį.

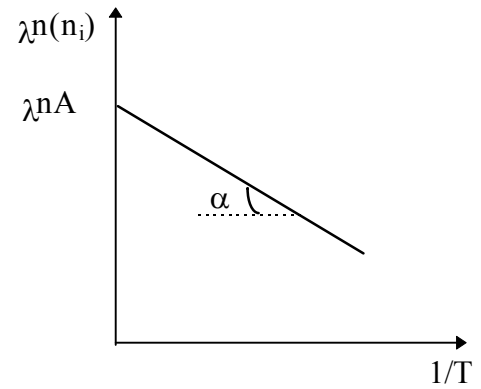


22 pav.

$$\begin{cases} \ln n_i = \ln A - \frac{\Delta E}{2kT_1} \\ \ln n_i = \ln A - \frac{\Delta E}{2kT_2} \end{cases};$$

$$\operatorname{tg}\alpha = \frac{\Delta[\ln n]}{\Delta\left[\frac{1}{T}\right]} = \frac{\Delta E}{2k};$$

$$\Delta E = 2k \operatorname{tg}\alpha$$



23 pav.

Vadinasi, eksperimentiškai iš grafiko nustatę $\operatorname{tg}\alpha$, apskaičiuojame draustinės juostos plotį ΔE .

Kartu būtina prisiminti, kad draustinės juostos plotis gali priklausyti nuo temperatūros. Pirmuoju artutimumu šį kitimą galima laikyti tiesiniu:

$$\Delta E(T) = \Delta E_0 - \beta T;$$

čia ΔE_0 - draustinės energijų juostos plotis absoliutinio nulio temperatūroje, $\beta = d(\Delta E)/dT$ - temperatūrinis ΔE koeficientas.

Todėl, norint apskaičiuoti draustinės juostos plotį aukštesnėje temperatūroje, reikia naudotis šia formule.

Modeliavimui naudosime silicio (Si), germanio (Ge) bei galio arsenido (GaAs) parametrus. Jų draustinės juostos tarpas lygus $\Delta E_{\text{Si}} = 1,76 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, $\Delta E_{\text{Ge}} = 1,12 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, $\Delta E_{\text{GaAs}} = 2,29 \cdot 10^{-19} \text{ J}$. Temperatūrų T intervalą pasirinkome nuo 200 K iki 500 K.

Elektronų tankį grynajame puslaidininkyje apskaičiuojame fermio lygmens išraiška įrašę į pusiausvyrosios elektronų koncentracijos išraišką:

$$n_i = N_c e^{-\frac{E_c - F}{kT}} = N_c e^{-\frac{E_c - \frac{1}{2}E_v - kT \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right)^{\frac{1}{2}}}{kT}} = N_c e^{-\frac{E_c - E_v}{2kT}} \sqrt{\frac{N_v}{N_c}} = \sqrt{N_v N_c} e^{-\frac{E_c - E_v}{2kT}};$$

$$n_i = \sqrt{N_v N_c} e^{-\frac{\Delta E_0}{2kT}};$$

čia N_c – efektinis laidumo juostos būsenų tankis, išreiškiamas formule:

$$N_c = \frac{2(2\pi m_n kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3},$$

o N_v – efektinis valentinės juostos būsenų tankis, išreiškiamas formule:

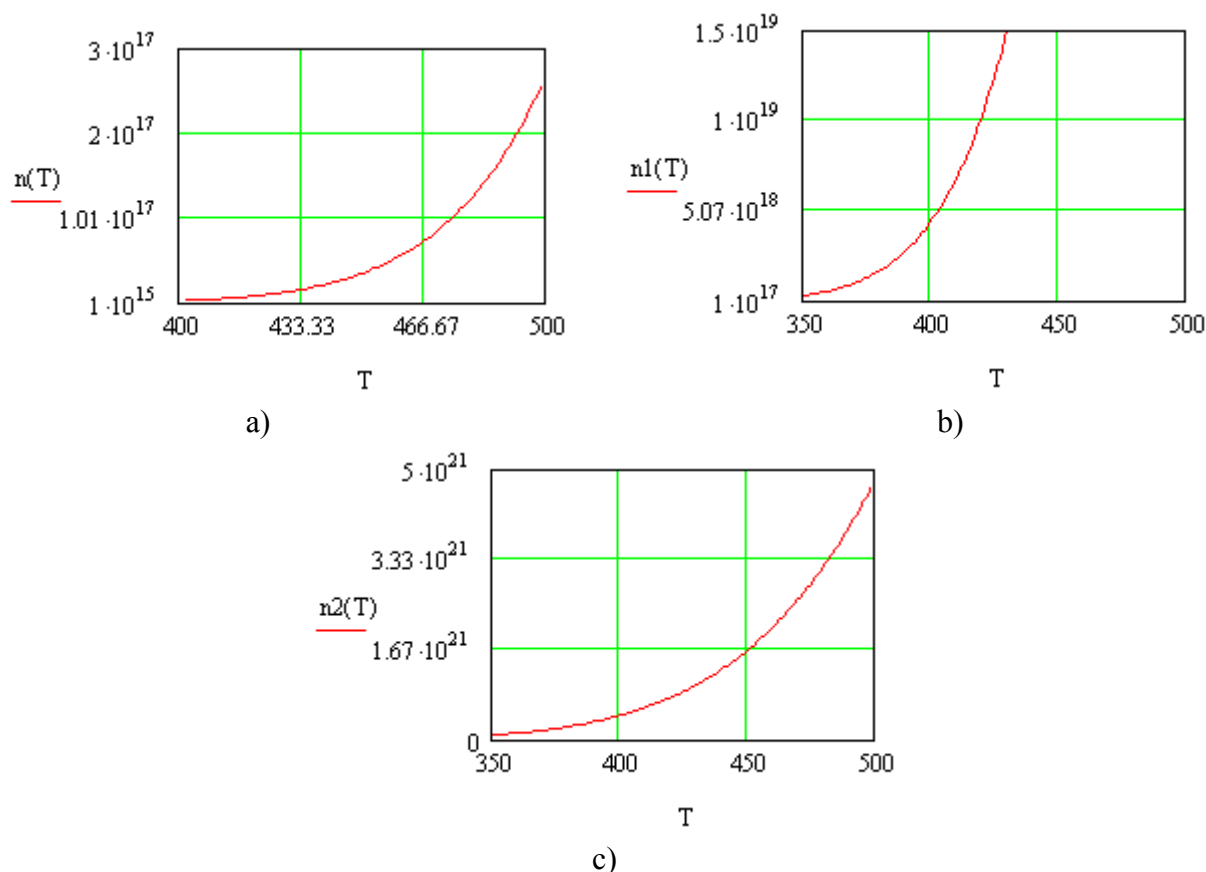
$$N_v = \frac{2(2\pi m_p kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3}.$$

Kai kurių medžiagų laidumo elektronų ir skylių efektinės masės

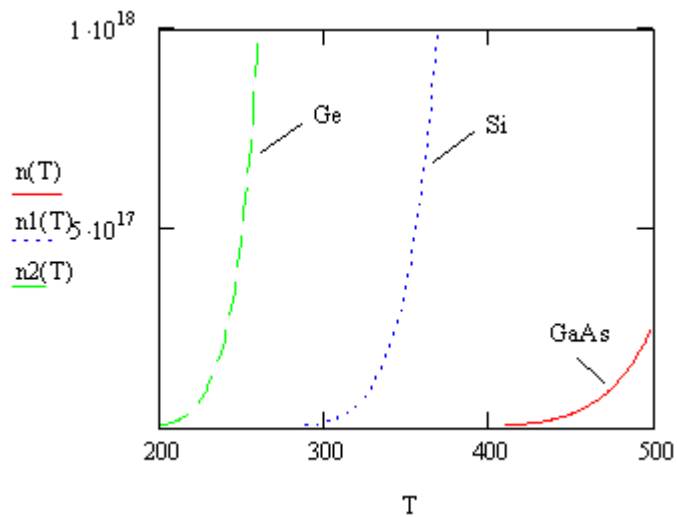
Medžiaga	$\frac{m_n}{m_0}$	$\frac{m_p}{m_0}$
Silicis	1,18	0,81
Germanis	0,55	0,36
Galio arsenidas	0,066	0,52

m_n ir m_p – laidumo elektronų ir skylių efektinės masės (3 lentelė) (Semiconductor physics. http://www.mtmi.vu.lt/pfk/sem_phys_slides/09_eff_mass.htm). Kadangi laidumo elektronai ir skylės yra ne laisvojoje erdvėje, o kristale – tarp atomų, veikiant elektriniam laukui jie įgyja kitokį pagreitį nei laisvojoje erdvėje esantis elektronas. Kristalo įtaka krūvininkams įvertinama priėmus, kad jų masės skiriasi nuo elektrono, esančio laisvojoje erdvėje, masės. Skylių efektinė masė lygi į skylės šokinėjančio elektrono efektinei masei. Absoliučiojo nulio temperatūroje grynujų puslaidininkių Fermio lygmuo yra energijos juostos viduryje. Kylant temperatūrai Fermio lygmens padėtis gali nežymiai keistis. Lygmens padėties kitimą lemia efektyvių masių santykis m_p/m_n .

Pagal formulę gavome grynojo silicio, germanio ir galio arseno laisvųjų krūvininkų tankio priklausomybę nuo temperatūros $n_i(T)$, kurią nulemia eksponentinis narys.



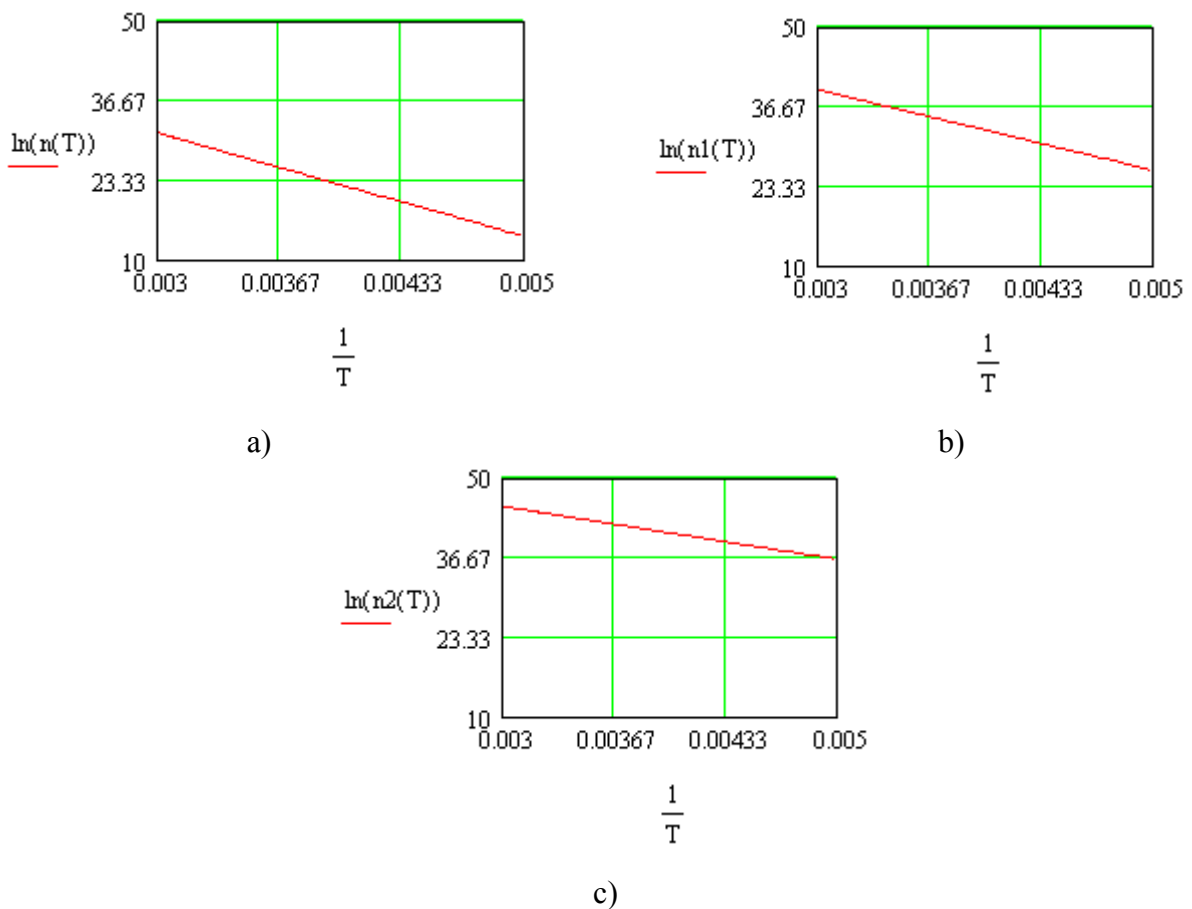
24 pav. Krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo temperatūros a) GaAs, b) Si, c) Ge.



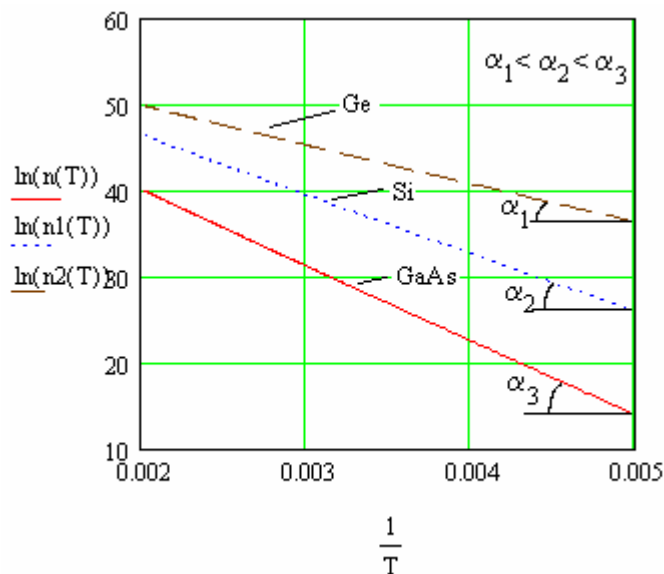
25 pav. Krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo temperatūros

Grynajame puslaidininkyje laidumo elektronų ir skylių koncentracijos vienodos. Taigi galime teigti, kad krūvininkų koncentracija grynajame puslaidininkyje labai priklauso nuo temperatūros ir draudžiamosios juostos pločio.

Eksperimentiškai nustatę $n_i(T)$ ir išmatuotą $\ln(n_i)$ pavaizdavę kaip $1/T$ funkciją gavome tieses (26 pav.).



26 pav. a) – GaAs, b) – Si, c) – Ge.



27 pav.

