

Sveučilište u Rijeci, Odjel za fiziku

Velimir Labinac

Fizika čvrstog stanja I

Zbirka zadataka

Izdano: 17. kolovoza 2020.

Ova zbirka sadrži zadatke koji su tijekom godina dani na vježbama, domaćim zadaćama, kolokvijima i pismenim ispitima iz kolegija *Fizika čvrstog stanja I*. Zbirku ću nadopunjavati novim zadacima, a u planu su i rješenja/upute za jedan dio zadataka.

Okosnicu zbirke čine zadaci iz knjige Ashcroft N. Q., Mermin N. D., *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976. Većina zadataka iz navedene knjige poprilično je teška, ali s druge strane, veoma korisna za rješavanje jer se tako utvrđuje razmišljanje osnovnih ideja u fizici kondenzirane materije i priprema studenta za samostalan istraživački rad. Ostali zadaci su iz raznih izvora i različitih težina, no čini se da ipak vrijedi ona popularna izjava: „Zadaci iz fizike kondenzirane materije su ili trivijalni ili veoma teški! ”

Glavni razlog zbog kojeg sam složio ovu zbirku jest da zadatke sustavno razvrstam po poglavljima koja su relevantna za polaganje ispita. Naime, fizika kondenzirane materije je najveće područje fizike, sadrži mnoštvo koncepata, definicija i formula te se, veoma često, temeljni koncepti javljaju u različitim varijacijama. Zbog toga je studentima teško razlučiti, pohvatati i zapamtiti sve detalje. Mislím, zato, da je svaki pokušaj sistematizacije tog ogromnog područja fizike studentima itekako koristan.

Velimir Labinac
Sveučilište u Rijeci, Odjel za fiziku

Sadržaj

1. Drudeova teorija metala	1
2. Sommerfeldova teorija metala.....	4
3. Kristalna rešetka	7
4. Recipročna rešetka.....	11
5. Difrakcija neutrona i rendgenskog zračenja na kristalima.....	13
6. Elektron u periodičnom potencijalu. Blochov teorem.....	17
7. Aproksimacija gotovo slobodnih elektrona	21
8. Aproksimacija čvrste veze	23
9. Metode za proračun elektron-elektron interakcije	26
10. Poluklasični model dinamike Blochovih elektrona	29
11. Poluklasična teorija provođenja u metalima	32
12. Optička svojstva metala	34
13. Međuatomske veze u kristalima. Kohezivna energija	36
14. Klasična teorija titranja kristalne rešetke. Elastičnost.....	39
15. Kvantna teorija titranja kristalne rešetke. Fononi	42
16. Anharmonički efekti u kristalu	46
17. Fononi u metalu. Mjerenje fononske disperzije	47
18. Dielektrička svojstva izolatora. Polaritoni.....	49
19. Homogeni poluvodiči.....	51
20. Optička svojstva poluvodiča. Ekscitoni	54
21. Dijamagnetizam i paramagnetizam	56
22. Elektronske interakcije i magnetska struktura.....	59
23. Magnetsko uređenje. Magnoni	60
24. Supravodljivost.....	62
Literatura	66

1 Drudeova teorija metala

Zadatak 1.1 Drudeove teorije procijenite red veličine relaksacijskog vremena i srednjeg slobodnog puta vodljivih elektrona u metalima.

Zadatak 1.2 Upotrebom Drudeove teorije procijenite red veličine termičke brzine elektrona (brzina uslijed toplinskog gibanja) i driftne brzine elektrona (brzina zanošenja, brzina uslijed djelovanja vanjskog električnog polja) u metalima na sobnoj temperaturi i u električnom polju $1 \text{ V} \cdot \text{m}^{-1}$.

Zadatak 1.3 U Drudeovom modelu metala, vjerojatnost da se elektron sudari u infinitezimalnom vremenskom intervalu dt iznosi dt/τ .

(a) Pokažite da je vjerojatnost da se slučajno izabrani elektron u trenutku t nije sudario u vremenskom intervalu $[0, t]$ jednaka $\exp(-t/\tau)$. Pokažite da je vjerojatnost da se neće sudariti u sljedećem vremenskom intervalu $[t, 2t]$ također jednaka $\exp(-t/\tau)$.

(b) Pokažite da je vjerojatnost da vremenski interval između dva uzastopna sudara leži unutar $[t, t + dt]$ jednaka $(dt/\tau)\exp(-t/\tau)$.

(c) Pokažite da je posljedica tvrdnje pod (a) sljedeća: u bilo kojem trenutku je prosječno vrijeme od prethodnog ili do sljedećeg sudara jednako τ gdje se prosjek uzima po svim elektronima.

(d) Pokažite da je posljedica tvrdnje pod (b) sljedeća: prosječno vrijeme između dva uzastopna sudara elektrona iznosi τ .

(e) Iz dijela (c) slijedi da u bilo kojem trenutku, vrijeme između prethodnog i sljedećeg sudara T usrednjeno preko svih elektrona iznosi 2τ . Objasnite zašto taj rezultat nije suglasan tvrdnji iz dijela (d). Potpuno objašnjenje trebalo bi uključivati izvod razdiobe vjerojatnosti za T .

Razlika u rezultatima (d) i (e) navela je Drudea da za vodljivost σ uzme samo polovinu vrijednosti dobivene teorijom. Pri proračunu toplinske vodljivosti nije napravio istu pogrešku pa se zato faktor 2 javlja u Lorenzovom broju.

Zadatak 1.4 Elektron se sudario s ionom koji se nalazi položaju s temperaturom T . Nađite vjerojatnost da elektron nakon sudara ima brzinu veću od najvjerojatnije brzine $v_m = (2k_B T/m)^{1/2}$.

Zadatak 1.5 (a) Riješite Drudeovu jednadžbu za elektron u uzorku metala koji je u konstantnom električnom polju E_0 . Konstante integracije ostavite nepoznatim.

(b) Pretpostavimo da smo u trenutku $t_0 = 0$ isključili električno polje. Koja je ovisnost driftne brzine o vremenu?

(c) Kako glasi rješenje za driftnu brzinu v_d iz dijela (a) za $t \gg \tau$? Pretpostavimo li da su driftne brzine svih elektrona jednake kolika je gustoća struje $\mathbf{j} = -en\mathbf{v}_d$? Iz ove relacije izvedite Ohmov zakon i DC električnu provodnost.

Zadatak 1.6 Uzorak metala stavimo u statičko električno polje $\mathbf{E}$ i statičko magnetsko polje $\mathbf{B} = B_0\mathbf{e}_z$. Vodljivi elektroni mogu se smatrati slobodnim elektronskim plinom u Drudeovom modelu gdje je relaksacijsko vrijeme τ i gustoća elektrona n .

(a) Napišite Drudeovu jednadžbu za ovaj sustav.

(b) Pomoću jednadžbi $\mathbf{j} = -en\mathbf{p}/m$ i $E_i = \rho_{il} j_l$ nađite tenzor otpornosti ρ_{il} .

Zadatak 1.7 Promotrite metalnu žicu na konstantnoj temperaturi u jednodolikom statičkom električnom polju $\mathbf{E}$. Neka se odabrani elektron u žici sudari u trenutku t_1 i neka se elektron drugi put sudari nakon vremena $t_2 - t_1 = t$. U Drudeovom modelu, energija elektrona u sudarima nije očuvana jer prosječna brzina elektrona nakon sudara ne ovisi o energiji koju je elektron dobio od polja $\mathbf{E}$ u vremenu između dva sudara prema pretpostavkama teorije.

(a) Pokažite da je prosječna energija koju elektron izgubi i preda ionima u drugom sudaru jednaka $(eEt)^2/2m$. Prosjek se uzima po svim smjerovima u kojima se elektron može gibati nakon prvog sudara.

(b) Upotrijebite rezultat iz 1.3 (b) i pokažite da je prosječna energija koju elektron izgubi u jednom sudaru i preda ionu, jednaka $(eE\tau)^2/m$. Drugim riječima, gubitak energije po kubnom centimetru po sekundi iznosi $(ne^2\tau/m)E^2 = \sigma E^2$.

(c) Iz (b) zaključite da je gubitak snage u žici duljine L i površine presjeka A jednak $I^2 R$, gdje je I struja koja protječe žicom, a R električni otpor.

Zadatak 1.8 Pretpostavimo da je metal stavljen u jednodoliko magnetsko polje $\mathbf{H}$ u smjeru osi z . Primijenimo električno polje $\mathbf{E}\exp(-i\omega t)$ čiji je smjer okomit na $\mathbf{H}$, dakle, leži u ravnini xy .

(a) Ako je električno polje cirkularno polarizirano ($E_y = \pm iE_x$), pokažite da vrijedi

$$j_x = \left(\frac{\sigma_0}{1 - i(\omega \mp \omega_c)\tau} \right) E_x$$

$$j_y = \pm i j_x$$

$$j_z = 0$$

(b) Pokažite da, u skladu s dijelom (a), Maxwellove jednadžbe imaju rješenje oblika

$$E_x = E_0 e^{i(kz - \omega t)}$$

$$E_y = \pm i E_x$$

$$E_z = 0$$

pri čemu vrijedi $k^2 c^2 = \epsilon \omega^2$, gdje je

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \left[\frac{\omega \tau}{i + \tau(\omega \mp \omega_c)} \right]$$

(c) Skicirajte $\epsilon(\omega)$ za $\omega > 0$ pri polarizaciji $E_y = iE_x$ i pokažite da rješenja jednadžbe $k^2 c^2 = \epsilon \omega^2$ postoje za proizvoljni k pri frekvencijama $\omega > \omega_p$ i $\omega > \omega_c$. Pretpostavite da je $\omega_c \tau \gg 1$, odnosno da je magnetsko polje jako, te primijetite da je uvjet $\omega_p / \omega_c \gg 1$ zadovoljen čak i ako je iznos polja H nekoliko stotina kilogausa.

(d) Pokažite da, uz uvjet $\omega \ll \omega_c$, relacija koja povezuje k i ω za niske frekvencije glasi

$$\omega = \omega_c \left(\frac{k^2 c^2}{\omega_p^2} \right)$$

Ovakav nisko-frekventni val naziva se helikon i primijećen je u mnogim metalima. Procijenite frekvenciju helikona ako je valna duljina 1 cm i polje 10 kilogausa, na uobičajenim gustoćama u metalu.

Zadatak 1.9 Elektromagnetski val koji se širi površinom metala može otežati opažanje (volumnih) plazmona, kolektivnih pobuđenja slobodnih elektrona u metalima. Pretpostavimo da metal ispunjava poluprstor $z > 0$ i neka se u poluprostoru $z < 0$ nalazi vakuum. Pretpostavite, nadalje, da je gustoća slobodnog naboja jednaka nuli u oba poluprostora. Površinski plazmon je rješenje Maxwellovih jednadžbi oblika:

$$E_x^> = A e^{iqx} e^{-Kz}, \quad E_y^> = 0, \quad E_z^> = B e^{iqx} e^{-Kz}, \quad z > 0$$

$$E_x^< = C e^{iqx} e^{K'z}, \quad E_y^< = 0, \quad E_z^< = D e^{iqx} e^{K'z}, \quad z < 0$$

gdje su q , K i K' realni, te K i $K' > 0$.

(a) Uvrstite navedena rješenja u Maxwellove jednadžbe (CGS sustav)

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$$

$$-\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega) \mathbf{E}$$

gdje je $\epsilon(\omega)$ kompleksna dielektrična konstanta za metal dobivena u Drudeovom modelu. Primijetite da za vakuum vrijedi $\epsilon = 1$. Kako glase jednadžbe za A , B , C , D , q , K i K' koje dobivate nakon uvrštavanja?

(b) Pretpostavite uobičajene rubne uvjete za električno polje $\mathbf{E}$ i električni pomak $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$ po ravnini $z = 0$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{E}^> - \mathbf{E}^<) = 0$$

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}^> - \mathbf{D}^<) = 0$$

Napišite dvije jednadžbe za koeficijente A , B , C i D koje dobivate uvrštavanjem pretpostavljenog rješenja u rubne uvjete.

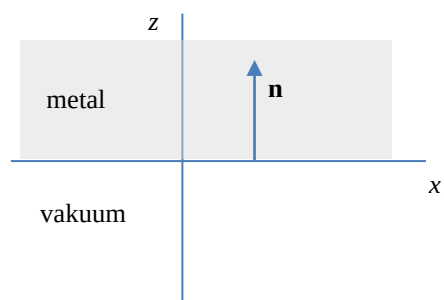
(c) Iz šest jednadžbi koje ste dobili pod (a) i (b), nađite q , K i K' kao funkcije od ω . Koji uvjet mora zadovoljiti dielektrična konstanta da ove veličine budu realne?

(d) Pokažite da u granici $qc \gg \omega$ postoji rješenje za frekvenciju

$$\omega_0 = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}$$

gdje je ω_p plazmena frekvencija. Zbog $\omega_0 \sim \omega_p$ uzmite da $\omega \tau \gg 1$ i $\epsilon(\omega) = 1 - (\omega_p/\omega)^2$. Ispitajte K i K' i pokažite da je val omeđen uz površinu $z = 0$. Kakva je polarizacija ovog površinskog EM vala?

1 DRUDEOVA TEORIJA METALA



2 Sommerfeldova teorija metala

Zadatak 2.1 Fermijeva energija srebra iznosi 5,5 eV.

- (a) Kolika je prosječna energija slobodnih elektrona u srebru na 0 K?
 (b) Na kojoj bi temperaturi bio idealni plin ako bi atomi ili molekule u idealnom plinu imali energiju izračunatu pod (a)?
 (c) Koja brzina odgovara energiji pod (a)?

Zadatak 2.2 Vjerojatnost da elektroni u uzorku srebra zauzmu energiju $1,01 \epsilon_F$ iznosi 0,1. Kolika je temperatura uzorka? Fermijeva energija srebra je $\epsilon_F = 5,5$ eV.

Zadatak 2.3 Fermijeva energija srebra iznosi 5,5 eV.

Izračunajte koliki dio slobodnih elektrona na sobnoj temperaturi ima energije iz intervala $[\epsilon_F - k_B T, \epsilon_F + k_B T]$.

Zadatak 2.4 Koristite Sommerfeldov model za elektrone u metalu i izračunajte broj elektronskih kvantnih stanja u kocki stranice 1 cm čija je energija manja od 1 eV.

Zadatak 2.5 Koristite Sommerfeldov model za elektrone u metalu i izračunajte broj elektronskih kvantnih stanja po jediničnom volumenu u intervalu energija $[\epsilon_F, \epsilon_F + \Delta\epsilon]$ za natrij. Fermijeva energija za natrij je $\epsilon_F = 3,22$ eV dok je širina intervala $\Delta\epsilon = 0,02$ eV.

Zadatak 2.6 Kemijski potencijal, ili približno, Fermijeva energija za volfram na 300 K iznosi 4,5 eV. Nađite vjerojatnost zaposjednuća (zauzeća) stanja s energijom ϵ koja je 10% manja od Fermijeve energije.

Zadatak 2.7 Kolika mora biti koncentracija elektronskog plina da bi pri temperaturi apsolutne nule prosječan iznos valnog vektora bio $\langle k \rangle = 1,5 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$?

Zadatak 2.8 Primjena hidrostatskog tlaka na metal uzrokuje povećanje Fermijeve energije zbog povećanja elektronske gustoće.

- (a) Izvedite izraz za promjenu Fermijeve energije u ovisnosti o promjeni tlaka.
 (b) Izračunajte tlak koji je potreban da se Fermijeva energija promijeni za faktor 1,000 001 za bakar. Elektronska gustoća u bakru iznosi $8,47 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$.
 (c) Izračunajte promjenu gustoće stanja na Fermijevoj sferi za bakar kad se Fermijeva energija promijeni za faktor 1,000 001.

Zadatak 2.9 Promotrimo Sommerfeldov dvodimenzionalni model metala.

- (a) Kako se odnose gustoća elektrona n i Fermijev valni vektor k_F ?
 (b) Kako se odnose Fermijev valni vektor i veličina r_s ?
 (c) Pokažite da je gustoća stanja $g(\epsilon)$ neovisna o energiji jednočestičnih stanja ϵ za $\epsilon > 0$ i za $\epsilon < 0$. Koliko iznosi $g(\epsilon)$?
 (d) Pokažite da su zbog konstantne gustoće stanja, svi članovi Sommerfeldova razvoja za gustoću n jednaki nuli, osim člana za kojeg je $T = 0$. Zaključite da je tada kemijski potencijal $\mu = \epsilon_F$ na svim temperaturama.
 (e) Iz izraza za gustoću čestica

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon g(\epsilon) f(\epsilon)$$

zaključite da zbog konstantne gustoće $g(\epsilon)$ vrijedi

$$\mu + k_B T \ln(1 + e^{-\mu/k_B T}) = \epsilon_F.$$

- (f) Iz rezultata (e) procijenite koliko se μ razlikuje od ϵ_F . Komentirajte koliko je numerički značajna pogreška Sommerfeldova razvoja pod (d) i koji je matematički razlog ove pogreške.

Zadatak 2.10 Pomoću termodinamičkih relacija

$$c_V = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_n = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_n,$$

izraza za gustoću unutrašnje energije u , Fermi-Diracove razdiobe te trećeg zakona termodinamike ($s \rightarrow 0$ za $T \rightarrow 0$), pokažite da je gustoća entropije $s = S/V$ slobodnog elektronskog plina dana jednadžbom

$$s = -k_B \int \frac{d^3k}{4\pi} \left[f(\mathcal{E}) \ln f(\mathcal{E}) + (1 - f(\mathcal{E})) \ln(1 - f(\mathcal{E})) \right],$$

gdje je $f(\mathcal{E})$ Fermi-Diracova razdioba.

Zadatak 2.11 Fermi-Diracova razdioba svodi se na Maxwell-Boltzmannovu razdiobu u slučaju da je Fermijeva funkcija mnogo manja od jedan za svaki pozitivan $\mathcal{E}$ jer je tada

$$f(\mathcal{E}) \approx e^{-(\mathcal{E}-\mu)/k_B T} \quad (1.1)$$

Nužan uvjet i dovoljan uvjet da gornja jednakost (1.1) vrijedi za svaki pozitivan $\mathcal{E}$ je

$$e^{-\mu/k_B T} \gg 1 \quad (1.2)$$

(a) Uz pretpostavku da vrijedi (1.1) pokažite da je iz definicije veličine r_s slijedi

$$r_s = e^{-\mu/3k_B T} 3^{1/3} \pi^{1/6} \hbar (2mk_B T)^{-1/2}$$

Pokažite da zbog (1.2) možemo pisati

$$r_s \gg \left(\frac{\hbar^2}{2mk_B T} \right)^{1/2} \quad (1.3)$$

što je moguće uzeti kao uvjet valjanosti klasične mehanike.

(b) Koje je značenje duljine koju veličina r_s mora prelaziti?

(c) Pokažite da (1.3) pokazuje brojčani uvjet

$$\frac{r_s}{a_0} \gg \left(\frac{10^5 \text{ K}}{T} \right)^{1/2}$$

(d) Pokažite da se normalizacijska konstanta $m^3/4\pi^3\hbar^3$ koja se pojavljuje u Fermi-Diracovoj razdiobi brzina može napisati u obliku

$$\frac{3\sqrt{\pi}}{4} \left(\frac{m}{2\pi k_B T_F} \right)^{3/2} n$$

pa je

$$\frac{f_B(0)}{f(0)} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{T_F}{T} \right)^{3/2}$$

Zadatak 2.12 U Sommerfeldovoj teoriji metala, vjerojatnost da promatrana energijska razina bude zaposjednuta ne bi se trebala jako promijeniti ako se ukupni broj elektrona promijeni za jedan. Provjerite je li Fermijeva funkcija kompatibilna s tom činjenicom na sljedeći način:

(a) Pokažite, za $k_B T \ll \mathcal{E}_F$, da kad se broj elektrona promijeni za jedan na fiksnoj temperaturi, kemijski potencijal promijeni se za iznos

$$\Delta\mu = \frac{1}{Vg(\mathcal{E}_F)}$$

gdje je $g(\mathcal{E})$ gustoća stanja (po jediničnom volumenu).

(b) Pokažite, kao posljedica izraza pod (a), da se vjerojatnost zaposjednuća energijske razine može **najviše** može promijeniti za

$$(\Delta f)_{\max} = \frac{1}{6} \frac{\mathcal{E}_F}{k_B T} \frac{1}{N}$$

Iako se mogu postići veoma niske temperature za koje je $\mathcal{E}_F/k_B T \approx 10^{14}$, broj elektrona N je reda veličine 10^{22} pa je Δf još uvijek zanemarivo malo.

Uputa: pod (a), upotrijebite izraz za gustoću elektrona $n = N/V$ pri $k_B T \ll \mathcal{E}_F$ [Ashcroft and Mermin, (2.75)]

$$n = \int_0^{\mathcal{E}_F} g(\mathcal{E}) d\mathcal{E} + \left\{ (\mu - \mathcal{E}_F) g(\mathcal{E}_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g'(\mathcal{E}_F) \right\}$$

Pod (b), krenite od Fermijeve funkcije (vjerojatnost zaposjednuća energijske razine $\mathcal{E}$) i potražite male promjene za f pri malim promjenama kemijskog potencijala μ . Također, uzimate u obzir da je $g(\mathcal{E}_F) = 3n/2\mathcal{E}_F$.

Zadatak 2.13 (a) Razmotrite elektrone u metalu u aproksimaciji neovisnog elektrona i pokažite da je vjerojatnost da je stanje energije $\Delta\mathcal{E}$ **iznad** Fermijeve razine popunjeno jednaka vjerojatnosti da je stanje energije $\Delta\mathcal{E}$ **ispod** Fermijeve razine prazno. Pretpostavite da je kemijski potencijal približno jednak Fermijevoj energiji.

(b) Označite vjerojatnost izračunatu pod (a) s w_0 . Ako je ovisnost kemijskog potencijala o temperaturi do članova drugog reda po $k_B T / \mathcal{E}_F$ u Sommerfeldovu modelu jednaka

$$\mu = \mathcal{E}_F \left[1 - \frac{1}{3} \left(\frac{\pi k_B T}{2 \mathcal{E}_F} \right)^2 \right]$$

pokažite da je relativna promjena vjerojatnosti iz (a) do najnižeg reda po $k_B T / \mathcal{E}_F \ll 1$ jednaka

$$\frac{|w_1 - w_0|}{w_0} = \frac{\pi^2}{12} \frac{k_B T}{\mathcal{E}_F} \frac{1}{1 + \exp(-\Delta \mathcal{E} / k_B T)}$$

(c) Ocijenite relativnu promjenu vjerojatnosti ako je $k_B T / \mathcal{E}_F \sim 0,01$ na sobnoj temperaturi.

3 Kristalna rešetka

Zadatak 3.1 Poslužite se tablicama i za kristal aluminija odredite:

- broj atoma aluminija u 1 m^3 ;
- volumen jedinične ćelije i konstantu rešetke;
- polumjer kugle čiji je volumen jednak volumenu prostora po jednom atomu;
- polumjer atoma aluminija (računajte kao da se atomi dodiruju po dijagonali stranice ćelije).

Zadatak 3.2 Bazu kristala čini jedan atom po čvoru rešetke i skup primitivnih vektora (u jedinicama 10^{-10} m):

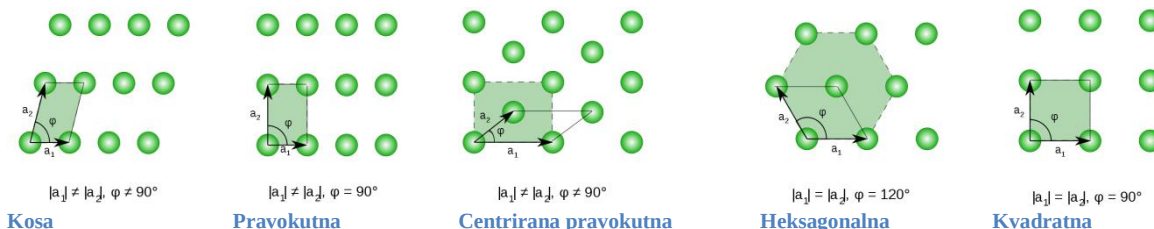
$$\mathbf{a} = 3\mathbf{e}_x, \mathbf{b} = 3\mathbf{e}_y, \mathbf{c} = \frac{3}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)$$

- O kojoj se Bravaisovoj rešetki radi u ovom kristalu?
- Izračunajte volumen primitivne i standardne jednične ćelije.

Zadatak 3.3 (a) Pokažite da savršeni c/a omjer za heksagonsku gusto slagano rešetku iznosi $(8/3)^{1/2} = 1,633$.
 (b) Natrij mijenja kristalnu strukturu iz bcc u hcp na temperaturi 23 K (martenzitna transformacija). Pretpostavljajući da se gustoća ne mijenja tijekom transformacije, nađite konstantu rešetke a heksagonske faze ako je poznata konstanta rešetke $a = 4,23 \text{ Å}$ kubne faze kao i da je c/a omjer veoma približan savršenom omjeru.

Zadatak 3.4 Željezo kristalizira u bcc rešetki na intervalu temperatura ispod $t_0 = 910^\circ$ i u fcc rešetki na intervalu temperatura iznad t_0 . Izračunajte omjer masenih gustoća željeza za ove dvije rešetke pod pretpostavkom da se atomi smatraju gusto slaganim sferama čiji je promjer jednak u obje rešetke.

Zadatak 3.5 (a) Konstruirajte najmanje tri primitivne ćelije za svaku od Bravaisovih dvodimenzionalnih rešetki na slici.
 (b) Konstruirajte Wigner-Seitzovu ćeliju za svaku od Bravaisovih dvodimenzionalnih rešetki.



(c) Uvjerite se da konstrukcija Wigner-Seitzove ćelije slijedi iz njene definicije.

Zadatak 3.6 Plošno centrirana (fcc) je najviše, a jednostavna kubna (sc) je najmanje gusta od svih triju kubnih Bravaisovih rešetki. Dijamantna struktura je gusta manje od bilo koje kubne Bravaisove rešetke. Jedna mjera za gustoću slaganja u rešetki je koordinacijski broj koji za fcc iznosi 12, za bcc je 8, za sc je 6, a za dijamantnu strukturu iznosi 4. Druga mjera je sljedeća: pretpostavimo da su identične kugle razmještene po prostoru tako da se njihova središta podudaraju s čvorovima četiriju navedenih struktura i da se kugle dodiruju u jednoj točki, bez prekrivanja. Takav se raspored kugli naziva gusto pakirani raspored. Pretpostavljajući da kugle imaju jediničnu gustoću, pokažite da je (prosječna) gustoća gusto pakiranih rasporeda u četiri rešetke jednaka:

$$\text{fcc: } \sqrt{2}\pi / 6 = 0,74$$

$$\text{bcc: } \sqrt{3}\pi / 8 = 0,68$$

$$\text{sc: } \pi / 6 = 0,52$$

$$\text{dijamant: } \sqrt{3}\pi / 16 = 0,34$$

Zadatak 3.7 Ispitajte je li neka od navedenih rešetki Bravaisova. Ako jest, napišite tri primitivna vektora; ako nije, opišite strukturu kao Bravaisovu rešetku s najmanjom mogućom bazom.

(a) Bazno centrirana kubna rešetka - jednostavna kubna rešetka s dodatnim čvorovima rešetke po horizontalnim stranicama kocke.

(b) Pobočno (bočno) centrirana kubna rešetka - jednostavna kubna rešetka s dodatnim čvorovima rešetke po vertikalnim stranicama kocke.

(c) Bridno centrirana kubna rešetka - jednostavna kubna rešetka s dodatnim čvorovima rešetke po bridovima kocke.

