

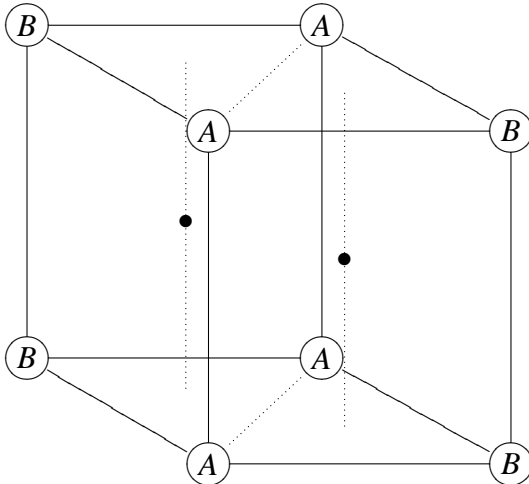
U siječnju 2001. godine otkrivena je nova vrsta visokotemperaturnog supravodiča (MgB<sub>2</sub>) čija je kristalna struktura prikazana na Sl.1. Vertikalna udaljenost dvaju magnezijevih slojeva je  $c=3,521 \text{ \AA}$  a udaljenost magnezijevih atoma unutar slojeva je  $a=3,083 \text{ \AA}$ . Temperatura supravodljivog prelaza je  $T_c \geq 39 \text{ K}$ .

**Zadatak 1.**

- Koju vrstu kristalne rešetke ima MgB<sub>2</sub> ?
- Nacrtati jednostavnu ćeliju MgB<sub>2</sub> !
- Odrediti broj iona magnezija i bora u jednostavnoj ćeliji !
- Izračunati (najkraću) udaljenost između iona magnezija i bora ! Izračunati omjer te udaljenosti i parametra  $a$  !
- Izračunati broj jednostavnih ćelija u jednom kubičnom centimetru !

**Rješenje:**

- (a) Kristalna rešetka  $MgB_2$  je heksagonska.



- (b)
- (c) Ioni magnezija u vrhovima jednostavne ćelije označeni sa slovom "A" doprinose s  $2/12$  ukupnom broju iona, dok oni označeni s "B" doprinose s  $1/12$  ukupnom broju iona. Dakle ukupni broj magnezijevih iona je:  $4 \cdot 2/12 + 4 \cdot 1/12 = 1$ . Ioni bora nalaze se u unutrašnjosti jednostavne ćelije pa ih ima dva.

U jednostavnoj ćeliji nalaze se 2 borova iona i 1 ion magnezija !

- (d) Borov ion se nalazi iznad težišta istostraničnog trokuta kojeg čine magnezijevi ioni. Udaljenost težišta od vrha trokuta je  $2/3$  visine istostraničnog trokuta, dakle:

$$(2/3) \cdot a\sqrt{3}/2 = a\sqrt{3}/3.$$

Udaljenost borovog iona od težišta je polovica parametra  $c$ . Dakle udaljenost iona bora i magnezija je:

$$d_{Mg-B} = \sqrt{\frac{c^2}{4} + \frac{a^2}{3}} = 2,504 \text{ \AA}.$$

Udaljenost  $d_{Mg-B} = 2,504 \text{ \AA}$ . Omjer  $d_{Mg-B}/a = 0,812$ .

- (e) Broj jednostavnih ćelija dan je omjerom volumena jednog kubičnog centimetra i volumena jednostavne ćelije. Volumen jednostavne ćelije je produkt visine  $c$  i površine romba koji je baza jednostavne ćelije. A površina baze je produkt stranice  $a$  i visine koja je jednaka  $a\sqrt{3}/2$ . Dakle volumen je jednak:

$$V = c \cdot a^2 \sqrt{3}/2 = 28,98 \text{ \AA}^3 = 28,98 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3.$$

Omjer volumena je:

$$\frac{1 \text{ cm}^3}{28,98 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3} = 3,45 \cdot 10^{22}.$$

Broj jednostavnih ćelija u jednom kubičnom centimetru je  $3,45 \cdot 10^{22}$ .

## Zadatak 2.

Ako se supravodič  $\text{MgB}_2$  pripremi s čistim izotopima borovih atoma, mjerenja temperature prelaza daju ove rezultate:

Atomska težina izotopa (amu)	temperatura prelaza (K)
11	39,16
10	40,21

Odrediti koeficijent izotopnog efekta  $\alpha$  uzimajući u obzir da je efektivna masa u izrazu za  $T_c$ :

- (a) samo težinu izotopa bora,
- (b) ukupnu težinu jednostavne ćelije.

Diskutirati dobivene rezultate !