Taigi galime teigti, kad koordinacių sistemoje kurios abscisių ašyje atidengiamas dydis, atvirkščias temperatūrai, o ordinačių ašyje – krūvininkų koncentracijos logaritmo reikšmės, grynujų puslaidininkų krūvininkų koncentracijos priklausomybės nuo temperatūros kreivės yra artimos tiesėms. Kaip žinome, eksperimentiškai iš grafiko nustatę $\text{tg}\alpha$, galime apskaičiuoti draustinės juostos plotį ΔE . Iš 27 pav. matome, kad tiesių polinkio kampai yra skirtingi. Didžiausią polinkį turi GaAs kreivė. Kaip žinome, GaAs turi ir didžiausią draustinės juostos plotį.

3.6. Fermi lygmuo ir krūvininkų koncentracija neišsigimusiamė priemaišiniame puslaidininkyje

Elektroninis neišsigimęs puslaidininkis apibūdinamas palyginti didele laidumo elektronų koncentracija. Tokiam puslaidininkiu turime: $N_D \neq 0$; $N_N \neq 0$.

Esant žemai temperatūrai, elektronų perėjimas iš valentinės į laidumo juostą daug mažiau tikimas negu iš donorinių lygmenų į laidumo juostą. Vadinasi, esant santykinai žemoms temperatūroms galime nepaisyti skylių koncentracijos p_0 .

Šiuo atveju elektroneutralumo sąlyga bus

$$n_0 = p_D$$

Esant aukštesnėms temperatūroms tikimybė pereiti elektronams iš valentinės E_V į laidumo E_C juostą didėja, o priemaišos gali būti nuskurdinamos, t.y. visos jonizuotos. Šiuo atveju (kaip pamatysime vėliau) puslaidininkis iš elektroninio virsta į grynąjį.

Tada neutralumo sąlyga užrašoma:

$$n_0 = p_D + p_0;$$

čia $n_D = N_D^+ = N_D$.

Nustatyti Fermio lygmenis priklausomybę nuo temperatūros yra gana sudėtinga, todėl tai atliksime ribiniais žemųjų ir aukštųjų temperatūrų atveju.

Žemosiomis laikysime tokias temperatūras, kuriose šiluminiu būdu sužadinama labai mažai valentinės juostos elektronų. Taigi elektronai į laidumo juostą patenka tik iš priemaišinių atomų. Todėl elektroneutralumo lygtis šiuo atveju yra tokia:

$$n_0 = p_D,$$

Ankščiau turėjome, kad

$$n_0 = N_C e^{\frac{E_C - E_F}{kT}} \quad \text{ir} \quad p_D = \frac{N_V}{2e^{\frac{F - E_D}{kT}} + 1}.$$

Tuomet

$$e^{\frac{E_C - F}{kT}} = \frac{N_D}{2e^{\frac{F - E_D}{kT}} + 1}.$$

Pažymėkime $e^{\frac{F}{kT}} = x$.

Padauginę abi lygybės puses iš $\left(2e^{\frac{F - E_D}{kT}} + 1\right)$ ir įstate $e^{\frac{F}{kT}} = x$, gauname kvadratinę lygtį:

$$2N_C e^{\frac{E_C + E_D}{kT}} x^2 + N_C e^{\frac{-E_C}{kT}} x - N_D = 0.$$

$$x = \frac{-N_C e^{\frac{-E_C}{kT}} \pm \sqrt{N_C^2 e^{\frac{-2E_C}{kT}} + 8N_C N_D e^{\frac{-E_C + E_D}{kT}}}}{4N_C e^{\frac{-E_C + E_D}{kT}}} = \frac{1}{4} \left(-e^{\frac{E_D}{kT}} + \sqrt{e^{\frac{2E_D}{kT}} + \frac{8N_D}{N_C} e^{\frac{-E_C + E_D}{kT}}} \right)$$

Prieš šaknį tik "+", nes $x > 0$, t.y. $e^{\frac{F}{kT}} > 0$;

$$e^{\frac{F}{kT}} = \frac{1}{4} e^{\frac{E_D}{kT}} \left(\sqrt{1 + \frac{8N_D}{N_C} e^{\frac{-E_C - E_D}{kT}}} - 1 \right).$$

Pažymime $E_C - E_D = \Delta E_D$

Vadinasi turime, kad

$$F = E_D + kT \ln \left[\frac{1}{4} \left(\sqrt{1 + \frac{8N_D}{N_C} e^{\frac{\Delta E_D}{kT}}} - 1 \right) \right].$$

Ši lygtis išreiškia Fermio lygmens priklausomybę nuo temperatūros elektroniniam neišsigimusiam puslaidininkui žemosiose temperatūrose. Bet ši formulė labai sudėtinga, todėl panagrinėkime žemųjų temperatūrų sritį smulkiau, t.y. dviem ribiniais atvejais.

Pačiose žemiausiose temperatūrose

$$\frac{8N_D}{N_C} e^{\frac{\Delta E_D}{kT}} \gg 1.$$

Tuomet galime atmesti vienetukus ir gausime:

$$F = kT \ln \left[\frac{1}{4} e^{\frac{E_D}{kT}} \left(\sqrt{\frac{8N_D}{N_C} e^{\frac{\Delta E_D}{kT}}} \right) \right] \quad \text{arba} \quad F = E_D + kT \ln \left[\frac{1}{4} \sqrt{\frac{8N_D}{N_C} e^{\frac{\Delta E_D}{kT}}} \right],$$

$$F = E_D + kT \frac{(E_C - E_D)}{2kT} + kT \ln \sqrt{\frac{8N_D}{16N_C}} \quad \text{ir} \quad F = \frac{E_D + E_C}{2} + kT \ln \sqrt{\frac{N_D}{2N_C}}.$$

Matome, kad absoliutinio nulio temperatūroje Fermio lygmuo yra vienodai nutolęs nuo laidumo juostos apačios ir donorinio lygmens. Antrojo nario priklausomybę nuo temperatūros lemia $N_C \sim T^{3/2}$.

Dabar galime apskaičiuoti elektronų koncentraciją laidumo juostoje n_0 . Prisimename, kad

$$n_0 = N_C e^{\frac{-E_C - F}{kT}}.$$

Įrašius F reikšmę, gauname

$$n_0 = \sqrt{\frac{N_C N_D}{2}} e^{\frac{-E_C - E_D}{2kT}}.$$

Matome, kad žemosiose temperatūrose $\ln(n_0)$ tiesiškai priklauso nuo $1/T$. Šios tiesės palinkimo kampo tangentas lygus $(E_C - E_D)/2k$. Be to, elektronų koncentracija yra proporcinga priemaišų koncentracijos kvadratinei šakniai

Dabar panagrinėkime atvejį, kai:

$$\frac{8N_D}{N_C} e^{\frac{\Delta E_D}{kT}} \ll 1.$$

Šis kriterijus atitiks **viršutinį žemųjų temperatūrų intervalą**, t y kai sužadinama dar nedaug valentines juostos elektronų.

Prisimename, kad $\sqrt{1 + \alpha} = 1 + \frac{\alpha}{2}$, kai $\alpha \ll 1$

Gauname

$$F = E_D + kT \ln \left(\frac{1}{4} \left(1 + \frac{4N_D}{N_C} e^{\frac{\Delta E_D}{kT}} - 1 \right) \right) = E_D + \Delta E_D + kT \ln \frac{N_D}{N_C}.$$

$$F = E_C + kT \ln \frac{N_D}{N_C}.$$

Apskaičiuojame elektronų koncentraciją laidumo juostoje n_0 .

$$n_0 = N_C e^{-\frac{E_C - F}{kT}} = N_D, \text{ t.y. } n_0 = N_D.$$

Vadinasi, kai $\frac{8N_D}{N_C} e^{\frac{\Delta E_D}{kT}} \ll 1$, elektronų koncentracija nepriklauso nuo temperatūros ir

yra lygi priemaišų koncentracijai. Tai atitinka priemaišų nuskurdintai sričiai, t. y. kai priemaišos jonizuotos.

Pažymėsime, kad nuskurdintų priemaišų srityje nepagrindinių krūvininkų (skylučių) koncentracija augs eksponentiškai, didėjant temperatūrai, kadangi galioja veikiančių masių dėsnis: $n_i^2 = n_0 p_0$;

$$p_0 = \frac{n_i^2}{n_0} = \frac{N_C N_V}{N_D} e^{-\frac{\Delta E_0}{kT}}.$$

Ši išraiška galioja, kol skylių koncentracija daug mažesnė už elektronų koncentraciją:

$$p_0 \ll n_0 = N_D^+ = N_D.$$

Vadinasi, žemosios temperatūros atitinka intervalui nuo 0 K iki priemaišų nuskurdinimo srities. Šis intervalas gali būti pakankamai pintus Pavyzdžiui, Si iki 400 K. Būtent šiame intervale puslaidininkis bus n-tipo.

Nepagrindinių krūvininkų koncentraciją p_n , šiame temperatūrų intervale galime apskaičiuoti pagal formulę:

$$p_0 = N_V e^{-\frac{F - E_V}{kT}}.$$

Tuo būdu fiksuotoje temperatūroje aukštesnį F lygmenį (didesnį N_D) atitinka didesne n ir mažesne p_n . Pusiausvyrosios krūvininkų koncentracijos nuskurdinimo arba praturtinimo pagrindiniais krūvininkais srityse apskaičiuojamos pagal formules:

$$p = N_V e^{-\frac{F - E_V}{kT}} \quad \text{ir} \quad n = N_C e^{-\frac{E_C - F}{kT}}.$$

Priemaišinis puslaidininkis aukštose temperatūrose.

Tada elektroneutralumo sąlyga:

$$n_0 = p_0 + N_D.$$

Pagal veikiančių masių dėsnį:

$$n_0 = \frac{n_i^2}{n_0} + N_D,$$

$$n_0^2 - N_D n_0 - n_i^2 = 0.$$

$$n_0 = \frac{N_D \pm \sqrt{N_D^2 + 4n_i^2}}{2} = \frac{N_D}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_D^2}} \right).$$

$$n_0 = N_C e^{-\frac{E_C - F}{kT}} = \frac{N_D}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_D^2}} \right).$$

Iš čia randame F :

$$F = E_C + kT \cdot \ln \left[\frac{N_D}{2N_C} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_D^2}} \right) \right].$$

Panagrinėkime **du ribinius atvejus**

Kai $\frac{4n_i^2}{N_D^2} \ll 1$. Tai atitinka **vidutinės temperatūros**, t y priemaišų nuskurdinimo

sritį. Iš n_0 ir F išraiškų gauname:

$$n_0 = N_D \quad \text{ir} \quad F = E_D + kT \cdot \ln \frac{N_D}{N_C}.$$

Tokiu būdu, priemaišų nuskurdinimo srityje žemosios ir aukštosios temperatūros persikloja.

Kai $\frac{4n_i^2}{N_D^2} \gg 1$ (aukštų temperatūrų viršutinė riba),

$$F = E_C + kT \cdot \ln \frac{n_i}{N_C}.$$

Turint omenyje, kad

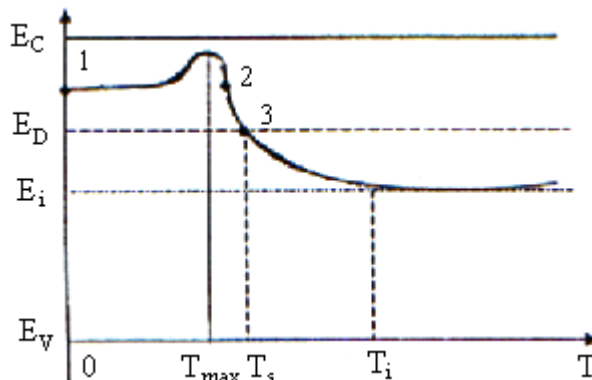
$$N_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-\frac{E_C - E_V}{2kT}}, \quad n_0 = n_i.$$

gauname

$$F = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_V}{N_C}.$$

Ši formulė atitinka Fermi lygmenį grynajame puslaidininkyje.

Nubraižykime donorinio puslaidininkio F priklausomybę nuo T (28 pav.).



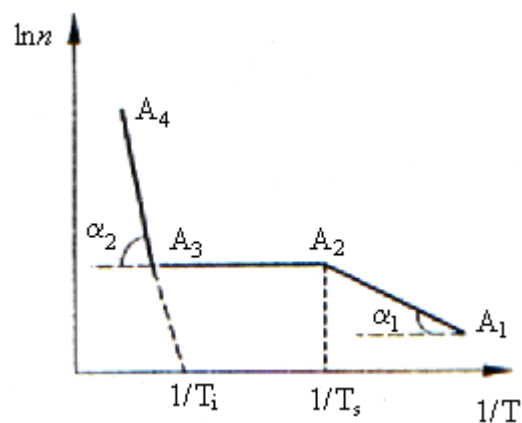
28 pav.

Absoliutinio nulio temperatūroje Fermio lygmuo yra vienodai nutolęs nuo laidumo juostos E_C apačios ir donorinio lygmens E_D , t.y. kai $T=0$,

$$F = \frac{E_C + E_D}{2} \quad (\text{I taškas}).$$

Temperatūrai didėjant, F pradžioje didėja, pasiekia maksimumą (priklausantį nuo N_D), o vėliau ima mažėti. Kai $N_C = N_D/2$, tuomet F kerta horizontalę $F = \frac{E_C + E_D}{2}$ (2 taškas) ir toliau leidžiasi iki E_D (3 taškas, žemųjų temperatūrų srityje iki T_S) ir žemiau. Kadangi $N_C \gg N_D$, tai F formulėje logaritmas yra neigiamas, t.y. kylant temperatūrai, Fermio lygmuo tolsta nuo E_C (kreivės dalis tarp T_S ir T_i). Priemaišų nuskurdinimo sritis yra, kai $F \approx E_i$. Temperatūrose aukštesnėse už T_i puslaidininkis yra savojo laidumo srityje.

Pavaizduokime elektronų koncentracijos priklausomybę nuo temperatūros n puslaidininkyje (29 pav.).

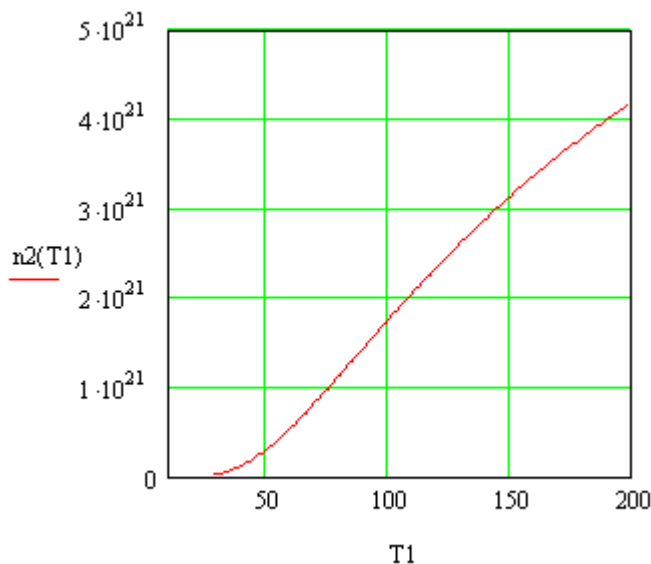


29 pav.