Zadatak 3.8 (a) Neka je $\mathbf{a}_1$ vektor koji spaja proizvoljni čvor rešetke P s jednim od najbližih susjednih čvorova u danoj Bravaisovoj rešetki. Neka je P' čvor rešetke koji se ne nalazi na pravcu p kroz P sa smjerom $\mathbf{a}_1$ i koji je bliži pravcu p nego bilo koja druga točka rešetke. Spojimo P i P' vektorom $\mathbf{a}_2$. Odaberimo, dalje, točku P'' koja ne pripada ravnini r određenoj vektorima $\mathbf{a}_1$ i $\mathbf{a}_2$ i koja je bliža ravnini r od bilo koje druge točke rešetke. Spojimo točke P i P'' vektorom $\mathbf{a}_3$. Pokažite da su $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ i $\mathbf{a}_3$ primitivni vektori.

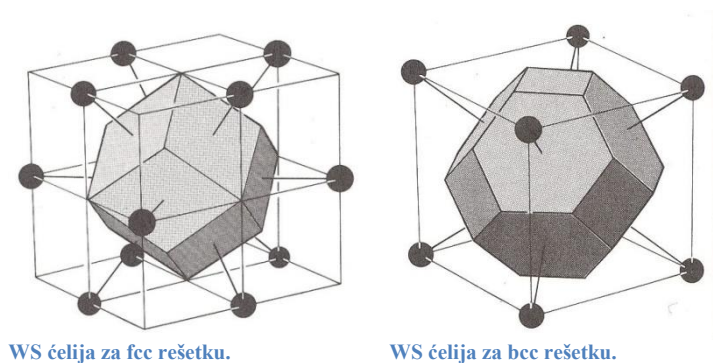
(b) Dokažite da Bravaisovu rešetku možemo definirati kao diskretan skup vektora koji ne leže svi u jednoj ravnini, a skup je zatvoren u odnosu na zbrajanje i oduzimanje.

Zadatak 3.9 (a) Dokažite da je Wigner-Seitzova (WS) ćelija za bilo koju dvodimenzionalnu Bravaisovu rešetku šesterokut ili pravokutnik (kvadrat).

(b) Pokažite da je omjer duljina dijagonala svake stranice WS ćelije za plošno centriranu kubnu rešetku (fcc) jednak $2^{1/2}/1$. Stranice su u obliku paralelograma.

(c) Pokažite da svaki brid poliedra koji omeđuje WS ćeliju prostorno centrirane kubne rešetke (bcc) ima duljinu jednaku $2^{1/2}/4$ duljine standardne jedinične ćelije.

(d) Pokažite da su stranice WS ćelije za bcc rešetku pravilni šesterokuti.

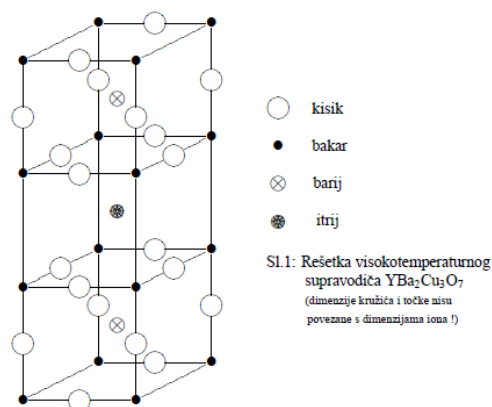


Zadatak 3.10 Na slici je prikazana jedinična ćelija visokotemperaturnog supravodiča $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Visina ćelije je $c = 11,708 \text{ \AA}$, a horizontalne stranice su $a = 3,827 \text{ \AA}$ i $b = 3,877 \text{ \AA}$.

(a) Koju vrstu kristalne rešetke ima $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$? Stranice su pod pravim kutom.

(b) Odrediti broj iona itrija, barija, bakra i kisika unutar primitivne (jednostavne) ćelije. Obrazložite odgovor.

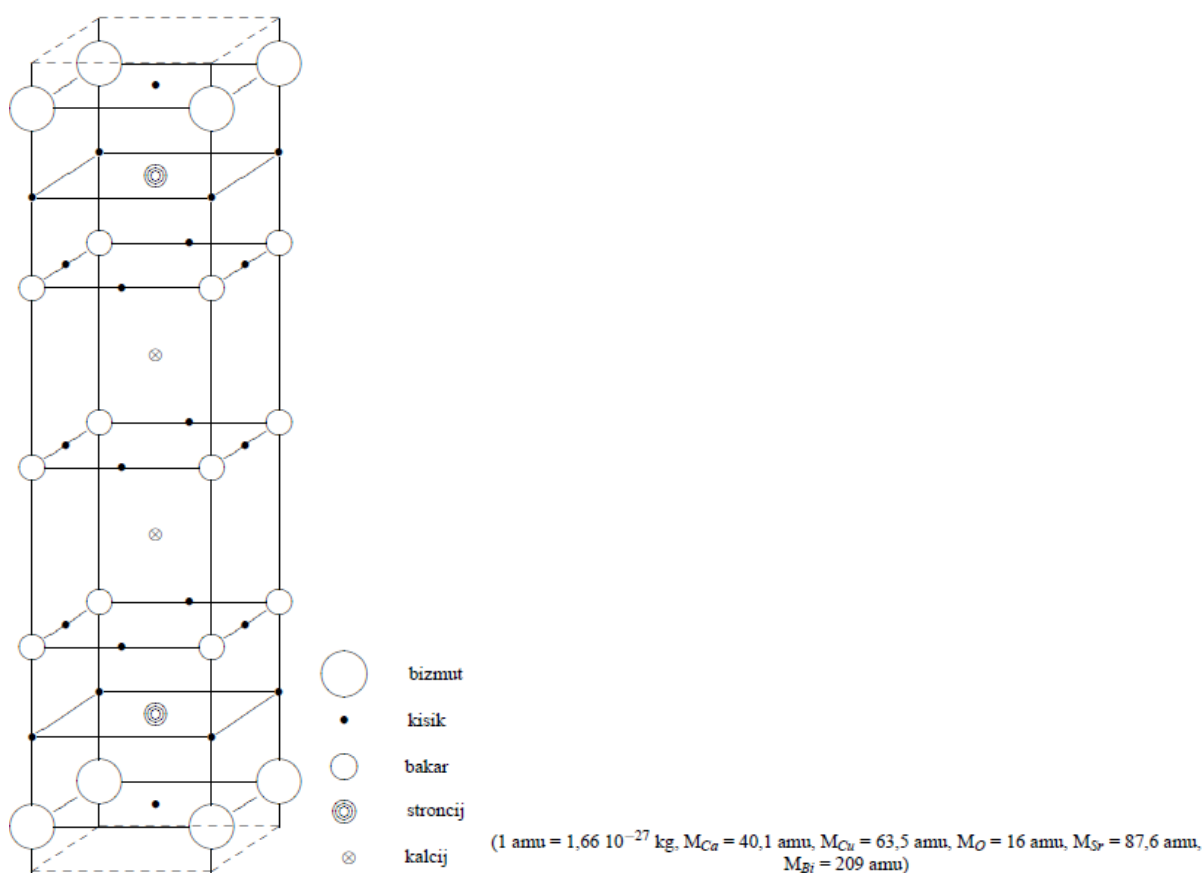
(c) Izračunajte gustoću kristala $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Mase iona u rešetki su $m_{\text{Ba}} = 137,36 u$, $m_{\text{Cu}} = 63,54 u$, $m_{\text{Y}} = 88,92 u$ i $m_{\text{O}} = 16,00 u$ gdje je atomska jedinična masa $u = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$.



Zadatak 3.11 Na slici je prikazana jedinična ćelija visoko temperaturnog supravodiča $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+x}$ (Bi2223).

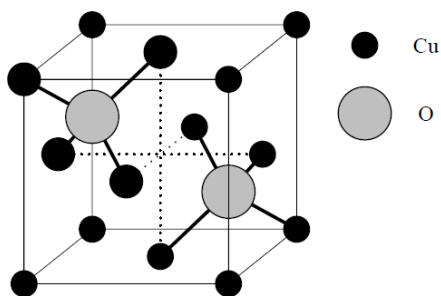
(a) Odrediti ukupni broj pojedinih iona u jediničnoj ćeliji.

(b) Izračunati masenu gustoću materijala ako se zna da je $a \approx b = 5,4 \text{ \AA}$ i $c = 37 \text{ \AA}$.

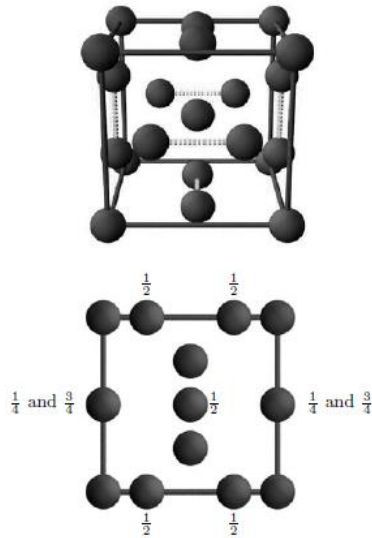


Zadatak 3.12 Kristalna struktura bakrenog oksida Cu_2O prikazana je na slici.

- Izračunajte gustoću kristala ako je konstanta rešetke a jednaka $4,723 \text{ \AA}$.
- Izračunajte najkraću udaljenost između atoma kisika i bakra.
- Koji je koordinacijski broj kisika, a koji bakra?
- Koji kut zatvaraju kemijske veze kisika prema atomima bakra?



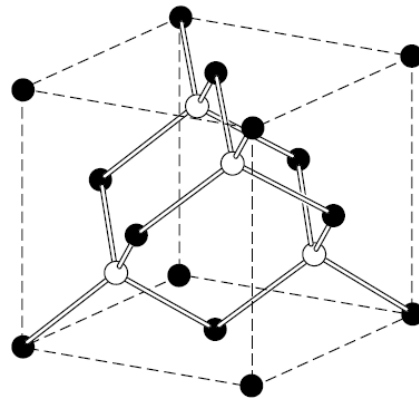
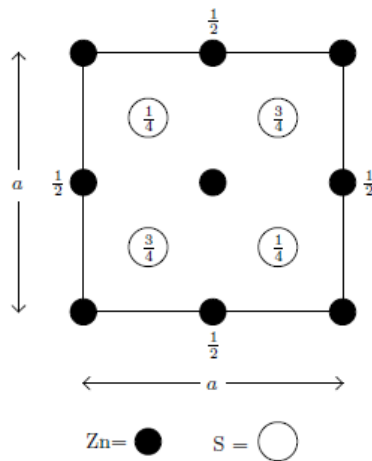
Zadatak 3.13 Fluor može kristalizirati u beta-fazu na temperaturama između 45 i 55 K . Slika prikazuje standardnu kubnu jediničnu ćeliju fluora u beta-fazi u 3D (gornja slika) i 2D donja slika gdje brojevi označavaju visine u ćeliji u jedinicama od a (na primjer, $3/4$ je, ustvari, $3a/4$). Atomi koji su bez pridruženih brojki nalaze se na položajima 0 ili 1 .



- (a) Koliko atoma ima u jediničnoj ćeliji?
 (b) O kojoj se rešetki radi i koja je baza za ovaj kristal?

Zadatak 3.14 Na slici je prikazana sfaleritna (cink-blend) kristalna struktura ZnS iz tlocrta (lijeva slika) i 3D slika (desna slika). To je, ustvari, dijamantna struktura s dvije vrste atoma: Zn (crne kuglice) i S (bijele kuglice). Brojevi na nekim kuglicama označavaju visinu u odnosu na $z = 0$ ravninu kao omjer visine i konstante rešetke. Atomi kojima nisu pridružene visine nalaze se na $z = 0$ ili $z = a$.

- (a) O kojoj se temeljnoj Bravaisovoj rešetki radi?
 (b) Opišite bazu rešetke.
 (c) Ako je konstanta rešetke $a = 0,541$ nm izračunajte udaljenost najbližih susjednih atoma Zn-Zn, Zn-S i S-S.



4 Recipročna rešetka

Zadatak 4.1 (a) Pokažite da je recipročna rešetka Bravaisova rešetka.
(b) Pokažite da je recipročna rešetka za recipročnu rešetku, direktna rešetka.

Zadatak 4.2 (a) Pokažite da primitivni vektori recipročne rešetke zadovoljavaju relaciju

$$\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

(b) Pretpostavimo da su primitivni vektori definirani pomoću $\mathbf{b}_i$ na isti način kao što su $\mathbf{b}_i$ definirani pomoću $\mathbf{a}_i$. Pokažite da su tako nastali vektori upravo jednaki $\mathbf{a}_i$, odnosno pokažite da je, na primjer,

$$2\pi \frac{\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3}{\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)} = \mathbf{a}_1$$

(c) Pokažite da je volumen primitivne ćelije Bravaisove rešetke

$$v = |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)|$$

Zadatak 4.3 Promotrimo recipročnu rešetku za dvodimenzionalnu Bravaisovu rešetku koja ima primitivne vektore $\mathbf{a}_1$ i $\mathbf{a}_2$.

(a) Pokažite da se primitivni vektori recipročne rešetke mogu izraziti u obliku

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{A_c} \left[|\mathbf{a}_2|^2 \mathbf{a}_1 - (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2) \mathbf{a}_2 \right]$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{A_c} \left[|\mathbf{a}_1|^2 \mathbf{a}_2 - (\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_1) \mathbf{a}_1 \right]$$

gdje je $A_c = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|$ površina primitivne ćelije.

(b) Pokažite da vrijedi $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij}$.

(c) Dvodimenzionalna Bravaisova rešetka ima primitivne vektore (u jedinicama nm)

$$\mathbf{a}_1 = 0,4\mathbf{e}_x, \quad \mathbf{a}_2 = 0,1\mathbf{e}_x + 0,2\mathbf{e}_y$$

(c1) Izračunajte primitivne vektore recipročne rešetke.

(c2) Nacrtajte recipročnu rešetku i konstruirajte prvu Brillouinovu zonu.

(c3) Nacrtajte ravnine s Millerovim indeksima (11), (10) i (52).

(c4) Izračunajte udaljenost između najbližih (11) ravnina.

Zadatak 4.4 Neka je funkcija $f(\mathbf{r})$ periodična funkcija u Bravaisovoj rešetki. Pokažite da su vektori $\mathbf{k}$ u Fourierovom redu

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

recipročni vektori $\mathbf{K}$, gdje su koeficijenti $F(\mathbf{k})$ Fourierova transformacija za $f(\mathbf{r})$.

Zadatak 4.5 (a) Pokažite da je recipročna rešetka jednostavne heksagonske rešetke također jednostavna heksagonska čije su konstante

$$c^* = \frac{2\pi}{c}, \quad a^* = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}$$

i čije su koordinatne osi zakrenute za 30° oko c -osi u direktnoj rešetki.

(b) Koja je vrijednost omjera c/a jednaka u direktnoj i recipročnoj rešetki? Ako je c/a savršen omjer u direktnoj rešetki (to je broj $c/a = (8/3)^{1/2}$), kolika je vrijednost omjera u recipročnoj rešetki?

(c) Bravaisova rešetka koju generiraju tri primitivna vektora jednake duljine a između kojih je jednak kut θ naziva se trigonska. Pokažite da je recipročna rešetka trigonske rešetke također trigonska s kutom θ^* za kojeg vrijedi

$$\cos \theta^* = -\frac{\cos \theta}{1 + \cos \theta},$$

a duljina primitivnih vektora iznosi

$$a^* = \frac{2\pi}{a} \frac{1}{\sqrt{1 + 2 \cos \theta \cos \theta^*}}$$

Zadatak 4.6 Pokažite da je bilo koji vektor recipročne rešetke $\mathbf{K}$ cjelobrojni višekratnik najkraćeg i njemu paralelnog vektora recipročne rešetke $\mathbf{K}_0$.

Zadatak 4.7 Koliki je kut između pravca $[110]$ i ravnine (101) u kubnom kristalu?

Zadatak 4.8 (a) Neka su (hkl) Millerovi indeksi familije ravnina rešetke. Izvedite formulu za udaljenost između susjednih ravnina u familiji.

(b) Primijenite formulu izvedenu pod (a) na kubne rešetke.

(c) Primijenite formulu izvedenu pod (a) na heksagonsku rešetku.

Zadatak 4.9 Gustoća atoma σ_{hkl} u ravnini rešetke (hkl) monoatomnog kristala povezana je s udaljenošću između susjednih ravnina relacijom

$$\sigma_{hkl} = \frac{d_{hkl}}{v}$$

gdje je d_{hkl} udaljenost između susjednih ravnina u familiji ravnina (hkl) i v je volumen primitivne ćelije u direktnoj rešetki.

(a) Dokažite gornju relaciju.

(b) Nađite najgušće popunjenu ravninu rešetke u bcc i fcc rešetki upotrebljavajući gornju relaciju.

5 Difrakcija neutrona i rendgenskog zračenja na kristalima

Zadatak 5.1 (a) Difrakciju rendgenskog zračenja na kristalu želimo zabilježiti na filmu u obliku kvadrata 10×10 cm. Valna duljina zračenja je $\lambda = 0,152$ nm, a zračimo praškasti uzorak kuhinjske soli (NaCl) čija je konstanta rešetke $0,563$ nm. Ovim eksperimentom želimo postići da zračenje reflektirano od ravnina (111) na filmu zabilježimo kao kružnicu promjera $0,1$ m. Na koju udaljenost x od kristala moramo postaviti zaslon s filmom?
(b) Ako uzorak NaCl zamijenimo s uzorkom AgCl, kako će se promijeniti intenzitet pretpostavimo li da se struktura i konstanta rešetke nisu promijenili?

Zadatak 5.2 Praškasti uzorak monoatomnog kristala s kubičnom rešetkom analiziramo Debye-Scherrerovom metodom. Primitivni vektori direktne rešetke su: $\mathbf{a}_1 = (a, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = (0, a, 0)$ i $\mathbf{a}_3 = (0, 0, a)$. Valna duljina rendgenskog zračenja je $1 \text{ \AA}$.

- Nadite primitivne vektore recipročne rešetke.
- Nadite prva četiri najkraća vektora recipročne rešetke.
- Prvi difrakcijski prsten opažamo pod kutom $17,9^\circ$ u odnosu na upadni smjer zračenja. Odredite konstantu rešetke a .
- Nadite kutove za sljedeća tri difrakcijska prstena.

Zadatak 5.3 Pretpostavimo da je otkriven supravodič na sobnoj temperaturi. Teorijski fizičar predviđa da supravodič ima fcc kubnu rešetku čija je konstanta $a = 1,5$ nm. Eksperimentalni fizičar planira provjeriti tvrdnju o tipu rešetke pomoću raspršenja rendgenskih zraka valne duljine $0,15$ nm na praškastom uzorku Debye-Scherrerovom kamerom.

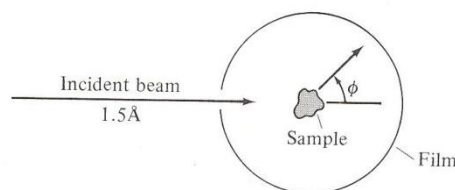
- Izrazite kut $2\theta = \phi$ pomoću Millerovih indeksa ravnina rešetke koje reflektiraju upadno zračenje obzirom na jednostavnu kubnu rešetku.
- Izračunajte kutove ϕ za prva tri pojačanja. Prisjetite se strukturnog faktora za fcc rešetku.

Zadatak 5.4 Kobalt kristalizira u dvije rešetke: α -Co (alfa-kobalt) ima hcp strukturu s konstantom rešetke $a = 2,51 \text{ \AA}$, a β -Co ima fcc strukturu s konstantom rešetke $a = 3,55 \text{ \AA}$. Pretpostavite da hcp struktura ima savršeni omjer c/a . Izračunajte i usporedite položaje prva tri difrakcijska maksimuma ako je napravljen eksperiment s ogibom rendgenskih zraka na praškastim uzorcima obje vrste kobalta. Valna duljina rendgenskog zračenja je $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$.

Zadatak 5.5 Nepoznati uzorak analiziran je Debye-Scherrerovom kamerom. Ustanovljeno je da se prva tri difrakcijska maksimuma pojavljuju pod kutovima $\theta_1 = 37,1^\circ$, $\theta_2 = 43,1^\circ$ i $\theta_3 = 62,4^\circ$. Valna duljina korištenih rendgenskih zraka je $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$. Odredite o kojem se elementu u uzorku radi, odnosno, izračunajte konstantu rešetke i pronađite je u periodnom sustavu elemenata.

Zadatak 5.6 Praškasti uzorci A, B i C triju različitih monoatomnih kubnih kristala analiziraju se Debye-Scherrerovom metodom (slika). Poznato je da je jedan uzorak plošno centrirana kubna, jedan prostorno centrirana kubna, a jedan dijamantna rešetka. Približni položaji prvih četiriju prstenova za svaki uzorak navedeni su u donjoj tablici.

A	B	C
42,2°	28,8°	42,8°
49,2	41,0°	73,2°
72,0°	50,8°	89,0°
87,3°	59,6°	115,0°



- Identificirajte kristalne strukture A, B i C.
- Ako je valna duljina upadnog rendgenskog zračenja $1,5 \text{ \AA}$, kolika je duljina brida jedinične ćelije standardne kubne ćelije u sva tri uzorka?
- Ako dijamantnu strukturu zamijenimo sfaleritnom čija jedinična kubna ćelija ima jednaku duljinu brida, napišite kutove za koje će pojaviti prva četiri prstena.

Zadatak 5.7 Cerij (Ce) kristalizira u obliku heksagonske gusto slagane rešetke (hcp). Konstanta rešetke za jediničnu ćeliju iznosi $a = 3,65 \text{ \AA}$, a slaganje je idealno, $c/a = (8/3)^{1/2}$. Imajući u vidu da je recipročna rešetka za hcp također hcp rešetka s parametrima

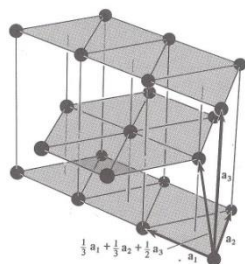
$$a^* = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}, \quad c^* = \frac{2\pi}{c}$$

odredite:

(a) Oblik strukturnog faktora S_K i iznos vektora recipročne rešetke $|\mathbf{K}|$ za tri najkraća vektora $\mathbf{K}$ za koje je $S_K \neq 0$. Vektori položaja za atome u bazi (slika) su

$$\mathbf{d}_1 = 0, \quad \mathbf{d}_2 = \frac{1}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3$$

(b) Kutove θ pod kojima će se pojaviti prva tri maksimuma pri raspršenju snopa rendgenskih zraka valne duljine $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$. Kut θ je kut između smjera upadnog snopa i smjera promatranja.



Zadatak 5.8 Snop rendgenskih zraka valne duljine $0,1585 \text{ nm}$ upada na kristal aluminija paralelno (010) ravninama rešetke. Konstanta rešetke iznosi $0,405 \text{ nm}$. Ako snop upada pod kutom $11,31^\circ$ u odnosu na smjer $[100]$, mjerenja pokazuju da se reflektirani snop širi u (010) ravnini. Nađite Millerove indekse za ovu refleksiju.

Zadatak 5.9 Veoma često plošno centriranu kubnu Bravaisovu rešetku prikazujemo kao jednostavnu kubnu rešetku koja ima kubičnu primitivnu ćeliju duljine brida a i četiri čvora rešetke u bazi.

(a) Pokažite da je geometrijski strukturni faktor jednak 0 ili 4 u svim točkama jednostavne kubne recipročne rešetke.

(b) Pokažite da ako izuzmemo točke sa strukturnim faktorom jednakim nula, ostale točke recipročne rešetke tvore prostorno centriranu kubnu rešetku čija jedinična ćelija ima duljinu brida $4\pi/a$? Je li ovakav rezultat očekivan?

Zadatak 5.10 (a) Pokažite da strukturni faktor za monoatomnu heksagonsku gusto slagano kristalnu strukturu može poprimiti šest vrijednosti $1 + e^{in\pi/3}$, $n = 1, 2, \dots, 6$, ovisno o vektoru $\mathbf{K}$ koji prolazi točkama heksagonske recipročne rešetke.

(b) Pokažite da sve točke recipročne rešetke u ravnini okomitoj na c -os koja sadrži i točku $\mathbf{K} = 0$ imaju neiščezavajući strukturni faktor.

(c) Pokažite da se točke s iščezavajućim strukturnim faktorom nalaze u svakoj drugoj ravnini familije ravnina recipročne rešetke okomite na c -os.

(d) Pokažite da u takvoj ravnini točka rešetke pomaknuta od $\mathbf{K} = 0$ za vektor paralelan c -osi ima strukturni faktor jednak nuli.

(e) Pokažite da ako iz takve ravnine izuzmemo sve točke sa strukturnim faktorom jednakim nuli, dvodimenzionalna trokutasta mreža svodi se recipročnu rešetku koja ima oblik saća.

Zadatak 5.11 Promotrite rešetku s bazom u kojoj je n iona. Pretpostavimo da se i -ti ion u bazi sastoji od m_i točkastih naboja $-z_{ij}e$ koje su smještene na položajima $\mathbf{b}_i$, $j = 1, 2, \dots, m_i$ pri čemu smatramo da smo ion translirali u točku $\mathbf{r} = 0$.

(a) Pokažite da je atomski faktor f_i jednak

$$f_i = \sum_{j=1}^{m_i} z_{ij} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{b}_{ij}}$$

(b) Pokažite da je ukupni strukturni faktor uz rezultat iz (a), identičan strukturnom faktoru kojeg bismo našli ako bi rešetka bila opisana bazom s $m_1 + m_2 + \dots + m_n$ točkastih iona.

Zadatak 5.12 Snop rendgenskog zračenja upada na monoatomni kristal s intenzitetom kod kojeg $7 \cdot 10^{11}$ fotona po sekundi padne na $0,001 \text{ m} \times 0,001 \text{ m}$ površine kristala. Gustoća atoma u kristalu iznosi $5 \cdot 10^{26} \text{ m}^{-3}$. Brojač

raspršenih fotona postavljen je pod određenim kutom θ na kristal, a pokriva prostorni kut 10^{-5} sr (steradiana). Brojač bilježi približno 140 fotona po sekundi. Nađite vrijednost diferencijalnog udarnog presjeka $d\sigma/d\Omega$.

Zadatak 5.13 Linearni kristal sastoji se od identičnih točkastih centara raspršenja u svakom čvoru rešetke $\rho_m = m\mathbf{a}$, gdje je m cijeli broj i $\mathbf{a}$ primitivni vektor linearne rešetke. Amplituda raspršenja proporcionalna je izrazu

$$F = \sum_{m=0}^{M-1} \exp(-ima \cdot \Delta \mathbf{k})$$

gdje je $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ promjena valnog vektora upadnog zračenja, a M broj čvorova u rešetki.

(a) Pokažite da je

$$F = \frac{1 - \exp[-iM(\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k})]}{1 - \exp[-i(\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k})]}$$

(b) Intenzitet raspršenog zračenja proporcionalan je $|F|^2$. Pokažite da je

$$|F|^2 = F^* F = \frac{\sin^2 \left[\frac{1}{2} M (\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k}) \right]}{\sin^2 \left[\frac{1}{2} (\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k}) \right]}$$

(c) Znamo da će se difrakcijski maksimum pojaviti kada je $\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi h$, gdje je h cijeli broj. Pretpostavimo da $\Delta \mathbf{k}$ malo promijenimo pa definiramo ϵ u jednadžbi $\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi h + \epsilon$ tako da ϵ daje položaj prve nule funkcije $\sin[(1/2)M\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k}]$. Pokažite da je $\epsilon = 2\pi/M$ tako da je širina difrakcijskog maksimuma proporcionalna $1/M$ te može biti veoma uska za velike vrijednosti M . Isti rezultat vrijedi i za trodimenzionalan kristal.

Zadatak 5.14 Na 300 K aluminij (Al) ima FCC rešetku s konstantom rešetke $a = 0,405$ nm. Toplinska rastezljivost (koeficijent toplinskog rastezanja) za Al iznosi $\alpha = 25 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Aluminij proučavamo pomoću Cu $K_{\alpha 1}$ zračenja čija je valna duljina $\lambda = 0,154$ nm. Istražit ćemo promjenu kuta difrakcije $\Delta\theta$ u ovisnosti od promjene temperature s 300 K na 600 K.

