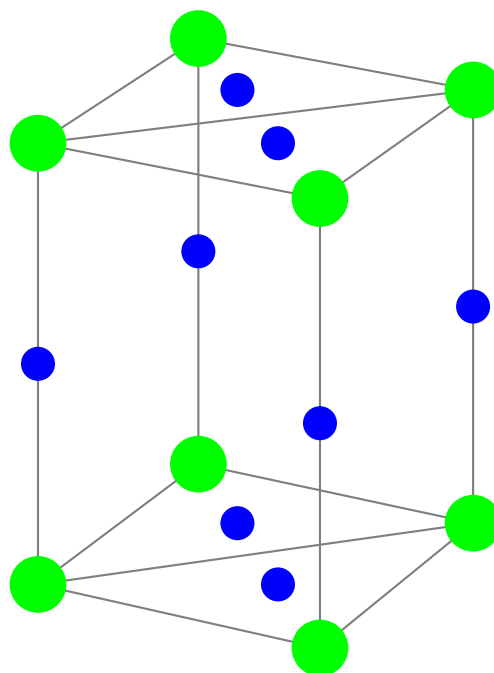


Zadatak 1.

Atom	x (Å)	y (Å)	z (Å)
N	0,00000	0,00000	0,00000
N	0,00000	0,00000	3,89000
N	3,66500	0,00000	0,00000
N	3,66500	0,00000	3,89000
N	1,83250	3,17398	0,00000
N	1,83250	3,17398	3,89000
N	-1,83250	3,17398	0,00000
N	-1,83250	3,17398	3,89000
Li	0,00000	2,11599	0,00000
Li	0,00000	2,11599	3,89000
Li	1,83250	1,05799	0,00000
Li	1,83250	1,05799	3,89000
Li	0,00000	0,00000	1,94500
Li	3,66500	0,00000	1,94500
Li	1,83250	3,17398	1,94500
Li	-1,83250	3,17398	1,94500



Na slici je prikazana elementarna ćelija Li_3N , a u tablici su dane koordinate atoma.

- Odrediti jednostavne translacijske vektore rešetke!
- Odrediti tip Bravaisove ćelije! Odgovor obrazložiti.
- Koja je najbliža udaljenost između atoma Li i N. Odgovor obrazložiti.
- Izračunati gustoću Li_3N !

$$(M_{\text{Li}} = 6,941 \text{ amu}, M_{\text{N}} = 14,0067 \text{ amu}, \text{amu} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg})$$

Rješenje:

- Uvedimo oznake za konstante rešetke $a = 3,665 \text{ Å}$ i $c = 3,89 \text{ Å}$. Natrijevi atomi u xy -ravnini su heksagonski raspoređeni. Udaljenosti su među njima jednake:

$$d_{N1-N3} = d_{N1-N5} = \sqrt{3,17398^2 + 1,83250^2} = 3,665 \text{ Å},$$

a kut koji zatvaraju veze je 60° :

$$\cos \theta = \frac{3,665 \cdot 1,8325}{3,665 \cdot 3,665} = \frac{1}{2}.$$

Tako da su jedinični vektori isti kao u u heksagonske rešetke:

$$\vec{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2 = a \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_3 = c \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

b) Radi se o heksagonskoj rešetki. To proizlazi iz a) dijela zadatka.

c) Veza N i Li u ravnini je:

$$d_1 = a \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \frac{2}{3} = a \frac{\sqrt{3}}{3} = 2,11599 \text{ \AA}.$$

Veza prema litijevom atomu vertikalni je $d_2 = 1,8325 \text{ \AA}$ (vidi tablicu).

Dakle najkraća udaljenost između N i Li je $d = d_2 = 1,8325 \text{ \AA}$.

d) Volumen ćelije je:

$$V = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c = 45,251 \cdot 10^{-30} \text{ m}^3,$$

a njena masa je:

$$M = 3 M_{Li} + M_N = (3 \cdot 6,941 + 14,0067) \cdot 1,6610^{-27} \text{ kg} = 5,78173 \cdot 10^{-27} \text{ kg}.$$

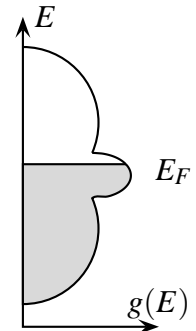
Gustoća kristala je:

$$\rho_{Li_3N} = \frac{M}{V} = 1277,7 \text{ kg/m}^3$$

Zadatak 2.