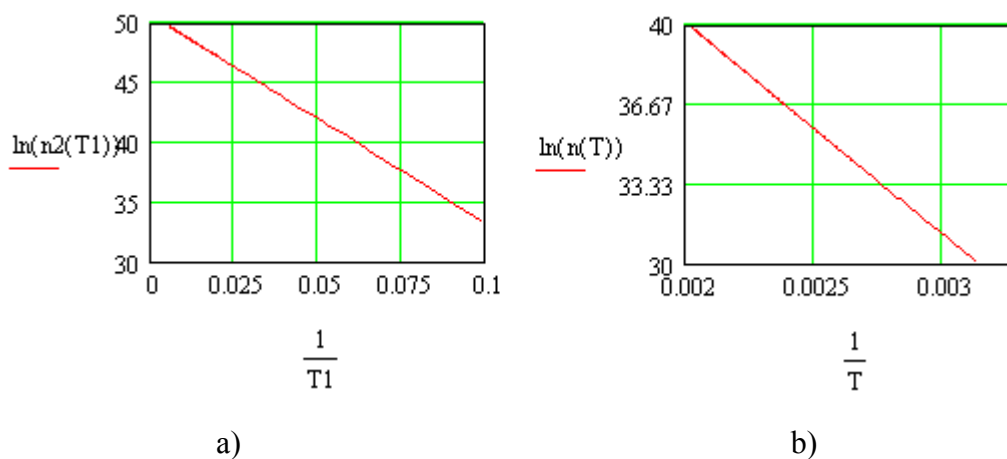
Visa elektronų koncentracijos priklausomybė nuo temperatūros apima visus atskirai išnagrinėtus atvejus. Itin žemose temperatūrose lemiančiu sužadinimu yra donorų jonizacija (kreivės dalis A_1A_2). α_1 apibūdina donorų jonizacijos energiją. Elektronų, perėjusių į laidumo juostą iš valentinės juostos (savųjų elektronų), yra dar labai mažai. Pasiekus temperatūrą T_S , priemaišos visiškai jonizuotos, o toliau keliant temperatūrą, elektronų tankis beveik nekinta (kreivės dalis A_2A_3), nes savųjų elektronų vis dar mažai. Kai temperatūra pasidaro tokia aukšta, kad elektronų, perėjusių į laidumo juostą iš valentinės juostos, ir donorinių lygmenų koncentracijos pasidaro lygios, kreivėje atsiranda lūžis. Toliau keliant temperatūrą, elektronų koncentracija didėja kaip grynajame puslaidininkyje (kreivės dalis A_3A_4). α_2 apibūdina draustinės juostos plotį

Matome, kad. esant vienodoms priemaišų koncentracijoms, temperatūra T , yra tuo aukštesnė, kuo didesnis draustinės energijos juostos plotis. To paties puslaidininkio T didėja, didinant priemaišų koncentraciją.

Pabandykime visa tai sumodeliuoti. Temperatūrų intervalą dalinsime į dvi dalis: temperatūra T nuo 10 K iki 200 K ir temperatūra T_I nuo 300 K iki 400 K. $N_D = 10^{22}$. $\Delta E_D = 0,03 \text{ eV} = 0,48 \cdot 10^{-20} \text{ J}$. Kitus duomenis paimame iš aukščiau spręsto uždavinio. Brėžiame elektronų koncentracijos priklausomybę nuo temperatūros T_I (30 pav.).



30 pav. Elektronų koncentracijos priklausomybė nuo temperatūros



31 pav. a) $\ln(n_2(T_1)) = f(1/T_1)$, b) $\ln(n(T)) = f(1/T)$

Kaip matome iš 31 pav., itin žemose temperatūrose lemiančiu sužadiniu yra donorų jonizacija. Elektronų, perėjusių į laidumo juostą iš valentinės juostos (savųjų elektronų), yra dar labai mažai (31 pav., a). Kai temperatūra pasidaro tokia aukšta, kad elektronų, perėjusių į laidumo juostą iš valentinės juostos, ir donorinių lygmenų koncentracijos pasidaro lygios, kreivėje atsiranda lūžis. Toliau keliant temperatūrą, elektronų koncentracija didėja kaip

grynajame puslaidininkyje (31 pav., b). Kampas tarp kreivės ir abscisių ašies apibūdina draustinės juostos plotį.

4. Modelių panaudojimas kietojo kūno fizikos paskaitose

Studentai geriau įsimena informaciją ne tik ją girdėdami, bet ir matydami, todėl labai svarbu, kad paskaitos būtų vaizdžios, studentams pateikiama įvairi ir įdomi informacija. Patogu medžiagą demonstruoti kompiuteriu, ypač, jei naudojamos projekcinės multimedijos sistemos, ir kiekvienas studentas demonstruojamą medžiagą mato prieš jį esančiame ekrane. Demonstravimui galime naudoti įvairiomis programomis sukurtą medžiagą, rasti ir panaudoti internete esamą medžiagą bei informaciją.

Siekiant įvertinti kompiuterinių demonstracijų panaudojimo galimybes, buvo atliktas žvalgomas tyrimas Šiaulių universiteto Fizikos ir matematikos fakultete. Sukurti kompiuteriniai modeliai buvo analizuojami per kietojo kūno paskaitas su Fizikos, Fizikos ir informatikos bei Fizikos ir kitų gamtos mokslų pagrindų specialybių IV kurso studentais (36 studentai). Paskaitos vyko naudojant kompiuterinį projektorių. Dėstant teorinę medžiagą, t. y. fizikinius procesus aprašant matematinėmis lygtimis, greta buvo naudojami sukurti kompiuteriniai modeliai. Parinkus realius fizikinius parametrus, ekrane buvo demonstruojamos jų funkcinės priklausomybės. Keičiant vieno ar kito fizikinio parametro vertę, buvo analizuojama, kokią įtaką jis daro galutiniam rezultatui.

Pravedus paskaitų ciklą studentams buvo užduoti keli klausimai, siekiant išsiaiškinti kompiuterinio modeliavimo panaudojimo galimybes paskaitose.

Studentai buvo klausiami apie tai, ką jie mąsto apie projekcinių multimedijos sistemų panaudojimą paskaitų metu. Net 95 % studentų atsakė, kad tai reikalingas ir netgi šiuo metu neatsiejamas nuo mokomojo proceso dalykas. 5 % studentų neturėjo konkrečios nuomonės. Paprašyti nurodyti projekcinių multimedijos sistemų privalumus, jie nurodė, kad:

- patogiau stebėti demonstruojamą medžiagą;
- vaizdo medžiaga yra įtaigesnė;
- medžiagos rodymą galima reguliuoti;
- galima atkreipti dėmesį į svarbesnius dalykus;
- medžiaga pateikiama konspektyviai;
- geriau įsimenama pateikiama informacija.

Kompiuterinių modelių privalumai (nurodyti pačių studentų):

- vaizdumas;
- patogiau analizuoti reiškinių;
- galimybė keisti parametrus ir stebėti, kokią įtaką turi vykstančiam procesui;
- reikšmingų faktorių akcentavimas;

- galima stebėti ir analizuoti reiškinius, kurių būtų neįmanoma pademonstruoti realiai;
- palengvina mokymąsi.

Trūkumai:

- kompiuteriniai modeliai vis tik tėra tik realiai vykstančių procesų ar reiškinių idealizacija. Neįmanoma sukurti visiškai tiksliai realų procesą atspindinčio kompiuterinio modelio;
- legalios programinės įrangos poreikis.

Iš žvalgomojo tyrimo paaiškėjo, kad kompiuterinių modelių sugretinimas su matematinėmis lygtimis, t. y. fizikinių reiškinių vizualizavimas yra naudingas studentams. Tokiu būdu, matematinis fizikinių reiškinių aprašymas darosi labiau suprantamas. Tai padeda išsamiai ištirti vykstančius procesus, atskirti esminius faktorius nuo neesminių, kas skatina studentą giliau pažvelgti į studijuojamą problemą, geriau suprasti ir įtvirtinti naują medžiagą.

5. Išvados

Darbe atlikta modeliujamų procesų teorinė analizė. Gauti galutiniai analitiniai sprendiniai tinkami kompiuteriniam modeliavimui. Korektiškai sudarytas ir išanalizuotas realiųjų fizikinių procesų kompiuterinis modelis gali tapti reikšmingu mokymo metodu tiek vidurinėje, tiek aukštojoje mokykloje. Modeliuojant fizikinius procesus galima imituoti įvairių reiškinių vyksmą, savybes, mechanizmą, keisti modelio parametrus bei aiškintis dėsningumus ir taip pagilinti jų suvokimą.

Naudojantis kompiuterine matematikos sistema *Mathcad* gauta pusiau kvadratinė kvantinių būsenų tankio priklausomybė nuo energijos. Sumodeliuoti Fermio ir Dirako bei Bolcmano skirstiniai skirtingose temperatūrose [$5 \text{ K} < T < 500 \text{ K}$]. Parodyta, kad Fermio ir Dirako funkcija sparčiai kinta energijų intervale: $(F - 2kT) < E < (F + 2kT)$. Palyginus Fermio ir Dirako bei Bolcmano skirstinius, matyti, kad šie skirstiniai gerai sutampa didelių energijų srityje, kur leistinų energetinių būsenų skaičius daug didesnis už elektronų skaičių. Pasinaudojant būsenų tankio bei Fermio ir Dirako skirstiniais gautas laisvųjų elektronų pasiskirstymas pagal energijos reikšmes. Parodyta, kad F_0 (Fermio energija 0 K temperatūroje) priklauso nuo laidumo elektronų skaičiaus tūrio vienetė. Gauta krūvininkų koncentracijos neišsigimusiam grynajame puslaidininkyje priklausomybė nuo temperatūros. Parodyta, kad, pasinaudojant $\ln n_i = f(1/T)$ priklausomybe, iš tiesės polinkio kampo galima rasti draustinės juostos plotį. Sumodeliuota skirtingų medžiagų molinės šilumos priklausomybė nuo temperatūros. Galima matyti, kad molinė šiluma iš tikrųjų priklauso nuo temperatūros bei konkrečių kūno savybių, ir ypač žemose temperatūrose.

Apibendrinus žvalgomojo tyrimo rezultatus, galima teigti, kad racionalus matematinių išvedimų ir kompiuterinių demonstracijų derinimas mokomajame procese yra naudingas studentams. Jis padeda išsamiai ištirti vykstančius procesus, atskirti esminius faktorius nuo neesminių, kas skatina studentą giliau pažvelgti į studijuojamą problemą, geriau suprasti ir įtvirtinti naują medžiagą bei aktyvina požiūrį į fizikos, matematikos ir informatikos mokslų integravimą.

5. Literatūra

1. *Aukštojo mokslo ir bendrojo ugdymo kaita ir perspektyvos (fizika, matematika, informatika)*. Tarptautinės mokslinės konferencijos rinktiniai straipsniai. 2003 m. Šiauliai: VŠĮ ŠU leidykla.
2. Dargys A., Acus A., 2003, *Fizika su kompiuteriu*. Vilnius: Ciklonas.
3. *Fizika, matematika, informatika bendrojo ugdymo ir aukštojoje mokykloje*. Respublikinės mokslinės konferencijos straipsnių rinkinys. Nr. 3. 2002. Šiauliai: VŠĮ ŠU leidykla.
4. Fermi – Dirac function. http://www.mtmi.vu.lt/pfk/lab-d-spec-lab/fermi_dirac/fermi_dirac.htm (žiūrėta 2004 m. rugsėjo mėn.).
5. Informacijos ir komunikacijos technologijos. <http://www.ipc.lt> (žiūrėta 2005 m. balandžio mėn.).
6. Javorskis B., Detlafas A., 1970. *Fizikos kursas*. T 1. Vilnius: Mintis.
7. Juodviršis A., Mikalkevičius M., Vengris S., 1985. *Puslaidininkinės fizikos pagrindai*. Vilnius: Mokslas.
8. Kompiuterinis modeliavimas.
<http://mokslas.ipc.lt:8000/Sviesa/Md.nsf/0/bbbeb15f51b0aad842256b210024129d?OpenDocument> (žiūrėta 2005 m. sausio mėn.)
9. Mathcad. <http://www.exponenta.ru/soft/Mathcad/Mathcad.asp> (žiūrėta 2004 m. gruodžio mėn.)
10. Rimgailaitė E., Diburytė K., 2000. *Matematiniai fizikinių procesų modeliai*. Kursinis darbas. Šiauliai.
11. Rimgailaitė E., 2003. *Informacinių technologijų panaudojimas astronomijos pamokose*. Baigiamasis darbas. Šiauliai.
12. Semiconductor physics. http://www.mtmi.vu.lt/pfk/sem_phys_slides/09_eff_mass.htm (žiūrėta 2004 m. lapkričio mėn.)
13. Štaras S., Kirvaitis R., 1995. *Mikroelektronikos pagrindai*. Vilnius: Mokslo ir enciklopedijų leidykla.
14. Tamašauskas A., Vosylius J., Radvilavičius Č., 1992. *Fizika 3*. Vilnius: Mokslas.
15. Turskienė S., 2003, *Uždavinių sprendimas kompiuterinėmis matematikos sistemomis*. Šiauliai: VŠĮ ŠU leidykla.
16. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г., 1977, *Физика полупроводников*. Москва: Наука.
17. *Физика твердого тела*. 2001. Москва.

18. Киреев П. С., 1975. *Физика полупроводников*. Москва: Высшая школа.
19. Моделирование.
http://www.ctc.msiu.ru/materials/Book2/ch_09_model/01_model/index.html (žiūrēta 2005 m. kovo mėn.)
20. Компьютерное моделирование.
http://www.ctc.msiu.ru/materials/Book2/ch_09_model/01_model/01_comp_model/index.html (žiūrēta 2005 m. kovo mėn.)
21. Поршнеv С.В., 2002, *Компьютерное моделирование физических процессов с использованием пакета MathCad*. Москва: Горячая линия – Телеком.
22. Смит. Р., 1982, *Полупроводники*. Москва: Мир.