(a) Napišite ovisnost $\Delta\theta$ u ovisnosti od θ uz navedenu promjenu temperature.

(b) Izračunajte $\Delta\theta$ za (111) refleksije.

Uputa: promjena duljine s temperaturom glasi $\Delta l = \alpha l \Delta T$.

Zadatak 5.15 Rendgensko zračenje reflektira se na kristalu Braggovom refleksijom. Ako je masena gustoća kristala poznate strukture izmjerena s relativnom pogreškom 0,0003 i ako kut upadnih i reflektiranih zraka iznosi 6° te je izmjeren s relativnom pogreškom 3,4 minute na 6° , kolika je relativna pogreška u određivanju valne duljine rendgenskog zračenja? Pojednostavite račun uzевši da se radi o jednostavnoj kubnoj rešetki duljine d .

Uputa: za veličinu f koja ovisi o p nezavisnih i slučajnih veličina, $f(x_1, x_2, \dots, x_p)$, relativna pogreška glasi

$$\frac{\Delta f}{f} = \sqrt{\sum_{i=1}^p \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\Delta x_i}{f} \right)^2}$$

gdje se funkcija f i njene parcijalne derivacije računaju za izmjerene vrijednosti x_i .

Zadatak 5.16 Praškasti uzorak analizira se Debye-Scherrerovom kamerom. Upadno rendgensko zračenje dobiveno je Cu- K_{α} prijelazom koji daje zračenje valne duljine $\lambda = 0,154$ nm. Opaženi su sljedeći kutovi raspršenja (Braggovi kutovi): $19,48^\circ$; $22,64^\circ$; $33,00^\circ$; $39,68^\circ$; $41,83^\circ$; $50,35^\circ$; $57,05^\circ$; $59,42^\circ$.

(a) O kojoj se recipročnoj rešetki radi? Koja je odgovarajuća direktna rešetka?

(b) Kolika je konstanta rešetke? Kolika je gustoća (koncentracija) n za nađenu konstantu rešetke?

(c) O kojem je elementu riječ? Očitajte iz tablica.

(d) Pomoću (a), (b) i (c) te formule

$$N_A = \frac{n}{\rho} M$$

izračunajte Avogadrov broj N_A , gdje je ρ masena gustoća, a M molarna masa. Vrijednosti za ρ i M očitajte iz tablica. Točna vrijednost Avogadrovog broja je $6,023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Zadatak 5.17 Pokažite da je za monoatomnu dijamantnu rešetku strukturni faktor jednak

$$S_K = 1 + \exp[2\pi i(h+k+l)] \\ = \begin{cases} 2, & h+k+l \text{ je dvostruki parni broj;} \\ 1 \pm i, & h+k+l \text{ je neparan;} \\ 0, & h+k+l \text{ je dvostruki neparni broj.} \end{cases}$$

gdje su h , k i l komponente za $\mathbf{K}$ u bazi koju čine primitivni vektori recipročne rešetke. Interpretirajte ove rezultate geometrijski.

Zadatak 5.18 Za elastično raspršenje rendgenskog zračenja na kristalu, pokažite da maksimalni iznos vektora recipročne rešetke $K = |\mathbf{K}|$ ovisi o valnom vektoru fotona $k = |\mathbf{k}|$. Uvjerite se da smo dokazano svojstvo prešutno koristili za zadatke na vježbama, recimo, u zadatku 5.3.

Zadatak 5.19 Analizirani su praškasti uzorci za tri različita monoatomna kubna kristala A, B i C Debye-Scherrerovom metodom. Dobiveni su difrakcijski prstenovi koji odgovaraju kutovima u donjoj tablici. Poznato je da je jedan kristal bcc, drugi fcc i treći dijamantna rešetka.

ϕ_A	30°	35°	50°	60°
ϕ_B	21°	29°	36°	42°
ϕ_C	30°	50°	60°	74°

(a) Odredite kristalnu strukturu uzoraka A, B i C.

(b) Valna duljina upadnog rendgenskog zračenja iznosi $\lambda = 0,95 \text{ \AA}$. Kolika je konstanta rešetke za svaku od struktura?

6 Elektron u periodičkom potencijalu. Blochov teorem

Zadatak 6.1 Izračunajte prvih nekoliko energijskih vrpce s najnižim energijama u aproksimaciji prazne rešetke za fcc rešetku u $[111]$ smjeru.

Zadatak 6.2 Izračunajte interval energije u eV između energijske vrpce s najnižom energijom i energijske vrpce sa sljedećom najnižom energijom u centru prve Brillouinove zone za aluminij s konstantom rešetke 0,405 nm ako pretpostavimo da vrijedi aproksimacija prazne rešetke.

Zadatak 6.3 Promotrite dvovalentan fcc metal stroncija (Sr) čija je konstanta rešetke $a = 0,608$ nm. Stroncij ima prvu Brillouinovu zonu (1bz) potpuno popunjenu. Nađite najmanji energijski procjep na rubu 1bz u aproksimaciji prazne rešetke uz upotrebu donje slike.

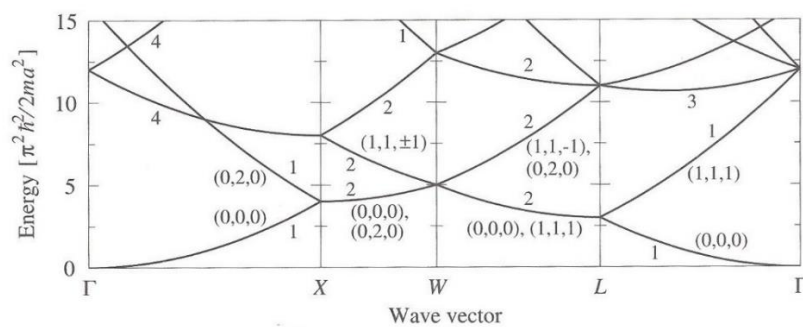


Fig. 16.7 Empty-lattice band structure of the FCC Bravais lattice. The degeneracies of the bands are indicated by numbers and the responsible reciprocal lattice vectors are given for the two lowest bands.

Zadatak 6.4 Dvodimenzionalni metal kristalizira u kvadratnoj rešetki konstante a . Pretpostavite da je primijenjiv model slobodnih elektrona.

(a) Koji oblik ima prva Brillouinova zona i koji su vektori recipročne rešetke?

(a) Promatrajte kinetičku energiju elektrona na rubu prve Brillouinove zone. Pokažite da je kinetička energija u vrhu, dvostruko veća od kinetičke energije elektrona na središtu stranice.

(b) Koliki je odgovarajući omjer za jednostavnu kubnu 3D rešetku?

Zadatak 6.5 Razmotrite jednostavnu kubnu rešetku koja se sastoji od N^3 primitivnih ćelija. Pomoću Born-von Karmanovih periodičnih rubnih uvjeta, pokažite da je broj različitih Blochovih vektora $\mathbf{k}$ iz prve Brillouinove zone jednak N^3 .

Zadatak 6.6 Pokažite da je valna funkcija za Blochove elektrone periodička u recipročnoj rešetki. Drugim riječima, ako je $\mathbf{K}$ vektor recipročne rešetke, pokažite da je

$$\psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Zadatak 6.7 Pokažite da su za Blochove elektrone energija $\epsilon_n(\mathbf{k})$ i valna funkcija $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ periodičke funkcije u recipročnoj rešetki.

Uputa: napišite Schrödingerovu jednadžbu za funkciju $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ iz Blochove funkcije $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ pa je usporedite s jednadžbom za $\mathbf{k} + \mathbf{K}$. Kakve moraju biti energije?

Zadatak 6.8 (a) Pokažite da je

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = N\delta_{\mathbf{k},0},$$

gdje je $\mathbf{R}$ vektor Bravaisove rešetke, N broj čvorova u rešetki te $\mathbf{k}$ valni vektor iz prve Brillouinove zone koji zadovoljava Born-von Karmanove rubne uvjete.

(b) Pokažite da vrijedi

$$\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = N\delta_{\mathbf{R},0}.$$

Zadatak 6.9 (a) Pokažite da vrijedi

$$\int_{pc} d^3r e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} = 0$$

za svaki neišezavajući vektor recipročne rešetke $\mathbf{K}$ i gdje je integral izračunat po primitivnoj ćeliji.

(b) Iskoristite (a) i pokažite da su koeficijenti Fourierova reda za funkciju koja je periodička u Bravaisovoj rešetki

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} f_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$$

$$f_{\mathbf{K}} = \frac{1}{V_{pc}} \int_{pc} d^3r e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r})$$

(c) Pokažite da svojstvo (a) također vrijedi ako $\mathbf{K}$ zamijenimo kristalnim valnim vektorom

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \mathbf{b}_i$$

te integriramo po cijelom kristalu volumena V . Primijenite dobivenu jednakost na funkciju $g(\mathbf{r})$ koja zadovoljava Born-von Karmanove, periodičke rubne uvjete i dokažite da je

$$g(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

$$g_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V} \int_V d^3r e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} g(\mathbf{r})$$

Zadatak 6.10 (a) Neka je $f(\mathbf{r})$ periodična funkcija u Bravaisovoj rešetki. Pokažite da vrijedi

$$\int_v d^3r \nabla f(\mathbf{r}) = 0$$

$$\int_v d^3r \nabla^2 f(\mathbf{r}) = 0$$

gdje je v primitivna ćelija Bravaisove rešetke.

(b) Koristite (a) i dokažite Greenov teorem za periodične funkcije: ako su $g(\mathbf{r})$ i $h(\mathbf{r})$ periodične funkcije u Bravaisovoj rešetki tada je

$$\int_v d^3r g \nabla h = - \int_v d^3r h \nabla g$$

$$\int_v d^3r g \nabla^2 h = \int_v d^3r h \nabla^2 g$$

(c) Vrijede li rezultati pod (a) i (b) za funkcije periodične u recipročnoj rešetki?

Zadatak 6.11 (a) Pokažite da je Fourierov transformat periodičnog potencijala $U_{\mathbf{K}} = 0$ za heksagonsku gusto slaganu rešetku gdje je $\mathbf{K}$ vektor recipročne rešetke s ruba prve Brillouinove zone u smjeru osi c .

(b) Prisjetite se primjera s vježbi i pomoću rezultata iz (a) argumentirajte koliki je tada energijski procjep.

(c) Objasnite zašto nije moguć izolator s monovalentnim atomima koji ima hcp strukturu.

Uputa: izračunajte koliki je Fourierov transformat potencijala oblika

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} \sum_{j=1}^n V(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{d}_j)$$

gdje su V ionski potencijali, a $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \dots, \mathbf{d}_n$ vektori položaja atoma u bazi.

Zadatak 6.12 Operator impulsa ne komutira s hamiltonijanom Blochovih elektrona. Ipak, moguće je načiniti operator $\mathbf{P}$ čije su svojstvene vrijednosti jednake kristalnom impulsu $\hbar\mathbf{k}$ tj. da vrijedi

$$[H, \mathbf{P}] = 0, \quad \mathbf{P} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \hbar\mathbf{k} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

gdje je $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ Blochova valna funkcija. Zbog činjenice da $\mathbf{P} \rightarrow \mathbf{p}$ kad periodički potencijal $U(\mathbf{r}) \rightarrow 0$, možemo pisati

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} + i\hbar\mathbf{F}$$

gdje je $\mathbf{F}$ operator kojeg treba odrediti.

(a) Nađite $[H, \mathbf{p}]$.

(b) Nađite operator $\mathbf{F}$.

Zadatak 6.13 (a) Objasnite zašto u 1D ne može doći preklapanja energijskih vrpca.

(b) Dokažite da u Bravaisovoj rešetki vrijedi $\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}(-\mathbf{k})$.

Zadatak 6.14 (a) U slučaju slobodnog elektrona gustoća stanja pri Fermijevoj energiji je $g(\mathcal{E}_F) = mk_F/\hbar^2\pi^2$. Pokažite da se opći izraz za gustoću stanja

$$g_n(\mathcal{E}) = \int_{S_n(\mathcal{E})} \frac{dS}{4\pi^2} \frac{1}{|\nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k})|}$$

svodi na $g(\mathcal{E}_F)$ ako je $\mathcal{E}_n(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2/2m$ i sferna Fermijeva ploha leži u potpunosti unutar primitivne ćelije.

(b) Promotrite energijsku vrpce u kojoj, za dovoljno mali k , vrijedi

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} + \frac{k_z^2}{m_z} \right)$$

gdje su m_x , m_y i m_z konstante, a nazivamo ih **efektivnim masama**. Jedan primjer na kojeg možemo primijeniti gornji izraz je kristal s ortorompskom simetrijom. Pokažite da je tada $g_n(\mathcal{E})$ proporcionalan izrazu $(\mathcal{E} - \mathcal{E}_0)^{1/2}$ pa derivacija $g_n(\mathcal{E})$ postaje beskonačna (van Hoveov singularitet) kako se približavamo minimumu energijske vrpce, točki $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0$.

(c) Promotrite gustoću stanja u blizini sedlaste točke za energijsku vrpce danu izrazom

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} - \frac{k_z^2}{m_z} \right)$$

gdje su m_x , m_y i m_z konstante. Pokažite da ako je $\mathcal{E} \approx \mathcal{E}_0$ derivacija gustoće stanja ima sljedeći oblik:

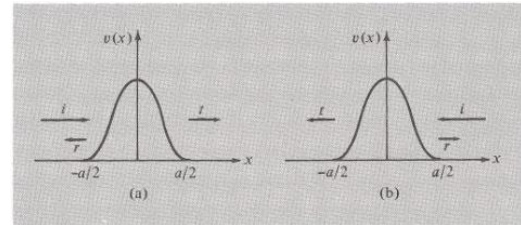
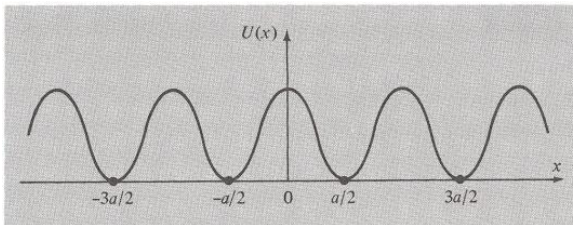
$$g'_n(\mathcal{E}) \approx \text{konstanta}, \quad \mathcal{E} > \mathcal{E}_0$$

$$\approx (\mathcal{E} - \mathcal{E}_0)^{-1/2}, \quad \mathcal{E} < \mathcal{E}_0$$

Zadatak 6.15 Promotrite jednodimenzionalan periodički potencijal

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} v(x + na)$$

kao niz identičnih simetričnih potencijalnih barijera $v(x)$ širine a koje su postavljene u točke $x_n = na$ gdje je n cijeli broj (slika). Potencijalnu barijeru $v(x)$, općenito, karakteriziraju koeficijent transmisije $t(\kappa)$ i koeficijent refleksije $r(\kappa)$ za elektron koji upada na barijeru s energijom $\mathcal{E} = \hbar^2 \kappa^2/2m$.



(a) Najprije promotrite raspršenje elektrona samo na jednoj potencijalnoj barijeri. Napišite opće rješenje za ovaj problem. Partikularna rješenja u područjima $|x| > a/2$ naznačena su na slici.

(b) Kako su energije elektrona u potencijalu $U(x)$ povezane s Blochovim valnim vektorom k ? Proverite svoj odgovor u granici $v(x) = 0$.

(c) Može se pokazati da su koeficijenti t i r povezani jednačbom $|t|^2 + |r|^2 = 1$ što je posljedica očuvanja vjerojatnosti. Uzmite da t i r imaju oblik

$$t = |t|e^{i\delta}, \quad r = |r|e^{i\delta}$$

Uvrstite ove izraze u jednačbu dobivenu pod (a) i približno je riješite grafički. Na crtežu označite zabranjene zone u kojima jednačba nema rješenja.

Zadatak 6.16 Diskutirajte energijske vrpce u jednodimenzionalnoj rešetki periode d gdje je potencijalna energija $V(x + d) = V(x)$ oblika

$$V = V_0, \quad -b \leq x \leq 0$$

$$V = 0, \quad 0 \leq x \leq d - b$$

Ovaj se model periodičkog potencijala naziva Kronig-Penneyev model. Odredite vrijednosti energije na vrhu prve vrpce i na dnu druge za točku na rubu 1. Brioullinove zone. Uzmite da je $V_0 = 0,1$, $d = 8$ i $b = 3$ u atomskim jedinicama.

Uputa: koristite zadatak 6.3 s vježbi. U nastavku je tablica za atomske jedinice.

Zadatak 6.17 (a) Razmotrite nede degeneriranu Blochovu orbitalu $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ u $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ u n -toj vrpici kubnog kristala. Upotrijebite drugi red računa smetnje i pokažite da vrijedi:

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{j \neq n} \frac{|\langle n\mathbf{0} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | j\mathbf{0} \rangle|^2}{\varepsilon_n(\mathbf{0}) - \varepsilon_j(\mathbf{0})},$$

gdje se zbraja po svim ostalim orbitalama $\psi_{j\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | j\mathbf{k} \rangle$ u $\mathbf{k} = \mathbf{0}$.

(b) Pokažite da je efektivna masa m^* definirana kao

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

za energiju pod (a) jednaka

$$\frac{m}{m^*} = 1 + \frac{2}{m} \sum_{j \neq n} \frac{|\langle n\mathbf{0} | \hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{p} | j\mathbf{0} \rangle|^2}{\varepsilon_n(\mathbf{0}) - \varepsilon_j(\mathbf{0})}.$$

7 Aproximacija gotovo slobodnih elektrona

Zadatak 7.1 Elektroni mase m gibaju se jednodimenzionalnoj rešetki. Slabi periodički potencijal opisan je Fourierovim redom

$$V(x) = V_0 + V_1 \cos(2\pi x/a) + V_2 \cos(4\pi x/a) + \dots$$

(a) Pod kojim uvjetima će vrijediti aproksimacija gotovo slobodnih elektrona? Prepostavite da su ti uvjeti ispunjeni i skicirajte tri najniže energijske vrpce u prvoj Brillouinovoj zoni. Označite energijske vrpce brojevima.

(b) Izračunajte do prvog reda u računu smetnje, energijski procjep u točki $k = \pi/a$ između prve i druge vrpce te u točki $k = 0$ između druge i treće vrpce.

Zadatak 7.2 Promotrimo elektrone u 2D kvadratnoj rešetki. Periodički potencijal dan je formulom

$$U(x, y) = -4U_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right)$$

gdje je a konstanta rešetke.

(a) Nađite Fourierov transformat zadanog periodičkog potencijala.

(b) Neka je $\mathbf{k}_1 = (\pi/a)(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y)$ vektor položaja vrha kvadrata oko čvora u recipročnom prostoru. Koeficijenti u Fourierovom razvoju Blochove valne funkcije ψ su njezini Fourierovi transformati. Fourierov transformat $\psi(\mathbf{k}_1)$ jako se veže na tri koeficijenta $\psi(\mathbf{k}_2)$, $\psi(\mathbf{k}_3)$ i $\psi(\mathbf{k}_4)$. Odredite vektore $\mathbf{k}_2$, $\mathbf{k}_3$ i $\mathbf{k}_4$. Koje vrijednosti vektora recipročne rešetke $\mathbf{K}$ moramo uzeti u obzir želimo li prvim redom računa smetnje izračunati koeficijente $\psi(\mathbf{k}_1)$, $\psi(\mathbf{k}_2)$, $\psi(\mathbf{k}_3)$ i $\psi(\mathbf{k}_4)$?

(c) Izračunajte $U_{\mathbf{K}}$ za tražene vrijednosti vektora $\mathbf{K}$. Pokažite da je $U_{\mathbf{K}} = U_{-\mathbf{K}}$ različit od nule za samo jednu vrijednost vektora $\mathbf{K}$. Iz tog se razloga račun smetnje reducira na podprostor sa samo dva koeficijenta za Blochovu valnu funkciju, na primjer, za $\psi(\mathbf{k}_1)$ i $\psi(\mathbf{k}_2)$.

(d) Napišite Schrödingerovu jednadžbu za podprostor koji uključuje samo $\psi(\mathbf{k}_1)$ i $\psi(\mathbf{k}_2)$.

(e) Riješite sustav jednadžbi za $\psi(\mathbf{k}_1)$ i $\psi(\mathbf{k}_2)$ i pronađite dvije dozvoljene energije u točki $\mathbf{k}_1$.

(f) Neka Γ središte 1. B.z., a točka T s vektorom položaja $\mathbf{k}_1$. Skicirajte $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ za dvije vrpce najniže energije duž spojnice Γ - T i odredite veličinu energijskog procjepa.

Zadatak 7.3 Nađite izraz za imaginarni dio valnog vektora unutar energijskog procijepa na rubu prve Brillouinove zone za dva energijske razine. Računajte za $\text{Im}(k)$ u središtu energijskog procijepa te pokažite da za mali $\text{Im}(k)$ vrijedi

$$\frac{\hbar^2}{2m} [\text{Im}(k)]^2 \approx \frac{2mU^2}{\hbar^2 K^2}$$

Zadatak 7.4 (a) Pokažite da jedinični vektor normale na Fermijevu plohu mora biti neprekidna funkcija u reduciranoj shemi zona želimo li da energija $\mathcal{E}_{\mathbf{n}\mathbf{k}}$ bude kontinuirana i diferencijabilna.

(b) Pokažite da je u aproksimaciji gotovo slobodnog elektrona, Fermijeva ploha okomita na rubove Brillouinove zone.

Zadatak 7.5 Nađite Fermijevu plohu za 2D trokutastu (heksagonalnu) rešetku sa šest neinteragirajućih elektrona po čvoru.

(a) Izračunajte polumjer Fermijeve sfere.

(b) Nacrtajte recipročnu rešetku trokutaste rešetke na paus papiru i označite prve tri Brillouinove zone.

(c) Nacrtajte Fermijevu sferu na posebnom komadu papira u istoj skali kao i Brillouinove zone. Pomičite paus papir iznad Fermijeve sfere tako i njene dijelove spojite u Fermijevu plohu.

Zadatak 7.6 Promotrite točku W na slici čiji je vektor $\mathbf{k}_W = (2\pi/a)(1, 1/2, 0)$ u prvoj Brillouinovoj zoni fcc Bravaisove rešetke. U točki W sijeku se tri Braggove ravnine: (200) , (111) , $(11\bar{1})$ pa su zato energije

$$\mathcal{E}_1^0 = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2, \quad \mathcal{E}_2^0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\mathbf{k} - \frac{2\pi}{a} (1, 1, 1) \right)^2, \quad \mathcal{E}_3^0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\mathbf{k} - \frac{2\pi}{a} (1, 1, -1) \right)^2, \quad \mathcal{E}_4^0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\mathbf{k} - \frac{2\pi}{a} (2, 0, 0) \right)^2$$

skoro degenerirane kad je $\mathbf{k} \approx \mathbf{k}_W$ i jednake $\mathcal{E}_W \approx \hbar^2 \mathbf{k}_W^2 / 2m$.

(a) Pokažite da su u području k -prostora blizu točke W , energije elektrona u prvom redu računa smetnje rješenja jednadžbe:

$$\begin{vmatrix} \epsilon_1^0 - \epsilon & U_1 & U_1 & U_2 \\ U_1 & \epsilon_2^0 - \epsilon & U_2 & U_1 \\ U_1 & U_2 & \epsilon_3^0 - \epsilon & U_1 \\ U_2 & U_1 & U_1 & \epsilon_4^0 - \epsilon \end{vmatrix} = 0$$

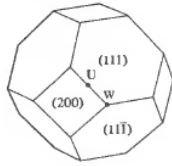
gdje su $U_2 = U_{200}$, $U_1 = U_{111} = U_{1\bar{1}\bar{1}}$. Za rješenja trebate dobiti:

$$\epsilon = \epsilon_w - U_2 \quad (\text{dvostruko degenerirana}), \quad \epsilon = \epsilon_w + U_2 \pm 2U_1$$

(b) Upotrijebite istu metodu i pokažite da su energije blizu točke U čiji je vektor $\mathbf{k}_U = (2\pi/a)(1, 1/2, 1/2)$ jednake

$$\epsilon = \epsilon_U - U_2, \quad \epsilon = \epsilon_U + \frac{1}{2}U_2 \pm \frac{1}{2}(U_2^2 + 8U_1^2)^{1/2}$$

gdje je $\epsilon_U \approx \hbar^2 \mathbf{k}_U^2 / 2m$.



8 Aproximacija čvrste veze

Zadatak 8.1 Izvedite jednadžbu za energijske vrpce u aproksimaciji čvrste veze

$$[\mathcal{E}(\mathbf{k}) - E_l] b_l = -[\mathcal{E}(\mathbf{k}) - E_l] \sum_m \left[\sum_{\mathbf{R} \neq 0} \alpha_{lm}(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \right] b_m - \sum_m \beta_{lm} b_m - \sum_m \left[\sum_{\mathbf{R} \neq 0} \gamma_{lm}(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \right] b_m$$

Uputa: pogledajte u Ashcroft, Mermin str. 179-180.

Zadatak 8.2 Izračunajte gustoću stanja za 1D energijsku vrpcu u TBA

$$\mathcal{E}(k) = \mathcal{E}_0 - 2t \cos(ka)$$

Uputa: krenite od definicije gustoće stanja

$$g(\mathcal{E}) = \frac{2}{L} \sum_{k \in \text{1D}} \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}(k))$$

gdje je L duljina kristala.

Zadatak 8.3 Promotrite jednodimenzionalnu kristalnu rešetku s atomima na međusobnoj udaljenosti b u aproksimaciji čvrste veze, s jednim elektronom po atomu. Atomske valne funkcije su oblika $u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ gdje je $\mathbf{R}_i = i\mathbf{b}$ položaj jezgre i -tog atoma. Uzmite u obzir da vrijedi:

$$\int u^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) H u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d^3r = -E_0$$

$$\int u^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) H u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{i+1}) d^3r = -V$$

$$\int u^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) H u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{i+j}) d^3r = 0 \quad \text{za } j \geq 2$$

gdje je H hamiltonijan. Izračunajte:

- Energijsku vrpcu za ovaj kristal koja odgovara energiji E_0 .
- Elektronsku gustoću stanja.

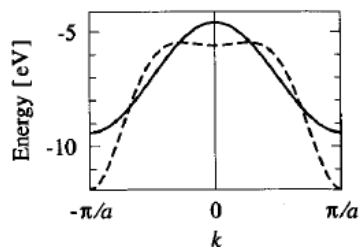
Zadatak 8.4 Razmotrite jednodimenzionalan TBA model elektrona koji tuneliraju između atoma. Neka je udaljenost između atoma jednaka a , atomsku orbitalu na n -tom atomu označimo s $|n\rangle$ za $n = 1, 2, \dots, N$. Pretpostavite da je $H_{nm} = \langle n|H|m\rangle = \epsilon$ za $n = m$ i $\langle n|H|m\rangle = -t$ za $n = m \pm 1$ i $t > 0$.

- Izvedite i skicirajte disperzijsku krivulju $E = E(k)$ za elektrone.
- Koliko postoji različitih svojstvenih stanja za H u ovom sustavu?
- Kolika je efektivna masa blizu dna ove vrpce?
- Kolika je gustoća stanja?
- Ako je svaki atom monovalentan, kolika je gustoća stanja za Fermijevu energiju?

Zadatak 8.5 (a) Upotrijebite aproksimaciju čvrste veze za s-vrpcu u jednodimenzionalnom kristalu konstante rešetke a koja je nastala od atomskih s-orbitala i izvedite disperziju $\mathcal{E} = \mathcal{E}(k)$ uzevši u obzir prve najbliže susjede. Integral prekrivanja za prve najbliže susjede označite s γ prema oznakama s vježbi. Koeficijent β uzmite u obzir, a α zanemarite.

(b) Izvedite disperziju $\mathcal{E} = \mathcal{E}(k)$ uzevši u obzir prve i druge najbliže susjede. Integral prekrivanja za druge najbliže susjede označite s γ' . Uzmite u obzir koeficijente α i β .

(c) Na slici su nacrtane vrpce izračunate pod (a) i (b). Koji je utjecaj uzimanja u obzir drugih najbližih susjeda?



