Pismeni ispit iz OFČS - 5. rujna 2003.

Zadatak 1. Kristalna struktura bakra je plošno centrirana kubna rešetka, konstante a = 3,61 Å.

a) Izračunati udaljenost između kristalografskih ravnina (1 1 1)!

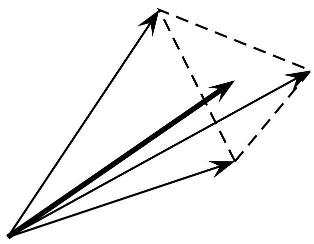
b) Koju minimalnu frekvenciju trebaju imati rendgenske zrake da bi imali Braggovu refleksiju pod kutom $\vartheta = 45°$ na ravninama (1 1 1).

Rješenje:

a) Ravnina (1 1 1) definirana je odrescima na kristalografskim osama koji iznose redom: $1{\cdot}\vec{a}_1$, $1{\cdot}\vec{a}_3$, $1{\cdot}\vec{a}_3$. U slučaju plošno centrirane kubne rešetke, vrijedi:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix} \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix} \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}.$$

Da bi odredili udaljenost između kristalografskih ravnina potrebno je naći pravac okomit na ravnine te odrediti koordinate točaka presjecišta tog pravca i kristalografskih ravnina. Neka je to pravac koji prolazi kroz ishodište koordinatnog sustava. U slučaju plošno centrirane kubne rešetke, stvar je dosta jednostavna jer sva tri translacijska vektora su međusobno simetrična, te njihovi vrhovi leže na (1 1 1) kristalografskoj ravnini i međusobno čine jednakostranični trokut. A traženi pravac prolazi središtem prostornog kuta koji translacijski vektori zatvaraju



i presijeca ravninu u središtu trokuta (težištu) čije su koordinate dane aritmetičkom sredinom koordinata vrhova trokuta. Prema tome koordinate presjecišta su zadane radijus vektorom:

$$\vec{a}_T \;=\; \frac{1}{3}\,(\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3) \;=\; \frac{a}{3}\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$$

Iznos tog vektora je ujedno i tražena udaljenost između kristalografskih ravnina:

$$d \;=\; a\,\frac{\sqrt{3}}{3} \;=\; 3,61\text{ Å}\,\frac{\sqrt{3}}{3} \;=\; 2,084\text{ Å}.$$

b) Prema Braggovom uvjetu treba biti zadovoljeno:

$$n\,\lambda = 2\,d\,\sin\vartheta$$

Minimalna frekvencija znači maksimalna valna duljina, tj $n = 1$, pa je tražena frekvencija dana ovim izrazom:

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{c}{2\,d\,\sin\vartheta} = \frac{3\;10^8\ \text{m/s}}{2\cdot 2{,}084\;10^{-10}\ \text{m}\ \frac{\sqrt{2}}{2}} = 1{,}01\;10^{18}\ \text{Hz}.$$

Zadatak 2. Kvazijednodimenzionalni kristal sadrži lance izgrađene iona platine i klora. Ako je frekvencijski procijep između akustičkih i optičkih fonona 9 THz , izračunati:

a) Konstantu elastičnosti β između iona platine i klora. Rezultat iskazati u jedinicama eV/Å^2.

b) Brzinu širenja akustičkih titranja ako je konstanta rešetke a = 2,7 Å.

(M_{Pt} = 195 amu, M_{Cl} = 35,5, amu = 1,66 10^{-27} kg, 1eV = 1,60 10^{-19} J)

Rješenje:

a) Frekvencija titranja linearne rešetke s dva atoma dana je relacijom:

$$\omega_{\pm}^2(k) = \beta\frac{M_{Pt}+M_{Cl}}{M_{Pt}M_{Cl}}\left[1 \pm \sqrt{1 - 4\,\frac{M_{Pt}M_{Cl}}{(M_{Pt}+M_{Cl})^2}\sin^2\frac{ka}{2}}\right].$$

Frekvencijski procijep dan je razlikom frekvencija na rubu Brillouinove zone: $k = \pi/a$:

$$\omega_{\pm}^2(\frac{\pi}{a}) = \beta\frac{M_{Pt}+M_{Cl}}{M_{Pt}M_{Cl}}\left[1 \pm \sqrt{1 - 4\,\frac{M_{Pt}M_{Cl}}{(M_{Pt}+M_{Cl})^2}}\right] = \begin{cases} \dfrac{2\beta}{M_{Pt}} \\ \dfrac{2\beta}{M_{Cl}} \end{cases}$$