---

## Rješenje:

Veza između temperature supravodljivog prelaza i mase iona dana je s ovom relacijom:

$$T_c \sim M^{-\alpha}.$$

Logaritmiranjem relacije dobivamo:

$$\ln T_c = -\alpha \cdot \ln M + \text{const.}$$

gdje je *const.* logaritam konstante proporcionalnosti. Odavde izlazi:

$$\alpha = -\frac{\Delta \ln T_c}{\Delta \ln M} = -\frac{\ln(T_{c1}/T_{c2})}{\ln(M_1/M_2)}.$$

Ako se radi o malim promjenama temperature i mase onda se logaritam može razviti u red. Neka je:

$$M_{1/2} = \bar{M} \pm 0,5 \delta M,$$

pa je

$$\ln(M_1/M_2) = \ln \frac{\bar{M} + 0,5 \delta M}{\bar{M} - 0,5 \delta M} \approx \frac{\delta M}{\bar{M}}.$$

Slični se izraz dobiva i za logaritam odnosa temperatura. Konačno dobivamo:

$$\alpha = -\frac{\delta T_c / \bar{T}_c}{\delta M / \bar{M}}$$

(a)  $\alpha \approx 0,28$

(b) Atomska masa jednostavne ćelije je:  $24,3 + 2 \cdot 11 = 46,3$  amu, odnosno  $44,3$  amu.

Pa se dobiva:  $\alpha \approx 0,60$

Iznos koeficijenta izotopnog efekta ovisi o izboru efektivne mase. Efektivna masa u izrazu za  $T_c$  je *usrednjena masa* preko raznih fononskih titranja koja utječu na supravodljivost. Jednoznačni rezultat se dobiva samo za monoatomne tvari. Osim toga i kulonske odbojne sile utječu na iznos koeficijenta, pa je on obično manji od 0.5 koliko predviđa BCS teorija.

### Zadatak 3.

Energija jedne od elektronskih vrpca u MgB<sub>2</sub> supravodiču može se približno opisati ovim izrazom:

$$E(\vec{k}) = -t_1 \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{a \cdot k_y}{2}\right) \cdot \left(\cos\left(\frac{a \cdot k_y}{2}\right) + \cos\left(\frac{a \cdot k_x \sqrt{3}}{2}\right)\right)} - 2 t_2 \cos(c \cdot k_z),$$

gdje su  $t_1 = 1,60$  eV i  $t_2 = 0,92$  eV. Izračunati tenzor efektivne mase elektrona za valni vektor  $\vec{k} = (0,0,0)$ .

( $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34}$  Js,  $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31}$  kg,  $1\text{eV} = 1,60 \cdot 10^{-19}$  J.)

### Rješenje:

Tenzor inverzne efektivne mase dan je drugim derivacijama energije po valnom vektoru:

$$\left(\frac{1}{m_{eff}}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}$$

Druge derivacije energije  $E(\vec{k})$  su složene funkcije koje se tek pojednostave uvrštenjem valnog vektora za koji se te derivacije računaju. Umjesto da izračunavamo ove složene izraze, moguće je izraz za energiju na samom početku pojednostaviti razvijanjem u red potencija po valnom vektoru do članova drugog reda i tek nakon toga izračunati derivacije koje se traže.

Dakle energiju razvijamo oko točke  $\vec{k} = (0,0,0)$ , što znači da su komponente valnog vektora male veličine:  $k_i \ll \pi/a, \pi/c$ ,  $i = x, y, z$ . U izrazu za energiju pojavljuju se kosinusi komponenti valnog vektora koji se mogu razviti na poznati način:

$$\cos(x) \approx 1 - \frac{x^2}{2}.$$

Izraz koji se nalazi pod korijenom u izrazu za energiju može se aproksimirati ovako:

$$\begin{aligned} 1 + 4 \left(1 - \frac{(ak_y)^2}{8}\right) \left(2 - \frac{(ak_y)^2}{8} - \frac{3(ak_x)^2}{8}\right) &\approx 1 + 8 \left(1 - 3 \frac{(ak_y)^2 + (ak_x)^2}{16}\right) \\ &= 9 \left(1 - \frac{(ak_y)^2 + (ak_x)^2}{6}\right). \end{aligned}$$

Stoga je konačni razvoj energije oko točke  $\vec{k} = (0,0,0)$  dana ovim izrazom:

$$E(\vec{k}) \approx -3t_1 - 2t_2 + t_1 \frac{(ak_y)^2 + (ak_x)^2}{4} + t_2 (ck_z)^2$$

Oдавde izlazi da je tenzor efektivne mase elektrona dijagonalna matrica, te da su mase u x i y smjeru iste i jednake

$$m_{xx} = m_{yy} = \frac{2\hbar^2}{t_1 a^2} = \frac{2(1,055)^2 10^{-68} \text{J}^2 \text{s}^2}{1,60 \cdot 1,60 \cdot 10^{-19} \text{J} (3,083)^2 10^{-20} \text{m}^2} = 9,15 \cdot 10^{-31} \text{kg} = 1,004 m_e,$$

dok je masa u z smjeru jednaka

$$m_{zz} = \frac{\hbar^2}{2t_2 c^2} = \frac{(1,055)^2 10^{-68} \text{J}^2 \text{s}^2}{2 \cdot 0,92 \cdot 1,60 \cdot 10^{-19} \text{J} (3,521)^2 10^{-20} \text{m}^2} = 3,05 \cdot 10^{-31} \text{kg} = 0,325 m_e.$$

Tenzor efektivne mase elektrona za valni vektor  $\vec{k} = (0,0,0)$  je dijagonalna matrica, gdje su  $m_{xx} = m_{yy} = 1,004 m_e$ , a  $m_{zz} = 0,325 m_e$ .