ODABRANA POGLAVLJA FIZIKE ČVRSTOG STANJA

OSNOVE FIZIKE ČVRSTOG STANJA

- zbirka zadataka -

V2.0

Danko Radić, 2014.

Sadržaj:

<u>napomena</u>: Oznaka zadatka (Š n.m) odnosi se na zadatak (n.m) iz knjige V. Šips "Uvod u fiziku čvrstog stanja". Oznaka (Š n.m*) znači da je zadatak iz knjige izmijenjen, ili da rješenje / postupak ponuđen u knjizi nije zadovoljavajuć.
Ova zbirka tijesno se oslanja na gradivo izneseno na predavanjima tako da je oznake nekih korištenih fizikalnih veličina, definicije, postupke itd. uputno tamo pogledati.

Z-1.1 (Š 1.1*) Dokaži da u kristalu ne postoje osi petog, sedmog i viših redova.

rj: naputak: Translacijski vektor rešetke **T** zakrenut za kut ϕ i vektor -**T** zakrenut za -ϕ moraju određivati vektor koji je kolinearan i sumjerljiv s **T** (opet mora biti translacijski vektor rešetke). Otud slijedi da kut zakreta $\phi=2\pi/n$, ne može rezultirati osi reda n=5, 7 i više.

Z-1.2 (Š 1.2) Volumen elementarne ćelije recipročnog prostora izrazi pomoću volumena elementarne ćelije kristala u realnom prostoru $\Omega=\mathbf{a}_1(\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3)$.

rj: Korištenjem pravila za dvojni vektorski produkt $\mathbf{A}\times(\mathbf{B}\times\mathbf{C})=\mathbf{B}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{C})-\mathbf{C}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{B})$ dobiva se $\Omega^*=(2\pi)^3/\Omega$.

Z-1.3 (Š 1.3) Napiši izraze za osnovne vektore rešetke koja je recipročna recipročnoj rešetci.

rj: Rešetka recipročna recipročnoj je polazna rešetka.

Z-1.4 (Š 1.4) Izvedi izraze za osnovne vektore recipročnog prostora za sve tri kubične rešetke (SC, BCC, FCC) konstante jedinične ćelije a.

rj:
1) SC:
$\mathbf{a}_1=a\ (1,0,0)$, $\mathbf{a}_2= a\ (0,1,0)$, $\mathbf{a}_3= a\ (0,0,1)$ =>
$\mathbf{b}_1=(2\pi/a)\ (1,0,0)$, $\mathbf{b}_2=(2\pi/a)\ (0,1,0)$, $\mathbf{b}_3=(2\pi/a)\ (0,0,1)$
2) BCC:
$\mathbf{a}_1=(a/2)\ (1,1,-1)$, $\mathbf{a}_2=(a/2)\ (-1,1,1)$, $\mathbf{a}_3=(a/2)\ (1,-1,1)$ =>
$\mathbf{b}_1=(2\pi/a)\ (1,1,0)$, $\mathbf{b}_2=(2\pi/a)\ (0,1,1)$, $\mathbf{b}_3=(2\pi/a)\ (1,0,1)$
3) FCC:
$\mathbf{a}_1=(a/2)\ (0,1,1)$, $\mathbf{a}_2=(a/2)\ (1,0,1)$, $\mathbf{a}_3=(a/2)\ (1,1,0)$ =>
$\mathbf{b}_1=(2\pi/a)\ (-1,1,1)$, $\mathbf{b}_2=(2\pi/a)\ (1,-1,1)$, $\mathbf{b}_3=(2\pi/a)\ (1,1,-1)$

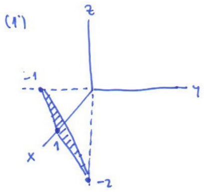
Z-1.5 Izračunaj vektore recipročne rešetke za heksagonsku rešetku $\mathbf{a}_1=a\ (1,0,0)$, $\mathbf{a}_2=(a/2)\ (-1,\sqrt{3},0)$, $\mathbf{a}_3=c\ (0,0,1)$.

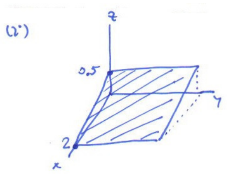
rj: $\mathbf{b}_1=(2\pi/a)\ (1,1/\sqrt{3},0)$, $\mathbf{b}_2=(2\pi/a)\ (0, 2/\sqrt{3},0)$, $\mathbf{b}_3=(2\pi/c)\ (0,0,1)$

Z-1.6 Odredi vektore recipročne rešetke u grafenu.

rj: u pitanju je saćasta rešetka (s bazom) $\mathbf{a}_1=(a/2)\ (3, -\sqrt{3})$, $\mathbf{a}_2=(a/2)\ (3, \sqrt{3})$;
$\mathbf{b}_1=(2\pi/3a)\ (1,-\sqrt{3})$, $\mathbf{b}_2=(2\pi/3a)\ (1,\sqrt{3})$

Z-1.7 Millerovi indeksi:
a) Napiši Millerove indekse zadanih ravnina:





b) Skiciraj ravnine s zadanim Millerovim indeksima: {2 2 1}, {0 4 0}

Z-1.8 Odredi gustoću pakiranja atoma u kristalnoj ravnini za:
(1) SC {1 0 0}
(2) BCC {1 0 0}
(3) FCC {1 0 0}
(4) SC {1 1 1}
(5) BCC {1 1 0}
(6) FCC {1 1 0}
(7) BCC {1 1 1}

<u>rj</u>:
(1) $\eta=\pi/4$
(2) $\eta= 3\pi/16=0.589$
(3) $\eta= \pi/4$
(4) $\eta= \pi/4\sqrt{3}=0.454$
(5) $\eta= 3\pi/8\sqrt{2}=0.833$
(6) $\eta= \pi/4\sqrt{2}=0.555$
(7) $\eta= 19\sqrt{3}\pi/144=0.718$

Z-1.9 Odredi uvjet na Millerove indekse ravnina i (neke) kuteve pod kojima se javljaju difrakcijski maksimumi pri elastičnom raspršenju X-zraka valne duljine λ=1.5Å na kristalu BCC tipa rešetke konstante a=3.6Å.

