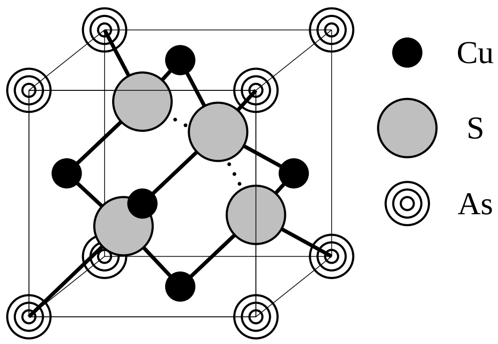
Pismeni ispit iz OFČS - 18. lipnja 2004.

Zadatak 1.



Na slici prikazana je elementarna ćelija minerala $AsCu_3S_4$. Konstanta rešetke je 5,28 Å.

a) Kojoj vrsti Bravaisove rešetke pripada navedena elementarna ćelija ?

b) Izračunati gustoću kristala minerala $AsCu_3S_4$!

c) Koji je koordinacijski broj sumpora i koji su mu najbliži susjedni ioni ?

(1 amu = 1,66 10^{-27} kg, M_S = 32,07 amu, M_{Cu} = 63,55 0 amu, M_{As} = 74,92 amu)

Rješenje:

a) Jednostavna kubna rešetka

b) U ćeliji se nalaze jedan atom arsena, tri atoma bakra i četiri atoma sumpora. Gustoća je:

$$\rho = \frac{1,6610^{-27}\ \mathrm{kg}\ (74,92 + 3\cdot 63,55 + 4\cdot 32,07)}{5,28^3\ 10^{-30}\ \mathrm{m}^3} \ = \ 4,442\ 10^3\ \mathrm{kg/m}^3$$

c) Koordinacijski broj sumpora je 4. Okružen je s 3 iona bakra te jednim arsena.

Zadatak 2. Neka je energijski spektar elektrona u prvoj Brillouinovoj dan ovim izrazom:

$$E(\vec{k}) \ = \ -J\left(\cos(k_x a) \ + \ \cos(k_y a) + \cos(k_z a)\right)$$

a) Odrediti energiju dna i vrha Brillouinove zone !

b) Odrediti približni izraz za energijski spektar oko vrha Brillouinove zone. Koji je (približni) oblik Fermijeve površine ako je Brillouinova zona 95% popunjena s elektronima (5% šuplina) ?

c) Izračunati Fermijev valni vektor šupljinske Fermijeve površine za 95% popunjenu Brillouinovu zonu.

d) Izračunati srednju elektronsku energiju za 95% popunjenu Brillouinovu zonu.

Rješenje:

a) Dno Brillouinove zone odgovara valnom vektoru $\vec{k}$ = (0,0,0), a vrh valnim vektorima $\vec{k}$ = $(\pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{\pi}{a})$, što se može dobiti deriviranjem energije po komponentama valog vektora. Energija dna vrpce je $-3J$, a vrha vrpce $+3J$.

b) Korištenjem izraza za razvoj kosinusa oko minimuma:

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

dobiva se da je energija približno jednaka:

$$E(\vec{k}) \approx +3J - \frac{Ja^2}{2}(\vec{k} - \vec{k}_0)^2,$$

gdje je $\vec{k}_0 = (\pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{\pi}{a})$ valni vektor jednog od kuteva Brillouinove zone. Fermi površina u osam kuteva Brillouinove zone ima sferni oblik - 8 puta po 1/8 unutrašnje strane sfere. Translacijom sfernih odsječaka za vektor recipročne rešetke u jedan (proizvoljno odabrani) kut Brillouinove zone dobova se kompletna sferna ljuska. Njena unutrašnost predstavlja kvantna stanja koja **nisu** popunjena. U *šupljinskoj slici* sfera je popunjena šupljinama. Ja^2 se pojavljuje kao inverz efektivne mase.

c) Vulumen sferne šupljine radijusa k_F oko valnog vektora $\vec{k}_0$, je jednak:

$$V_{\check{s}} = \frac{4\pi}{3} k_F^3$$

Broj kvantnih stanja koje se nalaze u sfernoj šupljini (računajući i spin):

$$ZN_{\check{s}} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 = V \frac{k_F^3}{3\pi^2},$$

gdje je V volumen sustava. Ukupni volumen Brillouinove zone je:

$$V_{1BZ} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

I taj je volumen 5% popunjen šupljinama, dakle:

$$V_{\check{s}} = 0,05\, V_{1BZ}$$

Odavdje izlazi da je:

$$k_F = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{0,15}{4\pi}\right)^{1/3} = 0,458\,\frac{\pi}{a}$$

d) Prosječna energija šupline u unutrašnjosti sferne ljuske radijusa k_F (u analogiji sa slobodnim elektronima):

$$\overline{E}_{\check{s}} = \frac{3}{5} E_F = \frac{3}{5} \frac{Ja^2}{2} k_F^2 = 0,619\, J$$

Ako bi Brillouinova zone bila sasvim popunjena srednja energija elektrona bi bila jednaka nuli:

$$\overline{E} \cdot ZN = V \int_{1BZ} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} E(\vec{k}) \equiv 0$$

jer se integrira po cijeloj Brillouinovoj zoni, tj. granice integracije su simetrične, a podintegralna funkcija ($E(\vec{k})$) je periodična. Postojanje šupljina, umanjuje srednju energiju:

$$\overline{E} \cdot ZN = V \left(\int_{1BZ} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} E(\vec{k}) - \int_{V_{\check{s}}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} E(\vec{k}) \right) = 0.0 - ZN \cdot \overline{E}_{\check{s}}$$

pa je ona negativna za iznos srednje energije šupljina u sfernoj ljusci:

$$\overline{E} = -0,619\ J.$$

Zadatak 3. Relativni čisti uzorak metala nikla, na temperaturi od 100 K ima električni otpor 0,1 Ω. Debyeva temperatura nikla je 450 K. koja je očekivana vrijednost električnog otpora uzorka na temperaturi od 1100 K ?

$$\int_0^\infty dx \frac{x^4}{e^x - 1} = \Gamma(5)\zeta(5), \qquad \zeta(5) \approx 1,03692$$

Rješenje:

Prema Blochovom izrazu za otpor idealnog metala:

$$\rho = A \left(\frac{T}{\Theta}\right)^5 \int_0^{\Theta/T} dx \frac{x^4}{e^x - 1}$$

U granici niskih temperatura, $T \ll \Theta$,

$$\rho(T) \approx A \left(\frac{T}{\Theta}\right)^5 \Gamma(5)\zeta(5)$$

U granici visokih temperatura, $T \gg \Theta$,

$$\rho(T) \approx A \frac{1}{4} \frac{T}{\Theta}$$

Ako bi navedene približne izraze iskoristili za proračun otpora na temperaturama T_1 = 100 K i T_2 = 1100 K, tada je:

$$\frac{\rho(T_2)}{\rho(T_1)} = \frac{1}{4\,\Gamma(5)\zeta(5)} \frac{T_2\,\Theta^4}{T_1^5} = 45,3134$$

Prema tome, iznos električnog otpora uzorka na temperaturi od 1100 K bit će oko 45 puta veći od onog na 100 K, dakle približno je jednak 4,53 Ω.