Priedai

Kietųjų kūnų savitoji (molinė) šiluma 1

1. Įvedame uždaviniui išspręsti reikalingą universaliąją dujų konstantą R bei charakteringą Debajaus temperatūrą θ :

$$R := 8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$\theta := 100^*$$

2. Temperatūrų intervalas, kuriame bus ieškoma sprendinio:

$$T := 0,1..1000^*$$

3. Užrašome kietųjų kūnų savitosios šilumos lygtį:

$$C_v(T) := 9 \cdot R \cdot \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \cdot \int_0^{\frac{T}{\theta}} x^4 \cdot \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

4. Gauname kontrolinius funkcijos skaičiavimo pavyzdžius esant skirtingoms temperatūroms ($T_1 = 100 \text{ K}$, $T_2 = 200 \text{ K}$, $T_3 = 1000 \text{ K}$)*:

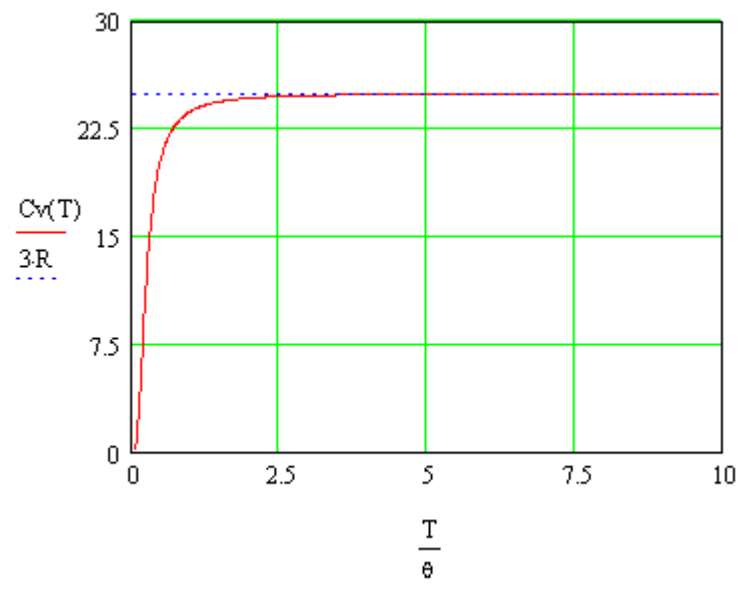
$$C_v(100) = 23.738 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$C_v(200) = 24.633 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$C_v(1000) = 24.93 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

5. Braižome grafiką:

* Vartotojas gali keisti.



Kietųjų kūnų savitoji (molinė) šiluma 2

1. Įvedame uždaviniui išspręsti reikalingą universaliąją dujų konstantą R bei charakteringą Debajaus temperatūrą θ :

$$R := 8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$\theta := \begin{pmatrix} 94.5 \\ 150 \\ 215 \\ 374 \\ 441 \\ 645 \\ 1000 \\ 2000 \end{pmatrix} *$$

2. Temperatūrų intervalas, kuriame bus ieškoma sprendinio:

$$T := 10, 11..2500 *$$

3. Įvedame kintamąjį, reikalingą programai nuskaityti duomenis iš matricos:

$$n := 0..7$$

4. Užrašome kietųjų kūnų savitosios šilumos lygtį:

$$C_{v,T,n} := 9 \cdot R \cdot \left(\frac{T}{\theta_n} \right)^3 \cdot \int_0^{\frac{T}{\theta_n}} x^4 \cdot \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

5. Gauname kontrolinius funkcijos skaičiavimo rezultatus. Funkcija paskaičiuota kiekvienai temperatūros vertei iš intervalo nuo $T_1 = 10 \text{ K}$ iki $T_n = 2500 \text{ K}$:

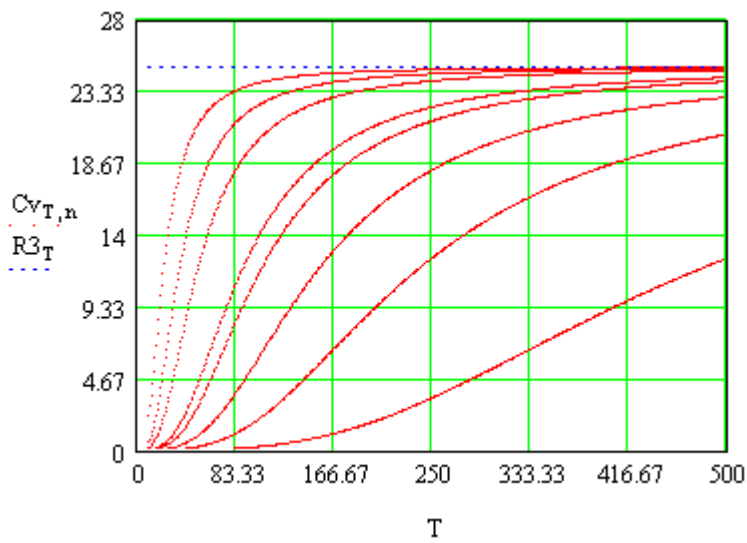
* Vartotojas gali keisti.

$C_v =$

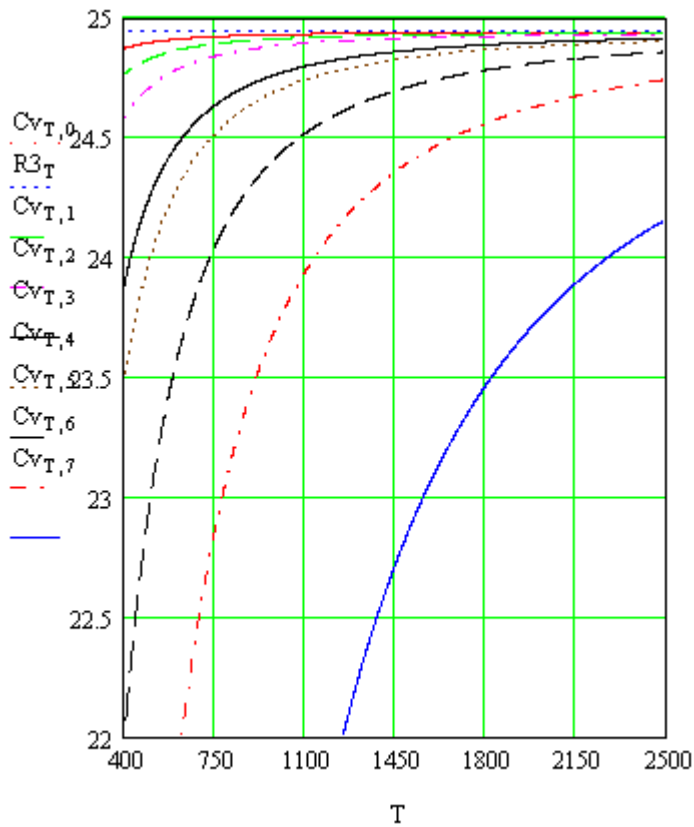
0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0
2.215	0.575	0.196	0.037	0.023	$7.243 \cdot 10^{-3}$	
2.866	0.765	0.26	0.049	0.03	$9.641 \cdot 10^{-3}$	
3.586	0.99	0.338	0.064	0.039	0.013	
4.359	1.253	0.43	0.082	0.05	0.016	
5.168	1.554	0.536	0.102	0.062	0.02	
5.998	1.891	0.659	0.125	0.076	0.024	

$\cdot \text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$

6. Braižome grafiką. Gauname kreivių šeimą. Mėlyna spalva žymi grafiką $C_v = 3R$:



7. Tam, kad būtų aiškiau, galima kiekvieną grafiką nubraižyti skirtingomis spalvomis:



Čia galima keisti intervalo ribas (priklausomai nuo to, kurią grafiko dalį norime analizuoti).

Būsenų tankis

1. Įvedame uždaviniui išspręsti reikalingą Planko konstantą h bei elektrono rimties masę m :

$$h := 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$m := 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

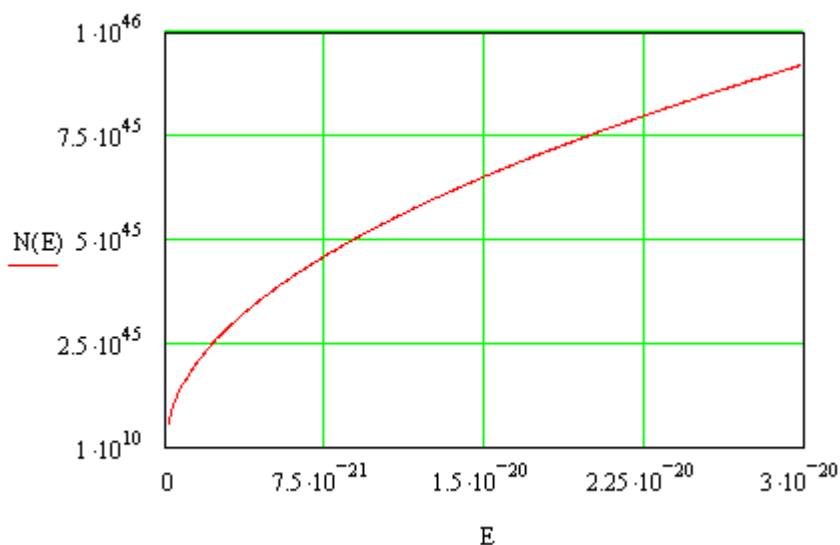
2. Energijų intervalas, kuriame bus ieškoma sprendinio:

$$E := 0.01 \cdot 10^{-19}, 0.015 \cdot 10^{-19} \dots 1 \cdot 10^{-18} \text{ J}^*$$

3. Užrašome būsenų tankio formulę:

$$N(E) := \frac{2 \cdot \pi \cdot (2 \cdot m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \cdot E^{\frac{1}{2}}$$

4. Braižome grafiką:



5. Gauname funkcijos skaičiavimo rezultatus. Funkcija paskaičiuota kiekvienai energijos vertei iš intervalo nuo $E_1 = 0.01 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ iki $E_n = 1 \cdot 10^{-18} \text{ J}$ (čia pateikti tik dalis rezultatų matricos):

$N(E) =$

$5.326 \cdot 10^{44}$
$6.523 \cdot 10^{44}$
$7.533 \cdot 10^{44}$
$8.422 \cdot 10^{44}$
$9.225 \cdot 10^{44}$
$9.965 \cdot 10^{44}$
$1.065 \cdot 10^{45}$
$1.13 \cdot 10^{45}$
$1.191 \cdot 10^{45}$
$1.249 \cdot 10^{45}$
$1.305 \cdot 10^{45}$
$1.358 \cdot 10^{45}$
$1.409 \cdot 10^{45}$
$1.459 \cdot 10^{45}$
$1.507 \cdot 10^{45}$
$1.553 \cdot 10^{45}$

Fermi – Dirako skirstinys

1. Įvedame uždaviniui išspręsti reikalingas Planko h bei Bolcmano k konstantas:

$$h := 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

2. Energijų intervalas, kuriame bus ieškoma sprendinio:

$$E := 0.01 \cdot 10^{-19}, 0.015 \cdot 10^{-19} .. 1 \cdot 10^{-18} \text{ J}^*$$

3. Nurodome Fermi energiją (šiuo atveju metalams):

$$F := 8 \cdot 10^{-19} \text{ J}^*$$

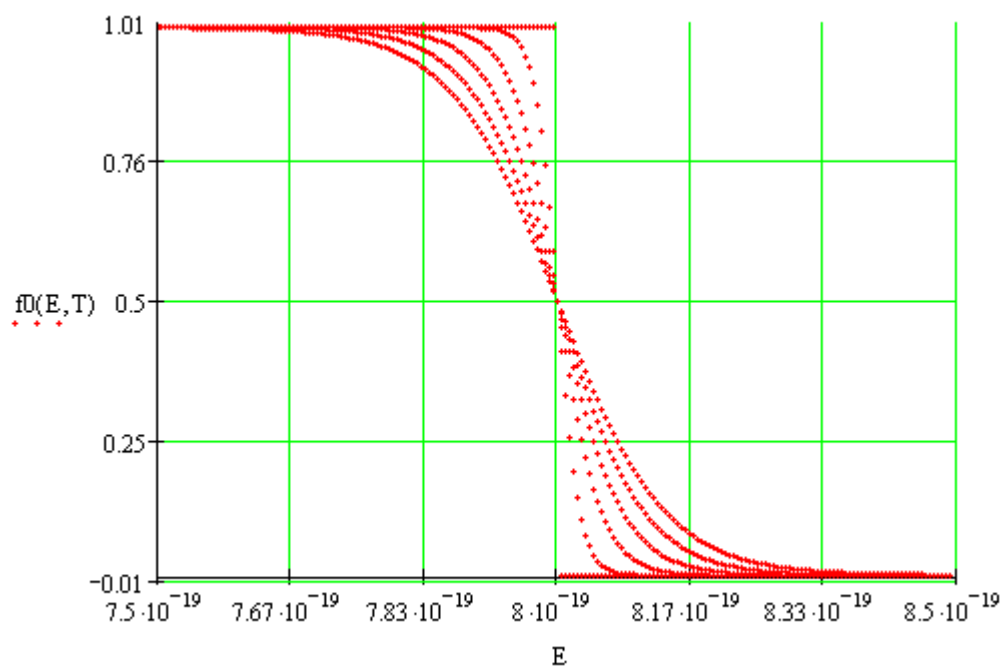
4. Temperatūrų intervalas:

$$T := 5,100..500 \text{ K}$$

5. Užrašome Fermi – Dirako pasiskirstymo funkciją:

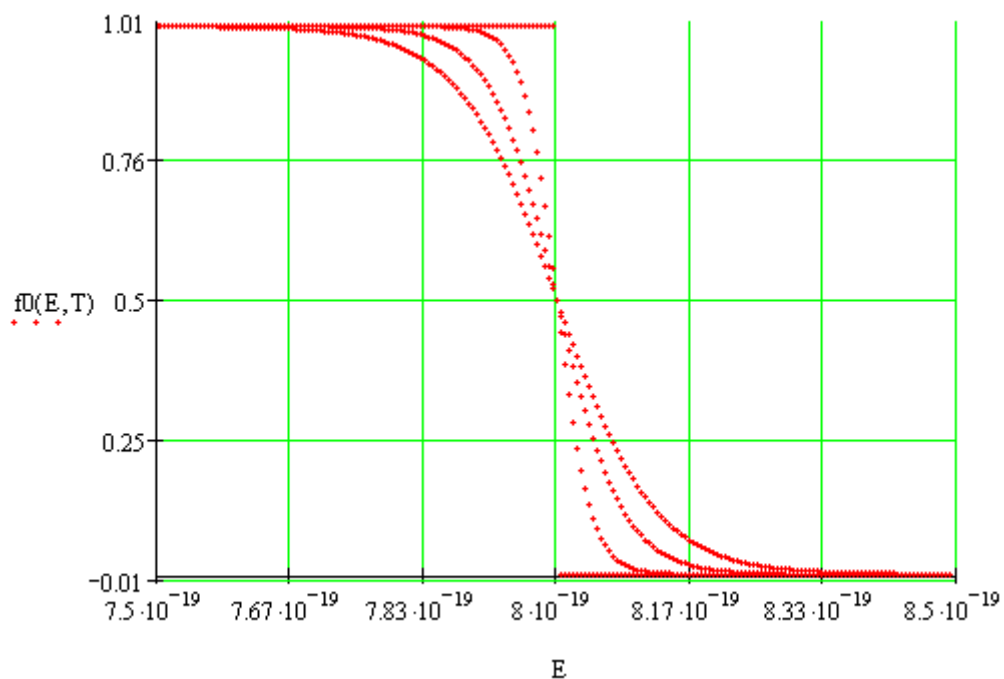
$$f(E, T) := \frac{1}{\frac{E-F}{e^{k \cdot T}} + 1}$$

6. Braižome grafiką:



* Vartotojas gali keisti.