<u>rj</u>: Geometrijski strukturni faktor baze: $F_{h,k,l} = f\left(1+e^{i\pi(h+k+l)}\right)$ je $\neq 0$ za $h+k+l$ paran te =0 za $h+k+l$ neparan, dakle nužan uvjet maksimuma je $h+k+l$ paran. Iz Laueove formule dobivamo kuteve s neiščezavajućim maksimumima za izabranu {h k l} ravninu, npr. {0 2 0} θ=72.2° itd.

Z-1.10 Pokaži da refleksija (difrakcijski maksimum) X-zraka na FCC strukturi isčezava sa svake kristalne ravnine čiji su Millerovi indeksi kombinacija parnih i neparnih brojeva.

<u>rj</u>: Geometrijski strukturni faktor baze: $F_{h,k,l} = f\left(1+e^{i\pi(h+k)}+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(k+l)}\right)$ =0 za bilo koju kombinaciju gdje je (h,k), (h,l), (k,l), neparno (pokazati to tablicom).

Z-1.11 (Š 3.8) Neutronski snop zatvara s kristalnom ravninom kut $\theta=30°$. Pri kojoj brzini opažamo prvi difrakcijski maksimum reflektiranih neutrona ako je razmak krisalnih ravnina $d=2.5$Å?

rj: $v=1582$m/s

Z-1.12 (Š 1.7) Izvedi izraz za broj Schottkyevih defekata u kristalu.

rj: Pošavši od termodinamičke vjerojatosti $B=\begin{pmatrix} N \\ N_S \end{pmatrix}$, $N>>N_S>>1$ (N-broj atoma u kristalu, N_S-broj Schottkyevih defekata), uz korištenje Stirlingove formule $\ln(x!)\approx x \ln(x)-x$, pokazuje se da je $N_S=N \exp(-E_S/k_BT)$, gdje je E_S energija aktivacije jednog Schottkyevog defekta.

Z-1.13 (Š 1.8) Izvedi izraz za broj Frenkelovih defekata u kristalu.

rj: Pošavši od termodinamičke vjerojatosti $B=\begin{pmatrix} N \\ N_F \end{pmatrix}\begin{pmatrix} N' \\ N_F \end{pmatrix}$, $N>>N_F>> N'>>1$ (N-broj atoma u kristalu, N_F-broj Frenkelovih defekata, N'-broj raspoloživih intersticijskih mjesta), uz korištenje Stirlingove formule $\ln(x!)\approx x \ln(x)-x$, pokazuje se da je $N_F=\sqrt{(NN')} \exp(-E_F/2k_BT)$, gdje je E_F energija aktivacije jednog Frenkelovog defekta.

Z-2.1 (Š 3.1) Odredi disperzijsku relaciju fonona ako u modelu jednodimenzionalne rešetke konstante a i mase atoma m uzmemo u obzir međudjelovanje svih atoma, a ne samo prvih susjeda. (β_n su konstante elastične interakcije ovisno o rednom broju susjeda n)

rj: $\omega^2(k) = \frac{4}{m}\sum_n \beta_n \sin^2 \frac{kna}{2}$

Z-2.2 (Š 3.2*) Za 1D linearnu rešetku izgrađenu od jednakih atoma mase m, pri čemu su ravnotežni razmaci među susjednim atomima c, d, c, d, ... (konsekventno odgovarajuće konstante elastične sile među susjedima su β, γ, β, γ, ...), odredi disperzijsku relaciju $\omega(k)$ sustava u aproksimaciji prvih susjeda i harmoničkog titranja. Uzmi da je duljina $c+d\equiv a$. Posebno odredi $\omega(k)$ u granici $k\to 0$.

rj:

$$\omega_\pm^2(k) = \frac{1}{m}\left(\beta+\gamma\pm\sqrt{\beta^2+\gamma^2+2\beta\gamma\cos(ka)}\right)$$

$$\omega_\pm^2(k\to 0) = \frac{\beta+\gamma}{m}\left[1\pm\left(1-\frac{1}{2}\frac{\beta\gamma}{(\beta+\gamma)^2}(ka)^2\right)\right] \quad\Rightarrow\quad \omega_\pm(k\to 0) = \begin{cases}\sqrt{\frac{\beta\gamma}{2m(\beta+\gamma)}}|ka|; & A\\ \sqrt{\frac{2(\beta+\gamma)}{m}}; & O\end{cases}$$

Z-2.3 Odredi disperzijsku relaciju titranja beskonačnog 1D lanca s 2 atoma mase m_1 u m_2 u bazi jedinične ćelije konstante rešetke a i konstante elastične sile κ.

rj: $\omega_\pm^2(k) = \frac{\kappa}{\mu}\left(1\pm\sqrt{1-\frac{4\mu^2}{m_1m_2}\sin^2\frac{ka}{2}}\right); \quad \mu\equiv\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$

Z-2.4 Odredi frekvenciju titranja lokaliziranog fononskog stanja za 1D lanac atoma mase M, konstante rešetke a i konstante elastične sile κ, s jednom lakom supstitucijskom primjesom mase m.

rj: $\omega = \sqrt{\frac{2\kappa}{m}\left(1+\frac{m}{M}\right)}; \quad k=\pm\frac{\pi}{a}, \quad m<M$

Z-2.5 Odredi Debyevu temperaturu za Ca i Cu uz pretpostavku da je brzina zvuka $v_s=3\cdot 10^3$m/s u oba krisala jednaka. Parametri jedinične ćelije su a(Ca)=0.558nm, a(Cu)=0.361nm, a struktura je FCC tipa.

rj: $\Theta_D = \frac{\hbar v_s}{k_B a}\sqrt[3]{24\pi^2} = \begin{cases}250K, & Ca\\ 390K, & Cu\end{cases}$