Neka je gustoća stanja nekog metala:

$$g(E) = \begin{cases} C \sqrt{E_0^2 - E^2} & \text{za } -E_0 < E < \Delta - E_0 \\ C \sqrt{E_0^2 - E^2} + C \sqrt{E_0^2 - (E - \Delta)^2} & \text{za } \Delta - E_0 < E < E_0 \\ C \sqrt{E_0^2 - (E - \Delta)^2} & \text{za } E_0 < E < \Delta + E_0 \\ 0 & \text{drugdje} \end{cases},$$



gdje su $E_0 = 1 \text{ eV}$, $\Delta = 1,4 \text{ eV}$ i $C = 5 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3} \text{ eV}^{-2}$.

a) Izračunati koncentraciju elektrona ako je Fermijeva energija $E_F = 0,85 \text{ eV}$.

b) Koja je maksimalna moguća koncentracija elektrona.

c) Izračunati prosječnu energiju ($E_F = 0,85 \text{ eV}$)

d) Odrediti vrijednost parametra Δ za koji je gustoća stanja na Fermijevoj energiji maksimalna ($g(E_F)$).

Rješenje:

a) Koristeći tablični integral:

$$\int dE \sqrt{E_0^2 - E^2} = \frac{1}{2} (E \sqrt{E_0^2 - E^2} + E_0^2 \arcsin \frac{E}{E_0}),$$

nalazimo da je:

$$ZN = \int_{-E_0}^{E_F} dE g(E) = C \cdot E_F^2 \cdot 1,78182 = 8,9091 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}.$$

b)

$$\max(ZN) = \int_{-E_0}^{\Delta+E_0} dE g(E) = C E_0^2 \pi = 15,708 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}.$$

c) Koristeći tablični integral:

$$\int dE E \sqrt{E_0^2 - E^2} = -\frac{1}{3}(E_0^2 - E^2)^{3/2},$$

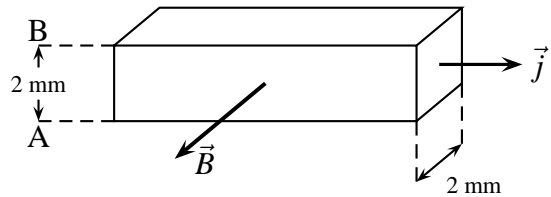
nalazimo da je:

$$\frac{\int_{-E_0}^{E_F} dE E g(E)}{\int_{-E_0}^{E_F} dE g(E)} = \frac{C E_0^3 \cdot 0,127461}{C \cdot E_F^2 \cdot 1,78182} = E_F \cdot 0,0715341 = 0,060804 \text{ eV}.$$

d) Gustoća stanja ima maksimum ako je $\Delta = E_F$, što se dobije deriviranjem gustoće stanja po Δ .

Zadatak 3.

Kroz komad bakra, širine i visine 2 mm, teče struja od 1 A u y-smjeru. Bakar se nalazi u magnetskom polju indukcije od 1 T (u x-smjeru). Izračunati pad napona između točaka A i B, ako je poznato da je koncentracija elektrona u bakru $N_e = 8,5 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$.



$$(e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}, 1 \text{ T} = 1 \text{ Vs/m}^2)$$

Rješenje:

Do pada napona dolazi zbog pojave Hallovog efekta. Pad napona jednak je produktu električnog polja u z smjeru i visine uzorka, a , koja je jednaka 2 mm. Samo električno polje dano je relacijom za Hallov efekt:

$$F_z = R_H j_y B_z,$$

dok je gustoća struje:

$$j_y = \frac{I}{a \cdot b},$$

gdje smo s b označili širinu uzorka (= 2 mm). Također Hallova konstanta, dana je:

$$R_H = \frac{1}{q \cdot N_e}.$$

Kombinirajući sve ove izraze, nalazimo da je pad napona:

$$|V| = a \cdot \frac{1}{e N_e} \cdot \frac{I}{a \cdot b} \cdot B_z = \frac{I \cdot B_z}{e \cdot N_e \cdot b} = 3,67647 \cdot 10^{-8} \text{ V}.$$