Zadatak 8.6 Promotrite 1D Bravaisovu rešetku s dva atoma u bazi u aproksimaciji čvrste veze (TBA). Neka je N atoma vrste A smješteno na položaje $R_m = 2ma$, gdje je $m = 1, 2, 3, \dots, N$. Također, neka je N atoma vrste B

postavljeno na položaje $R_n = (2n + 1)a$, gdje je $n = 1, 2, 3, \dots, N$. Svaki atom ima jedan elektron i jednu atomsku orbitalu. Orbitale za atom na položaju R_m označit ćemo s $u^A(x - R_m)$, a orbitale na položaju R_n s $u^B(x - R_n)$. Pretpostaviti ćemo da su orbitale ortonormirane:

$$\langle u_m^A | u_{m'}^A \rangle = \delta_{mm'}$$

$$\langle u_n^B | u_{n'}^B \rangle = \delta_{nn'}$$

$$\langle u_n^A | u_m^B \rangle = 0$$

gdje je, na primjer, $\langle x | u_m^A \rangle = u^A(x - R_m)$. Jednoelektronski hamiltonijan dan je izrazom $H = p^2/2m + U(x)$ gdje je $U(x)$ periodični potencijal ove Bravaisove rešetke. Ako su atomi na položajima R_m i R_n najbliži susjedi, tada su matrični elementi za H u bazi $\{|u_m^A\rangle, |u_n^B\rangle\}$ jednaki

$$\langle u_m^A | H | u_{m'}^A \rangle = \varepsilon_A \delta_{mm'}$$

$$\langle u_n^B | H | u_{n'}^B \rangle = \varepsilon_B \delta_{nn'}$$

$$\langle u_n^A | H | u_m^B \rangle = -t$$

Ako atomi na položajima R_m i R_n nisu najbliži susjedi, tada su ovi matrični elementi jednaki nuli.

(a) Kako glase Blochove valne funkcije $\psi_k^A(x)$ i $\psi_k^B(x)$ u TBA? Pripazite na normalizaciju.

(b) Kako glase matrični elementi $\langle \psi_k^A | H | \psi_k^A \rangle$, $\langle \psi_k^A | H | \psi_k^B \rangle$, $\langle \psi_k^B | H | \psi_k^B \rangle$? Napišite matricu za H u bazi $\{|\psi_k^A\rangle, |\psi_k^B\rangle\}$.

(c) Kako glase svojstvene vrijednosti za H iz (b)? Drugim riječima, nađite energijske vrpce za ovaj kristal.

(d) Nacrtajte vrpce ako je $\varepsilon_A + \varepsilon_B = 0$ i $\varepsilon_A - \varepsilon_B = t = 1$ eV.

Zadatak 8.7 Upotrijebite aproksimaciju čvrste veze te izvedite izraz za energijsku s-vrpcu u fcc rešetki iz atomske s-razine. Kolika je energija vrpce u granici $\mathbf{k} \rightarrow 0$?

Zadatak 8.8 Odredite tenzor recipročne efektivne mase elektrona za 2D heksagonalnu rešetku.

Zadatak 8.9 (a) Upotrijebite TBA da pokažete da polubeskonačni lanac atoma čiji rub predstavlja površinu kristala, ima energije i unutar procjepa između uobičajenih energijskih vrpca.

(b) Diskutirajte energijske vrpce i površinska stanja iz (a) ako se na rubu nalazi atom primjese.

Zadatak 8.10 Promotrite četiri atoma s vanjskim p -orbitalama smještene na vrhove kvadrata u slučaju $E_{pz} \ll E_{px} = E_{py} \equiv E_p$. Pretpostavite da je utjecaj međuatomskih interakcija na energije orbitala p_x i p_y opisan matričnim elementima J_1 i J_2 . Orbitale p_z ispustite iz razmatranja. Odredite energije i valne funkcije osam molekularnih orbitala dobivenih miješanjem osam atomskih orbitala p_x i p_y .

Zadatak 8.11 (a) Pokažite da su Wannierove funkcije na različitim čvorovima ortogonalne

$$\int \phi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}') d^3r \propto \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}$$

pozivajući se na ortogonalnost Blochovih funkcija i identitet

$$\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} = N \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}$$

(b) Pokažite da je

$$\int d^3r |\phi_n(\mathbf{r})|^2 = 1$$

ako je integral kvadrata iznosa Blochove funkcije $|\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2$ po primitivnoj ćeliji normaliziran na jedinicu.

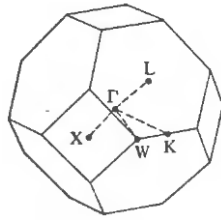
Zadatak 8.12 (a) Pokažite da se duž spojnice ΓX u prvoj Brillouinovoj zoni fcc rešetke prikazanoj na slici, TBA energija s-vrpce mijenja kao

$$\varepsilon = E_s - \beta - 4\gamma [1 + 2\cos(\pi\mu)], \quad 0 \leq \mu \leq 1$$

gdje je μ parametar spojnice, točka Γ točno u središtu zone $(0, 0, 0)$, a točka X ima koordinate $(2\pi/a, 0, 0)$. Dakle, spojnica ΓX leži upravo na koordinatnoj osi k_x .

(b) Pokažite da derivacija za ε u smjeru normale po kvadratnim stranicama prve Brillouinove zone iščezava.

Uputa: koristite izraz za energiju s-vrpce kojeg smo izračunali u zadatku 8.2 s vježbi. Pod (b), primijetite da kvadrati leže na ravninama koje su okomite na koordinatne osi k_x , k_y i k_z .



Zadatak 8.13 (a) Upotrijebite aproksimaciju čvrste veze te izvedite izraz za energijsku s-vrpce u bcc rešetki iz atomske s-razine. Tijekom računa uzimate u obzir standardne pretpostavke: sumacija po najbližim susjedima te zanemarite koeficijent $\alpha_{lm}(\mathbf{R})$.

(b) Kakva je ovisnost energije o valnom vektoru na dnu vrpce, za $\mathbf{k} \approx 0$?

(c) Kakva je ovisnost energije o valnom vektoru na rubovima 1BZ, za $\mathbf{k} \approx (\pm\pi/a, \pm\pi/a, \pm\pi/a)$?

Uputa: prisjetite se da u bcc rešetki broj najbližih susjeda (koordinacijski broj) iznosi 8

$$\mathbf{R}_{nn} = \left\{ \frac{a}{2}(\pm 1, \pm 1, 1), \frac{a}{2}(\pm 1, \pm 1, -1) \right\}$$

9 Metode za proračun elektron-elektron interakcije

Zadatak 9.1 Pokažite da je blizu minimuma energijske vrpce pri $k = 0$ Hartree-Fockova jednoelektronska energija parabolična po k

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*},$$

gdje je efektivna masa m^*

$$\frac{m^*}{m} = \frac{1}{1 + 0,22(r_s/a_0)}.$$

Zadatak 9.2 Počevši od Hartree-Fockovih jednadžbi, pokažite da je energija po čestici u Hartree-Fockovoj aproksimaciji dana izrazom

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{2e^2}{\pi} k_F F(k/k_F)$$

gdje je $F(x)$ jednaka

$$F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|$$

Uputa: pogl. Ashcroft, Mermin str. 334.

Zadatak 9.3 Jednoelektronske energije u Hartree-Fockovoj aproksimaciji interagirajućeg elektronskog plina, uzimajući ravne valove kao polazne valne funkcije, imaju oblik

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_0(\mathbf{k}) + \mathcal{E}_{\text{ex}}(\mathbf{k})$$

gdje je $\mathcal{E} = \hbar^2 k^2 / 2m$ i

$$\mathcal{E}_{\text{ex}}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k}'| < k_F} \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} = -\frac{2e^2 k_F}{\pi} F(k/k_F)$$

$$F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|$$

(a) Pokažite da je doprinos člana izmjene ukupnoj energiji interagirajućeg elektronskog plina s N elektrona

$$\frac{E_{\text{ex}}}{N} = -\frac{3e^2 k_F}{4\pi}$$

a doprinos člana za kinetičku energiju

$$\frac{E_{\text{kin}}}{N} = \frac{3}{10} \frac{\hbar^2 k_F^2}{m}$$

(b) Pokažite da njihovim zbrajanjem dobivamo

$$\frac{E^{\text{HF}}}{N} = \left[\frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} - \frac{3}{2} \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{2/3} \frac{1}{r_s} \right] \text{Ry} = \left[\frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} \right] \text{Ry}$$

Uputa: pod (a) izračunajte integral (1/2 zbog dvostrukog zbrajanja Coulombskih interakcija)

$$E^{\text{ex}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \mathcal{E}_{\text{ex}}(\mathbf{k}) \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \\ \rightarrow 2 \frac{1}{2} \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{k_F} dk k^2 (-1) \frac{2e^2 k_F}{\pi} \left[\frac{1}{2} + \frac{1-(k/k_F)^2}{4(k/k_F)} \ln \left| \frac{1+k/k_F}{1-k/k_F} \right| \right]$$

Koristit će vam sljedeći neodređeni integral:

$$\int y^n \ln y \, dy = \frac{y^{1+n} [-1 + (1+n) \ln y]}{(1+n)^2} + \text{konst.}$$

Zadatak 9.4 (a) Pronađite prosječnu vrijednost *točnog* hamiltonijana $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ koji opisuje elektrone u metalu ako za ukupnu valnu funkciju uzmete produkt **normaliziranih** jednočestičnih valnih funkcija

$$\Psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_N s_N) = \psi_1(\mathbf{r}_1 s_1) \psi_2(\mathbf{r}_2 s_2) \dots \psi_N(\mathbf{r}_N s_N)$$

(b) Izrazite uvjete normalizacije za jednočestične valne funkcije ψ_i kao jednadžbe veze s Lagrangeovim multiplikatorima $\mathcal{E}_i$ te varirajte izraz

$$F[\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N] = \langle \Psi | H | \Psi \rangle + \sum_{i=1}^N \mathcal{E}_i \left(\int \psi_i^* \psi_i d^3r - 1 \right)$$

po $\delta\psi_i$ i $\delta\psi_i^*$. Pokažite da iz jednadžbe $\delta F = 0$, odnosno, $\delta_i F = 0$ slijede Harteejeve jednadžbe.

Zadatak 9.5 (a) Pomoću integralne reprezentacije delta funkcije

$$\delta(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

i činjenice da Coulombski potencijal $\Phi = -e/r$ (CGS) zadovoljava Poissonovu jednadžbu

$$-\nabla^2 \Phi = -4\pi e \delta(\mathbf{r}) ,$$

argumentirajte da se potencijalna energija elektronskog para, $V(\mathbf{r}) = -e\Phi(\mathbf{r}) = e^2/r$ može zapisati u obliku

$$V(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{k}) ,$$

gdje je $V(\mathbf{k})$ Fourierov transformat za $V(\mathbf{r})$

$$V(\mathbf{k}) = \frac{4\pi e^2}{k^2} .$$

(b) Pokažite da je Fourierov transformat zasjenjene Coulombske interakcije

$$V_s(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{r} e^{-k_0 r}$$

jednak

$$V_s(\mathbf{k}) = \frac{4\pi e^2}{k^2 + k_0^2} ,$$

gdje je k_0 Thomas-Fermijev valni vektor.

(c) Pokažite da zasjenjena Coulombska interakcija zadovoljava jednadžbu

$$(-\nabla^2 + k_0^2) V_s(\mathbf{r}) = 4\pi e^2 \delta(\mathbf{r}) .$$

Zadatak 9.6 (a) Upotrijebite prvi red stacionarnog računa smetnje za valnu funkciju $\psi_{\mathbf{k}}$

$$\psi_{\mathbf{k}} = \psi_{\mathbf{k}}^0 + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\langle \psi_{\mathbf{k}'}^0 | V(\mathbf{r}) | \psi_{\mathbf{k}}^0 \rangle}{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^0 - \mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^0} \psi_{\mathbf{k}'}^0$$

u problemu koji je zadan hamiltonijanom $H = \mathbf{p}^2/2m + V(\mathbf{r}) = \mathbf{p}^2/2m - e\Phi(\mathbf{r})$. Izraz za ukupnu gustoću naboja glasi

$$\rho(\mathbf{r}) = -e \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}|^2 = \rho^0(\mathbf{r}) + \rho^{ind}(\mathbf{r}) ,$$

gdje je $f_{\mathbf{k}}$ ravnotežna Fermijeva razdioba te pokažite da je Fourierov transformat inducirane gustoće naboja u prvom redu po ukupnom potencijalu Φ jednak

$$\rho^{ind}(\mathbf{q}) = -e^2 \int \frac{d^3k}{4\pi^2} \frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}}{(\hbar^2/m) \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}} \Phi(\mathbf{q}) .$$

(b) Iz (a) izvedite izraz za Fourierov transformat Lindhardove susceptibilnosti $\chi(\mathbf{q})$ i dielektrične konstante $\epsilon(\mathbf{q})$.

Zadatak 9.7 Lindhardova dielektrična funkcija ovisna o frekvenciji ω kao i o valnom vektoru $\mathbf{q}$ vanjske smetnje, glasi:

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \int \frac{d^3k}{4\pi^3} \frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}}{\hbar^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{q} / m + \hbar \omega}$$

Pokažite da se u granici $q \rightarrow 0$ pri fiksnoj frekvenciji ω , Lindhardova funkcija svodi na Drudeovu dielektričnu funkciju koja je izvedena za prostorno jednoliku smetnju

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

Zadatak 9.8 Pokažite da Lindhardova dielektrična funkcija u granici $q \rightarrow 0$ (dugovalna granica) teži k Thomas-Fermijevoj dielektričnoj funkciji.

Zadatak 9.9 (a) Pokažite da je Lindhardova funkcija za statičko polje na $T = 0$ jednaka

$$\chi(\mathbf{q}) = -e \left(\frac{mk_F}{\hbar^2 \pi^2} \right) \left[\frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right]$$

gdje je $x = q/2k_F$.

(b) Pokažite da se zasijenjeni potencijal točkastog naboja na velikim udaljenostima na $T = 0$ ponaša kao

$$\Phi(r) \sim \frac{\cos(2k_F r)}{r^3}$$

i drugačiji je od Thomas-Fermijeve teorije. Ovisno o kontekstu u kojem se spominju, ovakve oscilacije potencijala nazivaju se Friedelove ili Ruderman-Kittelove oscilacije.

Uputa: pogl. Ashcroft, Mermin str. 343.

10 Poluklasični model dinamike Blochovih elektrona

Zadatak 10.1 (a) Izvedite prvu jednadžbu poluklasičnog modela za elektrone u kristalu, odnosno, pokažite da je prosječna brzina Blochovog elektrona jednaka grupnoj brzini valnog paketa

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}},$$

gdje je valni vektor $\mathbf{k}$ središnji u valnom paketu.

(b) Izvedite izraz za inverzni tenzor efektivne mase Blochovih elektrona.

Uputa: upotrijebite razvoj u red oko $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ za energiju vrpce $\mathcal{E}(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ na jednoj strani te račun smetnje do drugog reda za hamiltonijan u periodičnom potencijalu $H_{\mathbf{k} + \mathbf{q}}$ na drugoj strani.

Zadatak 10.2 Disperzija za vodljivu vrpču u 1D metalu je dana izrazom

$$\mathcal{E}_c(k) = \mathcal{E}_g + \mathcal{E}_1 \sin^2(ka/2)$$

gdje je $\hbar k$ kristalni impuls, veličina a je konstanta rešetke, a $\mathcal{E}_g$ i $\mathcal{E}_1$ su konstante.

(a) Izračunajte efektivnu masu elektrona za $k = 0$ i $k = \pi/a$.

(b) Izvedite izraz za grupnu brzinu elektrona upotrebljavajući poluklasične jednadžbe gibanja.

(c) Nacrtajte grupnu brzinu kao funkciju od k u 1BZ.

Zadatak 10.3 Razmotrite jednodimenzionalan vodič duljine L u aproksimaciji čvrste veze. Energijska vrpca dana je formulom

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_0 - \frac{\Delta}{2} \cos(ka),$$

gdje je a konstanta rešetke. Pretpostavite da je vodič na temperaturi $T = 0$, da je vrpca djelomično popunjena do Fermijeve energije $\mathcal{E}_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$, gdje je Fermijev valni vektor $k_F < \pi/a$ te da nema raspršenja elektrona u rešetki, na primjer, zbog titranja rešetke. Vodič je stavljen u homogeno električno polje E .

(a) Ako elektron ima kristalni impuls k_0 u trenutku $t = 0$, pokažite da je brzina elektrona u trenutku t jednaka

$$v(t) = v_{\max} \sin(k_0 a - \omega_{BO} t).$$

Odredite $v_{\max}$ i kružnu frekvenciju Blochovih oscilacija ω_{BO} .

(b) Pretpostavite da su u trenutku $t = 0$ sva stanja ispod Fermijeve energije popunjena, a ona iznad Fermijeve energije prazna. Izvedite izraz za gustoću električne struje kao funkciju vremena t .

(c) Nacrtajte amplitudu gustoće struje kao funkciju elektronske gustoće od $n = 0$ do $n = 2/a$.

Zadatak 10.4 Uzmemo li u obzir prigušenje, poluklasične jednadžbe za gibanje elektrona u periodičnom potencijalu u aproksimaciji čvrste veze i pod djelovanjem električnog polja E u 1D, imaju oblik:

$$\dot{x} = \frac{2\gamma a}{\hbar} \sin(ka)$$

$$\hbar \dot{k} = -eE - \frac{m}{\tau} \dot{x}$$

gdje prigušenje opisuje drugi član u drugoj jednadžbi s desne strane. Vrijednosti parametara su: $\gamma = 1$ eV, $a = 0,2$ nm, $E = 10^6$ V·cm⁻¹ i $\tau = 10^{-14}$ s.

(a) Napišite jednadžbe gibanja pomoću bezdimenzionalnih veličina, s duljinom u jedinicama od a i s vremenom u jedinicama od τ .

(b) Integrirajte jednadžbe dobivene pod (a) i opišite efekt prigušenja na Blochove elektrone.

(c) Opišite analitički (formulom) konačno stanje sustava.

Zadatak 10.5 Pokažite da su gustoća električne struje i gustoća energijske struje

$$\mathbf{j} = (-e) \int_{1BZ} \frac{d^3 k}{4\pi^3} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{k}}$$

$$\mathbf{j}_E = \frac{1}{2} \int_{1BZ} \frac{d^3 k}{4\pi^3} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} [\mathcal{E}(\mathbf{k})]^2$$

jednake nuli ako se radi u popunjenoj energijskoj vrpici.

Uputa: koristite teorem iz zadatka 6.7 s vježbi.

Zadatak 10.6 Za elektrone blizu maksimuma ili minimuma energijske vrpce, relacija $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ ima oblik

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2}{2} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0),$$

gdje je $\mathbf{M}$ matrica neovisna o valnom vektoru $\mathbf{k}$. Elektroni u poluvodičima se gotovo uvijek razmatraju u ovoj aproksimaciji.

(a) Izračunajte ciklotronsku efektivnu masu i pokažite da je neovisna o $\mathcal{E}$ i k_z te jednaka

$$m^* = \left(\frac{\det(\mathbf{M})}{M_{zz}} \right)^{1/2}.$$

(b) Izračunajte elektronsku specifičnu toplinu koja je posljedica zadane energijske vrpce. Usporedite je s rezultatom u modelu slobodnih elektrona i pokažite da je efektivna masa specifične topline zbog energijske vrpce

$$m^* = [\det(\mathbf{M})]^{1/3}.$$

Zadatak 10.7 Razmotrite energijsku vrpcu sa sljedećom disperzijom:

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}(0) + \hbar^2 \left(\frac{k_x^2}{2m_x} + \frac{k_y^2}{2m_y} + \frac{k_z^2}{2m_z} \right)$$

koja ima minimum u $\mathbf{k} = 0$. Energijska vrpca ima ovaj oblik u ortorompskoj rešetki.

(a) Izračunajte gustoću stanja i elektronsku specifičnu toplinu (toplinski kapacitet po jediničnom volumenu). Usporedbom s rezultatom za elektronsku specifičnu toplinu slobodnih elektrona, pokažite da je efektivna masa za elektronsku specifičnu toplinu jednaka

$$m_s^* = (m_x m_y m_z)^{1/3}$$

(b) Riješite poluklasičnu jednadžbu gibanja

$$m_\alpha \frac{dv_\alpha}{dt} = -e [E_\alpha + (\mathbf{v} \times \mathbf{B})_\alpha], \quad \alpha = x, y, z$$

za $\mathbf{E} = 0$ i $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ i pokažite da je ciklotronska frekvencija dana izrazom $\omega_c = eB/m_c^*$ gdje je ciklotronska efektivna masa $m_c^* = (m_x m_y)^{1/2}$.

Zadatak 10.8 U Drudeovom modelu, struja inducirana električnim poljem koje je ortogonalno na homogeno magnetsko polje, jednaka je

$$\mathbf{E} = \boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{j}$$

gdje tensor otpornosti ima oblik

$$\boldsymbol{\rho} = \begin{pmatrix} \rho & -RH \\ RH & \rho \end{pmatrix}$$

Veličina ρ je magnetootpornost, a R je Hallov koeficijent.

(a) Razmotrite metal s nekoliko djelomično popunjenih vrpce u kojima je inducirana struja povezana s električnim poljem kroz relaciju $\mathbf{E}_n = \boldsymbol{\rho}_n \cdot \mathbf{j}_n$, gdje $\boldsymbol{\rho}_n$ ima oblik

$$\boldsymbol{\rho}_n = \begin{pmatrix} \rho_n & -R_n H \\ R_n H & \rho_n \end{pmatrix}$$

Ovakva relacija za $\boldsymbol{\rho}_n$ ne zahtjeva nužno da elektrone u vrpce smatramo slobodnim, već samo da magnetsko polje bude usmjereno duž osi s dovoljnom simetrijom u kristalu. Pokažite da je ukupna inducirana struja $\mathbf{E} = \boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{j}$ s tenzorom otpornosti

$$\boldsymbol{\rho} = \left(\sum_n \boldsymbol{\rho}_n^{-1} \right)^{-1}$$

(b) Ako postoje smo dvije vrpce, izvedite izraze za Hallov koeficijent i magnetootpor.

(c) Iz dobivenog izraza za R pod (b) pokažite da je u granici jakih polja u slučaju da obje vrpce imaju zatvorene orbite

$$R_\infty = -\frac{1}{n_{eff} e c}$$

gdje je n_{eff} ukupna gustoća elektrona minus ukupna gustoća šupljina. Diskutirajte slučaj $n_{eff} = 0$ i pokažite da tada magnetootpornost raste razmjerno H^2 .

Zadatak 10.9 Ako $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ ima oblik iz zadatka 8.3, poluklasične jednadžbe gibanja su linearne i, zato, jednostavno rješive.

(a) Generalizirajte Drudeov model i pokažite da je DC električna vodljivost dana jednadžbom

$$\sigma = ne^2 \mathbf{M}^{-1}.$$

(b) Izvedite izraz za efektivnu ciklotronsku masu iz zadatka 8.3 (a) tako da riješite eksplicitno riješite jednadžbu

$$\mathbf{M} \cdot \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{H} \right).$$

te iskoristite izraz za kružnu frekvenciju $\omega = eH/cm^*$.

Zadatak 10.10 Valjanost poluklasičnog rezultata $\mathbf{k}(t) = \mathbf{k}(0) - e\mathbf{E}t/\hbar$ za elektron u homogenom električnom polju ima jaku potvrdu u sljedećem teoremu koji je veoma korisna osnova za razmatranje problema električnog proboja:

Promotrite vremenski ovisnu Schrödingerovu jednadžbu za elektron u periodičkom potencijalu $U(\mathbf{r})$ i homogenom električnom polju $\mathbf{E}$:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} \right] \psi = H\psi$$

Pretpostavimo da je u $t = 0$ rješenje $\psi(\mathbf{r}, 0)$ linearna kombinacija Blochovih stanja koja imaju isti valni vektor $\mathbf{k}$. Tada će rješenje $\psi(\mathbf{r}, t)$ biti linearna kombinacija Blochovih stanja koja imaju valni vektor $\mathbf{k} - e\mathbf{E}t/\hbar$.

Treba napomenuti da poluklasična teorija elektrona u homogenom električnom polju ipak nije točna jer koeficijenti u linearnoj kombinaciji Blochovih stanja općenito ovise o vremenu pa se mogu dogoditi prijelazi između vrpca.

11 Poluklasična teorija provođenja u metalima

Zadatak 11.1 Tenzor električne vodljivosti za metale s kubnom simetrijom je konstanta puta jedinična matrica, odnosno, gustoća struje $\mathbf{j}$ paralelna je električnom polju $\mathbf{E}$. Upotrijebite slične simetrije te pokažite da je za heksagonsku gusto slagano rešetku, tenzor vodljivosti dijagonalan u pravokutnom sustavu sa z osi duž c osi kristalne rešetke. Pri tome vrijedi $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$ te je struja zbog električnog polja koje je paralelno ili okomito u odnosu na os c, uvijek paralelna polju.

Zadatak 11.2 Pokažite da se izraz za električnu vodljivost

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2 \tau(\mathcal{E}_F)}{4\pi^3} \int_{1bz} d^3k v_i(\mathbf{k}) v_j(\mathbf{k}) \left[-\frac{\partial f(\mathcal{E})}{\partial \mathcal{E}} \right]_{\mathcal{E}=\mathcal{E}(\mathbf{k})}$$

može svesti na

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2 \tau(\mathcal{E}_F)}{4\pi^3} \int_{1bz} d^3k f(\mathcal{E}(\mathbf{k})) \left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij}$$

gdje je inverzni tenzor efektivne mase dan formulom

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial k_i \partial k_j}$$

Uputa: koristite poluklasične jednadžbe za brzinu i parcijalnu integraciju. Također, uzmite u obzir da je

$$-\frac{\partial f}{\partial \mathcal{E}} \approx \delta(\mathcal{E}_F - \mathcal{E})$$

Zadatak 11.3 (a) Upotrijebite tenzor DC vodljivosti na $T = 0$, odnosno, u aproksimaciji $T \ll T_F$, i pokažite da je vodljivost vrpce s kubnom simetrijom dana izrazom:

$$\sigma = \frac{e^2}{12\pi^3 \hbar} \tau(\mathcal{E}_F) \bar{v} S$$

gdje je S površina Fermijeve plohe u vrpci, a prosjek brzine izračunat je po Fermijevoj plohi

$$\bar{v} = \frac{1}{S} \int dS |\mathbf{v}(\mathbf{k})|$$

Primijetite da izraz za prosječnu brzinu sadrži informaciju o tome da potpuno pune ili potpuno prazne vrpce koje ne sadrže Fermijevu plohu, ne vode struju. Također, izraz za prosječnu brzinu omogućava alternativan način gledanja na činjenicu da skoro prazna (mali broj elektrona) ili skoro puna vrpca (mali broj šupljina) ima nisku vodljivost, budući da takve vrpce sadrže veoma mali dio Fermijeve plohe.

(b) Pokažite da se izraz za vodljivost iz (a) u aproksimaciji slobodnih elektrona svodi na Drudeov rezultat.