Z-2.6 (Š 3.5) U okviru Debyeva modela izračunajte energiju osnovnog stanja akustičkih osclatora (modova fonona) u molu kristala ako je Debyeva temperatura Θ_D=300K.

rj: $U=(9/8)N_A k_B \Theta_D$ = 2.8 kJ/mol

Z-2.7 (Š 3.6) U Debyevoj aproksimaciji izračunaj omjer broja akustičkih fonona i broja elementarnih ćelija u zlatu pri temperaturi T=20K ako je Debyeva temperatura zlata Θ_D=170K.

rj: $\frac{n}{N} = 18\zeta(3)\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 = 0.035$

Z-2.8 (Š 3.7) Pri temperaturi T=30K izmjeren je toplinski kapacitet kristalne rešetke C_V=0.8J/K. Izačunaj broj atoma u kristalu ako svaka elementarna ćelija sadrži 1 atom, a Debyeva temperatura je Θ_D=320K.

rj: $N = \frac{5C_V}{12\pi^4 k_B}\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)^3 = 3\cdot 10^{23}$

Z-2.9 Izračunaj toplinski kapacitet kristala, koji se sastoji od ravnina atoma s potpuno krutom vezom među ravninama, u Debyevoj aproksimaciji za $T \ll \Theta_D$.

rj: $C_V = \frac{6L^2 k_B^3 \zeta(3)}{\pi v_s^2 \hbar^2} T^2$ (L je linearna dimenzija kristala)

Z-3.1 Polazeći od problema 2 točkasta naboja $+q$ i $-q$ udaljena za d i kulonske sile kojom međudjeluju, izvedi izraze za:
a) potencijal dipola na udaljenosti $r >> d$
b) potencijlanu energiju dipola u vanjskom električnom polju točkastog naboja Q na udaljenosti $r >> d$
c) električno polje dipola na položaju **r** u odnosu na centar dipola

rj:

a) $\Phi(\vec{r}) = \dfrac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{4\pi\varepsilon_0 r^3}, \quad \vec{p} \equiv q\vec{d}$

b) $U = -\vec{p}\cdot\vec{E}, \quad \vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi(\vec{r}), \quad \left(\Phi(\vec{r}) = \dfrac{Q}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)$

c) $\vec{E}(\vec{r}) = \dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{3\vec{r}(\vec{p}\cdot\vec{r}) - r^2\vec{p}}{r^5}$

Z-3.2 (Š 2.1) Razmatrajući međudjelovanje dvaju atoma na udaljenostima koje su mnogo veće od linearnih dimenzija atoma odredi uzajamnu potencijalnu energiju.

rj: $U \approx -\dfrac{B}{r^6}, \quad B \equiv \dfrac{\alpha p^2}{4\pi^2\varepsilon_0}$ (α - polarizabilnost, p - dipolni moment atoma)

Z-3-3 (Š 2.2) Zadan je izraz za energiju međudjelovanja dvaju atoma $E_p = -\dfrac{a}{r^n} + \dfrac{b}{r^{n'}}$. Odredi uvjet stabilnosti sustava.

rj: $n' > n$

Z-3.4 (Š 2.3) Neka je unutrašnja energija sustava $U(r) = -\dfrac{A}{r^n} + Be^{-\frac{r}{a}}$, gdje su A, B, a parametri, a r prosječna udaljenost susjednih čestica. Odredi energiju sustava u ravnotežnom stanju.

rj: $U(r_0) = -\dfrac{A}{r_0^n}\left(1 - \dfrac{na}{r_0}\right)$

Z-3.5 Odredi energiju rešetke ionskog kristala sastavljenog od $+q$ i $-q$ naboja
a) za 1D kristal (egzaktno i Evjen-Frankovom metodom (uzmi 5 ćelija))
b) za 3D NaCl kristal (Evjen-Frankovom metodom (uzmi 2 ćelije))

rj:
a) $\alpha_M = 2\ln 2 = 1.38629$ (egzaktno), $\alpha_M = 1.367$ (Evjen-Frank)
b) $\alpha_M = 1.76$

Z-3.6 Odredi energiju rešetke 1D linearnog ionskog kristala sastavljenog od N iona naboja $\pm q$ ako je repulzivna Paulijeva interakcija među susjedima oblika $A / R^n, \quad n \in \mathbb{N}$.

rj: $E = -N \dfrac{2q^2 \ln 2}{4\pi\varepsilon_0 R_0}\left(1 - \dfrac{1}{n}\right)$

Z-4.1 Izračunaj spektar energija i valne funkcije elektrona u 1D potencijalnoj jami beskonačno visokih zidova i duljine L koristeći rubne uvjete isčezavanja valne funkcije na rubovima jame (koristi Direchletove, a ne Neumannove periodičke rubne uvjete). Unutar jame elektron je slobodan.

rj: $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad \Psi_n(x) = i\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$

Z-4.2 (Š 4.2) Kolika mora biti koncentracija elektronskog plina da bi pri temperaturi T=0 prosječan valni broj elektrona bio k=1.5·10^{10}m^{-1}?

rj: $n = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{4}{3}k\right)^3 = 2.7\cdot 10^{29}\,m^{-3}$

Z-4.3 Odredi relaciju koja povezuje tlak i volumen slobodnog elektronskog plina na T=0.

rj: $P = \frac{2}{3}\frac{U}{V}$, U je unutrašnja energija

Z-4.4 (Š 4.6) Izračunaj tlak slobodnog elektronskog plina na T=0 ako je elektronska koncentracija n=5.6·10^{28}m^{-3}.

rj: $P = \frac{\hbar^2(3\pi^2)^{2/3}n^{5/3}}{5m} = 1.9\cdot 10^{10}\,Pa$

Z-4.5 Za 2D slobodni elektronski plin nađi vezu Fermijeve energije E_F i kemijskog potencijala μ i napiši ju u obliku E_F = μ+korekcija.

