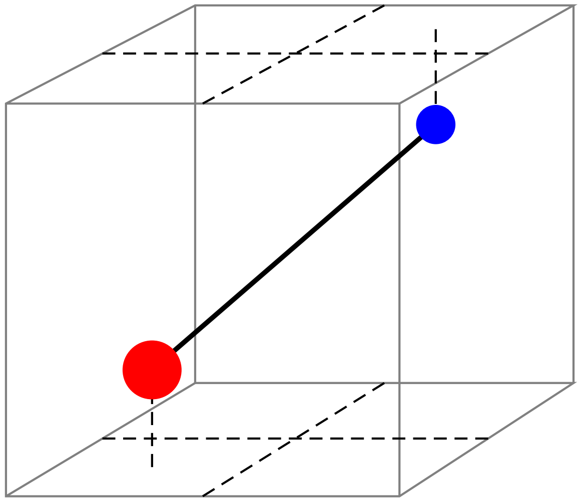
Zadatak 1.

Atom	x (Å)	y (Å)	z (Å)
Ag	0,82	0,82	0,82
Mg	2,46	2,46	2,46



Elementarna ćelija AgMg prikazana je na slici, a u tablici su dane koordinate iona. Konstanta rešetke je a = 3,28 Å.

a) Prikazati elementarnu ćeliju tako da se u vrhovima kocke nalaze istovrsni ioni.

b) Koji je koordinacijski broj Ag iona?

c) Koji kut zatvaraju (susjedne) spojnice između Ag iona i njegovih najbližih susjednih Mg iona?

Rješenje:

a) Translatiranjem iona srebra $(0,82,\ 0,82,\ 0,82)$ u ishodište (0,0,0), ion magnezija prelazi u središte kocke. Pri tome ioni srebra iz susjednih ćelija prelaze u ostale vrhove kocke. Dobiva se elementarna ćelija tipa CsCl.

b) Koordinacijski broj iona srebra je 8 isti kao i koordinacijski broj magnezija.

c) Ako se iona srebra nalazi u iskodištu, dva susjedna magnezijeva iona imaju koordinate:

$$\vec{a}_1 = a \begin{pmatrix} 0,5 \\ 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix} \quad \text{i} \quad \vec{a}_2 = a \begin{pmatrix} -0,5 \\ 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix}$$

Kut koji zatvaraju vektori dan je skalarnim produktom vektora:

$$\cos\theta = \frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2}{|\vec{a}_1||\vec{a}_2|} = \frac{0,25 + 0.25 - 0.25}{0,75} = \frac{1}{3},$$

odnosno

$$\theta = 70,528^\circ.$$

Zadatak 2. Gustoća stanja grafena (po jednom atomu), monoatomskog dvodimenzionalnog grafitnog sloja je jednaka:

$$g(E) = \begin{cases} C \cdot |E - E_F| & \text{za } |E - E_F| \le D \\ 0 & \text{za } |E - E_F| > D \end{cases}$$

gdje su:

$$C \approx \frac{1}{\pi\sqrt{3}\gamma_0^2},$$

i

$$\gamma_0 \approx 0,9 \text{ eV}.$$

a) Pokazati da kemijski potencijal ne ovisi o temperaturi:

$$\mu(T) = konst. = E_F \qquad \forall\ T.$$

(Uputa: Poći od izraza za ukupni broj čestica koristeći funkciju raspodjele.)

b) Izračunati koncentraciju elektrona koji imaju energiju $E > E_F$ na T =300 K. ($D \gg K_B T$).

c) Na temelju izraza za gustoću stanja, diskutirati o kojoj je vrsti materijala riječ (metal, poluvodič, ...) !

Napomena:

$$\int_0^\infty dx \frac{x}{e^x + 1} = \frac{\pi^2}{12}$$

(k_B = 1,38 10^{-23} JK^{-1}, 1 eV = 1,60 10^{-19} J)

Rješenje:

a) Broj čestica općenoto je dan preko funkcije raspodjele i gustoće stanja kao:

$$N(T) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE\ g(E)\ \rho(E) = \int_{E_F-D}^{E_F+D} dE\ \frac{g(E)}{e^{\beta(E-\mu(T))} + 1}.$$