Zadatak 11.4 Pokažite da jednadžbe koje opisuju električnu i toplinsku struju

$$\mathbf{j} = \mathbf{L}^{11} \mathbf{F} + \mathbf{L}^{12} (-\nabla T)$$

$$\mathbf{j}^q = \mathbf{L}^{21} \mathbf{F} + \mathbf{L}^{22} (-\nabla T)$$

gdje su

$$\mathbf{F} = \mathbf{E} + \frac{\nabla \mu}{e}$$

$$\mathbf{L}^{11} = \boldsymbol{\sigma}(\mathcal{E}_F) = \boldsymbol{\sigma}$$

$$\mathbf{L}^{21} = T \mathbf{L}^{12} = -\frac{\pi^2}{3e} (k_B T)^2 \boldsymbol{\sigma}'$$

$$\mathbf{L}^{22} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T}{e^2} \boldsymbol{\sigma}$$

$$\boldsymbol{\sigma}' = \left. \frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} \boldsymbol{\sigma}(\mathcal{E}) \right|_{\mathcal{E}=\mathcal{E}_F}$$

vrijede i u prisutnosti homogenog magnetskog polja pri čemu se tenzor $\boldsymbol{\sigma}(\mathcal{E})$ mora generalizirati da uključi efekte magnetskog polja zamjenom $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ s prosječnom vrijednošću za $\mathbf{v}(\mathbf{k})$

$$\bar{\mathbf{v}}_n(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^0 \frac{dt}{\tau_n(\mathbf{k})} e^{t/\tau_n(\mathbf{k})} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_n(t))$$

Kada temperatura T teži u nulu, DC vodljivost metala s kubičnom rešetkom poprima konstantnu vrijednost (rezidualna vodljivost) koja je posljedica sudara elektrona s primjesama. Na $T = 0$ rezidualnu vodljivost moguće je dobiti zamijenimo li derivaciju Fermijeve funkcije, Diracovom delta funkcijom $\delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F)$ u općoj formuli za vodljivost

$$\sigma = \frac{1}{3} e^2 \int d\mathcal{E} v^2(\mathcal{E}) \tau(\mathcal{E}) \left[-\frac{\partial f(\mathcal{E})}{\partial \mathcal{E}} \right]$$

Napišite razvoj za σ po potencijama od T za mali, ali konačan T . Zanimajte ovisnost kemijskog potencijala o temperaturi.

Zadatak 11.5 Pretpostavimo da mjerimo toplinsku provodnost: za ustanovljeni temperaturni gradijent mjerimo toplinsku struju j_q duž uzorka. No, umjesto da osiguramo da je električna struja jednaka nuli, eksperiment izvedemo tako da je električno polje jednako nuli. Toplinsku provodnost κ' izračunamo pomoću formule

$$\kappa' = -\frac{j_q}{\nabla T}$$

(a) Izračunajte razliku $\Delta\kappa = \kappa' - \kappa$ pomoću uobičajene toplinske provodnosti κ , električne provodnosti σ i Seebeckovog koeficijenta (termosnage) $\mathcal{S}$.

(b) Koliki je red veličine za $\Delta\kappa/\kappa$ na sobnoj temperaturi za metale?

Zadatak 11.6 Odziv vodljivih elektrona na električno polje

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \text{Re} \left[E(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right]$$

koje ovisi o vektoru položaja kao i o vremenu, zahtijeva posebna razmatranja. Takvo polje će, općenito, inducirati gustoću naboja

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, t) &= -e\delta n(\mathbf{r}, t) \\ \delta n(\mathbf{r}, t) &= \text{Re} \left[\delta n(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right] \end{aligned}$$

Zbog činjenice da je broj elektrona očuvan u sudarima, lokalna ravnotežna raspodjela g^0 koja se pojavljuje u aproksimaciji relaksacijskog vremena mora odgovarati gustoći jednako stvarnoj trenutnoj lokalnoj gustoći $n(\mathbf{r}, t)$. Zato i u slučaju da je raspodjela temperature jednolika, moramo pretpostaviti da lokalni kemijski potencijal μ ima oblik

$$\begin{aligned} \mu(\mathbf{r}, t) &= \mu + \delta\mu(\mathbf{r}, t) \\ \delta\mu(\mathbf{r}, t) &= \text{Re} \left[\delta\mu(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right] \end{aligned}$$

gdje odabiremo da $\delta\mu(\mathbf{q}, t)$ zadovoljava (do članova reda linearnih po $\mathbf{E}$) jednakost

$$\delta n(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\partial n_{eq}(\mu)}{\partial \mu} \delta\mu(\mathbf{q}, \omega)$$

Pokažite da u ovom slučaju pri jednolikoj raspodjeli temperature, za neravnotežnu raspodjelu temperature dobivamo izraz

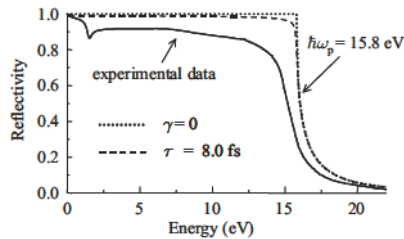
$$\begin{aligned} g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) &= f(\mathcal{E}(\mathbf{k})) + \text{Re} \left[\delta g(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right] \\ \delta g(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \omega) &= \left(-\frac{\partial f}{\partial \mathcal{E}} \right) \frac{\left[\delta\mu(\mathbf{q}, \omega) / \tau \right] - e\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega)}{(1/\tau) - i[\omega - \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k})]} \end{aligned}$$

12 Optička svojstva metala

Zadatak 12.1 Na slici je prikazana usporedba teorijske i eksperimentalne reflektivnosti aluminijske.

(a) Aluminij je trovalentni metal gustoće atoma $6 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$. Objasnite zašto je sjajan.

(b) Vodljivost aluminijske na sobnoj temperaturi iznosi $4,1 \cdot 10^7 \Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$. Izračunajte reflektivnost na valnoj duljini 500 nm prema Drude-Lorentzovom modelu.



Zadatak 12.2 Optička reflektivnost ili koeficijent refleksije definirana je relacijom

$$R(\omega) = \left| \frac{1 - N(\omega)}{1 + N(\omega)} \right|^2 = \frac{[1 - n(\omega)]^2 + \kappa^2(\omega)}{[1 + n(\omega)]^2 + \kappa^2(\omega)}$$

gdje je kompleksni indeks loma

$$N(\omega) = \sqrt{\epsilon_r(\omega)} = n(\omega) + i\kappa(\omega)$$

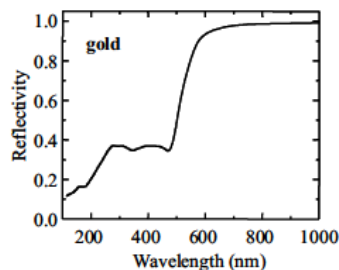
definiran pomoću kompleksne relativne permitivnosti (dielektrične konstante) ϵ_r , dok su n i κ indeks loma i koeficijent ekstinkcije. Upadni EM val je transversalni val s valnim vektorom $k \approx 0$. Promotrimo jednostavan metal čija je električna vodljivost opisana Drudeovom formulom $\sigma(\omega) = (ne^2\tau/m)/(1 - i\omega\tau)$. Dielektrična konstanta ϵ_r povezana je s vodljivošću σ standardnom formulom $\epsilon_r(\omega) = 1 + 4\pi i\sigma(\omega)/\omega$. Pretpostavit ćemo da je $\omega_p\tau \gg 1$, gdje je ω_p plazmena frekvencija i vrijedi $\omega_p^2 = 4\pi ne^2/m$. Izračunajte reflektivnost R u tri različita područja frekvencija upadnog zračenja:

(a) Hagen-Rubensov frekvencijski interval u kojem je $0 < \omega\tau \ll 1$;

(b) Relaksacijski interval u kojem je $1 \ll \omega\tau \ll \omega_p\tau$;

(c) Interval visokih frekvencija u kojem je $\omega\tau \gg \omega_p\tau$;

Zadatak 12.3 Slika prikazuje izmjerenu reflektivnost zlata za valne duljine 100 – 1000 nm. Objasnite oblik grafa kvalitativno i pokušajte pročitati s grafa koliki je energijski procjep između d-vrpce i Fermijeve energije. Upotrijebite ove podatke da objasnite karakterističnu boju zlata.



Zadatak 12.4 Natrij ima bcc rešetku i jedan valentni elektron po atomu. Nađite izraz pomoću kojeg ćete procijeniti valnu duljinu praga za međuvrpčane prijelaze, iz najniže u sljedeću višu energijsku vrpce u natriju. Upotrijebite činjenicu da je fermijev valni vektor k_F mnogo manji od valnog vektora na rubu prve Brillouinove zone. Konstanta rešetke za natrij je $a = 4,23 \text{ \AA}$.

Zadatak 12.5 Kvantno-mehanički izraz za AC električnu vodljivost metala možemo, relativno jednostavno, dobiti pretpostavimo li da nema sudara. Postavimo uzorak u vremenski promjenjivo električno polje $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}(\omega)e^{-i\omega t}$.

(a) Pomoću vremenski-ovisnog računa smetnje izračunajte promjenu Blochovog stanja $|n\mathbf{k}\rangle$ do članova prvog reda po električnom polju.

(b) Izračunajte prosječnu vrijednost operatora gustoće struje po promijenjenom Blochovom stanju do članova prvog reda po električnom polju. Pokažite da je tenzor AC električne vodljivosti za n -tu vrpcu jednak

$$\sigma_{lm}^{(n)}(\omega) = -\frac{e^2}{i\omega} \int \frac{d^3k}{4\pi^3} f(\epsilon_n(\mathbf{k})) \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{\hbar^2}{m} \delta_{lm} - \frac{\hbar^4}{m^2} \sum_{n' \neq n} \left(\frac{\langle n\mathbf{k} | \nabla_l | n'\mathbf{k} \rangle \langle n'\mathbf{k} | \nabla_m | n\mathbf{k} \rangle}{\hbar\omega + \epsilon_n(\mathbf{k}) - \epsilon_{n'}(\mathbf{k})} + \frac{\langle n\mathbf{k} | \nabla_m | n'\mathbf{k} \rangle \langle n'\mathbf{k} | \nabla_l | n\mathbf{k} \rangle}{-\hbar\omega + \epsilon_n(\mathbf{k}) - \epsilon_{n'}(\mathbf{k})} \right) \right]$$

Ovaj se izraz naziva Kubo-Greenwoodovom formulom za optičku vodljivost.

Zadatak 12.6 Kubo-Greenwoodova formula, za razliku od poluklasične teorije, opisuje dobro i međuvrpčanu apsorpciju. Iskoristite tu formulu i pokažite da je

$$\text{Im } \epsilon = \frac{4\pi}{\omega} \text{Re } \sigma = \frac{4\pi^2 e^2}{\omega} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{nn'} D_{nn'}(\mathbf{k}) \delta\left(\frac{\epsilon_n(\mathbf{k}) - \epsilon_{n'}(\mathbf{k})}{\hbar} - \omega\right)$$

$$D_{nn'}(\mathbf{k}) = \frac{f(\epsilon_{n'}(\mathbf{k})) - f(\epsilon_n(\mathbf{k}))}{\epsilon_n(\mathbf{k}) - \epsilon_{n'}(\mathbf{k})} \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 |\langle n\mathbf{k} | v_i | n'\mathbf{k} \rangle|^2$$

U nedostatku sudara, poluklasična vodljivost je imaginarna, a dielektrična konstanta je realna što znači da nema disipacije elektromagnetske energije u metalu. Ipak, kao što smo pokazali, kvantno-mehanička vodljivost u nedostatku sudara ipak ima realni dio.

13 Međuatomske veze u kristalima. Kohezivna energija

Zadatak 13.1 Razmotrite diatomnu molekulu u kojoj atomi interagiraju van der Waalsovom interakcijom. Za model interakcije uzet ćemo Lennard-Jonesov potencijal

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right].$$

- (a) Pokažite da je ravnotežna udaljenost atoma jednaka $r_0 = 2^{1/6}\sigma$.
 (b) Nađite jakost interakcije u ovoj molekuli.

Zadatak 13.2 Promotrite zamišljeni molekularni kristal s jednostavnom kubnom Bravaisovom rešetkom. Pretpostavite da svaki atom međudjeluje samo s prvim najbližim susjedima Morseovim potencijalom

$$V(r) = V_0 \left[e^{-2\kappa(r-\lambda)} - 2e^{-\kappa(r-\lambda)} \right],$$

gdje su V_0 , κ i λ konstante.

- (a) Nađite ravnotežnu konstantu rešetke a .
 (b) Izračunajte ukupnu energiju vezanja kristala. Pretpostavite da postoji N atoma u kristalu i da je kinetička energija titranja atoma zanemariva.

Zadatak 13.3 Razmotrite koheziju jednodimenzionalnog kristala u kojem se pozitivni i negativni ioni naboja $\pm q$ izmjenjuju u lancu. Neka je R udaljenost između najbližih susjednih iona, a ukupan broj iona u rešetki je $2N$. Pored elektrostatske interakcije, između najbližih susjeda dodatno djeluje i odbojna interakcija oblika A/R^n .

- (a) Izračunajte ukupnu kohezivnu energiju kristala. Za proračun Madelungove konstante stavite $N \rightarrow \infty$.
 (b) Nađite ravnotežnu udaljenost između najbližih susjeda R_0 .
 (c) Izračunajte energiju rešetke po ionskom paru. Energija rešetke je $E_I = -U_{tot}(R_0)$, gdje je U_{tot} ukupna potencijalna energija kristala.
 (d) Izračunajte rad potreban da se kristal stisne tako da udaljenost između najbližih susjeda bude jednaka $(1 - \eta)R_0$. Pretpostavite da je $\eta \ll 1$.

Zadatak 13.4 U Born-Meyerovoj teoriji vezanja u ionskim kristalima, potencijalna energija ionskog kristala dana je izrazom

$$U(R) = -\frac{N\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + \frac{NA}{R^n}$$

gdje je N broj ionskih parova, α je Madelungova konstanta, R je udaljenost između iona u paru dok su A i n eksperimentalno određene konstante.

- (a) Izvedite izraz za ravnotežnu udaljenost između najbližih susjeda kao funkciju od A , n i α .
 (b) Izračunajte energiju rešetke po ionskom paru u ravnoteži.
 (c) Izračunajte n i A za NaCl za koje je: konstanta rešetke 0,563 nm, izmjerena energija rešetke 7,95 eV po ionskom paru te Madelungova konstanta α iznosi 1,747565.

Uputa: konstanta rešetke je dva puta veća od ravnotežne udaljenosti.

Zadatak 13.5 Razmotrimo vezanje u ionskom kristalu NaCl. Pretpostavljamo da je izmjeren modul stlačivosti B . Potencijalna energija po ionskom paru dana je izrazom

$$u(r) = -\frac{\alpha e^2}{r} + \beta \left(\frac{r_0}{r} \right)^n,$$

gdje je r_0 udaljenost između najbližih susjeda, α je Madelungova konstanta, a n i β su konstante koje treba odrediti iz uvjeta ravnotežne udaljenosti.

- (a) Izvedite relaciju

$$B = \frac{1}{18r_0} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \right|_{r=r_0}$$

- (b) Izvedite izraz koji povezuje n i β pomoću uvjeta ravnotežne udaljenosti.
 (c) Izvedite izraz za modul stlačivosti u ravnotežnom položaju atoma.
 (d) Izračunajte n i β upotrijebivši vrijednost $B = 2,4 \cdot 10^{10} \text{ N}\cdot\text{m}^{-2}$, $r_0 = 0,282 \text{ nm}$ i $\alpha = 1,747$.

Zadatak 13.6 Ukupna energija trodimenzionalnog ionskog kristala dana je formulom

$$U(r) = \frac{NA}{R^{12}} - \frac{N\alpha Z^2 e^2}{R}$$

gdje je N broj ionskih parova i R udaljenost između najbližih susjeda.

(a) Izvedite izraz za ravnotežnu vrijednost R_0 .

(b) Izračunajte energiju vezanja po paru u ravnoteži.

Zadatak 13.7 Upotrijebite Lennard-Jonesov potencijal i pokažite da je omjer kohezivnih energija za neon u bcc i fcc rešetki jednak 0,958. Sume po rešetki za bcc strukturu glase:

$$\sum_j p_{ij}^{-12} = 9,114, \quad \sum_j p_{ij}^{-6} = 12,253,$$

a za fcc

$$\sum_j p_{ij}^{-12} = 12,132, \quad \sum_j p_{ij}^{-6} = 14,454.$$

Zadatak 13.8 (a) Izvedite izraz za Madelungovu konstantu za kristal CsCl upotrijebivši Ewaldovu metodu sumacije.

(b) Numerički izračunajte vrijednost Madelungove konstante za CsCl.

Zadatak 13.9 (a) U veoma grubom modelu alkalnih metala, pretpostavimo da je naboj svakog valentnog elektrona jednoliko raspodijeljen unutar sfere polumjera r_s oko svakog iona. Pokažite da je elektrostatska energija po elektronu jednaka

$$u^{coul} = -\frac{9a_0}{5r_s} \text{ Ry/elektron} = -\frac{24,49}{r_s/a_0} \text{ eV/elektron}$$

(b) U stvarnom metalu valentni elektroni su većinom odvojeni od ionske jezgre. Ovu činjenicu možemo uzeti u obzir tako da jednoliko raspodijelimo naboj svakog elektrona između koncentričnih sfera polumjera r_c i r_s oko svakog iona. Potencijal pojedinog iona tada možemo zamijeniti pseudopotencijalom

$$V_{ps}(r) = -\frac{e^2}{r}, \quad r > r_c \\ = 0, \quad r < r_c$$

Pokažite da se u ovom modelu rezultat iz (a) mijenja u izraz

$$u^{coul} = -\frac{9a_0}{5r_s} + \frac{3(r_c/a_0)^2}{(r_s/a_0)^3} \text{ Ry/elektron}$$

uzmемо li u obzir samo korekcije prvog reda po r_c/r_s .

(c) Uzmemo li za energiju po čestici zbroj kinetičke, energije zamjene i potencijalne energije izračunate pod (b), pokažite da je ravnotežna vrijednost iona u rešetki r_s/a_0 dana izrazom

$$r_s/a_0 = 0,82 + 1,82(r_c/a_0) \left[1 + O(a_0/r_c)^2 \right]$$

Zadatak 13.10 Promotrite dva atoma plemenitog plina koji su na međusobnoj udaljenosti R . Jezgre imaju naboj Ze i nalaze se na položajima $\mathbf{0}$ i $\mathbf{R}$, a oko svake od jezgri nalazi se Z elektrona. Elektroni blizu jezgre $\mathbf{0}$ imaju koordinate $\mathbf{r}_i^{(1)}$, a elektroni blizu jezgre 2 koordinate $\mathbf{r}_i^{(2)}$, $i = 1, 2, \dots, Z$. Pretpostavimo da je R jako velik tako da postoji zanemarivo prekrivanje raspodjela elektronskog naboja dvaju jezgri pa se ukupna valna funkcija sustava elektrona za dva atoma ne mora simetrizirati (iako valne funkcije sustava elektrona pojedinačnih atoma moraju biti antisimetrične!). Neka su H_1 i H_2 hamiltonijani za atome 1 i 2. Hamiltonijan sustava za dva neovisna atoma je oblika $H = H_1 + H_2 + U$, gdje je U coulombska interakcija između parova svih nabijenih čestica i glasi

$$U = e^2 \left[\frac{Z^2}{R} - \sum_{i=1}^Z \left(\frac{Z}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i^{(1)}|} + \frac{Z}{r_i^{(2)}} \right) + \sum_{i,j=1}^Z \frac{1}{|\mathbf{r}_i^{(1)} - \mathbf{r}_j^{(2)}|} \right]$$

Do drugog reda u stacionarnom računu smetnje, energija interakcije između dva atoma je

$$\Delta E = \langle 0 | U | 0 \rangle + \sum_n \frac{|\langle 0 | U | n \rangle|^2}{E_0 - E_n}$$

gdje je $|0\rangle$ osnovno stanje, a $|n\rangle$ pobuđeno stanje za hamiltonijan $H_1 + H_2$.

- (a) Pokažite da je član prvog reda $\langle 0|U|0\rangle$ jednak elektrostatskoj interakciji između dvije raspodjele naboja $\rho_0^{(1)}$ i $\rho_0^{(2)}$ u atomima 1 i 2 koji su u osnovnom stanju.
- (b) Pokažite da ako se raspodjele naboja ne prekrivaju te ako su sferno simetrične, član $\langle 0|U|0\rangle$ jednak je nuli.
- (c) Pretpostavka da postoji zanemarivo prekrivanje između elektronskih stanja na dva atoma također znači da su valne funkcije koje se pojavljuju u drugom redu računa smetnje zanemarivo male posvuda osim u području u kojem je $|\mathbf{r}_i^{(1)}|$ i $|\mathbf{r}_i^{(2)} - \mathbf{R}| = |\boldsymbol{\eta}_i^{(2)} - \mathbf{R}| \ll R$. Zato U smijemo razviti u red do članova drugog reda po $r_i^{(1)}/R$ i $\eta_i^{(2)}/R$. Pokažite da je takav razvoj jednak

$$-\frac{e^2}{R} \sum_{i,j} \left\{ 3(\mathbf{r}_i^{(1)} \cdot \mathbf{e}_R) \left[(\mathbf{r}_j^{(1)} - \mathbf{R}) \cdot \mathbf{e}_R \right] - \mathbf{r}_i^{(1)} \cdot (\mathbf{r}_j^{(2)} - \mathbf{R}) \right\}$$

gdje je $\mathbf{e}_R = \mathbf{R}/R$.

- (d) Pokažite da je zbog (c) interakcija dva atoma proporcionalna s R^{-6} i negativna.

14 Klasična teorija titranja kristalne rešetke. Elastičnost

Zadatak 14.1 Pretpostavimo da ioni u beskonačnom lancu interagiraju s prvih m susjeda pa je potencijalna energija dana izrazom

$$U^{harm} = \frac{1}{2} \sum_n \sum_{m>0} K_m [u(R_n) - u(R_{n+m})]^2.$$

gdje je $R_n = na$ i K_m su konstante elastičnosti.

(a) Pokažite da je disperzija $\omega(k)$ u ovom slučaju jednaka

$$\omega(k) = 2 \sqrt{\sum_{m>0} K_m \frac{\sin^2(mka/2)}{M}}$$

(b) Pokažite da je dugovalna granica za disperziju iz (a) jednaka

$$\omega(k) = a \left(\sum_{m>0} \frac{m^2 K_m}{M} \right)^{1/2} |k|$$

pri čemu izraz sa sumom po m mora konvergirati.

(c) Pokažite da ako je $K_m = m^{-p}$ ($1 < p < 3$) i suma iz (b) ne konvergira, tada je u dugovalnoj granici

$$\omega(k) \propto k^{(p-1)/2}$$

(d) Pokažite da posebnom slučaju $p = 3$ iz (c) vrijedi

$$\omega(k) \sim k \sqrt{\ln k}$$

Zadatak 14.2 Uzmemo li u obzir prvih p najbližih susjeda fononska disperzija jednoatomnog lanca glasi (pogl. vježbe):

$$\omega^2 = \frac{2}{M} \sum_{p>0} C_p [1 - \cos(pka)]$$

(a) Pretpostavimo je konstanta elastičnosti između ravnine s i $s + p$ jednaka

$$C_p = A \frac{\sin pk_0 a}{p^2}$$

gdje su k_0 i A konstante, p je cijeli broj. Ovakav oblik za C_p je uobičajan za metale. Napišite izraze za ω^2 i $\partial\omega^2/\partial k$. Ne morate sumirati.

(b) Odaberite $k_0 a = 1$ i uvedite novu varijablu $x \equiv ka$. Nacrtajte $\omega^2(x)$ i $\partial\omega^2/\partial x$ u odgovarajućoj skali na y osi tako da zbrojite prvih 1000 članova u sumi. Pokažite da je $\partial\omega^2/\partial k$ ima logaritamski singularitet za $x = 1$, odnosno, $k = k_0$. Ova se singularnost u disperziji naziva **Kohnova anomalija**.

Zadatak 14.3 Promotrite lanac atoma mase m u kojem najbliži susjedi međudjeluju harmoničkom silom konstante elastičnosti K . Pored toga, gibanje svakog atoma (na j -tom mjestu) je prigušeno jer na atom djeluje i sila "otpora" razmjerna njegovoj brzini

$$F = -\Gamma \dot{u}_j$$

Pretpostavite da je $\Gamma \ll (mK)^{1/2}$.

(a) Napišite jednadžbe gibanja atoma.

(b) Nađite disperziju za ovaj lanac atoma $\omega = \omega(k)$. Je li amplituda titranja atoma konstantna?

(c) Nađite vrijeme relaksacije za normalne modove, a računajte ga po formuli $\tau_k = -1/\omega_k''$, gdje je ω_k'' imaginarni dio kružne frekvencije ω_k . Razmotrite i slučaj kada je gibanje atoma nadkritično prigušeno.

Zadatak 14.4 Promotrite lanac iona u kojem se ioni mase M_1 i M_2 izmjenjuju, a nalaze se na jednakoj udaljenosti a . Računajte u aproksimaciji najbližih susjeda.

(a) Pokažite da je disperzijska relacija za modove ovog lanca jednaka

$$\omega^2 = \frac{K_e}{M_1 M_2} \left(M_1 + M_2 \pm \sqrt{M_1^2 + M_2^2 + 2M_1 M_2 \cos ka} \right)$$

(b) Diskutirajte oblik disperzijske relacije iz (a) i prirodu modova ako je $M_1 \gg M_2$.

(c) Usporedite disperzijsku relaciju iz (a) s disperzijom monoatomnog lanca u slučaju $M_1 \approx M_2$.

Zadatak 14.5 Promotrite titranje 1D kristalne rešetke koja se sastoji od atoma mase M . Atomi interagiraju harmoničkom silom samo između prvih susjeda čija je konstanta elastične sile jednaka K .

(a) Pokažite da je jedno od mogućih rješenja jednačbi za pomak n -tog atoma iz ravnotežnog položaja dano sa

$$u_n(t) \propto J_{2n}(\omega t)$$

gdje je $J_n(x)$ Besselova funkcija.

(b) Kojem početnom uvjetu odgovara navedeno rješenje?

(c) Odredite asimptotsko ponašanje rješenja za $t \rightarrow \infty$.

Uputa: rekurzivne relacije za Besselove funkcije $J_n(x)$ glase

$$\frac{dJ_n}{dx} = \frac{1}{2} [J_{n-1} - J_{n+1}]$$

Nađite koliko je $d^2 J_n/dx^2$ te promijenite indeks $n \rightarrow 2n$.

Zadatak 14.6 Odredite disperziju beskonačnog lanca iona mase M s jednom primjesom mase M_0 . Ioni su na udaljenosti a .

Zadatak 14.7 Razmotrite lanac iona jednake mase M u kojem najbliži susjedi imaju naboje suprotnih predznaka $e_p = (-1)^p e$, gdje je $p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Međuatomski potencijal je zbroj dvaju doprinosa:

- kratkodosežne interakcije koja djeluje između najbližih susjeda. Interakcija je kvadratna po pomaku iona s konstantom elastičnosti γ ;
- coulombske (dugodosežne) interakcije između svih iona.

(a) Pokažite da je doprinos coulombske interakcije atomskim konstantama elastičnosti jednak

$$C_{pC} = 2(-1)^p \frac{e^2}{p^3 a^3}$$

gdje je a udaljenost između najbližih susjeda.

(b) Pokažite da je disperzija oblika

$$\frac{\omega^2}{\omega_0^2} = \sin^2(ka/2) + \sigma \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p p^{-3} [1 - \cos(pka)]$$

gdje je $\omega_0^2 \equiv 4\gamma/M$ i $\sigma \equiv e^2/\gamma a^3$.

(c) Pokažite da je ω^2 negativan (nestabilni mod) na rubu 1bz zone $k = \pi/a$ ako je $\sigma > 0,475$, odnosno, $\sigma > 4/7\zeta(3)$, gdje je $\zeta(x)$ Riemannova zeta funkcija. Pokažite dalje da je brzina zvuka za $ka \ll 1$ imaginarna ako vrijedi $\sigma > (\ln 4)^{-1} = 0,721$. Na temelju navedenog, ω^2 teži nuli i rešetka je nestabilna za neku vrijednost ka iz intervala $[0, \pi]$ ako je $0,475 < \sigma < 0,721$.

Zadatak 14.8 (a) Nađite jednačbu gibanja za 2D kvadratnu rešetku čija je konstanta rešetke a i masa atoma (iona) M . Konstanta elastičnosti sile između prvih najbližih susjeda je C .