rj: iz $N_{T=0} = N_{T\neq 0}$, uz korištenje ln(1+x)=ln[x(1+1/x)], za x>>1, dobivamo $E_F = \mu + k_B T \ln\left(1 + e^{-\frac{\mu}{k_B T}}\right)$

Z-4.6 Koristeći Sommerfeldov razvoj $\int_0^\infty F(E)f(E)dE \approx \int_0^\mu F(E)dE + \frac{1}{6}(\pi k_B T)^2 \left.\frac{\partial F}{\partial E}\right|_{E=\mu}$ izračunaj:

a) ovisnost kemijskog potencijala μ o temperaturi T

b) toplinski kapacitet C_V

jako degeneriranog fermionskog plina s gustoćom stanja g_F na Fermijevom nivou E_F.

rj:

a) $\mu(T) = E_F\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{E_F}\right)^2\right]$

b) $C_V = \frac{\pi^2}{3} g_F k_B^2 T$

Z-4.7 (Š 4.7) Pri temperaturi T=0.1K izmjeren je toplinski kapacitet elektronskog plina u jediničnom volumenu metala C_V=4JK^{-1}m^{-3}. U Sommerfeldovom modelu odredi koncentraciju vodljivih elektrona u metalu.

rj: $n = \frac{9}{\pi^2}\left(\frac{\hbar^2 C_V}{k_B^2 m T}\right)^3 = 1.5\cdot 10^{28} m^{-3}$

Z-4.8 (Š 4.8*) Primjenom klasične statističke fizike izvedi izraz za gustoću termoelektronske struje (V_0 je dubina potencijalne jame, T je temperatura, n je gustoća elektrona).

rj: $j = en\sqrt{\frac{k_B T}{2m\pi}}e^{-\frac{V_0}{k_B T}}$

Z-5.1 (Š 5.1) Polazeći od valne funkcije slobodnog elektrona, primjenom prve aproksimacije stacionarnog računa smetnje, odredi valnu funkciju elektrona u periodičkom potencijalu.

rj: $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left[1 + \frac{2m}{\hbar^2} \sum_n \frac{V_{\vec{G}_n} e^{i\vec{G}_n\cdot\vec{r}}}{\vec{k}^2 - (\vec{k}+\vec{G}_n)^2} \right]$

Z-5.2 Razvij disperziju slobodnih elektrona u periodičkom potencijalu $E_\pm(\vec{k}) = \frac{1}{2}\left[E^0_{\vec{k}} + E^0_{\vec{k}+\vec{G}} \pm \sqrt{\left(E^0_{\vec{k}} - E^0_{\vec{k}+\vec{G}}\right)^2 + 4\left|V_{\vec{G}}\right|^2} \right]$, dobivenu računom smetnje za degenerirane nivoe gdje je $E_{\mathbf{k}}^{o}$ slobodnoelektronska energija, a $V_{\mathbf{G}} = \langle \Phi_{\mathbf{k}} | V | \Phi_{\mathbf{k+G}} \rangle$ matrični element periodičkog potencijala $V(\mathbf{r})$, u okolini ruba Brillouinove zone. Odredi iznos energetskog procijepa Δ između vrpci.

rj:

$$E_\pm(\Delta\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{G^2}{4} + (\Delta k)^2 \right) \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \left(\vec{G}\cdot\Delta\vec{k}\right)^2 + \left|V_{\vec{G}}\right|^2}$$

$$\Delta = E_+ - E_- = 2\left|V_{\vec{G}}\right|$$

gdje je $\Delta\mathbf{k}$ (mali) valni vektor u odnosu na rub Brillouinove zone tj. $\mathbf{k} = -(\mathbf{G}/2) + \Delta\mathbf{k}$.

Z-5.3 (Š5.3) U 1D modelu odredi efektivnu masu i brzinu elektrona ako je njegova energija $E(k) = E_0 \cos(ka/2)$. Dobiveni rezultat primijeni na slučaj $ka \ll 1$.

rj:

$$m^* = -\frac{4\hbar^2}{a^2 E_0 \cos(ka/2)} \approx -\frac{4\hbar^2}{a^2 E_0},\ ka \ll 1$$

$$v = -\frac{aE_0}{2\hbar}\sin(ka/2) \approx \frac{\hbar k}{m^*},\ ka \ll 1$$

Z-5.4 (Š 5.4) Zadana je energija elektrona

$$E(\vec{k}) = E_0\left(\cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{k_y b}{2} + \cos\frac{k_y b}{2}\cos\frac{k_z c}{2} + \cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{k_z c}{2} \right).$$

Odredi elemente tenzora efektivne mase.

rj:

$$\frac{1}{m^*_{xx}} = -\frac{E_0 a^2}{4\hbar^2}\cos\frac{k_x a}{2}\left(\cos\frac{k_y b}{2}+\cos\frac{k_z c}{2}\right)$$

$$\frac{1}{m^*_{yy}} = -\frac{E_0 b^2}{4\hbar^2}\cos\frac{k_y b}{2}\left(\cos\frac{k_x a}{2}+\cos\frac{k_z c}{2}\right)$$

$$\frac{1}{m^*_{zz}} = -\frac{E_0 c^2}{4\hbar^2}\cos\frac{k_z c}{2}\left(\cos\frac{k_x a}{2}+\cos\frac{k_y b}{2}\right)$$

$$\frac{1}{m^*_{xy}} = \frac{1}{m^*_{yx}} = \frac{E_0 ab}{4\hbar^2}\sin\frac{k_x a}{2}\sin\frac{k_y b}{2}$$

$$\frac{1}{m^*_{xz}} = \frac{1}{m^*_{zx}} = \frac{E_0 ac}{4\hbar^2}\sin\frac{k_x a}{2}\sin\frac{k_z c}{2}$$

$$\frac{1}{m^*_{yz}} = \frac{1}{m^*_{zy}} = \frac{E_0 bc}{4\hbar^2}\sin\frac{k_y b}{2}\sin\frac{k_z c}{2}$$