Kiekviena kreivė atitinka Fermi – Dirako skirtinį skirtingoje temperatūroje. Todėl jei norime gauti mažesnę kreivių šeimą, reikia nurodyti kitą temperatūrų intervalą. Tarkim kai temperatūrų intervalas $T := 5,150..500$ K (t. y. žingsnis kas 150 K), grafikas atrodys taip:



Bolcmano skirstinys

1. Įvedame uždaviniui išspręsti reikalingas Planko h bei Bolcmano k konstantas:

$$h := 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

2. Energijų intervalas, kuriame bus ieškoma sprendinio:

$$E := 0.01 \cdot 10^{-19}, 0.015 \cdot 10^{-19} .. 1 \cdot 10^{-18} \text{ J}^*$$

3. Nurodome Fermi energiją (šiuo atveju metalams):

$$F := 8 \cdot 10^{-19} \text{ J}^*$$

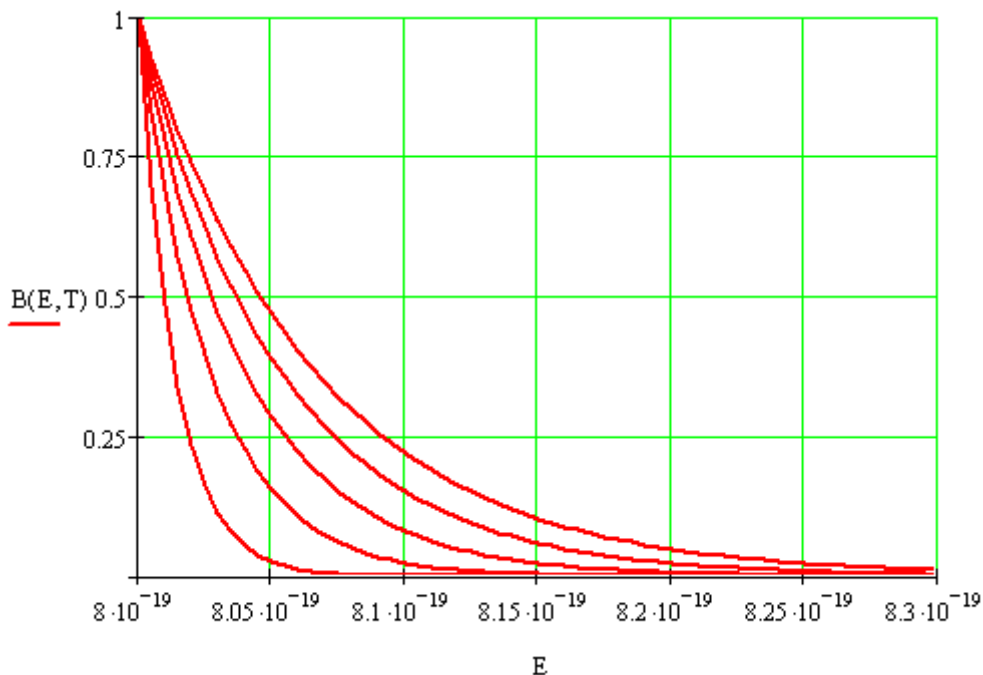
4. Temperatūrų intervalas:

$$T := 5,100 .. 500 \text{ K}$$

5. Užrašome Bolcmano pasiskirstymo funkciją:

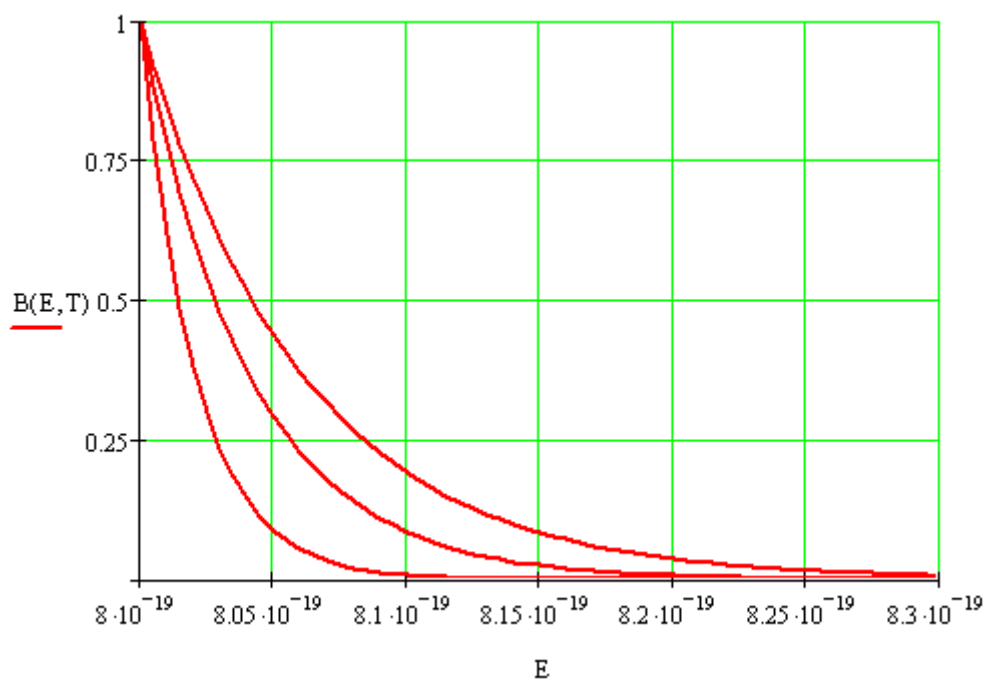
$$B(E, T) := e^{-\frac{F}{k \cdot T}} \cdot e^{-\frac{E}{k \cdot T}}$$

6. Braižome grafiką:



* Vartotojas gali keisti.

Kiekviena kreivė atitinka Bolcmano skirtinį skirtingoje temperatūroje. Todėl jei norime gauti mažesnę kreivių šeimą, reikia nurodyti kitą temperatūrų intervalą. Tarkim kai temperatūrų intervalas $T := 5,150..500$ K (t. y. žingsnis kas 150 K), grafikas atrodys taip:



Fermi – Dirako ir Bolcmano skirstinių palyginimas

1. Įvedame uždaviniui išspręsti reikalingas Planko h bei Bolcmano k konstantas:

$$h := 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

2. Energijų intervalas, kuriame bus ieškoma sprendinio:

$$E := 0.01 \cdot 10^{-19}, 0.015 \cdot 10^{-19} \dots 1 \cdot 10^{-18} \text{ J}^*$$

3. Nurodome Fermi energiją (šiuo atveju metalams):

$$F := 8 \cdot 10^{-19} \text{ J}^*$$

4. Temperatūrų intervalas:

$$T := 5,100 \dots 500 \text{ K}$$

5. Užrašome Fermi – Dirako pasiskirstymo funkciją:

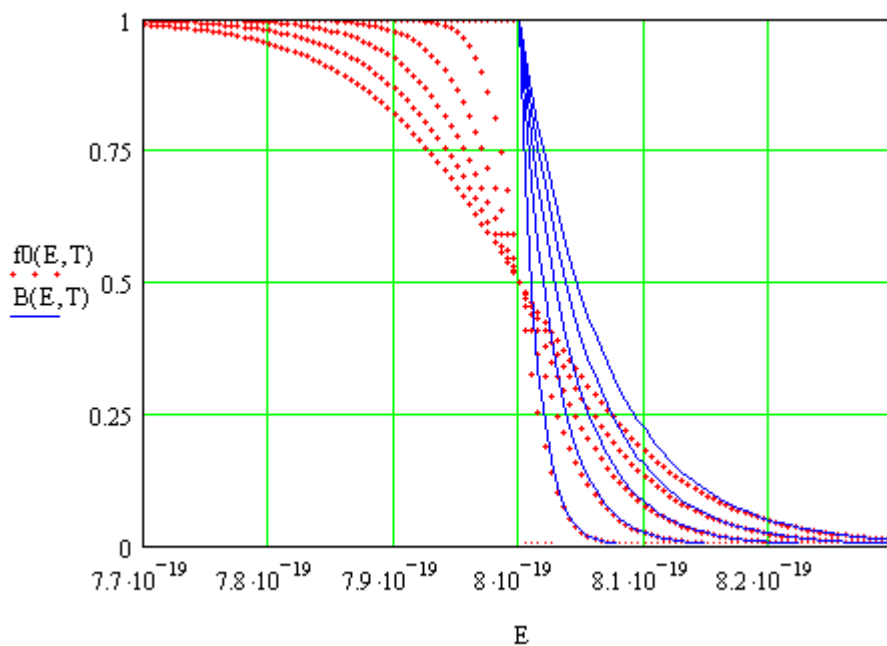
$$f(E, T) := \frac{1}{\frac{e^{\frac{E-F}{k \cdot T}}}{e^{\frac{E-F}{k \cdot T}} + 1}}$$

6. Užrašome Bolcmano pasiskirstymo funkciją:

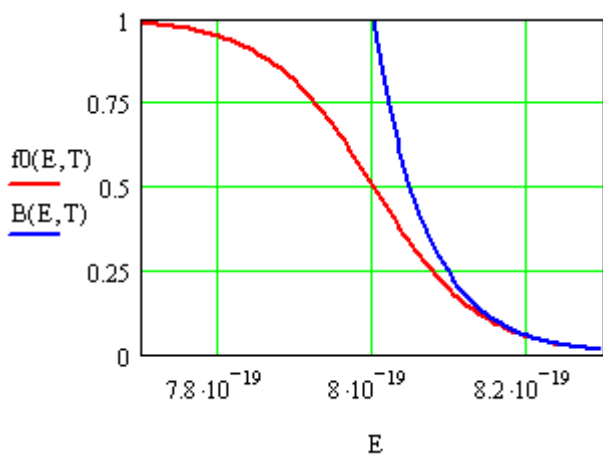
$$B(E, T) := e^{-\frac{E}{k \cdot T}} \cdot e^{-\frac{F}{k \cdot T}}$$

7. Braižome grafikus:

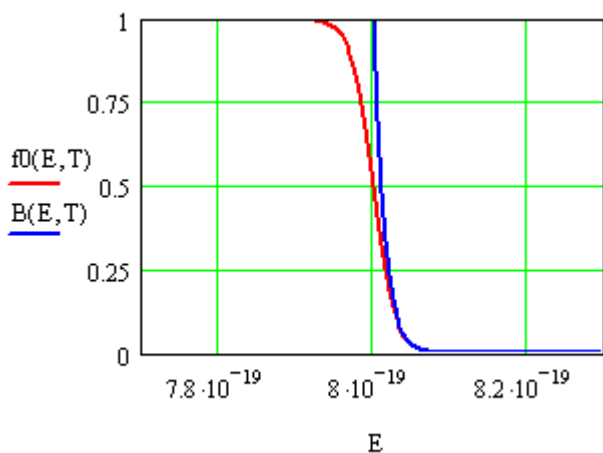
* Vartotojas gali keisti.



Jeigu norime šias dvi funkcijas palyginti detaliau, galime nagrinėti atskirus atvejus prie tam tikros temperatūros. Tarkim kai temperatūra $T = 500$ K, grafikai atrodys taip:



Kai temperatūra $T = 10$ K, gauname:



Fermi – Dirako ir Bolcmano skirstinių palyginimas 2

1. Įvedame uždaviniui išspręsti reikalingą Bolcmano k konstantą:

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

2. Kintamasis, kuriam skaičiuosime funkcijas:

$$\xi := \begin{pmatrix} -5 \\ -4 \\ -3 \\ -2 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix}$$

Čia $\xi := \frac{E - F}{kT}$.

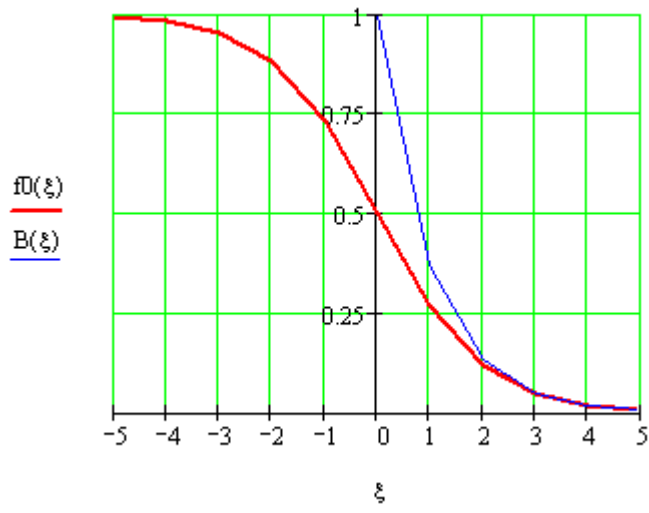
3. Užrašome Fermi – Dirako pasiskirstymo funkciją:

$$fD(\xi) := \frac{1}{e^{\xi} + 1}$$

4. Užrašome Bolcmano pasiskirstymo funkciją:

$$B(\xi) := e^{-\xi}$$

5. Braižome grafikus:



Fermi – Dirako skirstinio animavimas

1. Įvedame uždaviniui išspręsti reikalingas Planko h bei Bolcmano k konstantas:

$$h := 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

2. Energijų intervalas, kuriame bus ieškoma sprendinio:

$$E := 0.01 \cdot 10^{-19}, 0.015 \cdot 10^{-19} .. 1 \cdot 10^{-18} \text{ J}^*$$

3. Nurodome Fermi energiją (šiuo atveju metalams):

$$F := 8 \cdot 10^{-19} \text{ J}^*$$

4. Temperatūrų intervalas:

$$T := 5,100 .. 500 \text{ K}$$

5. Užrašome Fermi – Dirako pasiskirstymo funkciją:

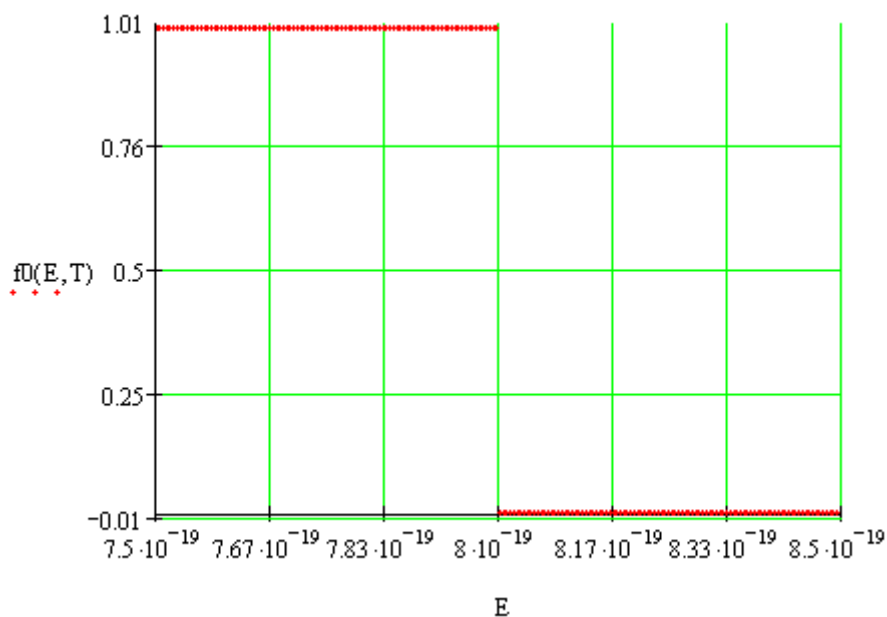
$$f(E, T) := \frac{1}{\frac{e^{\frac{E-F}{k \cdot T}}}{+ 1}}$$

