Pismeni ispit iz OFČS - 4. veljače 2005.

Zadatak 1.

Primitivni vektori kristala β-Po su:

$$\begin{aligned}
\vec{a}_1 &= +2,989\,\vec{i} - 0,218\,\vec{j} - 0,218\,\vec{k} \\
\vec{a}_2 &= -0,218\,\vec{i} + 2,989\,\vec{j} - 0,218\,\vec{k} \\
\vec{a}_3 &= -0,218\,\vec{i} - 0,218\,\vec{j} + 2,989\,\vec{k},
\end{aligned}$$

izraženo u jedinicama Å. Atomi polonija nalaze se u vrhovima primitivne ćelije.

a) Izračunati volumen primitivne ćelije !

b) Koju gustoću ima kristal β-Po ?

c) Koje kutove zatvaraju primitivni vektori ?

d) Kojoj vrsti Bravaisove rešetke pripada β-Po ?

e) Izračunati vektore recipročne rešetke !

(M_{Po} = 208,98 amu, amu = 1,66 10^{-27} kg)

Rješenje:

a) Volumen je:

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = Det \begin{vmatrix} 2,989 & -0,218 & -0,218 \\ -0,218 & 2,989 & -0,218 \\ -0,218 & -0,218 & 2,989 \end{vmatrix} \text{Å}^3 = 26,257\,10^{-30}\ \mathrm{m}^3.$$

b) Unutar primitivne ukupni ima samo jedan atom polonija pa je

$$\rho = \frac{208,98 \cdot 1,66\,10^{-27}\mathrm{kg}}{26,257\,10^{-30}\ \mathrm{m}^3} = 13,212\,10^3\ \mathrm{kg/m^3}$$

c) Kosinus kuta između dva vektora je:

$$\cos(\varphi) = \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{|\vec{a}|\,|\vec{b}|}$$

U našem slučaju sva tri kuta su ista i kosinus je:

$$\cos(\alpha) = \frac{-2 \cdot 2,989 \cdot 0,218 + 0,218 \cdot 0,218}{2,989^2 + 2 \cdot 0,218^2} = -0.139069$$

odnosno

$$\alpha = 97.994^\circ$$

d) Budući da se radi o jediničnoj ćeliji istih stranica, koji zatvaraju isti kut različiti od pravog kuta, radi se o trigonskoj Bravaisovoj ćeliji.

e) Vektori recipročne rešetke:

$$
\begin{aligned}
\vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{V}\,\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = 2,132\,\vec{i} + 0,168\,\vec{j} + 0,168\,\vec{k} \\
\vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{V}\,\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = 0,168\,\vec{i} + 2,132\,\vec{j} + 0,168\,\vec{k} \\
\vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{V}\,\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = 0,168\,\vec{i} + 0,168\,\vec{j} + 2,132\,\vec{k}
\end{aligned}
$$

Zadatak 2. Gustoća elektronskih stanja jednodimenzionalnog lanca atoma je:

$$
g(E) = \begin{cases} \dfrac{C}{\sqrt{4t^2 - E^2}} & \text{za } |E| \leq 2t \\ 0 & \text{za } |E| > 2t \end{cases} .
$$

Odrediti iznos nepoznate konstante C ako se zna da je vrpca polupopunjena, te da je koncentracija elektrona:

$$
ZN = 3,14\ 10^{28}\ \text{m}^{-3}
$$

Konstanta t jednaka 1 eV. Kolika je prosječna energija?

Rješenje: Gustoća stanja je simetrična funkcija oko ishodišta $E = 0$, pa za polupopunjenu vrpcu Fermijeva energija je $E_F = 0$. Koncentracija čestica je:

$$
\begin{aligned}
ZN &= \int^{E_F} dE\ g(E) = \int_{-2t}^{0} dE\ \frac{C}{\sqrt{4t^2 - E^2}} = C \cdot \arctan\left[\frac{E}{\sqrt{4t^2 - E^2}}\right]\Bigg|_{-2t}^{0} \\
&= C \cdot \frac{\pi}{2}
\end{aligned}
$$

Odavde izlazi:

$$
C = \frac{2}{\pi}\,3,14\ 10^{28}\ \text{m}^{-3} = 2,0\ 10^{28}\ \text{m}^{-3}
$$

Prosječna ejergija:

$$
\overline{E} = \frac{C}{ZN}\int_{-2t}^{0} dE\ \frac{E}{\sqrt{4t^2 - E^2}} = \frac{C}{C\,\dfrac{\pi}{2}}\,(-2t) = -\frac{4}{\pi}\,t = -1.27\ \text{eV}
$$

Zadatak 3. Paramagnetski sustav čestica spina $S = 1$, iznosa dipolnog momenta $\mu = g\ \mu_B$, gdje je žiromagnetski faktor, g, jednak 2, nalazi se u magnetskom polju od 5 T. Odrediti postotak čestica koji imaju spin paralelan i koji imaju spin antiparalelan s magnetskim poljem na temperaturi T=50 K.

($\mu_B = 0,927410^{-23}$ J T^{-1}, k_B = 1,38 10^{-23} J K^{-1})

Rješenje: Energija čestice spina S u magnetskom polju B je:

$$E = -g\ \mu_B S_z B,$$

gdje je S_z komponenta spina u smjeru magnetskog polja koja može imati vrijednosti:

$$S_z = -1,\ 0,\ +1.$$

Broj čestica po spinskim stanjima dana je Boltzmannovom raspodjelom:

$$N(S_z) = C \cdot e^{-\frac{E(S_z)}{k_B T}},$$

gdje je C normalizacijska konstanta:

$$N(\text{ukupno}) = N(S_z = -1) + N(S_z = 0) + N(S_z = +1) = C(e^{-\frac{g\mu_B B}{k_B T}} + 1 + e^{\frac{g\mu_B B}{k_B T}})$$

Frakcija čestica sa spinom $S = +1$ je:

$$\frac{N(S_z = +1)}{N(\text{ukupno})} = \frac{e^{\frac{g\mu_B B}{k_B T}}}{e^{-\frac{g\mu_B B}{k_B T}} + 1 + e^{\frac{g\mu_B B}{k_B T}}} = \frac{1}{1 + e^{-\frac{g\mu_B B}{k_B T}} + e^{-2\frac{g\mu_B B}{k_B T}}}$$

Izraz u eksponentu je

$$\frac{g\mu_B B}{k_B T} = \frac{2 \cdot 0,9274\ 10^{-23}\ \text{J T}^{-1} \cdot 5\ \text{T}}{1,38\ 10^{-23}\text{J K}^{-1} \cdot 50\ K} = 0,134406,$$

pa je

$$\frac{N(S_z = +1)}{N(\text{ukupno})} = \frac{1}{1 + e^{-0,134406} + e^{-2\cdot 0,134406}} = 0,379$$

Dakle, približno je 38% posto čestica sa spinom u smjeru magnetskog polja.

Analogno nalazimo da je broj čestica s antiparalenim spinom:

$$\frac{N(S_z = -1)}{N(\text{ukupno})} = \frac{1}{1 + e^{+0,134406} + e^{+2\cdot 0,134406}} = 0,290$$

Dakle, oko 29% čestica je sa spinom antiparalenim magnetskom polju.