Z-5.5 (Š 5.5) Neka je energija elektrona $E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_x^2}{m_x^*}+\frac{k_y^2}{m_y^*}+\frac{k_z^2}{m_z^*}\right)$, gdje su m_x^*, m_y^*, m_z^* redom efektivne mase u smjeru *x*, *y*, *z* osi. Odredi izraz za gustoću stanja.

rj: $g(E) = \frac{1}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{2m_x^* m_y^* m_z^* E}$

Z-5.6 Odredi tenzor efektivne mase za heksagonalnu rešetku s disperzijskom relacijom $E(\vec{k}) = E_0 - 2t\cos k_y a - 4t\cos\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\cos\frac{k_y a}{2}$ (koristeći razvoj kosinusa) oko dna vrpce.

rj: $\frac{1}{\mathbf{m}^*} = \frac{3ta^2}{\hbar^2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$

Z-5.7 U aproksimaciji čvrste veze izvedi Blochove energije i Blochove valne funkcije za 1D lanac atoma u aproksimaciji prvih susjeda ako je preklapanje orbitala parametrizirano integralom elektronskog preskoka *t*.

rj:

$$E(k) = E^0 - 2t\cos(ka)$$

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_j}\phi(\vec{r}-\vec{R}_j)$$

gdje je: E^0 – sredina vrpce (atomska energija), $\mathbf{R}_j$ – koordinata j-tog čvora rešetke, **k** – Blochov valni vektor, $\phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j)$ – atomska valna funkcija na čvoru *j*, *N* – broj atoma u kristalu

Z-5.8 Izračunaj kohezivnu energiju 1D kristala konstante rešetke a u aproksimaciji čvrste veze prvih susjeda (integral elektronskog preskoka t) i pokaži ju kao funkciju popunjenja vrpce (Fermijev valni broj k_F).

rj: $E_{coh}^{1at.} = \frac{4t}{\pi}\sin(k_F a)$

Z-5.9 Izračunaj gustoću stanja 1D kristala konstante rešetke a u aproksimaciji čvrste veze prvih susjeda (integral elektronskog preskoka t), a zatim iz nje izračunaj kohezivnu energiju kao funkciju popunjenja vrpce (Fermijeva energija E_F).

rj:

$$g(E) = \frac{2L}{\pi a}\frac{1}{\sqrt{4t^2 - E^2}}$$

$$E_{coh}^{1at.} = \frac{2}{\pi}\sqrt{4t^2 - E_F^2}$$

Z-5.10 (a) Za 2D volumno centriranu pravokutnu rešetku stranica jedinične ćelije a i b, u okviru aproksimacije čvrste veze prvih susjeda (integral elektronskog preskoka t), odredi Blochove energije i njihov razvoj oko dna vrpce (točka u ishodištu ~$(k_x a)^2 + (k_y b)^2$).

rj:

$$E(\vec{k}) = E^0 - 4t\cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{k_y b}{2}$$

$$E(\vec{k}) \approx E^0 - 4t + \frac{t}{2}\left[(k_x a)^2 + (k_y b)^2\right]$$

*(b) Odredi gustoću stanja pri dnu vrpce

rj:

$$g(E) = \frac{L^2}{\pi abt}\Theta\left(E - E^0 + 4t\right)$$

Z-6.1 (Š 6.4) Izvedi Ohmov zakon promatrajući djelovanje konstantnog električnog polja **E** na elektron pri čemu pretpostavi da na elektron djeluje također i sila trenja proporcionalna njegovoj brzini.

rj:

$\vec{v}(t) = \vec{C}e^{-t/\tau} - \dfrac{e\vec{E}\tau}{m}$ - opće rješenje za brzinu elektrona (**C** - konstanta određena početnim uvjetom) koje u stacionarnoj granici daje $\vec{j} = \dfrac{e^2 n\tau}{m}\vec{E}$, gdje je τ - relaksacijsko vrijeme, n - koncentracija elektrona, m - masa elektrona

Z-6.2 Izvedi izraz za vodljivost metala u vremenski oscilirajućem električnom polju $\mathbf{E}=\mathbf{E}_0\exp(-i\omega t)$ polazeći od modela slobodnog elektrona na koji djeluje sila trenja proporcionalna njegovoj brzini. Zatim izvedi vodljivost u granicama $\omega\tau<<1$ i $\omega\tau>>1$, gdje je τ relaksacijsko vrijeme. Skiciraj rezultat grafički.

rj:

$$\sigma(\omega) = \sigma_0 \frac{1+i\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2}, \quad \sigma_0 \equiv \frac{e^2 n\tau}{m}$$

$$\omega\tau \ll 1: \quad \sigma(\omega) \approx \sigma_0(1+i\omega\tau)$$

$$\omega\tau \gg 1: \quad \sigma(\omega) \approx \sigma_0\left(\frac{1}{(\omega\tau)^2} + \frac{i}{\omega\tau}\right)$$

Z-6.3 Izvedi izraz za tenzor magnetovodljivosti **M** u magnetskom polju $\mathbf{B}=(0,0,B)$ za česticu naboja q.

rj:

$$\mathbf{M} = \frac{\sigma_0}{1+(\tilde{\omega}_c\tau)^2}\begin{pmatrix} 1 & \tilde{\omega}_c\tau & 0 \\ -\tilde{\omega}_c\tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1+(\tilde{\omega}_c\tau)^2 \end{pmatrix}, \quad \sigma_0 \equiv \frac{q^2 n\tau}{m}, \quad \tilde{\omega}_c \equiv \frac{qB}{m}$$

gdje veličina $\tilde{\omega}_c$ označava ciklotronsku frekvenciju koja nosi i predznak naboja, a s "pravom" ciklotronskom frekvencijom $\omega_c=|q|B/m$ povezana je na način: $\tilde{\omega}_c = -\omega_c,\ q<0; \quad \tilde{\omega}_c = \omega_c,\ q>0$