6. Įvedame kintamąjį, pagal kurį programa apskaičiuos temperatūros T kitimą ir brėš grafiką:

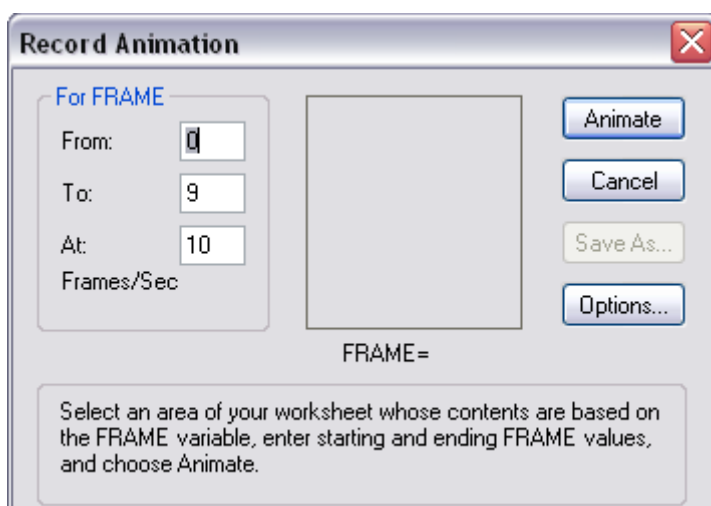
$$T := 100 \text{ FRAME}$$

7. Braižome grafiką:

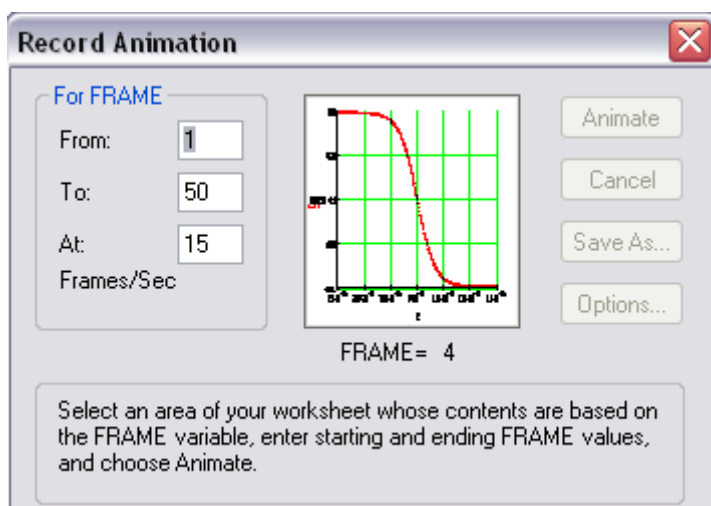
* Vartotojas gali keisti.



Norint peržiūrėti animaciją, reikia pasirinkti meniu Tools – Animation – Record ir, atsidarius langui, pažymėti nubrėžtą grafiką.



Tada pasirinkti kadrų skaičių (nuo kurio kadro vaizduoti kitimą, iki kurio kadro vaizduoti kitimą ir kiek kadrų rodyti per sekundę) ir spausti mygtuką Animate:



Tada gautą animaciją išsaugoti *.avi formatu, ir gautą failiuką bus galima peržiūrėti bet kuriuo kitu metu. Netgi ten, kur nebus programos Mathcad.

Elektroninių dujų koncentracija ir jos animavimas

1. Įvedame uždaviniui išspręsti reikalingas Planko h bei Bolcmano k konstantas:

$$h := 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

2. Įvedame elektrono rimties masę m_0 :

$$m_0 := 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg.}$$

3. Energijų intervalas, kuriame bus ieškoma sprendinio:

$$E := 0.01 \cdot 10^{-20}, 0.015 \cdot 10^{-20} .. 5 \cdot 10^{-19} \text{ J}^*$$

$$E := 0.01 \cdot 10^{-19}, 0.015 \cdot 10^{-19} .. 1 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

4. Nurodome Fermi energiją (šiuo atveju puslaidininkiams):

$$F := 1.6 \cdot 10^{-20} \text{ J}^*$$

$$F := 8 \cdot 10^{-19} \text{ J (metalams)}$$

5. Temperatūrų intervalas:

$$T := 5,100 .. 500 \text{ K}$$

6. Užrašome Fermi – Dirako pasiskirstymo funkciją bei būsenų tankio formulę::

$$f(E, T) := \frac{1}{\frac{e^{\frac{E-F}{k \cdot T}}}{+ 1}}$$

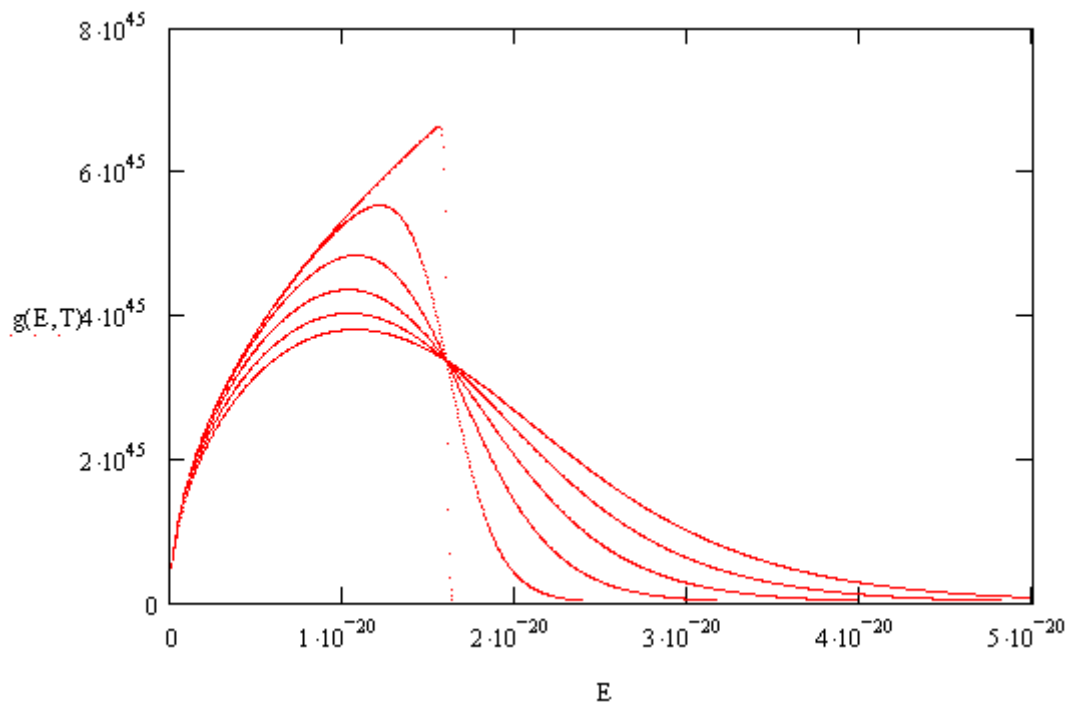
$$N(E) := \frac{2 \cdot \pi \cdot (2 \cdot m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \cdot E^{\frac{1}{2}}$$

7. Užrašome formulę, pagal kurią skaičiuosime elektroninių dujų koncentraciją:

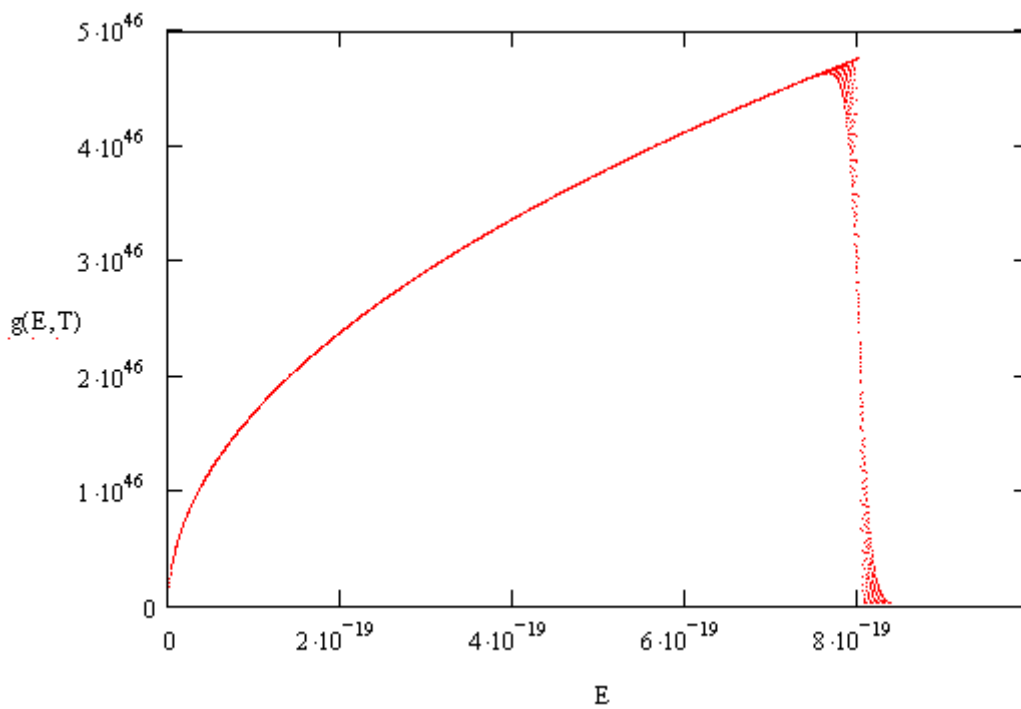
$$g(E, T) := N(E) \cdot f(E, T)$$

8. Braižome grafiką:

* Vartotojas gali keisti.



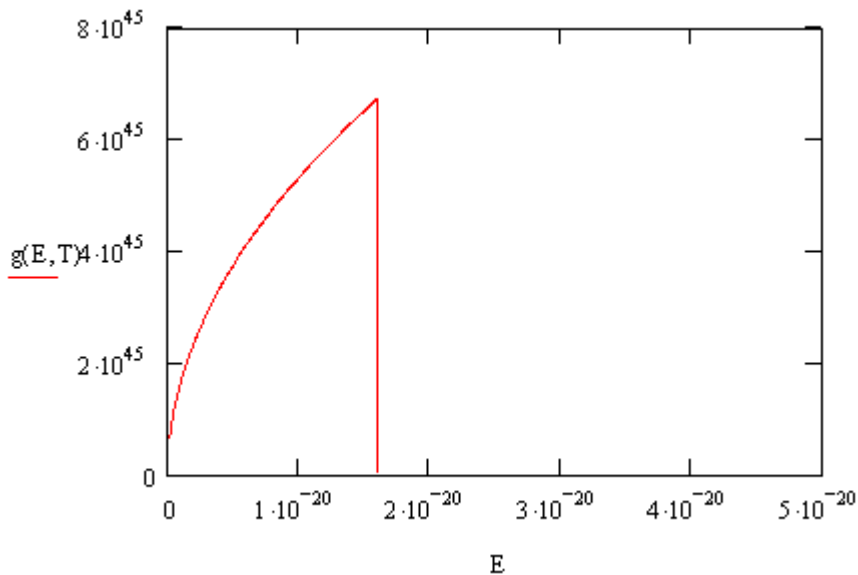
9. Braižome grafiką (metalams):



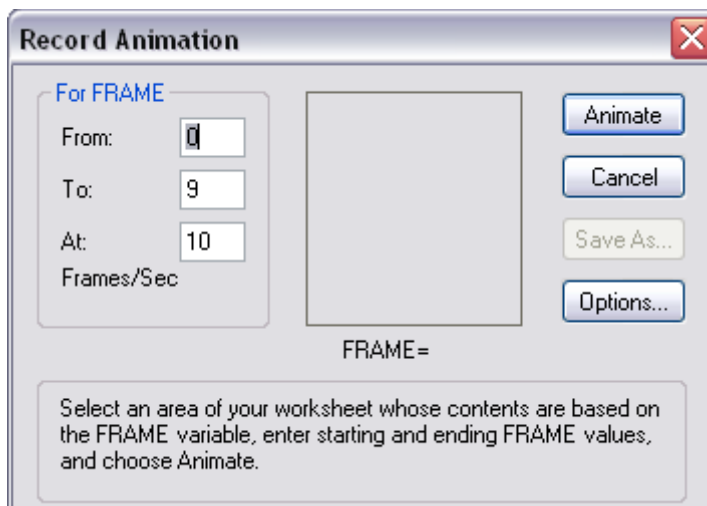
10. Įvedame kintamąjį, pagal kurį programa apskaičiuos temperatūros T kitimą ir brėš grafiką:

$T := 100 \text{FRAME}$

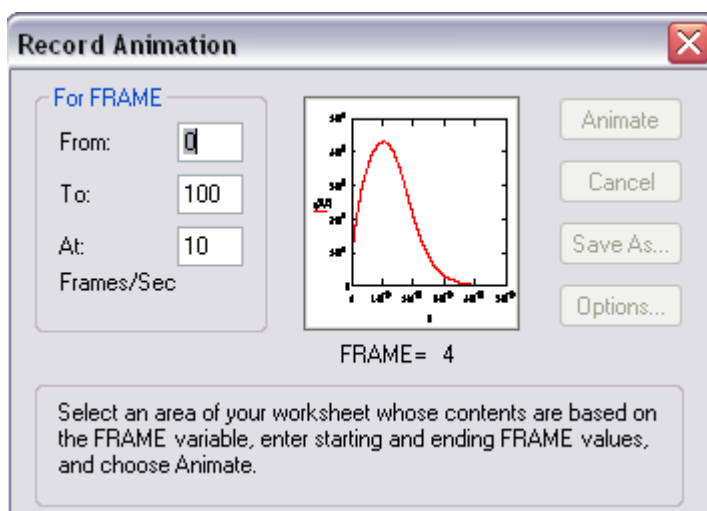
11. Braižome grafiką:



Norint peržiūrėti animaciją, reikia pasirinkti meniu Tools – Animation – Record ir, atsidarius langui, pažymėti nubrėžtą grafiką.