(b) Pretpostavite da je rješenje jednačbi iz (a) koje opisuje gibanje **okomito** na ravninu s atomima dano izrazom

$$u(\mathbf{R}) \equiv u_{lm} = A \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \exp(-i\omega_k t)$$

gdje je A konstanta, a vektor Bravaisove rešetke $\mathbf{R} = la\mathbf{e}_x + ma\mathbf{e}_y$. Nađite disperzijsku relaciju $\omega_k = \omega(\mathbf{k})$.

(c) Nađite gustoću normalnih modova $g(\omega)$ za navedeno gibanje za $ka \ll 1$.

Uputa: potencijalna energija u harmoničkoj aproksimaciji je oblika

$$U^{\text{harm}} = \frac{C}{4} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} [\mathbf{u}(\mathbf{R}) - \mathbf{u}(\mathbf{R}')]^2$$

gdje je $\mathbf{u}(\mathbf{R}) = u(\mathbf{R})\mathbf{e}$, gdje je vektor $\mathbf{e}$ ortogonalan na ravninu s atomima.

Zadatak 14.9 Razmotrimo disperzijsku relaciju za jednodimenzijisku rešetku s bazom u granici kad su konstante elastičnosti K i G približno jednake

$$K = K_0 + \Delta, \quad G = K_0 - \Delta, \quad \Delta \ll K_0$$

Gornja aproksimacija odgovara jednodimenzijском modelu rešetke s bazom koju razmatramo kao monoatomnu Bravaisovu rešetku na koju djeluje slaba smetnja.

(a) Pokažite da se u slučaju $\Delta = 0$ disperzija za jednodimenzijisku rešetku s bazom svodi na disperziju za monoatomni lanac u aproksimaciji vezanja između najbližih susjeda.

Napomena: ako je duljina jedinične ćelije diatomnog lanca a , za $K = G$ svest će se na monoatomni lanac čija je konstanta rešetke $a/2$. Nadalje, Brillouinova zona diatomnog lanca ($-\pi a < k < \pi a$) postat će upola veća Brillouinova zona ($-\pi/(a/2) < k < \pi/(a/2)$) monoatomnog lanca. Zbog toga morate pojasniti kako se dvije grane, akustička i

optička, u upola manjoj zoni svode na jednu granu u punoj zoni. Da to pokažete, morate istražiti ponašanje omjera amplituda titranja za $\Delta = 0$.

(b) Ako je $\Delta \neq 0$, no $\Delta \ll K_0$, tada se disperzija razlikuje od one za monoatomni lanac samo po članovima reda $(\Delta/K_0)^2$, osim ako je $|\pi - ka|$ reda Δ/K_0 . Pokažite da je u tom slučaju promjena disperzije za monoatomni lanac linearna u Δ/K_0 .

Zadatak 14.10 Pokažite da je brzina longitudinalnog vala u $[111]$ smjeru u kubnom kristalu dana izrazom

$$v_x = \left[\frac{1}{3\rho} (C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}) \right]^{1/2}$$

gdje su C_{ij} komponente tenzora elastičnosti (konstante elastičnosti), ρ je masena gustoća sredstva kojim se val širi.

Zadatak 14.11 Kriterij da je kubni kristal s jednim atomom u primitivnoj ćeliji stabilan na male homogene deformacije može se iskazati zahtjevom da je gustoća elastične energije

$$U = \frac{1}{2} C_{11} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + \frac{1}{2} C_{44} (e_{yz}^2 + e_{zx}^2 + e_{xy}^2) + C_{12} (e_{yy}e_{zz} + e_{zz}e_{xx} + e_{xx}e_{yy})$$

pozitivna za sve moguće deformacije. Koji uvjeti na konstante elastičnosti slijede iz ovog zahtjeva?

Zadatak 14.12 Razmotrite lanac identičnih atoma u kojem su atomi na krajevima lanca učvršćeni i ne mogu titrati. Neka je a udaljenost susjednih atoma, m masa atoma i K konstanta elastičnosti hamonijske sile među atomima. Uzmite u obzir samo interakciju između najbližih susjeda i nađite:

- jednadžbe gibanja;
- spektar karakterističnih valnih vektora k ;
- disperziju $\omega = \omega(k)$ ovog lanca;
- ukupni broj dozvoljenih titranja, odnosno, različitih frekvencija;
- najvišu frekvenciju i odgovarajuću valnu duljinu;
- faznu brzinu kao funkciju valnog vektora;
- omjer faznih brzina za najdužu ($k \rightarrow 0$) i najkraću valnu duljinu ($k = \pi/2$);
- broj karakterističnih titranja lanca u intervalu $(\omega, \omega + d\omega)$, odnosno, $g(\omega)d\omega$ gdje je $g(\omega)$ fononska gustoća stanja. OPREZ: udaljenost između dva valna vektora je π/L , a ne $2\pi/L$!

Uputa: pod (a): ako postoji $N + 1$ atom u lancu i duljina lanca je $L = Na$, primijetite da za pomak prvog (0-tog) i posljednjeg (N -tog) atoma u lancu iz ravnotežnog položaja vrijedi

$$u_0 = u_N = 0$$

Rješenje koje zadovoljava rubni uvjet $u_0 = 0$ potražite u obliku:

$$u_n = A \sin(nka) e^{-i\omega t}$$

15 Kvantna teorija titranja kristalne rešetke. Fononi

Zadatak 15.1 Odredite Debyeovu temperaturu za Ca i Cu. U računu uzmite da je u oba kristala brzina zvuka $c \approx 3 \cdot 10^5 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$. Iz tablica možete pročitati kolike su konstante rešetke a_{Ca} i a_{Cu} .

Uputa: prisjetite se Debyeov valni vektor k_D definiran kao polumjer sfere u k -prostoru unutar koje se nalazi točno N valnih vektora određenih Born – von Karmanovim uvjetima iz čega se može izvesti formula

$$k_D^3 = 6\pi^2 n$$

gdje je $n = N/V$ gustoća iona. Također, znamo da vrijedi $v_{\text{pc}} v_0 = (2\pi)^3$ gdje je v_{pc} volumen primitivne ćelije u Bravaisovoj rešetki, a v_0 volumen primitivne ćelije u recipročnoj rešetki.

Zadatak 15.2 U donjoj tablici prikazane su eksperimentalno dobivene vrijednosti molarnog toplinskog kapaciteta kalija u ovisnosti o temperaturi. Jedinice za molarni toplinski kapacitet su $\text{mJ} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$.

(a) Nacrtajte dijagram raspršenja C_v/T u ovisnosti o T^2 .

(b) Metodom najmanjih kvadrata u Excelu, Mathematici ili nekom drugom programu, prilagodite pretpostavljenu teorijsku krivulju $C_v/T = \gamma + AT^2$ za specifičnu toplinu pri niskim temperaturama, podacima na dijagramu raspršenja.

(c) Pomoću dobivenih vrijednosti za γ i A procijenite Debyeovu temperaturu.

T	C_v	T	C_v	T	C_v	T	C_v
0.2604	0.5852	0.2885	0.6578	0.3644	0.8858	0.4515	1.177
0.2781	0.6306	0.2894	0.6657	0.3734	0.9180	0.4578	1.208
0.2953	0.6786	0.3067	0.7104	0.3935	0.9733	0.4835	1.302
0.2501	0.5592	0.3270	0.7687	0.3994	1.003	0.4969	1.353
0.2650	0.5969	0.3379	0.7962	0.4231	1.021	0.5435	1.551
0.2698	0.6066	0.3478	0.8362	0.4274	1.102	0.5944	1.786

Zadatak 15.3 Razmotrite omjer elektronskog doprinosa i doprinosa iona u rešetki toplinskom kapacitetu metala. Elektronski doprinos računajte pomoću Sommerfeldove teorije, a doprinos fonona u Debyeovom modelu.

(a) Nađite omjer c_v^e / c_v^{ph} .

(b) Odredite temperaturu T_0 na kojoj je $c_v^e = c_v^{ph}$.

(c) Procijenite red veličine temperature T_0 za alkalne metale.

Zadatak 15.4 Promotrite jednodimenzionalni kristal duljine L s N atoma. Neka je konstanta rešetke a .

(a) Izračunajte fononsku gustoću stanja za ovaj kristal.

(b) Izvedite integralni izraz za specifičnu toplinu kristala.

(c) Izračunajte specifičnu toplinu u granici visokih i niskih temperatura.

Zadatak 15.5 (a) Razmotrite kristal izolatora koji se sastoji od slojeva atoma. Vezanje između slojeva atoma je puno jače nego između samih atoma pa je gibanje atoma ograničeno na ravninu sloja. Računajte u Debyeovj aproksimaciji.

(a1) Izračunajte gustoću stanja (odnosno, normalnih modova) $g(\omega)$ po polarizaciji za ovo 2D gibanje.

(a2) Nađite gustoću energije u granici niskih temperatura $T \ll \Theta_D$. Pazite na broj polarizacija!

(a3) Pomoću (a2) pokažite da je specifična toplina proporcionalna s T^2 .

(b) Pretpostavimo da je vezanje između slojeva atoma veoma slabo u odnosu na atomsko, što je slučaj u višeslojnim strukturama. Bez računanja zaključite kako se ponaša specifična toplina na ekstremno niskim temperaturama.

Zadatak 15.6 Promatrat ćemo fononski plin u području volumena V .

(a) Izračunajte kanonsku particijsku funkciju Z i Helmholtzovu slobodnu energiju F .

(b) Izračunajte entropiju S fononskog plina.

(c) Izrazite S pomoću termodinamičkog prosjeka $\langle n_{\mathbf{k}s} \rangle$ u jednočestičnom fononskom stanju $|\mathbf{k}s\rangle$.

Zadatak 15.7 Pretpostavite da disperzijska relacija optičke grane u 3D kristalu blizu $\mathbf{k} = 0$ ima oblik $\omega(\mathbf{k}) = \omega_0 - Ak^2$, gdje su ω_0 i A pozitivne konstante. Nađite fononsku gustoću stanja za stanja $\omega < \omega_0$ i $\omega > \omega_0$.

Zadatak 15.8 (a) Pokažite da je gustoća normalnih modova (fononska gustoća stanja) u Debyeovoj aproksimaciji

$$g_D(\omega) = \begin{cases} \frac{3}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c^3}, & \omega < \omega_D = k_D c \\ 0, & \omega > \omega_D \end{cases}$$

točna (u harmoničkoj aproksimaciji) u granici niskih frekvencija za $g(\omega)$, uzmemo li da je c^{-3} prosječna vrijednost inverza treće potencije fazne brzine u tri akustička moda za velike valne duljine jednaka:

$$\frac{1}{c^3} = \frac{1}{3} \sum_s \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{1}{[c_s(\mathbf{k})]^3}$$

(b) Pokažite da je u d -dimenzionalnom harmoničkom kristalu gustoća normalnih modova u granici niskih frekvencija proporcionalna s ω^{d-1} .

(c) Iskoristite (b) i pokažite da je nisko-temperaturna specifična toplina harmoničkog kristala proporcionalna s T^d u d dimenzija.

(d) Pokažite da, ako se dogodi da frekvencije normalnih modova ω ne iščezavaju linearno s k , nego kao k^v , tada nisko-temperaturna specifična toplina iščezava kao $T^{d/v}$, gdje je d broj dimenzija.

Zadatak 15.9 (a) Promotrite točan izraz za specifičnu toplinu u granici visokih temperatura u harmoničkoj aproksimaciji. Ako specifičnu toplinu napišemo do prve korekcije u obliku

$$c_V = c_V^0 + \Delta c_V \quad \text{ili} \quad \frac{c_V}{c_V^0} = 1 + \frac{\Delta c_V}{c_V^0}$$

gdje je c_V^0 specifična toplina u Dulong-Petitovom zakonu, a Δc_V prva korekcija za specifičnu toplinu, pokažite da vrijedi

$$\frac{\Delta c_V}{c_V^0} = -\frac{1}{12} \frac{\int d\omega g(\omega) \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2}{\int d\omega g(\omega)}$$

(b) Pokažite da je sljedeći član u razvoju za specifičnu toplinu u visoko-temperaturnoj granici jednak

$$\frac{1}{240} \frac{\int d\omega g(\omega) \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^4}{\int d\omega g(\omega)}$$

(c) Pokažite da ako je kristal monoatomna Bravaisova rešetka iona koji međudjeluju u parovima potencijalom $\Phi(\mathbf{r})$, tada je ishodišni moment drugog reda za raspodjelu frekvencija iz (a) jednak

$$\int d\omega \omega^2 g(\omega) = \frac{n}{M} \sum_{\mathbf{R} \neq 0} \nabla^2 \Phi(\mathbf{R})$$

Zadatak 15.10 (a) Napišite izraz za hamiltonijan 1D harmoničkog oscilatora pomoću operatora spuštanja i podizanja. Kako glase energije u ovom problemu?

(b) Zapišite operatore pomaka $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ i impulsa $\mathbf{P}(\mathbf{R})$ za 3D monoatomnu kristalnu rešetku, pomoću operatora spuštanja i podizanja (poništenja i stvaranja) definiranih relacijama

$$a_{\mathbf{k}s} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \epsilon_s(\mathbf{k}) \cdot \left[\sqrt{\frac{M \omega_s(\mathbf{k})}{2\hbar}} \mathbf{u}(\mathbf{R}) + \sqrt{\frac{1}{2\hbar M \omega_s(\mathbf{k})}} \mathbf{P}(\mathbf{R}) \right]$$

$$a_{\mathbf{k}s}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \epsilon_s(\mathbf{k}) \cdot \left[\sqrt{\frac{M \omega_s(\mathbf{k})}{2\hbar}} \mathbf{u}(\mathbf{R}) - \sqrt{\frac{1}{2\hbar M \omega_s(\mathbf{k})}} \mathbf{P}(\mathbf{R}) \right],$$

gdje su $\epsilon_s(\mathbf{k})$ vektori polarizacije ($s = 1, 2, 3$) koji određuju smjer titranja pojedinog moda.

(c) Pomoću (b), napišite hamiltonijan i izraz za ukupnu energiju titranja 3D monoatomne kristalne rešetke.

Uputa: za (b), koristite jednakosti

$$\sum_{s=1}^3 [\epsilon_s(\mathbf{k})]_\mu [\epsilon_s(\mathbf{k})]_\nu = \delta_{\mu\nu}$$

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} = \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}$$

Također, upotrijebite relacije $\omega(\mathbf{k}) = \omega(-\mathbf{k})$ i $\epsilon(-\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})$ koje su posljedica invarijantnosti Schrödingerove jednačbe na vremensku inverziju.

Zadatak 15.11 Titranje 1D lanca atoma s jednim atomom u primitivnoj ćeliji, konstante rešetke a , opisali smo klasičnim jednačbama i dobili da je disperzija

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{K_e}{M}} \left| \sin(ka/2) \right|$$

pri čemu smo koristili aproksimaciju najbližih susjeda. Pokažite da istu disperziju dobijete i kvantnim pristupom, upotrebom fononskih koordinata i pridruženih impulsa te Heisenbergovih jednačbi gibanja. Hamiltonijan za dinamiku 1D lanca u harmoničkoj aproksimaciji glasi

$$H^{\text{harm}} = \sum_n \frac{p_n^2}{2M} + \frac{1}{2} K_e \sum_n (q_{n+1} - q_n)^2$$

(a) Uvedite fononske koordinate Q_k i kanonski konjugirane impulse P_k

$$q_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k Q_k e^{inka}, \quad Q_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n q_n e^{-inka}$$

$$p_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k P_k e^{-inka}, \quad P_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n p_n e^{inka}$$

koji opisuju normalne modove. Pokažite da je $[Q_k, P_{k'}] = i\hbar \delta_{kk'}$.

(b) Pokažite da je hamiltonijan u novim koordinatama i impulsima

$$H^{\text{harm}} = \sum_k \left(\frac{1}{2M} P_k P_{-k} + \frac{1}{2} M \omega_k^2 Q_k Q_{-k} \right)$$

Podudara li se ω_k s relacijom na početku zadataka?

(c) Pomoću (b) i Heisenbergovih jednačbi gibanja za operator Q_k pokažite da je

$$\ddot{Q}_k + \omega_k^2 Q_k = 0$$

Zadatak 15.12 Procijenite amplitudu titranja atoma Cu u kristalu i usporedite je s međuatomnim razmakom.

Pri računanju se poslužite Einsteinovim modelom titranja kristala u kojem atomi nezavisno titraju s frekvencijom ω_E . Einsteinova temperatura za Cu je 240 K, a masa atoma Cu iznosi 63,546 u.

Uputa: za harmonijski oscilator, prosječna potencijalna i kinetička energija su jednake. Tada je toplinska energija koja odgovara prosječnoj potencijalnoj jednaka $(3/2)k_B\theta_E$, gdje je θ_E Einsteinova temperatura.

Zadatak 15.13 (a) Pokažite da je gustoća normalnih modova (fononska gustoća stanja) u Debyeovj aproksimaciji

$$g_D(\omega) = \begin{cases} \frac{3}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c^3}, & \omega < \omega_D = k_D c \\ 0, & \omega > \omega_D \end{cases}$$

točna (u harmoničkoj aproksimaciji) u granici niskih frekvencija za $g(\omega)$, uzmemo li da je c^{-3} prosječna vrijednost inverza treće potencije fazne brzine u tri akustička moda za velike valne duljine jednaka:

$$\frac{1}{c^3} = \frac{1}{3} \sum_s \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{1}{[c_s(\mathbf{k})]^3}$$

(b) Pokažite da je u d -dimenzionalnom harmoničkom kristalu gustoća normalnih modova u granici niskih frekvencija proporcionalna s ω^{d-1} .

(c) Iskoristite (b) i pokažite da je nisko-temperaturna specifična toplina harmoničkog kristala proporcionalna s T^d u d dimenzija.

(d) Pokažite da, ako se dogodi da frekvencije normalnih modova ω ne iščezavaju linearno s k , nego kao k^v , tada nisko-temperaturna specifična toplina iščezava kao $T^{d/v}$, gdje je d broj dimenzija.

Zadatak 15.14 Olovo ima fcc rešetku konstante $a = 0,494$ nm. Youngov modul elastičnosti za olovo iznosi $E_Y = 1,6 \cdot 10^{10}$ N·m⁻². Ako se olovo tali kad je prosječna amplituda atomskih vibracija 12 % razmaka između atoma, izračunajte:

(a) Udaljenost susjednih atoma u fcc rešetki.

(b) Debye-vu temperaturu θ_D za olovo ako fazna brzina c širenja fonona za longitudinalne i transverzne modove u fcc rešetki ima jednaku vrijednost

$$c^2 = \frac{E_Y}{\rho}$$

gdje je ρ masena gustoća olova. Usporedite izračunatu temperaturu θ_D s vrijednošću očitanoj iz tablica.

Uputa: prisjetite se da je Debye-ev valni vektor k_D povezan s gustoćom atoma $n = N/V$ formulom

$$k_D^3 = 6\pi^2 n$$

(c) Temperaturu tališta olova T_t pomoću Lindemann-ovog kriterija

$$T_t = \frac{m\omega_D^2 x_0^2}{9k_B}$$

gdje je x_0 amplituda titranja pri kojoj dolazi do taljenja. Debye-evu frekvenciju ω_D računamo pomoću eksperimentalno dobivenih vrijednosti za θ_D .

(d) Točna vrijednost temperature tališta za olovo je 600,6 K. Kolika je relativna pogreška u odnosu na rezultat pod (c)?

16 Anharmonički efekti u kristalima

Zadatak 16.1 Pokažite da ako zadržimo članove trećeg reda u razvoju za potencijalnu energiju, tada potencijalna energija može postati negativna i po volji velika izaberemo li odgovarajuće ionske pomake $\mathbf{u}(\mathbf{R})$. Može se dokazati takav sustav nema osnovno stanje tj. da je nestabilan.

Zadatak 16.2 (a) Iz relacija za tlak P , Helmholtzovu slobodnu energiju F , unutrašnju energiju U i entropiju S

$$F = U - TS$$

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T$$

$$T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$$

napišite jednadžbu koja povezuje tlak i unutrašnju energiju.

(b) Pomoću (a) pokažite da je jednadžba stanja za harmonički kristal

$$P = - \frac{\partial}{\partial V} \left[U^{eq} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}s} \hbar \omega_s(\mathbf{k}) \right] + \sum_{\mathbf{k}s} (-1) \frac{\partial}{\partial V} [\hbar \omega_s(\mathbf{k})] \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k})} - 1},$$

gdje je U^{eq} potencijalna energija kristala u kojem ioni miruju u čvorovima rešetke.

Zadatak 16.3 Promotrite lanac od N atoma u kojem parovi atoma interagiraju potencijalom $\phi(r)$, a duljina cijelog lanca iznosi $L = Na$, gdje je a ravnotežna konstanta rešetke.

(a) Pokažite da ako su dominantne interakcije između najbližih susjeda, Grüneisenovi parametri za pojedine modove ne ovise o valnom vektoru k i glase

$$\gamma = - \frac{a}{2} \frac{\phi'''(a)}{\phi''(a)}.$$

(b) Pokažite da uzmemo li u obzir i interakciju između drugih najbližih susjeda, Grüneisenovi parametri za pojedine modove će, općenito, ovisiti o valnom vektoru.

Zadatak 16.4 Pokažite da Grüneisenov parametar za fcc kristal u kojem najbliži susjedni ioni interagiraju Lennard-Jonesovim potencijalom ima vrijednost $\gamma = 3,5$.

Uputa: vrijednosti ω^2 određene su drugom derivacijom energije – izrazite Grüneisenov parametar pomoću ω^2 , a ne pomoću ω i zamijenite derivaciju po volumenu s derivacijom po udaljenosti između najbližih susjeda $\partial/\partial V = \partial/\partial r (\partial V/\partial r)^{-1}$

Zadatak 16.5 Potencijalna energija monoatomnog lanca atoma zadana je izrazom:

$$U(x) = cx^2 - gx^3 - fx^4,$$

gdje su c, g i f pozitivne konstante.

(a) Pokažite da je termodinamički prosjek pomaka x u harmoničkoj aproksimaciji jednak nuli.

(b) Pokažite da je termodinamički prosjek pomaka za $(gx^3 + fx^4) \ll 1$ u najnižem redu po x jednak

$$\langle x \rangle_T = \frac{3g}{4c^2} k_B T.$$

Zadatak 16.6 Promotrite proces u kojem se dva fonona ponište, a nastaje jedan fonon, ili proces u kojem se jedan fonon raspadne na dva. Pretpostavimo da su fononi akustički, da dvije transverzne grane leže ispod longitudinalne, i da za sve tri grane vrijedi $d^2\omega/dk^2 \leq 0$. Svi procesi su jednodimenzionalni.

(a) Interpretirajte zakone očuvanja grafički i pokažite da ne postoji proces u kojem sva tri fonona pripadaju istoj grani.

(b) Pokažite da su jedini mogući procesi oni u kojima je jedan fonon koji nastaje ili se raspada, iz grane koja je viša od grane barem jednog fonona od dva koja se ponište ili koji u procesu nastanu. Mogući procesi su, na primjer:

$$\begin{aligned} \text{transverzalni fonon} + \text{transverzalni fonon} &\leftrightarrow \text{longitudinalni fonon} \\ \text{transverzalni fonon} + \text{longitudinalni fonon} &\leftrightarrow \text{longitudinalni fonon} \end{aligned}$$

17 Fononi u metalu. Mjerenje fononske disperzije

Zadatak 17.1 Promotrite ione kao točkaste naboje mase M i naboja e koji su uronjeni u jednoliko raspodijeljen elektronski naboj vodljivih elektrona. Ioni su u ravnotežnim položajima na čvorovima rešetke. Ako jedan ion pomaknemo za malu udaljenost r ($r \ll R$, R je bilo koji vektor Bravaisove rešetke), sila koja vraća ion u ravnotežni položaj je posljedica naboja unutar sfere polumjera r čije je ishodište u čvoru rešetke. Uzmite da je gustoća iona ili elektrona $n_i = n_e = 3/4\pi r_s^3$.

- (a) Pokažite da je frekvencija titranja iona $\omega = (e/Mr_s^3)^{1/2}$. Dobivamo li približno frekvenciju ionske plazme?
 (b) Procijenite vrijednost frekvencije ionske plazme u metalu natrija.
 (c) Procijenite red veličine brzine zvuka u metalima. Da li se red veličine podudara s vrijednošću dobivenom pomoću Bohm-Staverove relacije?

Zadatak 17.2 Sve račune u ovom zadatku provedite u CGS sustavu jedinica.

- (a) Brzinu zvuka u metalu procijenite s Bohm-Staverovom relacijom i pokažite da vrijedi

$$\frac{\hbar\omega_D}{\mathcal{E}_F} = \left(\frac{2^{8/3}}{3} \frac{Z^{1/3}m}{M} \right)^{1/2}$$

- (b) Iskoristite formulu za omjer elektronskog c_v^{el} i fononskog c_v^{ph} doprinosa specifičnoj toplini na niskim temperaturama

$$\frac{c_v^{\text{el}}}{c_v^{\text{ph}}} = \frac{5}{24\pi^2} Z \frac{\Theta_D^3}{T^2 T_F}$$

i pomoću (a) pokažite da je

$$\frac{c_v^{\text{el}}}{c_v^{\text{ph}}} = \left(\frac{5}{12\pi^2} \right) Z \left(\frac{4mZ^{1/3}}{3M} \right)^{3/2} \left(\frac{\mathcal{E}_F}{k_B T} \right)^2$$

- (c) Procijenite masu iona s AM_p gdje je A maseni broj i M_p je masa protona ($1836 m$, m je masa elektrona) te pokažite da temperatura T_0 pri kojoj su elektronski i fononski doprinosi specifičnoj toplini jednaki glasi

$$T_0 = 5,3 \left(\frac{Z}{A} \right)^{3/4} \left(\frac{a_0}{r_s} \right)^2 \cdot 10^2 \text{ K}$$

- (d) Izračunajte T_0 za natrij, aluminij i olovo.

- (e) Pokažite da je iznos prvog neiščezavajućeg, kubnog člana po temperaturi u razvoju za specifičnu toplinu rešetke veći od iznosa kubnog člana u razvoju za elektronski doprinos specifičnoj toplini za faktor

$$\frac{1}{Z} \left(\frac{3M}{Z^{1/3}m} \right)^{3/2}$$

Uputa: razvoj za elektronski doprinos specifičnoj toplini do kubnog člana po temperaturi glasi

$$c_v^{\text{el}} = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T g(\mathcal{E}_F) - \frac{\pi^4}{90} k_B^4 T^3 g(\mathcal{E}_F) \left[15 \left(\frac{g'(\mathcal{E}_F)}{g(\mathcal{E}_F)} \right)^2 - 21 \frac{g''(\mathcal{E}_F)}{g(\mathcal{E}_F)} \right]$$

Zadatak 17.3 Pri izvodu Bohm-Staverove relacije ioni se smatraju točkastim česticama koje interagiraju samo Coulombovim silama. Realističniji model uzima u obzir da ioni imaju prostornu raspodjelu naboja kao i da su ionske jezgre "neprobijne" zbog efektivne ion-ion interakcije koja, uz Coulombsku, također djeluje. Budući je repulzivna interakcija jezgra-jezgra kratkodosežna, ne dovodi do poteškoća u uobičajenom računu za titranje rešetke te može biti opisana dinamičkom matricom $\mathbf{D}^c$. Titranje rešetke u metalima možemo, zato, razmatrati na uobičajeni način pazeći pri tom da je ukupna dinamička matrica $\mathbf{D}$ jednaka $\mathbf{D}^c$ plus član koji se pojavljuje zbog Coulombskih interakcija između ionskih raspodjela naboja, no zasjenjenih vodljivim elektronima.

Neka ion na položaju $\mathbf{R} + \mathbf{u}(\mathbf{R})$ ima raspodjelu naboja $\rho(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{u}(\mathbf{R}))$ pa je elektrostatska sila na taj ion jednaka

$$\int d^3r \mathbf{E}(\mathbf{r}) \rho[\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{u}(\mathbf{R})]$$

gdje je $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ električno polje ostalih iona reducirano elektronskim zasjenjenjem.