Z-6.4 Iz izraza za tenzor magnetovodljivosti za česticu naboja q

$$\mathbf{M} = \frac{\sigma_0}{1+(\tilde{\omega}_c\tau)^2}\begin{pmatrix} 1 & \tilde{\omega}_c\tau & 0 \\ -\tilde{\omega}_c\tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1+(\tilde{\omega}_c\tau)^2 \end{pmatrix}, \quad \sigma_0 \equiv \frac{q^2 n\tau}{m}, \quad \tilde{\omega}_c \equiv \frac{qB}{m}$$

izračunaj Hallovu konstantu (magnetsko polje je u z-smjeru).

rj: $R_H = \dfrac{1}{nq}$

Z-6.5 (Š 6.5*) Odredi izraz za Hallovu konstantu u slabom magnetskom polju **B**=(0,0,B) ako su nosioci naboja i elektroni i šupljine.

rj:

pošavši od tenzora **M**, zanemarenjem članova ~B^2, dobiva se $R_H = \dfrac{n_h\mu_h^2 - n_e\mu_e^2}{e(n_h\mu_h - n_e\mu_e)^2}$, gdje su $\mu_e = e\tau_e/m_e$ i $\mu_h = e\tau_h/m_h$ pokretljivosti elektrona i šupljina, a n_e i n_h pripadne koncentracije

Z-6.6 Odredi Hallovu vodljivost i Hallovu konstantu u aproksimaciji jakog magnetskog polja **B**=(0,0,B) uzevši u obzir da su nosioci naboja i elektroni i šupljine.

rj:

pošavši od tenzora **M**, zanemarenjem članova ~$1/B^2$, dobiva se

$$\sigma_{xy} = \frac{e}{B}(n_h - n_e)$$

$$R_H = \frac{1}{e(n_h - n_e)}$$

gdje su n_e i n_h koncentracije elektrona i šupljina

Z-6.7 Odredi ciklotronsku frekvenciju elektrona s elipsoidnom ekvienergetskom plohom danom disperzijskom relacijom $E(\vec{k}) = \hbar^2\left(\dfrac{k_x^2 + k_y^2}{2m_t} + \dfrac{k_z^2}{2m_l}\right)$ gdje su m_t i m_l transverzalna i longitudinalna efektivna masa. Magnetsko polje usmjereno je u smjeru x-osi tj. **B**=(B,0,0).

rj: $\omega_c = \dfrac{eB}{\sqrt{m_l m_t}}$

Z-6.8 Provjeri valjanost Wiedermann-Franzovog zakona u režimima $T <<< \Theta_D$, $T << \Theta_D$, $T >> \Theta_D$ argumentiravši temperaturnu ovisnost konkretnim izrazima.

rj:

$$\frac{\kappa_e\rho}{T} \sim \frac{l_0 C_V^{el.}\rho}{T} \sim \begin{cases} const, & T <<< \Theta_D \\ T^2, & T << \Theta_D \\ const, & T >> \Theta_D \end{cases}$$

Z-7.1 (Š 7.1) Za poluvodič (intrinsični) s normalnom ovisnošću procijepa o temperaturi odredi parametar T_0 ako je α=3.2·10^{-4}eV/K, a poluvodiču se zagrijavanjem od T=0 do T=300K energijski procijep smanji za 0.08eV.

rj: $T_0 = T\left(\frac{\alpha T}{E_g(0)-E_g(T)}-1\right)=60K$

Z-7.2 (Š 7.2*) Pošavši od izraza za koncentracije efektivnih nosilaca naboja izvedi izraz za položaj Fermijevog nivoa u intrinsičnom poluvodiču.

rj: $E_F = \frac{E_C+E_V}{2}-\frac{3}{4}k_B T\ln\frac{m_e^*}{m_h^*}$

Z-7.3 Izvedi zakon akcije (djelovanja) masa (ZAM) za intrinsični poluvodič.

rj: $n_i = \frac{2}{h^3}(2\pi k_B T)^{3/2}(m_e^* m_h^*)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$

Z-7.4 Izračunaj postotak povećanja intrinsične koncentracije nosilaca u siliciju pri povišenju temperature za 1K u odnosu na sobnu (300K) ako je za silicij E_g=1.1eV pri 300K. (k_B=8.62·10^{-5}eV/K)

rj: $\xi=(n_i(T_2)- n_i(T_1))/ n_i(T_1)$=7.86%

Z-7.5 Siliciju na sobnoj temperaturi (T=300K, n_i=1.45·10^{10}cm^{-3}) dodana je koncentracija N_D=5·10^{14}cm^{-3} donorskih i N_A=3·10^{14}cm^{-3} akceptorskih primjesa. Odredi tip poluvodiča i koncentracije manjinskih i većinskih nosilaca naboja u njemu.

rj:
n=2·10^{14}cm^{-3} - većinski, p=1.05·10^{6}cm^{-3} - manjinski; poluvodič je n-tipa

Z-7.6 Odredi položaj Fermijevog nivoa na T=300K za germanij (n_i=2.4·10^{13}cm^{-3} na 300K) koji sadrži N_D=5·10^{16}cm^{-3} atoma fosfora (donori) i N_A=8·10^{16}cm^{-3} atoma bora (akceptori).

rj: $|E_F-E_i|=k_B T\ln(p/n_i)$=0.185eV

Z-7.7 Odredi položaj Fermijevog nivoa za silicij (E_g=1.1eV, n_i=1.45·10^{10}cm^{-3} na 300K) dopiran s N_D=10^{14}cm^{-3} donorskih primjesa na T=400K.