Tada pasirinkti kadrų skaičių (nuo kurio kadro vaizduoti kitimą, iki kurio kadro vaizduoti kitimą ir kiek kadrų rodyti per sekundę) ir spausti mygtuką Animate:



Tada gautą animaciją išsaugoti *.avi formatu, ir gautą failiuką bus galima peržiūrėti bet kuriuo kitu metu. Netgi ten, kur nebus programos Mathcad.

Fermi lygmuo ir krūvininkų koncentracija neišsigimusiam grynajame puslaidininkyje (GaAs)

1. Įvedame uždaviniui išspręsti reikalingas Planko h bei Bolcmano k konstantas:

$$h := 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

2. Įvedame elektrono rimties masę m_0 , efektinę elektrono m_n bei skylutės m_p mases:

$$m_0 := 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg},$$

$$m_n := 0.066 \cdot m_0,$$

$$m_p := 0.52 \cdot m_0.$$

Kiekvienam puslaidininkiui efektinė elektrono bei skylutės masės vertės yra skirtingos. Šiuo atveju imame vertes, būdingas galio arsenidui.

3. Nurodome draustinės juostos plotį:

$$\Delta E_0 := 2.29 \cdot 10^{-19} \text{ J}.$$

Kiekvienam puslaidininkiui draustinės juostos plotis yra skirtingas. Šiuo atveju imame galio arsenido draustinės juostos pločio vertę.

4. Temperatūrų intervalas, kuriame bus ieškoma sprendinio:

$$T := 200, 201 \dots 500 \text{ K}^*$$

5. Užrašome krūvininkų koncentracijos formulę:

$$n(T) := \sqrt{\frac{2 \cdot (2 \cdot \pi \cdot m_n \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \frac{2 \cdot (2 \cdot \pi \cdot m_p \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}} \cdot e^{\frac{-\Delta E_0}{2kT}}$$

Čia:

$$N_c(T) := \frac{2 \cdot (2 \cdot \pi \cdot m_n \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \quad ; \quad N_v(T) := \frac{2 \cdot (2 \cdot \pi \cdot m_p \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}$$

6. Paskaičiuotos N_c ir N_v bei n vertės kiekvienai temperatūros T vertei (ekrane matome tik pirmas vertes):

* Vartotojas gali keisti.

$N_c(T) =$

$2.311 \cdot 10^{23}$
$2.328 \cdot 10^{23}$
$2.345 \cdot 10^{23}$
$2.363 \cdot 10^{23}$
$2.38 \cdot 10^{23}$
$2.398 \cdot 10^{23}$
$2.415 \cdot 10^{23}$
$2.433 \cdot 10^{23}$
$2.451 \cdot 10^{23}$
$2.468 \cdot 10^{23}$
$2.486 \cdot 10^{23}$
$2.504 \cdot 10^{23}$
$2.522 \cdot 10^{23}$
$2.539 \cdot 10^{23}$
$2.557 \cdot 10^{23}$
$2.575 \cdot 10^{23}$

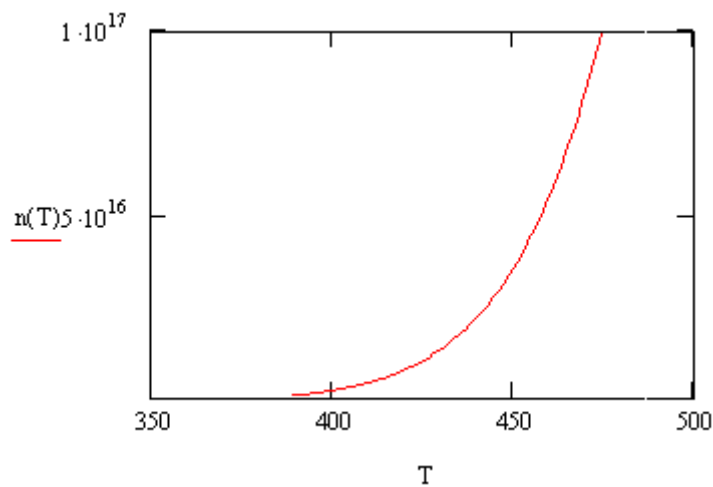
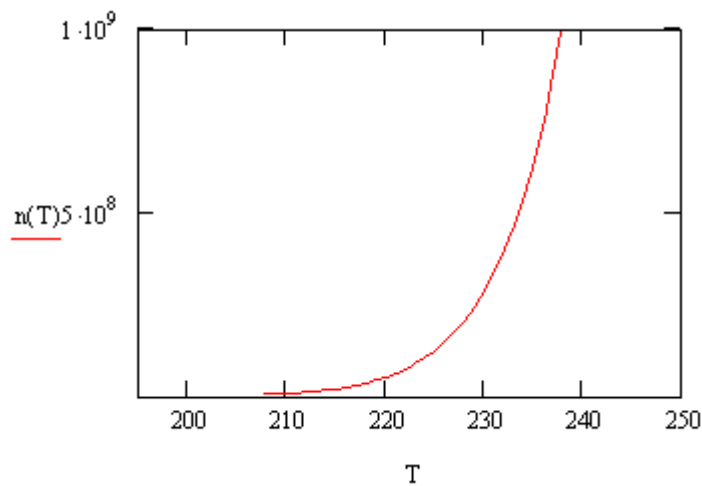
$N_v(T) =$

$5.11 \cdot 10^{24}$
$5.148 \cdot 10^{24}$
$5.187 \cdot 10^{24}$
$5.225 \cdot 10^{24}$
$5.264 \cdot 10^{24}$
$5.303 \cdot 10^{24}$
$5.341 \cdot 10^{24}$
$5.38 \cdot 10^{24}$
$5.419 \cdot 10^{24}$
$5.459 \cdot 10^{24}$
$5.498 \cdot 10^{24}$
$5.537 \cdot 10^{24}$
$5.577 \cdot 10^{24}$
$5.616 \cdot 10^{24}$
$5.656 \cdot 10^{24}$
$5.695 \cdot 10^{24}$

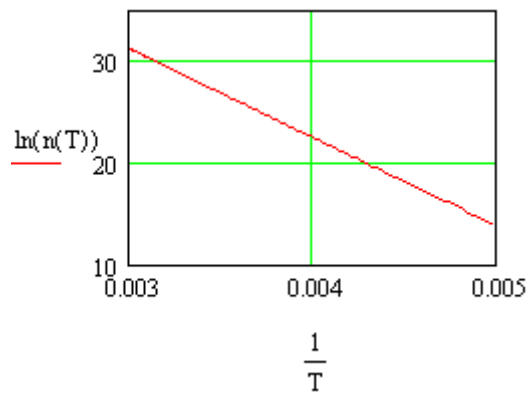
$n(T) =$

$1.045 \cdot 10^6$
$1.294 \cdot 10^6$
$1.6 \cdot 10^6$
$1.973 \cdot 10^6$
$2.428 \cdot 10^6$
$2.983 \cdot 10^6$
$3.657 \cdot 10^6$
$4.475 \cdot 10^6$
$5.466 \cdot 10^6$
$6.663 \cdot 10^6$
$8.107 \cdot 10^6$
$9.847 \cdot 10^6$
$1.194 \cdot 10^7$
$1.445 \cdot 10^7$
$1.745 \cdot 10^7$
$2.105 \cdot 10^7$

7. Braižome grafiką $n = f(T)$:



8. Braižome grafiką $\ln(n) = f\left(\frac{1}{T}\right)$:



Fermi lygmuo ir krūvininkų koncentracija neišsigimusiam grynajame puslaidininkyje (Si)

1. Įvedame uždaviniui išspręsti reikalingas Planko h bei Bolcmano k konstantas:

$$h := 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

2. Įvedame elektrono rimties masę m_0 , efektinę elektrono m_n bei skylutės m_p mases:

$$m_0 := 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg},$$

$$m_n := 1.18 \cdot m_0,$$

$$m_p := 0.81 \cdot m_0.$$

Kiekvienam puslaidininkiui efektinė elektrono bei skylutės masės vertės yra skirtingos.

Šiuo atveju imame vertes, būdingas siliciui.

3. Nurodome draustinės juostos plotį:

$$\Delta E_0 := 1.76 \cdot 10^{-19} \text{ J}.$$

Kiekvienam puslaidininkiui draustinės juostos plotis yra skirtingas. Šiuo atveju imame silicio draustinės juostos pločio vertę.

4. Temperatūrų intervalas, kuriame bus ieškoma sprendinio:

$$T := 200, 201 \dots 500 \text{ K}^*$$

5. Užrašome krūvininkų koncentracijos formulę:

$$n(T) := \sqrt{\frac{2 \cdot (2 \cdot \pi \cdot m_n \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \frac{2 \cdot (2 \cdot \pi \cdot m_p \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}} \cdot e^{\frac{-\Delta E_0}{2kT}}$$

Čia:

$$N_c(T) := \frac{2 \cdot (2 \cdot \pi \cdot m_n \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \quad ; \quad N_v(T) := \frac{2 \cdot (2 \cdot \pi \cdot m_p \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}$$

6. Paskaičiuotos N_c ir N_v bei n vertės kiekvienai temperatūros T vertei (ekrane matome tik pirmas vertes):

* Vartotojas gali keisti.

$N_c(T) =$

$1.747 \cdot 10^{25}$
$1.76 \cdot 10^{25}$
$1.773 \cdot 10^{25}$
$1.786 \cdot 10^{25}$
$1.799 \cdot 10^{25}$
$1.813 \cdot 10^{25}$
$1.826 \cdot 10^{25}$
$1.839 \cdot 10^{25}$
$1.853 \cdot 10^{25}$
$1.866 \cdot 10^{25}$
$1.879 \cdot 10^{25}$
$1.893 \cdot 10^{25}$
$1.906 \cdot 10^{25}$
$1.92 \cdot 10^{25}$
$1.933 \cdot 10^{25}$
$1.947 \cdot 10^{25}$

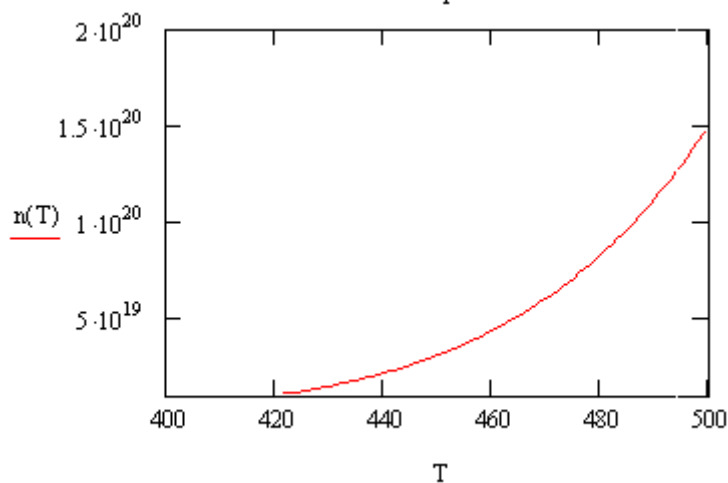
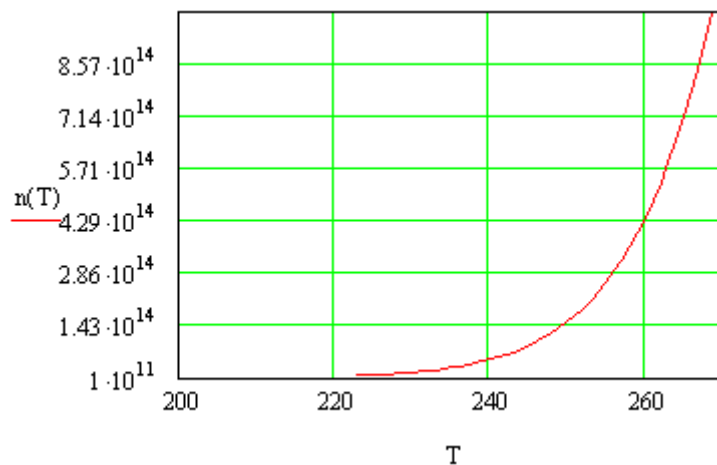
$N_w(T) =$

$9.934 \cdot 10^{24}$
$1.001 \cdot 10^{25}$
$1.008 \cdot 10^{25}$
$1.016 \cdot 10^{25}$
$1.023 \cdot 10^{25}$
$1.031 \cdot 10^{25}$
$1.038 \cdot 10^{25}$
$1.046 \cdot 10^{25}$
$1.054 \cdot 10^{25}$
$1.061 \cdot 10^{25}$
$1.069 \cdot 10^{25}$
$1.076 \cdot 10^{25}$
$1.084 \cdot 10^{25}$
$1.092 \cdot 10^{25}$
$1.1 \cdot 10^{25}$
$1.107 \cdot 10^{25}$

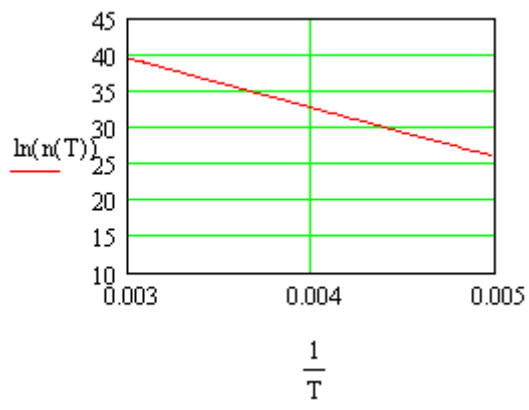
$n(T) =$

$1.873 \cdot 10^{11}$
$2.212 \cdot 10^{11}$
$2.607 \cdot 10^{11}$
$3.069 \cdot 10^{11}$
$3.606 \cdot 10^{11}$
$4.231 \cdot 10^{11}$
$4.956 \cdot 10^{11}$
$5.798 \cdot 10^{11}$
$6.772 \cdot 10^{11}$
$7.899 \cdot 10^{11}$
$9.2 \cdot 10^{11}$
$1.07 \cdot 10^{12}$
$1.243 \cdot 10^{12}$
$1.441 \cdot 10^{12}$
$1.669 \cdot 10^{12}$
$1.931 \cdot 10^{12}$

7. Braižome grafiką $n = f(T)$:



8. Braižome grafiką $\ln(n) = f\left(\frac{1}{T}\right)$:



Fermi lygmuo ir krūvininkų koncentracija neišsigimusiam grynajame puslaidininkyje (Ge)

1. Įvedame uždaviniui išspręsti reikalingas Planko h bei Bolcmano k konstantas:

$$h := 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

2. Įvedame elektrono rimties masę m_0 , efektinę elektrono m_n bei skylutės m_p mases:

$$m_0 := 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg},$$

$$m_n := 0.55 \cdot m_0,$$

$$m_p := 0.36 \cdot m_0.$$

Kiekvienam puslaidininkiui efektinė elektrono bei skylutės masės vertės yra skirtingos. Šiuo atveju imame vertes, būdingas germaniui.