- (a) Razvijte dodatnu elektrostatsku interakciju u red do linearnih članova po ionskom pomaku te pretpostavljajući da je elektronsko zasjenjenje opisano statičkom dielektričnom konstantom $\epsilon(\mathbf{q})$, pokažite da nova dinamička matrica ima oblik

$$D_{\mu\nu}(\mathbf{k}) = D_{\mu\nu}^c(\mathbf{k}) + V_{\mu\nu}(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [V_{\mu\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{K}) - V_{\mu\nu}(\mathbf{K})]$$

$$V_{\mu\nu}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi n q_\mu q_\nu |\rho(\mathbf{q})|^2}{q^2 \epsilon(\mathbf{q})}$$

(b) Pokažite da ukoliko ne uzmete u obzir elektronsko zasjenjenje ($\epsilon = 1$), rezultat iz (a) u dugovalnoj granici predviđa longitudinalni mod na frekvenciji ionske plazme.

(c) Pokažite da ako zasjenjenje uzmemo u obzir kroz Thomas-Fermijevu dielektričnu funkciju, sve fononske frekvencije iščezavaju linearno s k u dugovalnoj granici, no disperzija nije jednostavnog, Bohm-Staverovog tipa.

Zadatak 17.4 Pokažite da se dinamički strukturni faktor $S(\mathbf{q}, \omega)$ za prijenos energije $E = \hbar\omega = 0$ svodi na geometrijski strukturni faktor koji se javlja pri Braggovoj difrakciji.

Zadatak 17.5 Pretpostavimo da izmjereni $S(\mathbf{q}, \omega)$ integriramo po frekvencijama, odnosno, energijama. Pokažite da se pomoću dobivenog izraza može naći informacija o trenutnoj udaljenosti između atoma. Ovakva vrsta mjerenja daje korisnu sliku o kratko-dosežnim strukturama stakla i drugih nekristaličnih tvari.

Zadatak 17.6 Usporedite eksperimentalne tehnike neutronske raspršenja, Ramanovog raspršenja i infracrvene apsorpcije. Navedite prednosti i nedostatke svake od tehnika.

Zadatak 17.7 (a) Upotrijebite definiciju veličine W

$$2W \equiv \langle (\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{R}, t))^2 \rangle = \langle (\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{R}, 0))^2 \rangle$$

gdje je $\langle \dots \rangle$ termodinamički prosjek, te razvoj za $\mathbf{u}(\mathbf{R})$

$$\mathbf{u}(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}s} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_s(\mathbf{k})}} (a_{\mathbf{k}s} + a_{-\mathbf{k}s}^\dagger) \boldsymbol{\epsilon}_s(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}$$

i pokažite da Debye-Wallerov faktor ima oblik

$$e^{-2W} = \exp \left\{ -v \int \frac{d^3k}{(2\pi)^d} \sum_s \frac{\hbar}{2M\omega_s(\mathbf{k})} (\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_s(\mathbf{k}))^2 \coth \left[\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_s(\mathbf{k}) \right] \right\}$$

gdje je v volumen primitivne ćelije, a d dimenzija kristala.

(b) Pokažite da je $e^{-2W} = 0$ u jednoj i dvije dimenzije tako da promotrite ponašanje podintegralne funkcije za mali k . Koje su posljedice ove tvrdnje za moguće postojanje jedno- ili dvodimenzionalnog kristalnog uređenja?

(c) Procijenite veličinu Debye Wallerovog faktora za trodimenzionalni kristal.

18 Dielektrička svojstva izolatora. Polaritoni

Zadatak 18.1 Pokažite da je lokalno električno polje bliskih naboja u kristalu s kubičnom simetrijom jednako nuli. Kao model za proračun uzmite da je lokalno polje posljedica identičnih dipola s jednakom orijentacijom.

Zadatak 18.2 Uzmemo li u obzir fonon-fonon raspršenja koji su posljedica anharmoničkih članova u potencijalnoj energiji, za dielektričnu konstantu ionskih kristala dobijemo

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + (\epsilon_0 - \epsilon_\infty) \frac{\omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

gdje je γ konstanta gušenja zbog fonon-fonon raspršenja. Za NaCl je $\epsilon_0 = 5$ i $\epsilon_\infty = 2,25$, a dugovalna TO frekvencija fonona je $\nu_T = 4,9$ THz.

(a) Izračunajte gornju i donju graničnu valnu duljinu za Reststrahl interval (interval u kojemu ionski kristal jako reflektira).

(b) Procijenite refleksivnost pri valnoj duljini $50 \mu\text{m}$ ako je konstanta gušenja $\gamma = 10^{12} \text{ s}^{-1}$. Pogledajte zadatak 12.2.

(c) Izračunajte koeficijent apsorpcije pri valnoj duljini $50 \mu\text{m}$. Kolika mora biti debljina uzorka da se svjetlost posve apsorbira?

Zadatak 18.3 Statička i visokofrekventna dielektrična konstanta ionskog kristala litijevog fluorida LiF su $\epsilon_0 = 8,9$ i $\epsilon_\infty = 1,9$, a TO fononska frekvencija $\nu_{\text{TO}} = 9,2$ THz. Izračunajte donju i gornju valnu duljinu za Reststrahlen područje.

Zadatak 18.4 Pretpostavimo da dielektrična konstanta $\epsilon(\omega)$ kao funkcija od ω^2 nema jedan pol, nego ima općenitiji oblik

$$\epsilon(\omega) = A + \sum_{i=1}^n \frac{B_i}{\omega^2 - \omega_i^2}$$

Pomoću ove formule pokažite da je generalizirana Lyddane-Sachs-Teller relacija jednaka

$$\frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} = \prod_{i=1}^n \left(\frac{\omega_i^0}{\omega_i} \right)^2$$

gdje su ω_i^0 frekvencije pri kojima ϵ iščezava. Koje je fizičko značenje frekvencija ω_i i ω_i^0 ?

Zadatak 18.5 Alkalni halogenid (npr. NaCl) ima $\epsilon(0) = 5,9$, $\epsilon(\infty) = 2,25$, i refleksivnost $R = 0$ pri valnoj duljini $\lambda = 30,6 \mu\text{m}$. Za dielektričnu konstantu $\epsilon(\omega)$ pretpostavite da je realna.

(a) Nađite frekvencije ω_L i ω_T . Prisjetite se da je frekvencija ω_T je dugovalna TO frekvencija fonona u odsustvu vanjskog polja i određuje pol za $\epsilon(\omega)$, dok je ω_L , dugovalna LO frekvencija i nula za $\epsilon(\omega)$.

(b) Nacrtajte refleksivnost kao funkciju od ω . Prisjetite se da je refleksivnost $R(\omega)$ dana je izrazom

$$R(\omega) = \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^2 = \left(\frac{\sqrt{\epsilon(\omega)} - 1}{\sqrt{\epsilon(\omega)} + 1} \right)^2,$$

gdje je n indeks loma.

Zadatak 18.6 Pretpostavimo da primijenimo električno polje $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_x$ na vodikov atom u osnovnom stanju s valnom funkcijom

$$\psi_0 \propto e^{-r/a_0}$$

(a) Pretpostavite da probna valna funkcija za atom u polju $\mathbf{E}$ ima oblik

$$\psi \propto \psi_0(1 + \gamma x) = \psi_0 + \delta\psi$$

Odredite parametar γ minimizirajući ukupnu energiju atoma.

(b) Izračunajte dipolni moment vodikovog atoma

$$p = \int d^3r (-e)x(\psi_0\delta\psi^* + \psi_0^*\delta\psi)$$

pomoću najbolje probne funkcije iz (a) i pokažite da za polarizabilnost dobivate $\alpha = 4a_0^3$. Točna vrijednost je $4,5a_0^3$.

Zadatak 18.7 Promatrat ćemo krutnine i tekućine u kojima molekule imaju stalni električni dipolni moment (voda, amonijak) te krutnine, na primjer, ionske kristale kod kojih su neki ioni zamijenjeni drugima sa stalnim dipolnim momentom (kao što je OH^- u KCl).

(a) Električno polje E usmjerava dipolne molekule; toplinsko gibanje stvara neuređenost u sustavu povećavajući neusmjerenost dipolnih momenata. Upotrijebite ravnotežnu statističku mehaniku i napišite vjerojatnost da kut između vektora dipolnog momenta i vektora električnog polja leži u intervalu θ i $\theta + d\theta$. Ako postoji N takvih dipola s momentima p , pokažite da je njihov ukupni dipolni moment u toplinskoj ravnoteži jednak

$$Np\langle \cos \theta \rangle = NpL\left(\frac{pE}{k_B T}\right)$$

gdje je $L(x)$ Langevinova funkcija, $L(x) = \coth x - 1/x$.

(b) Tipični dipolni moment je reda veličine 1 Debyeve jedinica (10^{-18} u jedinicama esu). Pokažite da se za električno polje reda veličine $10^4 \text{ V}\cdot\text{cm}^{-1}$ polarizabilnost na sobnoj temperaturi može napisati u obliku

$$\alpha = \frac{p^2}{3k_B T}$$

Uputa: $1 \text{ V} \approx (1/300) \text{ esu}$.

Zadatak 18.8 Razmak između polarizabilnih molekula u lancu je a . Molekule su fiksne na čvorovima u lancu, ali imaju unutrašnji stupanj slobode kojeg možemo opisati jednadžbom

$$\frac{d^2 p}{dt^2} = -\omega_0^2 p + E\alpha\omega_0^2$$

gdje je p električni dipolni moment molekule koji je paralelan lancu, E je lokalno električno polje, dok je α polarizabilnost. Svaka molekula "osjeća" električno polje svih drugih molekula. Sustav je na $T = 0$, a kvantni efekti su mali.

(a) Izračunajte i nacrtajte krivulju disperzije $\omega(k)$ za valove polarizacije malih amplituda.

(b) Diskutirajte ponašanje $\omega(k = 0)$ kao funkciju od α .

(c) Što se mijenja ako su dipolni momenti okomiti na lanac i svi leže u jednoj ravnini?

19 Homogeni poluvodiči

Zadatak 19.1 Energija elektrona blizu vrha valentne vrpce u nekom poluvodiču dana je izrazom

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = -10^{-37} k^2 \text{ J}.$$

Elektron s valnim vektorom $\mathbf{k} = 10^9 \text{ e}_z \text{ m}^{-1}$ pobudimo u kvantno stanje više energije, na akceptorsku razinu ili u vodljivu vrpcu. Izračunajte efektivnu masu, energiju, impuls i brzinu nastale šupljine.

Zadatak 19.2 Energiju elektrona na dnu vodljive vrpce poluvodiča s energijskim procjepom $E_g = 0,7 \text{ eV}$ možemo aproksimirati izrazom

$$E(k) = E_g + Ak^2.$$

gdje je $A = 5 \cdot 10^{-37} \text{ J}\cdot\text{m}^2$. Izračunajte efektivnu masu elektrona na dnu vodljive vrpce.

Zadatak 19.3 Hipotetski poluvodič ima vodljivu vrpcu opisanu formulom $\mathcal{E}_c(\mathbf{k}) = E_1 - E_2 \cos(ka)$ i valentnu vrpcu opisanu formulom $\mathcal{E}_v(\mathbf{k}) = E_3 - E_4 \sin^2(ka)$, gdje su $E_i > 0$ te $E_1 > E_2$, $E_3 < E_1 - E_2$ i $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$.

(a) Nađite širinu ovih vrpce te energijski procjep između njih.

(b) Izračunajte efektivne mase elektrona za vodljivu i šupljine za valentnu vrpcu u $k = 0$.

Zadatak 19.4 Pretpostavimo da je energija elektrona u vodljivoj vrpce za hipotetski tetravalentni poluvodič n -tipa dana izrazom

$$\mathcal{E}(k) = \alpha k^2 + \text{konst.}$$

Ciklotronska rezonancija za elektrone u magnetskom polju $B = 0,1 \text{ Weber}\cdot\text{m}^{-2}$ pojavljuje se na frekvenciji $\omega_c = 1,8 \cdot 10^{11} \text{ rad}\cdot\text{s}^{-1}$.

(a) Nađite konstantu α .

(b) Pretpostavite da je poluvodič dopiran pentavalentnim donorskim atomima. Procijenite gustoću donora ako je poznato da je Hallov koeficijent na sobnoj temperaturi jednak $R_H = -6,25 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3\text{C}^{-1}$ te da je relativna dielektrična konstanta $\epsilon_r = 15$.

Zadatak 19.5 Kristal silicija dopiran je s primjesnim atomima Sb do gustoće 10^{21} m^{-3} . Primjesna energijska razina je $0,04 \text{ eV}$ od najbližeg ruba vrpce. Pretpostavite da je energijski procjep na 450 K jednak $E_g = 1,14 \text{ eV}$. Uzmite da su efektivne mase jednake masi slobodnog elektrona i da su **svi** atomi primjesa ionizirani na sobnoj temperaturi. Pokretljivosti za elektrone i šupljine glase $\mu_e = 0,13 \text{ m}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ i $\mu_h = 0,05 \text{ m}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$. Izračunajte vodljivost (SI: provodnost) σ ovog poluvodiča na zadanoj temperaturi.

Zadatak 19.6 Kristal germanija (Ge) dopiran je s $10^{22} \text{ atoma/m}^3$ arsena (As) koji daju donorsku razinu 13 meV ispod ruba vodljive vrpce. Za kristal Ge je energijski procjep $E_g = 0,7 \text{ eV}$, efektivna masa elektrona je $m_e = 0,22m$, efektivna masa šupljine je $m_e = 0,30m$, pokretljivost elektrona $\mu_e = 0,36 \text{ m}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ te pokretljivost šupljine $\mu_h = 0,16 \text{ m}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$.

(a) Izračunajte kemijski potencijal μ i vodljivost (provodnost) σ na sobnoj temperaturi (300 K).

(b) Ako kristal Ge dopiramo i s atomima aluminija (Al), hoće li se kemijski potencijal i vodljivost (kvalitativno) promijeniti? Dopiranje atomima Al generira akceptorsku razinu 10 meV iznad valentne vrpce.

Zadatak 19.7 Kristal silicija dopiran je s atomima arsena (As). Gustoća atoma As iznosi $5 \cdot 10^{20} \text{ atoma/m}^3$. Donorska razina leži $0,05 \text{ eV}$ ispod ruba vodljive vrpce. Energijski procjep iznosi $1,14 \text{ eV}$. Izračunajte kemijski potencijal μ na 200 K u odnosu na $\mathcal{E}_c$ te postotak neioniziranih atoma As. Koristite uobičajene aproksimacije i pretpostavite $m_e = m_h = m$.

Zadatak 19.8 (a) Pokažite da kemijski potencijal u intrinzičnom poluvodiču na $T = 0$ leži točno na sredini energijskog procjeka. Na kojoj temperaturi je kemijski potencijal jednak $(3/4)(E_c + E_v)$, gdje su E_c i E_v energije dna vodljive i vrha valentne vrpce?

(b) Objasnite kako se kemijski potencijal mijenja s temperaturom ako su dodane primjese:

(b1) donori;

(b2) akceptor?

(c) U poluvodič s direktnim procjepom dodane su primjese koje daju gustoću $10^{23} \text{ elektrona/m}^3$. Izračunajte gustoću šupljina na sobnoj temperaturi ako je energijski procjep 1 eV , a efektivne mase nositelja naboja u vodljivoj i valentnoj vrpce iznose $0,25$ i $0,4$ mase slobodnog elektrona, respektivno.

Zadatak 19.9 (a) Pokažite da je doprinos elektronskih elipsoidnih džepova gustoći stanja vodljive vrpce $g_c(\mathcal{E})$ dan formulom $dh_c(\mathcal{E})/d\mathcal{E}$, gdje je $h_c(\mathcal{E})$ broj stanja po jediničnom volumenu u džepu s energijama manjima od $\mathcal{E}$.
 (b) Pokažite da je doprinos šupljinskih elipsoidnih džepova gustoći stanja valentne vrpce $g_v(\mathcal{E})$ dan formulom $dh_v(\mathcal{E})/d\mathcal{E}$, gdje je $h_v(\mathcal{E})$ broj stanja po jediničnom volumenu u džepu s energijama većima od $\mathcal{E}$.
 (c) Upotrijebite činjenicu da volumen Ω u k -prostoru sadrži $\Omega/4\pi^3$ elektronskih stanja po jediničnom volumenu i da je volumen elipsoida $x^2/a^2 + y^2/b^2 + z^2/c^2 = 1$ jednak $V = (4\pi/3)abc$, te pokažite da formule

$$g_{c,v}(\mathcal{E}) = \sqrt{2|\mathcal{E} - \mathcal{E}_{c,v}|} \frac{m_{c,v}^{3/2}}{\hbar^3 \pi^2}$$

slijede direktno iz (a) i (b).

Zadatak 19.10 (a) Izvedite formule za ciklotronsku rezonantnu frekvenciju i ciklotronsku efektivnu masu iz poluklasične jednačbe gibanja elektrona u magnetskom polju.

(b) Pokažite da su formule za ciklotronsku efektivnu masu

$$m^* = \left(\frac{\det \tilde{\mathbf{M}}}{M_{zz}} \right)^{1/2}$$

$$m^* = \sqrt{\frac{m_1 m_2 m_3}{\hat{H}_1^2 m_1 + \hat{H}_2^2 m_2 + \hat{H}_3^2 m_3}}$$

ekvivalentne pri čemu je donja formula izračunata u koordinatnom sustavu glavnih osi tenzora ciklotronske efektivne mase M_{ij} jer su m_i svojstvene vrijednosti za M_{ij} , a $\hat{H}_i$ su komponente jediničnog vektora magnetskog polja u sustavu glavnih osi.

Zadatak 19.11 (a) Pokažite da ako za energiju dvostruko zauzete donorske razine uzmete $2\mathcal{E}_d + \Delta$, tada formulu za gustoću donorskih elektrona n_d moramo zamijeniti formulom

$$n_d = N_d \frac{1 + \exp[-\beta(\mathcal{E}_d - \mu + \Delta)]}{\frac{1}{2} \exp[\beta(\mathcal{E}_d - \mu)] + 1 + \frac{1}{2} \exp[-\beta(\mathcal{E}_d - \mu + \Delta)]}$$

(b) Provjerite da li se formula iz (a) u granici $\Delta \rightarrow \infty$ reducira na formulu za jednostruko zauzetu donorsku razinu. Također, provjerite da li se formula iz (a) u granici $\Delta \rightarrow 0$ svodi na očekivani rezultat za dva neovisna elektrona.

(c) Promotrite donorsku nečistoću s mnogo vezanih orbitalnih elektronskih stanja čije su energije $\mathcal{E}_i$. Pretpostavite da elektron-elektron odbojna Coulombska interakcija zabranjuje da se na nečistoću veže više od jedan elektron te pokažite da je generalizacija formule za gustoću donorskih elektrona

$$\frac{N_d}{1 + \frac{1}{2} \left(\sum_i e^{-\beta(\mathcal{E}_i - \mu)} \right)^{-1}}$$

Zadatak 19.12 Razmotrimo dopirani poluvodič s $N_d > N_a$. Pretpostavite da je poluvodič nedegeneriran, ali je $(N_d - N_a)/n_i$ toliko velik broj da izraz

$$\frac{N_d - N_a}{n_i} = 2 \sinh[\beta(\mu - \mu_i)]$$

ne daje nužno vrijednost kompatibilnu uvjetima

$$\mathcal{E}_d - \mu \gg k_B T$$

$$\mu - \mathcal{E}_a \gg k_B T$$

(a) Pokažite da je pod tim uvjetima p_v zanemariv u odnosu na n_c te da je p_a zanemariv u odnosu na N_a pa je kemijski potencijal dan kvadratnom jednačbom

$$N_c e^{-\beta(\mathcal{E}_c - \mu)} = N_d - N_a - \frac{N_d}{\frac{1}{2} e^{\beta(\mathcal{E}_d - \mu)} + 1}$$

(b) Iz rezultata pod (a) zaključite da ako temperatura padne na veoma niske vrijednosti tako da n_c nije više približno jednak $N_d - N_a$ tada postoji prijelaz u područje gdje je

$$n_c = \sqrt{\frac{N_c (N_d - N_a)}{2}} e^{-\beta(\mathcal{E}_c - \mathcal{E}_d)/2}$$

(c) Ako temperatura padne još niže, postoji drugi prijelaz u područje u kojem vrijedi

$$n_c = \frac{N_c (N_d - N_a)}{N_a} e^{-\beta(\varepsilon_c - \varepsilon_d)}$$

(d) Izvedite rezultate analogne rezultatima pod (a), (b) i (c) ako je $N_a > N_d$.

20 Optička svojstva poluvodiča. Ekscitoni

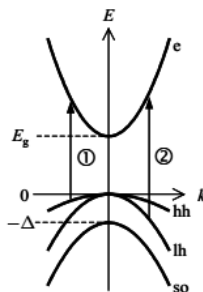
Zadatak 20.1 Indijev fosfid (InP) je III-V poluvodič s direktnim energijskim procjepom koji iznosi 1,35 eV na sobnoj temperaturi. Koeficijent apsorpcije pri 775 nm je $3,5 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1}$. Uzorak je tanak 1 μm i ima anti-refleksijske površine. Procijenite koeficijent transmisije T na 620 nm.

Zadatak 20.2 Na poluvodič s energijskim procjepom E_g upadaju fotoni energije $h\nu$. Ako je $h\nu > E_g$, direktnim prijelazima nastaju parovi elektron-šupljina iz valentne vrpce. Za energije elektrona u vodljivoj vrpri pretpostavite da imaju oblik $\mathcal{E}_c(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_c + \hbar^2 k^2 / 2m_e$, a za šupljine u valentnoj vrpri $\mathcal{E}_v(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_v - \hbar^2 k^2 / 2m_h$.

(a) Odredite iznos valnog vektora $\mathbf{k}$ te energiju elektrona i šupljina.

(b) Numerički izračunajte ove veličine za InSb (indijev antimonid) za kojeg je energijski procjep $E_g = 0,23 \text{ eV}$, masa elektrona $m_e = 0,014 m$ (m je masa slobodnog elektrona), masa šupljine $m_h = 0,4 m$ i $h\nu = 0,5 \text{ eV}$.

Zadatak 20.3 Parametri za model za četiri energetske vrpce galijeveog arsenida (GaAs) dani su donjoj tablici.



Crystal	E_g (eV) (0 K)	E_g (eV) (300 K)	Δ (eV)	m_e^*	m_{hh}^*	m_{lh}^*	m_{so}^*
GaAs	1.519	1.424	0.34	0.067	0.5	0.08	0.15
GaSb	0.81	0.75	0.76	0.041	0.28	0.05	0.14
InP	1.42	1.34	0.11	0.077	0.6	0.12	0.12
InAs	0.42	0.35	0.38	0.022	0.4	0.026	0.14
InSb	0.24	0.18	0.85	0.014	0.4	0.016	0.47

(a) Izračunajte valni vektor k za elektron koji je pobuđen iz hh-vrpce (heavy-hole) u vodljivu vrpce ako je foton energije 1,6 eV apsorbiran na 300 K. Koja je odgovarajuća vrijednost za lh-vrpce (light-hole)?

(b) Izračunajte valni vektor fotona unutar kristala. Da li je opravdana aproksimacija $\mathbf{k}_i \approx \mathbf{k}_f$? Indeks loma za GaAs za fotone energije 1,6 eV iznosi 3,7.

(c) Izračunajte omjer zajedničkih gustoća stanja za hh-vrpce i lh-vrpce.

(d) Kolika je valna duljina na kojoj prijelazi iz so-vrpce (split-off) postaju mogući?

Zadatak 20.4 Kompleksna dielektrična konstanta za poluvodič kadmijev telurid (CdTe) dana je izrazom

$$\epsilon_r = 8,92 + 2,29i$$

na 500 nm. Za ovu valnu duljinu, izračunajte faznu brzinu, koeficijent apsorpcije i refleksivnost.

Zadatak 20.5 (a) Izračunajte ekscitonsku Rydbergovu energiju i Bohrov polumjer za galijev arsenid (GaAs) za kojeg je $\epsilon_r = 12,8$, $m_e^* = 0,067 m_0$ i $m_h^* = 0,2 m_0$.

(b) Galijev arsenid ima kubičnu kristalnu strukturu s jediničnom ćelijom čija je duljina stranice $a = 0,56 \text{ nm}$. Procijenite broj jediničnih ćelija sadržanih unutar staze $n = 1$ za eksciton. Pomoću izračunatog opravdajte pretpostavku da se sredstvo može smatrati homogenim dielektrikom.

(c) Procijenite najvišu temperaturu na kojoj je moguće zapaziti stabilne ekscitone u GaAs.

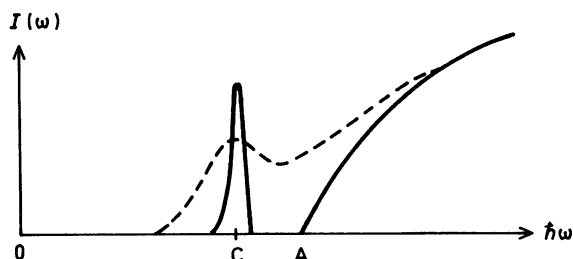
Zadatak 20.6 Direktni ekscitoni u germaniju mogu se formirati na niskim temperaturama pomoću fotona energije bliske energiji procjepa 0,808 eV.

(a) Izračunajte energiju vezanja i polumjer ekscitona u osnovnom stanju. Uzmite da je $m_e^* = 0,038 m_0$, $m_h^* = 0,1 m_0$ i $\epsilon_r = 16$.

(b) Izračunajte napon pri kojem će polje duž ekscitona biti jednako ionizacijskom polju u germanijevoj p-i-n diodi za koju je ugrađeni potencijal $V_{bi} = 0,74 \text{ V}$ i gdje je debljina i-područja jednaka 2 μm .

Zadatak 20.7 Na slici je prikazan apsorpcijski spektar veoma čistog poluvodiča InP na niskim temperaturama ($T \sim 4 \text{ K}$) gdje je nacrtan graf intenziteta apsorpcije kao funkcije energije fotona punom linijom. Poznato je da su energije u točkama A i C na grafu jednake $E_A = 1400 \text{ eV}$ i $E_C = 1386 \text{ eV}$. Statička dielektrična konstanta za InP je 9,6 i šupljine imaju mnogo manju efektivnu masu od elektrona ($m_h^* = m_e^*$).

- (a) Koji su fizički razlozi da graf izgleda upravo kao na slici: kontinuum s pragom apsorpcije u točki A i šiljak u točki C?
- (b) Izračunajte direktni energijski procjep za InP.
- (c) Izračunajte efektivnu masu šupljine m_n^* .
- (d) Na sobnim temperaturama puna linija se širi i ne vidi se jasno što je prikazano isprekidanom linijom. Objasnite taj efekt.



Zadatak 20.8 Snop svjetlosti upada na ploču optičkog sredstva debljine l kako je prikazano na slici. Pretpostavit ćemo da je l mnogo veće od duljine koherencije upadne svjetlosti l_c pa se efekti interferencije ne moraju razmatrati. Neka su R_1 i R_2 refleksivnosti prednje i stražnje plohe na ploči i da je α koeficijent apsorpcije sredstva.

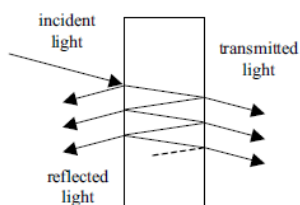
- (a) Zbrajajući intenzitete snopova koji su transmitirani nakon višestrukih refleksija s intenzitetom snopa nakon prvog prolaska, pokažite da je transmisivnost ploče dana izrazom

$$T = \frac{(1-R_1)(1-R_2)e^{-\alpha l}}{1-R_1R_2e^{-2\alpha l}}$$

- (b) Izračunajte veličinu pogreške zbog zanemarivanja višestrukih refleksija u sljedećim slučajevima:

- (b1) silicijska ploča na frekvenciji iz područja transparentnosti ploče, gdje je indeks loma $n = 3,4$ i $\alpha l = 0$;
- (b2) silicijska ploča na frekvenciji malo iznad područja transparentnosti ploče, gdje je indeks loma $n = 3,4$ i $\alpha l = 1$ pri čemu $n \gg \kappa$;
- (b3) ploča od safira (Al_2O_3) na frekvenciji iz područja transparentnosti ploče, gdje je indeks loma $n = 1,77$ i $\alpha l = 0$;

- (c) Diskutirajte implikacije rezultata pod (b).