rj: $|E_F-E_i|$= 0.11eV

Z-7.8 Fermijev nivo n-tipa silicija (E_g=1.1eV, C=2.32·10^{31}cm^{-6}K^{-3}) na 370K udaljen je za 0.37eV od dna vodljive vrpce. Odredi koncentraciju primjesa bora, koji treba dodati u taj poluvodič, da se Fermijev nivo pomake za 0.08eV prema sredini zabranjenog pojasa. (k_B=8.62·10^{-5}eV/K)

rj: Δp=4.48·10^{10}cm^{-3}

Z-8.1 (Š 6.2*) Vodič relativne permitivnosti $\varepsilon_r'=1$ (intrinsična) i vodljivosti $\sigma(\omega)$ nalazi se u oscilacijskom električnom polju $\mathbf{E}=\mathbf{E}_0\exp(-i\omega t)$. Izvedi izraz za ukupnu relativnu permitivnost vodiča induciranu protjecanjem električne struje.

rj: $\varepsilon_r = 1 + i\dfrac{\sigma(\omega)}{\varepsilon_0\omega}$

Z-8.2 Polazeći od općenitog izraza za dielektričnu funkciju elektronskog plina u "jellium" modelu

$$\varepsilon_r(\vec{q},\omega) = 1 - \frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2}\sum_{\vec{k},s}\frac{f(E_{\vec{k}}) - f(E_{\vec{k}+\vec{q}})}{\hbar\omega + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}}}$$

(a) izvedi izraz za $\varepsilon_r(\mathbf{q})$ u Thomas-Fermijevoj aproksimaciji ($\omega=0$, $q<<k_F$) na $T=0$.

rj: $\varepsilon_r(q) = 1 + \dfrac{e^2 g_F}{\varepsilon_0 q^2}$, gdje je g_F gustoća stanja na Fermijevom nivou

(b) izvedi izraz za $\varepsilon_r(\omega)$ u dinamičkoj granici ($\omega\neq 0$, $q<<k_F$) na $T=0$.

rj: $\varepsilon_r(\omega) = 1 - \dfrac{\omega_p^2}{\omega^2}$, gdje je ω_p frekvencija titranja plazme

Z-8.3 Nađi električno polje u središtu homogeno polarizirane dielektrične kugle čija polarizacija iznosi P, a radijus R.
(Uzmi da je površinska polarizacija gustoće naboja određena s P i iznos $P\cos(\theta)$, gdje je θ kut otklona radijvektora iz središta u odnosu na pol maksimalne polarizacije.)

rj: $E_x = \dfrac{P}{3\varepsilon_0}, \quad E_y = E_z = 0$

Z-8.4 a) Odredi renormaliziranu frekvenciju ω_T u odnosu na izvornu frekvenciju fononskih modova ionske rešetke ω_0 iz zahtjeva da se polarizacija može napisati kao $\vec{P} = n\alpha\vec{E}\Big|_{\omega_T}$ i kao

$$\vec{P}^* = \frac{n\alpha}{1-\dfrac{n\alpha}{3\varepsilon_0}}\vec{E}\Bigg|_{\omega_0}$$

b) Pošavši od izraza za dielektričnu funkciju $\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon^{(\infty)} + \dfrac{\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}}{1-\omega^2/\omega_T^2}$, pokaži da se ista može napisati u obliku $\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon^{(\infty)}\dfrac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2}$.

rj: a) $\omega_T^2 = \omega_0^2 - \frac{nq^2}{3\varepsilon_0 M_r}$, gdje je n - koncentracija dipola, q - naboj iona, M_r - reducirana masa elementarne ćelije

Z-8.5 Izvedi disperzijsku relaciju polaritona pošavši od izraza $\omega(k) = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_r(\omega)}} k$, uz zadanu $\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon^{(\infty)} + \frac{\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}}{1 - \omega^2 / \omega_T^2}$, te diskutiraj obje grane $\omega_\pm(k)$ u granicama $k \to 0$ i $k \to \infty$.

rj:

$$\omega_\pm^2(k) = \frac{1}{2\varepsilon^{(\infty)}} \left[\omega_T^2 \varepsilon^{(0)} + c^2 k^2 \pm \sqrt{(\omega_T^2 \varepsilon^{(0)} + c^2 k^2)^2 - 4\varepsilon^{(\infty)} \omega_T^2 c^2 k^2} \right]$$

$$\omega_+(k \to 0) = \sqrt{\omega_L^2 + \left(1 - \frac{\omega_T^2}{\omega_L^2}\right) \frac{c^2}{\varepsilon^{(\infty)}} k^2}; \quad \omega_+(0) = \omega_L$$

$$\omega_-(k \to 0) = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon^{(0)}}} k; \quad \omega_-(0) = 0$$

$$\omega_+(k \to \infty) = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon^{(\infty)}}} k$$

$$\omega_-(k \to \infty) = \omega_T$$

napomena: Kod računanja graničnih slučajeva vodi računa da u prevom članu pod kvadratnim korijenom u egzaktnom rezultatu uzmeš u obzir članove *istog reda* kao drugi član pod korijenom!

Z-8.6 (Š 3.4*) Promotri sustav lokaliziranih elektrona (u atomima) u oscilatornom električnom polju $E = E_0 \exp(-i\omega t)$. Pretpostavljajući da svaki elektron zadovoljava jednadžbu gibanja $m(\ddot{x} + \omega_0^2 x) = -eE - m\gamma\dot{x}$, gdje je m masa elektrona, ω_0 vlastita frekvencija titranja (u atomu), γ konstanta sile trenja, izvedi izraz za relativnu permitivnost.

rj: $\varepsilon_r(\omega) = 1 + \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)}$

Z-8.7 (Š 3.3*) Izvedi relaciju koja u najnižoj aproksimaciji određuje ovisnost indeksa loma o valnoj duljini. Uzmi u obzir samo atomsku polarizabilnost dielektrika.

rj: iz $\eta(\omega) = \sqrt{1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_{at}^2 - \omega^2}}$, gdje je ω_p frekvencija elektronske plazme, dobiva se

$$\eta(\lambda) = \eta_0 + \left(\frac{\lambda_0}{\lambda}\right)^2,$$

$$\eta_0 \equiv \sqrt{1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_{at}^2}}$$

$$\lambda_0^2 \equiv 2\pi^2 c^2 \frac{\omega_p^2}{\omega_{at}^4} \Bigg/ \sqrt{1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_{at}^2}}$$