3. Nurodome draustinės juostos plotį:

$$\Delta E_0 := 1.12 \cdot 10^{-19} \text{ J}.$$

Kiekvienam puslaidininkiui draustinės juostos plotis yra skirtingas. Šiuo atveju imame germanio draustinės juostos pločio vertę.

4. Temperatūrų intervalas, kuriame bus ieškoma sprendinio:

$$T := 200, 201 \dots 500 \text{ K}^*$$

5. Užrašome krūvininkų koncentracijos formulę:

$$n(T) := \sqrt{\frac{2 \cdot (2 \cdot \pi \cdot m_n \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \frac{2 \cdot (2 \cdot \pi \cdot m_p \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}} \cdot e^{\frac{-\Delta E_0}{2kT}}$$

Čia:

$$N_c(T) := \frac{2 \cdot (2 \cdot \pi \cdot m_n \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \quad ; \quad N_v(T) := \frac{2 \cdot (2 \cdot \pi \cdot m_p \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}$$

6. Paskaičiuotos N_c ir N_v bei n vertės kiekvienai temperatūros T vertei (ekrane matome tik pirmas vertes):

* Vartotojas gali keisti.

$N_{\alpha}(T) =$

5.558·10 ²⁴
5.6·10 ²⁴
5.642·10 ²⁴
5.684·10 ²⁴
5.726·10 ²⁴
5.768·10 ²⁴
5.81·10 ²⁴
5.853·10 ²⁴
5.895·10 ²⁴
5.938·10 ²⁴
5.98·10 ²⁴
6.023·10 ²⁴
6.066·10 ²⁴
6.109·10 ²⁴
6.152·10 ²⁴
6.195·10 ²⁴

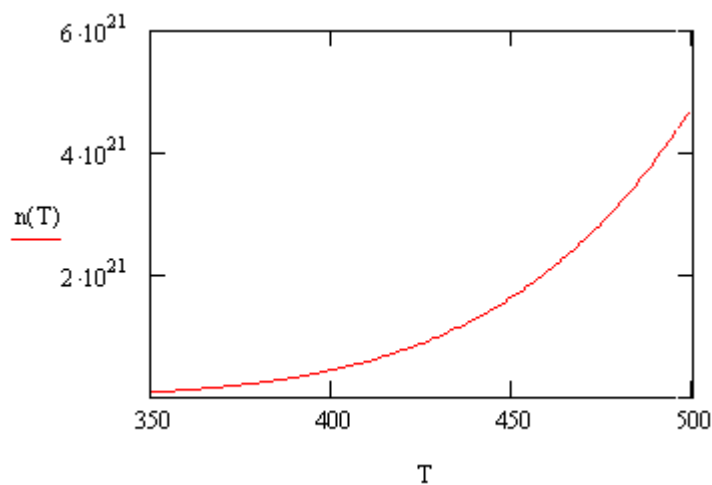
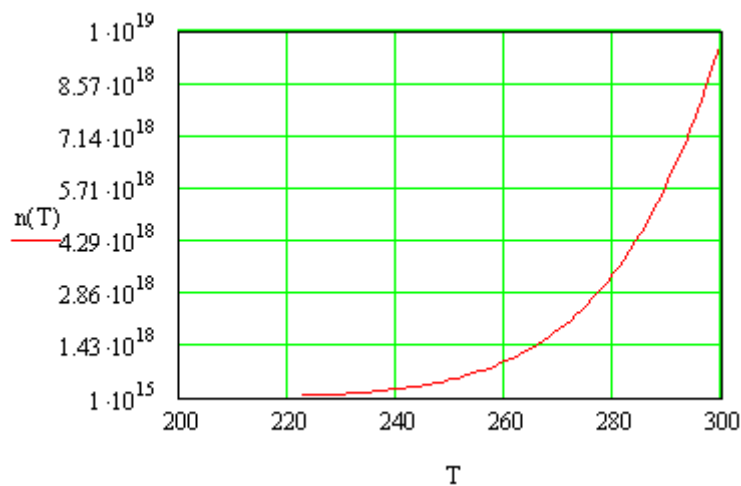
$N_{\nu}(T) =$

2.943·10 ²⁴
2.966·10 ²⁴
2.988·10 ²⁴
3.01·10 ²⁴
3.032·10 ²⁴
3.054·10 ²⁴
3.077·10 ²⁴
3.099·10 ²⁴
3.122·10 ²⁴
3.144·10 ²⁴
3.167·10 ²⁴
3.19·10 ²⁴
3.212·10 ²⁴
3.235·10 ²⁴
3.258·10 ²⁴
3.281·10 ²⁴

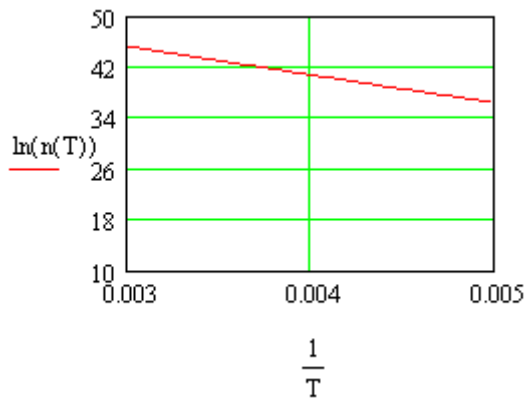
$n(T) =$

6.239·10 ¹⁵
6.954·10 ¹⁵
7.742·10 ¹⁵
8.611·10 ¹⁵
9.568·10 ¹⁵
1.062·10 ¹⁶
1.178·10 ¹⁶
1.305·10 ¹⁶
1.444·10 ¹⁶
1.597·10 ¹⁶
1.764·10 ¹⁶
1.947·10 ¹⁶
2.147·10 ¹⁶
2.366·10 ¹⁶
2.604·10 ¹⁶
2.864·10 ¹⁶

7. Braižome grafiką $n = f(T)$:

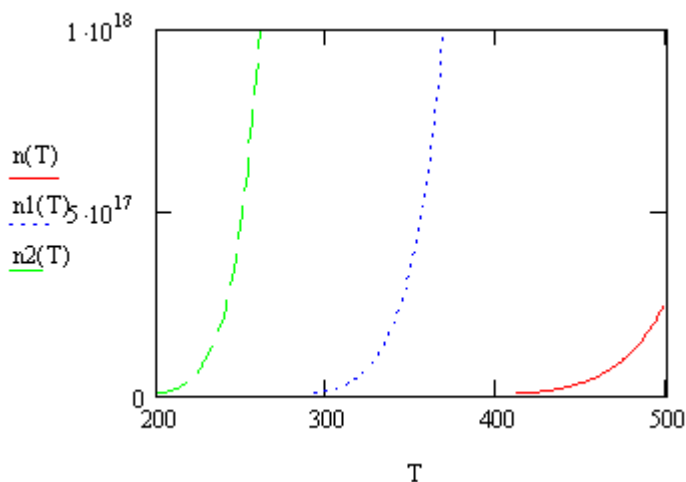


8. Braižome grafiką $\ln(n) = f\left(\frac{1}{T}\right)$:



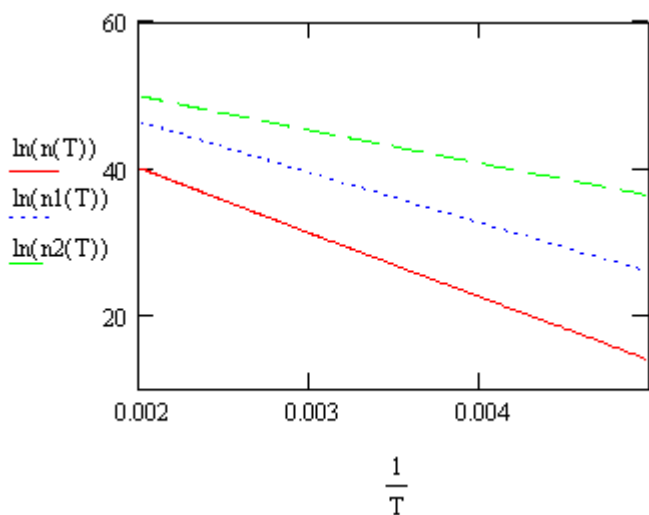
Fermi lygmuo ir krūvininkų koncentracija neišsigimusiam grynajame puslaidininkyje (palyginimas)

1. Pasinaudojame duomenimis, pateiktais 10, 11 ir 12 prieduose.
2. Braižome $n = f(T)$ grafikus kiekvienam puslaidininkiui:



Čia žalia linija žymi germanį, mėlyna – silicį, raudona – galio arsenidą.

3. Braižome $\ln(n) = f\left(\frac{1}{T}\right)$ grafikus:



Čia žalia linija žymi germanį, mėlyna – silicį, raudona – galio arsenidą.

4. Gautus grafikus palyginame.

Fermi lygmuo ir krūvininkų koncentracija GaAs puslaidininkyje, turinčiame donorinių priemaišų

1. Įvedame uždaviniui išspręsti reikalingas Planko h bei Bolcmano k konstantas:

$$h := 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

2. Įvedame elektrono rimties masę m_0 , efektinę elektrono m_n bei skylutės m_p mases:

$$m_0 := 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg},$$

$$m_n := 0.066 \cdot m_0,$$

$$m_p := 0.52 \cdot m_0.$$

3. Nurodome donoro jonizacijos energiją:

$$\Delta E := 0.48 \cdot 10^{-20} \text{ J}.$$

4. Temperatūrų T_1 intervalas, kuriame bus ieškoma sprendinio:

$$T_1 := 10, 11 \dots 200 \text{ K}^*$$

5. Donorų tankis puslaidininkyje:

$$N_d := 10^{22}.$$

6. Užrašome krūvininkų koncentracijos formulę priemaišinio laidumo sričiai:

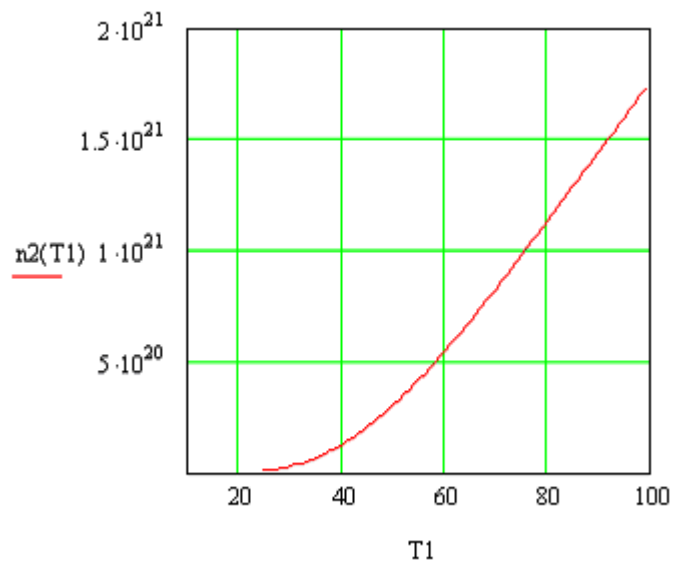
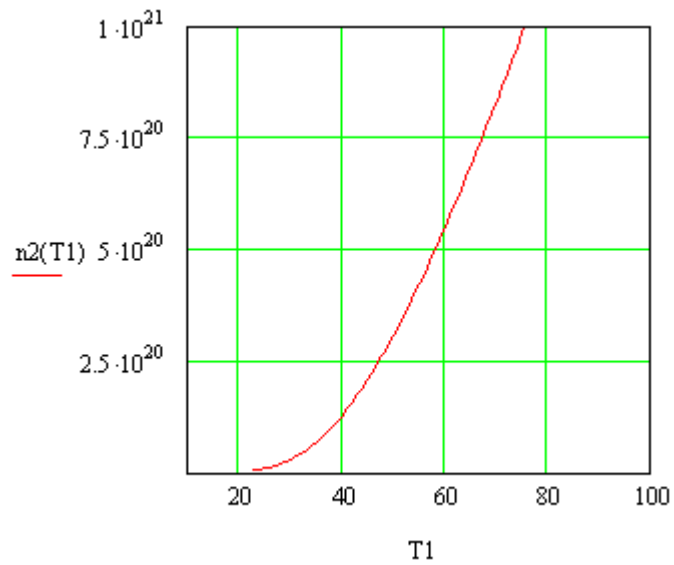
$$n_1(T_1) := \sqrt{\frac{2 \cdot (2 \cdot \pi \cdot m_n \cdot k \cdot T_1)}{h^3} \cdot \frac{N_d}{2} \cdot e^{\frac{-\Delta E}{2kT_1}}}$$

7. Paskaičiuojame n_2 vertes kiekvienai temperatūros T vertei (ekrane matome tik pirmas vertes):

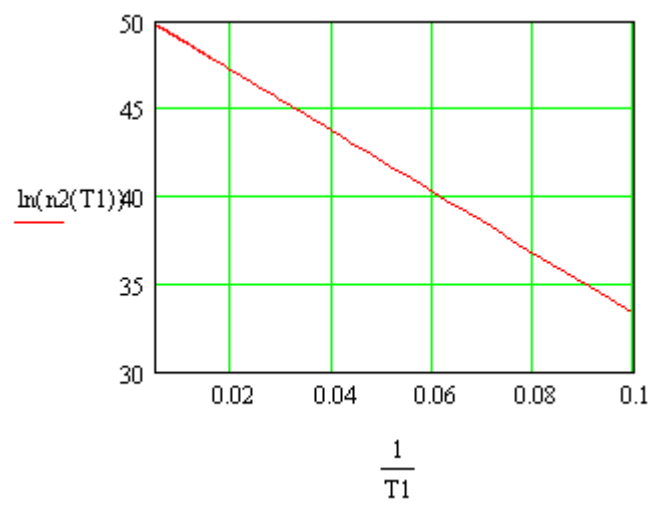
$n_2(T_1) =$

$2.799 \cdot 10^{14}$
$1.36 \cdot 10^{15}$
$5.08 \cdot 10^{15}$
$1.549 \cdot 10^{16}$
$4.028 \cdot 10^{16}$
$9.219 \cdot 10^{16}$
$1.903 \cdot 10^{17}$
$3.607 \cdot 10^{17}$
$6.367 \cdot 10^{17}$
$1.059 \cdot 10^{18}$
$1.673 \cdot 10^{18}$
$2.531 \cdot 10^{18}$
$3.688 \cdot 10^{18}$
$5.201 \cdot 10^{18}$
$7.128 \cdot 10^{18}$
$9.524 \cdot 10^{18}$

8. Braižome grafiką $n_2 = f(T_1)$:



9. Braižome grafiką $\ln(n_2) = f\left(\frac{1}{T_1}\right)$:



Kompaktinis diskas su sprendimais