Prema tome frekvencijski procijep $\Delta\omega$ je jednak:

$$\Delta\omega = \sqrt{\frac{2\beta}{M_{Cl}}} - \sqrt{\frac{2\beta}{M_{Pt}}},$$

odnosno konstanta elastičnosti je:

$$\beta = 0{,}5\cdot\frac{(\Delta\omega)^2}{(\frac{1}{\sqrt{M_{Cl}}} - \frac{1}{\sqrt{M_{Pt}}})^2}$$

Uvrštavanjem zadanih podataka dobivamo:

$$\begin{aligned}\beta &= 0{,}5\cdot\frac{81\;10^{24}\ \text{s}^{-2}\ 1{,}66\;10^{-27}\ \text{kg}}{(\frac{1}{\sqrt{35{,}5}} - \frac{1}{\sqrt{195}})^2} = 7{,}26\ \text{kg/s}^2\ 10^{-20}\ \text{m}^2\ \frac{1}{1{,}60}\ 10^{19}\ \text{J}^{-1}\text{eV/Å}^2 \\ &= 0{,}453\ \text{eV/Å}^2\end{aligned}$$

b) Brzina širenja akustičkih titranja dana je izrazom:

$$v_0 = a\sqrt{\frac{\beta}{2(M_{Pt}+M_{Cl})}},$$

iz čega slijedi da je:

$$v_0 = 2,7\ 10^{-10}\ \mathrm{m}\sqrt{\frac{7,26\ \mathrm{kg/s^2}}{2\ (195+35,5)\ 1,66\ 10^{-27}\ \mathrm{kg}}} = 832\ \mathrm{m/s}.$$

Zadatak 3. Neka je Paulijeva susceptibilnost elektronskog plina jednaka 5,0 10^{-6}. Koristeći Sommerfeldov model izračunati:

a) Gustoću stanja na Fermijevom novou u jedinicama $\mathrm{eV}^{-1}\ \mathrm{m}^{-3}$.

b) Srednji valni broj svih elektrona (njegov iznos $\overline{|\vec{k}|}$).

($\hbar$ = 1,055 10^{-34} Js, m_e = 9,11 10^{-31} kg, μ_B = 9,27 10^{-24} J T^{-1}, $\mu_0 = 4\pi\ 10^{-7}$ H m^{-1}
gdje su H = kg $\mathrm{m}^2\ \mathrm{s}^{-2}\ \mathrm{A}^{-2}$, T = kg $\mathrm{s}^{-2}\ \mathrm{A}^{-1}$)

Rješenje:

a) Paulijeva susceptibilnost elektronskog plina je jednaka:

$$\chi_P = \mu_0\,\mu_B^2\,\mathrm{g}(\mathrm{E}_F),$$

pa je gustoća stanja na Fermijevom novou:

$$\begin{aligned}\mathrm{g}(\mathrm{E}_F) &= \frac{\chi_P}{\mu_0\,\mu_B^2} = \frac{5,0\ 10^{-6}}{4\pi\ 10^{-7}\cdot(9,27)^2\ 10^{-48}\ \mathrm{J\ m^3}} = \frac{5,0\ 10^{-6}\cdot 1,6\ 10^{-19}}{4\pi\ 10^{-7}\cdot(9,27)^2\ 10^{-48}\ \mathrm{eV\ m^3}}\\ &= 7,40\ 10^{27}\mathrm{eV^{-1}m^{-3}}.\end{aligned}$$

b) Srednji valni broj se dobiva usrednjavanjem preko svih popunjenih kvantnih stanja:

$$\overline{|\vec{k}|} = \overline{k} = \frac{\int_0^{k_F} d^3k|\vec{k}|}{\int_0^{k_F} d^3k} = \frac{\int_0^{k_F} dk k^3}{\int_0^{k_F} dk k^2} = \frac{3}{4}\,k_F$$

Dakle, treba poznavati Fermijev valni broj. On se pak može izračunati iz već izračunate gustoće stanja:

$$\mathrm{g}(\mathrm{E}_F) = \frac{m\,k_F}{\pi^2\hbar^2}.$$

Dakle:

$$\begin{aligned}\overline{k} &= \frac{3}{4\,m}\,\pi^2\hbar^2\,\mathrm{g}(\mathrm{E}_F) = \frac{3}{4\,9,11\ 10^{-31}\mathrm{kg}}\,\pi^2(1,055)^2\ 10^{-68}\ \mathrm{J^2\ s^2}\,\frac{7,40\ 10^{27}\ \mathrm{J^{-1}\ m^{-3}}}{1,6\ 10^{-19}}\\ &= 4,19\ 10^9\mathrm{m^{-1}}.\end{aligned}$$