Z-9.1 (Š 8.2) Zadana je valna funkcija elektrona u osnovnom kvantnom stanju vodikovog atoma $\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$, gdje je $a_0 = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2}$ Bohrov radijus. Izračunaj molarnu dijamagnetsku susceptibilnost plina vodikovih atoma.

rj: $\chi_d = -\frac{N_A \mu_0 \varepsilon_0^2 h^4}{2\pi^2 m^3 e^2} = -2.99 \cdot 10^{-11} m^3 mol^{-1}$

Z-9.2 (Š 8.3) Za sustav jednakih magnetskih dipola u magnetskom polju pokaži da je magnetizacija jednaka negativnoj derivaciji slobodne energije *F* po magnetskom polju *B*.

rj: $M = -\frac{\partial F}{\partial B}$

Z-9.3 (Š 8.4*) Odredi magnetizaciju jednakih magnetkih dipola ako projekcija dipola na smjer magnetskog polja **B** može poprimiti vrijednosti μ, 0, -μ. Primjenom dobivenog rezultata izvedi izraz za magnetsku susceptibilnost u granici $k_B T >> \mu B$. Usporedi izraz s "kvantnim" rezultatom za paramagnetizam atoma s predavanja ($j=l=1$, $s=0$, $\mu=\mu_B$).

rj: $\chi = \frac{2}{3} \frac{n\mu_0 \mu^2}{k_B T}$

Z-9.4 (Š 8.5*) Izvedi izraz za atomsku paramagnetsku susceptibilnost uz pretpostavku da kut između magnetskog polja **B** i magnetskog dipola **μ** može biti proizvoljan. Potom iz dobivenog rezultata izvedi izraz u granici $k_B T >> \mu B$.

rj:

$$M = n\mu L\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right), \quad L(x) \equiv \mathrm{cth}(x) - \frac{1}{x}$$

$$\chi \approx \frac{n\mu_0 \mu^2}{3k_B T}, \quad \mu B \ll k_B T$$

Z-9.5 U okviru klasične Weissove teorije feromagnetizma, polazeći od izraza za magnetizaciju paramagneta $M = n\mu_B \tanh \frac{\mu_B B}{k_B T}$, izvedi:

a) uvjet nastajanja spontane magnetizacije

b) izraz za susceptibilnost u paramagnetskoj fazi (Curie-Weiss) u granici visokih temperatura (u odnosu na magnetske pojave).

rj:

a) dobiva se transcedentna jednadžba $x = \tanh\left(\frac{T_C}{T}x\right), x \equiv \frac{M}{n\mu_B}, T_C \equiv \frac{\mu_B^2 \lambda n}{k_B}$ koja ima neiscezavajuća rješenja za $x \sim M$ ako je $T<T_C$ tj. $T < \frac{\mu_B^2 n\lambda}{k_B}$ (λ je Weissova konst.)

b) $\chi_p = \frac{C}{T-T_C}, \quad C \equiv \frac{n\mu_0\mu_B^2}{k_B}$

Z-9.6 (Š 8.7*) Izvedi izraz za spinski paramagnetizam vodljivih elektrona (Pauli) u metalu pri temperaturi apsolutne nule koristeći razvoj Fermi-Diracove raspodjele pri $\mu_B B << E_F$.

rj: $\chi_P = \mu_0 \mu_B^2 g_F$

Z-9.7 Izvedi izraz za spinsku susceptibilnost slobodnog elektronskog plina ako u Paulijev paramagnetizam uključimo i odbojnu kulonsku interakciju elektrona suprotnog spina na istom čvoru rešetke (kratkodosežna interakcija) parametriziranu na način $E_{int} = Un_\uparrow n_\downarrow$ (U je konstanta interakcije, $n_\uparrow$, $n_\downarrow$ su koncentracije spina $\uparrow$, $\downarrow$). Koji uvjet je potrebno ispuniti da se elektronski spinovi spontano urede feromagnetski? Neka je g_F gustoća stanja elektrona na Fermijevoj energiji.

rj: $\chi = \frac{g_F \mu_0 \mu_B^2}{1 - \frac{g_F U}{2}}$

uvjet spontane magnetizacije (feromagnetizam): $1 - \frac{g_F U}{2} = 0$ (Stonerov kriterij)

Z-9.8 Izračunaj totalni angularni moment j (kvantni broj) za atom:
a) C6; b) Fe26; c) Co27

rj: a) j=0; b) j=4; c) j=7/2

Z-9.9 Pokaži da se orbitalni magnetski moment točkastog naboja q, koji se giba jednoliko po zatvorenoj petlji proizvoljnog oblika u ravnini, može napisati kao $\vec{\mu} = \frac{1}{2}\int \vec{r} \times \vec{j}\, dV$ i $\vec{\mu} = \frac{q}{2m}\vec{L}$, gdje je **L** mehanički angularni moment.

Z-9.10 Polazeći od hamiltonijana atomskog elektronskog spina **S** i angularnog momenta **L** u vanjskom magnetskom polju **B**; $H = \frac{e}{2m}\left(\vec{L} + 2\vec{S}\right) + \alpha \vec{L} \cdot \vec{S}$, gdje je α<<1 konstanta vezanja spin-staza (L-S vezanje), odredi njegovu energiju u granici slabog i u granici jakog magnetskog polja.

rj:

a) za slabo B član L-S vezanja je nezanemariv i uzrokuje precesiju **L** i **S** oko **J**; problem možemo riješiti tako da **L** i **S** prvo proiciramo na **J**, a potom na os kvantizacije određenu s **B** - to je tzv. Zeemanov efekt:

$$E = \mu_B g_j j_z B, \quad g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$ (Landeov faktor)

b) za jako B član L-S je zanemariv; L i S se ponašaju nevezano i svaki za sebe se direktno proicira na os kvantizacije određenu s **B** - to je Paschen-Bachov efekt:

$$E = \mu_B \left(l_z + 2s_z \right) B$$