Temperaturna ovisnost kemijskog potencijala, $\mu(T)$, je takva da je broj čestica N u gornjem izrazu konstantan, tj. neovisan o temperaturi T. Na temperaturi apsolutne nule taj je integral jednak:

$$N(T=0) = \int_{E_F-D}^{E_F} dE\ g(E).$$

Na konačnoj temperaturi je:

$$\begin{aligned} N(T) - N(T=0) &= \int_{E_F-D}^{E_F} dE\ g(E) \left[\frac{1)}{e^{\beta(E-\mu(T))} + 1} - 1\right] + \int_{E_F}^{E_F+D} dE\ \frac{g(E)}{e^{\beta(E-\mu(T))} + 1} \\ &= -\int_{E_F-D}^{E_F} dE\ \frac{g(E)}{e^{-\beta(E-\mu(T))} + 1} + \int_{E_F}^{E_F+D} dE\ \frac{g(E)}{e^{\beta(E-\mu(T))} + 1} \\ &= -\int_{E_F}^{E_F+D} dE\ \frac{g(2E_F - E)}{e^{\beta(E+\mu(T)-2E_F)} + 1} + \int_{E_F}^{E_F+D} dE\ \frac{g(E)}{e^{\beta(E-\mu(T))} + 1} = 0, \end{aligned}$$

što je jednako nuli ako je $\mu(T) = konst. = E_F$, tj. neovisno o temepraturi. U gornjem izrazu, u prvom integralu smo napravili zamjenu $E \to 2E_F - E$, te smo koristil svojstvo simetričnosti gustoće stanja u odnosu na Fermijevu energiju:

$$g(E - E_F) = g(E_F - E) \quad \text{ili} \quad g(E') = g(2E_F - E').$$

b) Koncentracija čestica energije veće od Fermijeve kada je $D \gg K_B T$ je jednaka:

$$N(E > E_F) = \int_{E_F}^{E_F+D} dE \, \frac{g(E)}{e^{\beta(E-E_F)}+1} = \int_0^D de \, \frac{C \cdot e}{e^{\beta e}+1} = C\,(k_B T)^2 \int_0^{\beta D} dx \, \frac{x}{e^x+1}$$

$$\approx C\,(k_B T)^2 \int_0^{\infty} dx \, \frac{x}{e^x+1} = C\,(k_B T)^2 \, \frac{\pi^2}{12} = 0,000124935 \quad \text{(po atomu).}$$

c) Gustoća stanja na Fermijevom nivou je jednaka nuli, ali je i procijep između vodljive i valentne vrpce jednak nuli. Stoga materijal nije metal, a niti je poluvodič. Ovu vrst materijala zovemo polumetalima.

Zadatak 3.

Relativna permitivnost materijala povezana je s njihovom elekričnom provodnošću:

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + i\,\frac{\sigma(\omega)}{\varepsilon_0 \omega}$$

a) Izračunati realni dio relativne permitivnosti metala u granici konstantnog električnog polja, ako su $\tau \approx 10^{-14}$ s i $\sigma(0) \approx 10^7\ \Omega^{-1} m^{-1}$.

b) Na temelju izračunate vrijednosti, što je moguće zaključiti o indeksu loma i prozirnosti metala za elektromagnetsko zračenje malih frekvencija ?

(ε_0 = 8,854 10^{-12} m^{-3} kg^{-1} s^4 A^2, Ω = m^2 kg s^{-3} A^{-2})

Rješenje:

a) Električna provodnost metala jednaka je:

$$\sigma(\omega) = \sigma(0) \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2},$$

pa je relativna permitivnost:

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \frac{\sigma(0)}{1 + (\omega\tau)^2} \left(\frac{i}{\varepsilon_0 \omega} - \frac{\tau}{\varepsilon_0} \right).$$

Realni dio je:

$$\varepsilon_r'(\omega) = 1 - \frac{\tau}{\varepsilon_0} \, \frac{\sigma(0)}{1 + (\omega\tau)^2}.$$

U statičkoj granici konstantnog električnog polja:

$$\varepsilon_r'(0) = 1 - \frac{\tau\sigma(0)}{\varepsilon_0} = -11293,3$$

b) Indeks loma je kvadratni korijen od dielektrične funkcije, pa je on imaginaran. Zbog imaginarnosti indeksa loma, amplituda EM vala eksponencijalno trne s udaljenošću od površine metala. Elektromagnetski val male frekvencije ne može se širiti u unutrašnjost metala, nego se kompletno reflektira na njegovoj površini.