21 Dijamagnetizam i paramagnetizam

Zadatak 21.1 Dokažite Bohr-van Leeuwenov teorem: u klasičnoj statističkoj fizici, termodinamički prosjek magnetizacije jednak je nuli.

Zadatak 21.2 Izračunajte dijamagnetsku susceptibilnost plina vodikovih atoma gustoće 10^{20} m^{-3} u osnovnom stanju i usporedite dobiveni rezultat s paramagnetskom spinskom susceptibilnošću na 100 K ($\chi_{\text{para}} = 7,8 \cdot 10^{-10}$)

Zadatak 21.3 (a) Susceptibilnost jednostavnih metala (alkalijskih i zemnoalkalijskih) sastoji se od doprinosa χ_{ce} vodljivih elektrona i doprinosa χ_{ion} od dijamagnetskog odziva elektrona iz zatvorenih ljuski u ionskim jezgrama. Uzmite da je susceptibilnost vodljivih elektrona dana Paulijevom i Landauovom susceptibilnošću slobodnih elektrona, pokažite da je

$$\frac{\chi_{\text{ion}}}{\chi_{\text{ce}}} = -\frac{1}{3} \frac{Z_c}{Z_v} \langle (k_F r)^2 \rangle$$

gdje je Z_v broj valentnih elektrona po ionu, Z_c broj elektrona u ionskim jezgrama po ionu, a $\langle r^2 \rangle$ je prosječna vrijednost kvadrata ionskog polumjera. Procijenite red veličine ovog omjera.

(b) Razmotrite ion s jednom djelomično popunjenom ljuskom s angularnim momentom J i sa Z dodatnih elektrona u ostalim popunjenim ljuskama. Pokažite da je omjer Curie-jevog zakona za paramagnetsku susceptibilnost i Larmorove dijamagnetske susceptibilnosti jednak

$$\frac{\chi_{\text{par}}}{\chi_{\text{dia}}} = -\frac{g^2 J(J+1)}{2Zk_B T} \frac{\hbar^2}{m \langle r^2 \rangle}$$

Procijenite red veličine ovog omjera.

Zadatak 21.4 (a) Pokažite da se Hundova pravila za ljusku s angularnim momentom l mogu sažeti u sljedeće izraze:

$$S = \frac{1}{2} [(2l+1) - |2l+1-n|]$$

$$L = S |2l+1-n|$$

$$J = S |2l-n|$$

(b) Provjerite da dva načina prebrojavanja degeneracije danog LS -multipleta daju isti odgovor, odnosno, provjerite da je

$$(2L+1)(2S+1) = \sum_{|L-S|}^{L+S} (2J+1)$$

(c) Pokažite da je ukupno cijepanje LS -multipleta zbog interakcije spin-staza $\lambda(\mathbf{L} \cdot \mathbf{S})$ jednako

$$\begin{aligned} E_{J_{\text{max}}} - E_{J_{\text{min}}} &= \lambda S(2L+1), \quad L > S \\ &= \lambda L(2S+1), \quad S > L \end{aligned}$$

i da je cijepanje između dva sukcesivna J -multipleta unutar LS -multipleta jednako

$$E_{J+1} - E_J = \lambda(J+1)$$

Zadatak 21.5 Pretpostavimo da unutar skupa $(2S+1)(2L+1)$ ionskih stanja najniže energije, kristalno polje može biti prikazano u obliku $aL_x^2 + aL_y^2 + aL_z^2$, gdje su a , b i c različite konstante. U posebnom slučaju $L=1$, pokažite da ako je kristalno polje dominantna smetnja (u usporedbi s interakcijom spin-staza) tada ćemo dobiti $(2S+1)$ -struko degenerirani skup osnovnih stanja u kojima svaki matrični element svake od komponenti angularnog momenta $\mathbf{L}$ iščezava.

Zadatak 21.6 Neke organske molekule imaju tripletno ($S=1$) pobuđeno stanje s energijom $k_B \Delta$ iznad singletnog ($S=0$) stanja.

(a) Nađite termodinamički prosjek za magnetski moment u polju B .

(b) Pokažite da je susceptibilnost za $T \gg \Delta$ približno neovisna o Δ .

(c) Pomoću dijagrama energijskih razina u ovisnosti o magnetskom polju i entropije kao funkcije polja, objasnite kako ovaj sustav možemo ohladiti izentropskom (adijabatskom) demagnetizacijom.

Zadatak 21.7 Neinteragirajućih N čestica spina $1/2$ stavljeno je u magnetsko polje $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$. Izračunajte toplinski kapacitet $C_V = (\partial U / \partial T)_V$, gdje je U unutrašnja energija.

Zadatak 21.8 (a) Pokažite da je za savršeni paramagnet čija slobodna energija ima oblik

$$F = \frac{1}{\beta} \Phi(\beta H),$$

specifična toplina pri konstantnom magnetskom polju H jednostavno povezana sa susceptibilnošću relacijom

$$c_H = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_H = \frac{H^2 \chi}{T},$$

gdje je $s = S/V$ specifična entropija. U području valjanosti Curiejevog zakona, pokažite da gornja formula prelazi u

$$c_H = \frac{1}{3} \frac{N}{V} k_B J(J+1) \left(\frac{g \mu_B H}{k_B T} \right)^2.$$

(b) Doprinosi titranja kristalne rešetke specifičnoj toplini procijenite pomoću formule

$$c_v = \frac{12\pi^4}{5} n k_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3$$

i pokažite da doprinos rešetke pada ispod doprinosa spinova na temperaturi T_0 reda veličine

$$T_0 \approx \left(\frac{N}{N_i} \right)^{1/5} \left(\frac{g \mu_B H}{k_B \Theta_D} \right)^{2/5} \Theta_D$$

gdje je N_i ukupni broj iona, N je broj paramagnetskih iona. Koliki je red veličine za $g \mu_B H / k_B \Theta_D$ ako je polje 10^4 gaussa?

Zadatak 21.9 Ako zapišemo Helmholtzovu slobodnu energiju u obliku

$$e^{-\beta F} = \sum_n e^{-\beta E_n} = \sum_n \langle n | e^{-\beta \mathcal{H}} | n \rangle = \text{Tr}(e^{-\beta \mathcal{H}})$$

gdje je $\mathcal{H} = g \mu_B \mathbf{H} \cdot \mathbf{J}$ hamiltonijan sustava s energijama E_n , tada je moguće lagano izvesti Curiejev zakon na visokim temperaturama bez uvođenja Brillouinove funkcije jer za $\mathcal{H} \ll k_B T$ možemo razviti eksponencijalnu funkciju $\exp(-\beta \mathcal{H}) = 1 - \beta \mathcal{H} + (\beta \mathcal{H})^2/2 + \dots$. Izračunajte slobodnu energiju do drugog reda po magnetskom polju, koristeći jednakost za matrice komponenti angularnog momenta J_μ

$$\text{Tr}(J_\mu J_\nu) = \frac{1}{3} \delta_{\mu\nu} \text{Tr}(\mathbf{J}^2)$$

te izvedite visokotemperaturnu susceptibilnost.

Uputa: operator angularnog momenta $J \rightarrow J/\hbar$. Koliki je trag matrica angularnog momenta u bazi $\{|jm\rangle\}$?

Zadatak 21.10 Susceptibilnost zbog spina vodljivih elektrona na apsolutnoj nuli može se izračunati na drugačiji način. Neka su

$$N^+(\xi) = \frac{1}{2} N (1 + \xi)$$

$$N^-(\xi) = \frac{1}{2} N (1 - \xi)$$

brojevi elektrona sa z-projeksijom spina $\hbar/2$ (spin up) i $-\hbar/2$ (spin down), respektivno, a N je ukupan broj vodljivih elektrona.

(a) Pokažite da je u magnetskom polju B ukupna energija slobodnih elektrona sa spinom up i down jednaka

$$E^+(\xi) = E_0 (1 + \xi)^{5/3} - \frac{1}{2} N \mu_B B (1 + \xi)$$

$$E^-(\xi) = E_0 (1 - \xi)^{5/3} + \frac{1}{2} N \mu_B B (1 - \xi)$$

gdje je $E_0 = (3/10) N \epsilon_F$, a ϵ_F Fermijeva energija sustava s N čestica bez vanjskog magnetskog polja. Parametar ξ pokazuje uređenost sustava: za $\xi = 0$ sustav sadrži jednak broj čestica sa spinom up i down, za $\xi = 1$ svi elektroni imaju spin up, dok za $\xi = -1$ svi elektroni imaju spin down.

(b) Minimizirajte ukupnu energiju $E_{\text{total}} = E^+ + E^-$ po parametru ξ i riješite jednadžbu za ravnotežnu vrijednost ξ_0 u granici $|\xi| \ll 1$.

(c) Pokažite da za ravnotežnu vrijednost ζ_0 dobivate tražene izraze za magnetizaciju i susceptibilnost kod Paulijevog paramagnetizma.

Zadatak 21.11 (a) U metalima u magnetskom polju H , znatnija promjena gustoće stanja vodljivih elektrona događa se oko Fermijeve energije $\mathcal{E}_F$. Izvedite izraz za magnetizaciju vodljivih elektrona

$$M = \mu_B^2 H \int_{-\infty}^{\infty} g'(\mathcal{E}) f(\mathcal{E}) d\mathcal{E}$$

tako da razvijete u red gustoću stanja u magnetskom polju za $\mu_B H \ll \mathcal{E}_F$.

(b) Iskoristite (a) i pomoću Sommerfeldovog razvoja pokažite da ako je temperatura $T \ll T_F$, korekcija za Paulijevu susceptibilnost $\chi_{\text{Pauli}} = \chi(0)$ ovisna o temperaturi dana je formulom

$$\chi(T) = \chi(0) \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left[\left(\frac{g'}{g} \right)^2 - \left(\frac{g''}{g} \right) \right] \right\},$$

gdje su g , g' i g'' gustoća stanja i njene derivacije izračunate u Fermijevoj energiji $\mathcal{E}_F$. Izraz za kemijski potencijal kao funkcija temperature do kvadratnog člana glasi:

$$\mu(T) = \mathcal{E}_F - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{g'(\mathcal{E}_F)}{g(\mathcal{E}_F)}.$$

(c) Pokažite da se rezultat pod (b) za slobodne elektrone svodi na

$$\chi(T) = \chi(0) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\mathcal{E}_F} \right)^2 \right].$$

Zadatak 21.12 Pokažite da je magnetizacija *nedegeneriranog* elektronskog plina točno jednaka

$$M = \frac{N}{V} \gamma J B_J(\beta \gamma J H)$$

uvrstimo li $J = 1/2$, što je izraz za magnetizaciju sustava neovisnih magnetskih momenata. U ovom je izrazu $B_J(x)$ Brillouinova funkcija, a konstanta $\gamma = g(JLS)\mu_B$, gdje je $g(JLS)$ Landé-ov g -faktor. To ćete pokazati tako da uvrstite aproksimaciju Fermijeve funkcije za niske gustoće $f \approx e^{-\beta(\mathcal{E} - \mu)}$ u izraz za gustoću elektrona sa spinovima "gore" (+) i "dolje" (−)

$$n_{\pm} = \int d\mathcal{E} g_{\pm}(\mathcal{E}) f(\mathcal{E})$$

Gustoće stanja $g_{\pm}(\mathcal{E})$ su

$$g_{\pm}(\mathcal{E}) = \frac{1}{2} g(\mathcal{E} \mp \mu_B H)$$

gdje je $g(\mathcal{E})$ gustoća stanja u aproksimaciji neovisnih elektrona.

Uputa: upotrijebite izraz za magnetizaciju $M = -\mu_B(n_+ - n_-)$ i izraz za gustoću $n = N/V = n_+ + n_-$.

Zadatak 21.13 Zbog elektron-elektron interakcija, pomak u energiji elektrona zbog interakcije elektronskog spinskog magnetskog momenta s poljem H imat će dodatni član koji opisuje promjenu raspodjele elektrona s kojom dani elektron interagira. U Hartree-Fockovoj aproksimaciji energije su:

$$\mathcal{E}_{\pm}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_0(\mathbf{k}) \pm \mu_B H - \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} v(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) f(\mathcal{E}_{\pm}(\mathbf{k}'))$$

Pokažite da se iz gornje jednadžbe za $k_B T \ll \mathcal{E}_F$ dobiva integralna jednadžba za $\mathcal{E}_+ - \mathcal{E}_-$ čije je rješenje

$$[\mathcal{E}_+(\mathbf{k}) - \mathcal{E}_-(\mathbf{k})]_{k=k_F} = \frac{2\mu_B H}{1 - v_0 g(\mathcal{E}_F)}$$

gdje je v_0 prosjek po svim prostornim kutovima

$$v_0 = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dx v(\sqrt{2k_F^2(1-x)})$$

Za koji se faktor promijenila Paulijeva susceptibilnost?

22 Elektronske interakcije i magnetska struktura

Zadatak 22.1 Procijenite red veličine interakcije dva magnetska dipola u kristalnoj rešetki. Koja temperatura odgovara ovoj interakciji? Kritične temperature pri kojoj feromagnet gubi magnetska svojstva variraju od nekoliko stotina kelvina do preko 1000 K.

Zadatak 22.2 Pretpostavimo da je sustavu s N vodljivih elektrona

$$N^+ = \frac{N}{2}(1+\zeta)$$

$$N^- = \frac{N}{2}(1-\zeta),$$

gdje je N^+ (N^-) broj elektrona sa z -komponentom spina $+\hbar/2$ ($-\hbar/2$). Parametar ζ pokazuje uređenost sustava: za $\zeta = 0$ sustav sadrži jednak broj čestica sa spinom up i down, za $\zeta = 1$ svi elektroni imaju spin up, dok za $\zeta = -1$ svi elektroni imaju spin down. Energiju izmjene između vodljivih elektrona i, j aproksimirat ćemo sljedećom interakcijom:

$$V_{ij} = \begin{cases} -V, & \text{elektroni } i, j \text{ imaju paralelne spinove} \\ 0, & \text{elektroni } i, j \text{ imaju antiparalelne spinove} \end{cases}$$

gdje je $V > 0$.

(a) Pokažite da je u magnetskom polju B ukupna energija slobodnih elektrona sa spinom up i down jednaka

$$E^+(\zeta) = E_0(1+\zeta)^{5/3} - \frac{1}{8}VN^2(1+\zeta)^2 - \frac{1}{2}N\mu_B B(1+\zeta)$$

$$E^-(\zeta) = E_0(1-\zeta)^{5/3} - \frac{1}{8}VN^2(1-\zeta)^2 + \frac{1}{2}N\mu_B B(1-\zeta)$$

gdje je $E_0 = (3/10)N\epsilon_F$. Volumen sustava je V_0 .

(b) Nađite parametar ζ koji odgovara točki minimuma za ukupnu energiju u granici $\zeta \ll 1$.

(c) Pokažite da je magnetizacija sustava jednaka

$$M = \frac{3(N/V_0)\mu_B^2}{2\epsilon_F - (3/2)VN} B$$

Vidimo da energija izmjene povećava susceptibilnost.

(d) Pokažite da je za $B = 0$ sustav nestabilan ako je $\zeta = 0$ u slučaju $V > 4\epsilon_F/3N$. Ako su ovi uvjeti zadovoljeni, feromagnetsko stanje ($\zeta \neq 0$) imaće nižu energiju nego paramagnetsko. Zbog pretpostavke $\zeta \ll 1$, to je dovoljan, ali ne i nužan uvjet za feromagnetizam. Ovaj se uvjet naziva **Stonerov kriterij**.

Zadatak 22.3 Pokažite da stacionarna stanja Schrödingerove jednadžbe za dvo-elektronski sustav sa simetričnim potencijalom $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ uvijek možemo odabrati tako da budu simetrična ili antisimetrična.

Zadatak 22.4 (a) Prosječna energija dvo-elektronskog sustava s hamiltonijanom oblika

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

u stanju ψ jednaka je

$$E[\psi] = \int d^3r_1 d^3r_2 \left[\frac{\hbar^2}{2m}(|\nabla_1\psi|^2 + |\nabla_2\psi|^2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\psi|^2 \right]$$

Pokažite da je najmanja vrijednost za $E[\psi]$ energija tripletnog osnovnog stanja E_t pri čemu promatramo sve antisimetrične normalizirane diferencijabilne funkcije koje iščezavaju u beskonačnosti. Slično, promatramo li sve simetrične normalizirane diferencijabilne funkcije koje iščezavaju u beskonačnosti tada za minimum dobivamo E_s energiju singletnog stanja.

Zadatak 22.5 Izvedite Heitler-Londonovu procjenu za razliku energija singletnog i tripletnog osnovnog stanja molekule vodika.

23 Magnetsko uređenje. Magnoni

Zadatak 23.1 Jedan oblik teorije srednjeg polja može se izvesti iz Heisenbergovog hamiltonijana.

(a) Izdvojite jedan čvor rešetke na položaju $\mathbf{R}$ i pokažite da je interakcija spina $\mathbf{S}(\mathbf{R})$ s ostalim spinovima u rešetki te vanjskim poljem $\mathbf{H}$ oblika (Oprez: konvencija nalaže da je spin u smjeru magnetskog momenta!)

$$\Delta\mathcal{H} = -\gamma\mathbf{S}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{H}_{\text{eff}}$$

gdje je $\gamma = g_{JLS} \mu_B$. Koliko je efektivno magnetsko polje $\mathbf{H}_{\text{eff}}$?

(b) Teorija srednjeg polja zamjenjuje (komplicirano) polje $\mathbf{H}_{\text{eff}}$ s termodinamičkim prosjekom $\langle \mathbf{H}_{\text{eff}} \rangle_T$. Ako je $\langle \mathbf{S}(\mathbf{R}) \rangle_T = \mathbf{M}V/\gamma N$, pokažite da je $\mathbf{H}_{\text{eff}} = \mathbf{H} + \lambda \mathbf{M}$. Koliki je parametar λ ?

(c) Koristite Curiejevu teoriju paramagnetizma i pokažite da je magnetizacija

$$M(T) = M_0 \left(\frac{H_{\text{eff}}}{T} \right)$$

gdje je funkcija $M_0(H_{\text{eff}}/T)$ magnetizacija u magnetskom polju na temperaturi T izračunata u odsustvu magnetskih interakcija. Kolika je magnetizacija u slučaju $\mathbf{H} = 0$?

(d) Nacrtajte funkciju $M(T)$ u prikladnim jedinicama.

Zadatak 23.2 Za $x \ll 1$, Brillouinova funkcija $B_J(x)$ ima oblik $Ax - Bx^3$, gdje su A i B pozitivne konstante.

(a) Izvedite da se spontana magnetizacija feromagneta ponaša kao $(T_c - T)^{1/2}$ kad $T \rightarrow T_c$ odozdo prema teoriji srednjeg polja.

(b) Izvedite da magnetizacija $M(H, T_c)$ pri kritičnoj temperaturi iščezava kao $H^{1/3}$ u teoriji srednjeg polja. Usput, eksperiment i izračuni pokazuju da je eksponent za H veoma blizu vrijednosti $1/5$ u 3D sustavima, a u 2D sustavima jednak $1/15$.

Zadatak 23.3 Razmotrite feromagnet koji se sastoji od N čestica spina $1/2$ s magnetskim momentom $\mathbf{m} = -\gamma\mathbf{S}$, gdje je $\gamma = g_{JLS} \mu_B$. Feromagnet može imati neiščezavajuću magnetizaciju $M(T, V, N)$ čak i u slučaju kada nema vanjskog magnetskog polja s time da je temperatura T manja od Curiejeve temperature T_c . U Heisenberg-Weissovom modelu iz zadatka 23.1(c), magnetizacija M je zadana implicitno izrazom

$$M = \frac{\gamma N}{2V} \tanh \left(\frac{\gamma \lambda M}{2k_B T} \right)$$

gdje je λ pozitivni bezdimenzijski parametar.

(a) Pokažite da je Curiejeva temperatura T_c dana izrazom $T_c \approx \lambda N \gamma^2 / 4V k_B$.

(b) Nađite izraz za $(\partial M / \partial T)_{V, N}$ kao funkciju od T, V, N i M .

(c) Jednočestična particijska funkcija za ovakav feromagnet dana je izrazom

$$Z = \cosh \left(\frac{\gamma \lambda M}{2k_B T} \right)$$

Izračunajte unutrašnju energiju feromagneta.

(d) Izračunajte specifičnu toplinu C_V feromagneta i napišite vrijednost za C_V u granici $T \rightarrow 0$.

Zadatak 23.4 (a) Pokažite da se magnonska disperzija za $ka \ll 1$ ponaša kao $\omega \approx Ak^2$, gdje je A konstanta ovisna o rešetki.

(b) Pokažite da je gustoća stanja za disperziju iz (a) jednaka $g(\omega) = \omega^{1/2} / 4\pi^2 A^{1/2}$.

(c) Upotrijebite približnu magnonsku disperziju $\omega = Ak^2$ da pronađete vodeći član (u najnižem redu) specifične topline trodimenzionalnog feromagneta na niskim temperaturama $k_B T \ll J$, gdje je J energija izmjene.

Uputa: integral koji će se pojaviti prilikom računanja je

$$\int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{e^x - 1} dx = \Gamma(5/2) \zeta(5/2; 1)$$

gdje je $\Gamma(y)$ gama funkcija, a $\zeta(y)$ Riemannova zeta-funkcija, $\zeta(5/2; 1) = 1,341487$.

Zadatak 23.5 (a) Iz činjenice da stanja hermitskog operatora A čine potpun ortonormiran skup, izvedite da je najveći (najmanji) dijagonalni element kojeg matrica za A u po volji uzetoj bazi može imati, jednak najvećoj (najmanjoj) svojstvenoj vrijednosti za A .

- (b) Pokažite da je najveći dijagonalni element za $\mathbf{S}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{R}')$ pri $\mathbf{R} \neq \mathbf{R}'$ jednak S^2 . **Uputa:** napišite operator $\mathbf{S}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{R}')$ pomoću $[\mathbf{S}(\mathbf{R}) + \mathbf{S}(\mathbf{R}')]^2$.
- (c) Pokažite da je najmanji dijagonalni element za $\mathbf{S}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{R}')$ jednak $-S(S+1)$.

Zadatak 23.6 Pretpostaviti ćemo da su magnetski ioni u Bravaisovoj rešetki opisani Heisenbergovim hamiltonijanom za feromagnete

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} J(\mathbf{R}-\mathbf{R}') \mathbf{S}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{R}') - g\mu_B H \sum_{\mathbf{R}} S_z(\mathbf{R})$$

$$J(\mathbf{R}-\mathbf{R}') = J(\mathbf{R}'-\mathbf{R}) \geq 0$$

- (a) Pokažite da je osnovno stanje u ovom modelu

$$|0\rangle = \prod_{\mathbf{R}} |S\rangle_{\mathbf{R}},$$

gdje je S maksimalna vrijednost z -projekcije spina za koju vrijedi

$$S_z(\mathbf{R})|S\rangle_{\mathbf{R}} = S|S\rangle_{\mathbf{R}}$$

- (b) Kolika je energija osnovnog stanja?

Zadatak 23.7 (a) Izvedite izraz za donju granicu za energiju osnovnog stanja Heisenbergova *antiferomagneta*

$$-\frac{1}{2} S(S+1) \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} |J(\mathbf{R}-\mathbf{R}')| \leq E_0$$

- (b) Izvedite izraz za gornju granicu za energiju osnovnog stanja Heisenbergova antiferomagneta koristeći varijacijski princip i probno stanje oblika

$$|0\rangle = \prod_{\mathbf{R}} |S\rangle_{\mathbf{R}}$$

$$S_z(\mathbf{R})|S\rangle_{\mathbf{R}} = S|S\rangle_{\mathbf{R}}$$

i to za obje podrešetke sa suprotnim magnetizacijama. Trebate dobiti

$$E_0 \leq -\frac{1}{2} S^2 \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} |J(\mathbf{R}-\mathbf{R}')|$$

Zadatak 23.8 Pokažite da je energija osnovnog stanja antiferomagneta u obliku lanca s četiri spina čiji Heisenbergov hamiltonijan oblika

$$\mathcal{H} = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4 + \mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{S}_1)$$

jednaka

$$E_0 = -4JS^2 \left(1 + \frac{1}{2S} \right)$$

Zadatak 23.9 Razmotrite anizotropni Heisenbergov hamiltonijan oblika

$$\mathcal{H}_{anizo} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} [J_z(\mathbf{R}-\mathbf{R}') \mathbf{S}_z(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{S}_z(\mathbf{R}') + J(\mathbf{R}-\mathbf{R}') \mathbf{S}_{\perp}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{S}_{\perp}(\mathbf{R}')]]$$

gdje je $J_z(\mathbf{R}-\mathbf{R}') > J(\mathbf{R}-\mathbf{R}') > 0$.

- (a) Pokažite je osnovno stanje za $\mathcal{H}_{anizo}$ jednako onome za izotropni slučaj. Pokažite da su pobuđena stanja niskih energija (spinski valovi) jednaka onima za izotropni slučaj, s tim da su energije pobuđenja spinskih valova veće za iznos

$$S \sum_{\mathbf{R}} [J_z(\mathbf{R}) - J(\mathbf{R})]$$

- (b) Pokažite da se niskotemperaturna spontana magnetizacija razlikuje od saturacije samo eksponencijalno u $-1/T$.
- (c) Može se pokazati da je u izotropnom 1D i 2D Heisenbergovom modelu feromagneta spontana magnetizacija jednaka nuli. Pokažite da u anizotropnom 2D Heisenbergovom modelu takav zaključak više ne vrijedi.

24 Supravodljivost

Zadatak 24.1 Procijenite prosječnu udaljenost između elektrona u Cooperovom paru ζ_0 pomoću relacija neodređenosti. Valna funkcija para je superpozicija produkata jednoelektronskih stanja (ravnih valova) s energijama iz intervala $[\mathcal{E}_F - \Delta, \mathcal{E}_F + \Delta]$ pa za neodređenost energije para uzmite $\delta\mathcal{E} = \Delta$, gdje je Δ energijski procjep supravodljivog stanja. Uzmite da je $\mathcal{E}_F / \Delta \sim 10^3 - 10^4$.

Zadatak 24.2 Struja I protječe supravodljivom žicom cilindričkog oblika polumjera r . Pokažite da kad je magnetsko polje, generirano strujom u neposrednoj blizini i blizu površine žice, jednako H_c tada vrijedi $I = 5rH_c$.

Zadatak 24.3 Prstenom koji je načinjen od olova, promjera poprečnog presjeka 1 mm i promjera 10 cm, protječe struja 100 A. Prsten je u supravodljivom stanju. Mjerenjem je utvrđeno da se struja nija promijenila unutar 1 godine. Ako detektor može mjeriti promjene struje od 1 μ A, izračunajte eksperimentalnu gornju granicu za otpornost olova u supravodljivom stanju.

Zadatak 24.4 U modelu dva fluida, pretpostavlja se da u supravodiču postoje normalni i supravodljivi elektroni. Normalni elektroni gibaju se prema jednadžbi koja je sličnog tipa kao i Drudeova

$$\frac{d\mathbf{j}_n}{dt} = \frac{n_n e^2}{m} \mathbf{E} - \frac{\mathbf{j}_n}{\tau}$$

gdje su $\mathbf{j}_n$ i n_n gustoća struje i gustoća normalnih elektrona. Supravodljivi elektroni gibaju se prema Londonovoj jednadžbi

$$\frac{d\mathbf{j}_s}{dt} = \frac{n_s e^2}{m} \mathbf{E}$$

gdje su $\mathbf{j}_s$ i n_s gustoća struje i gustoća supravodljivih elektrona.

(a) Nađite kompleksnu vodljivost $\sigma(\omega)$ za supravodič. Pretpostavite harmoničku vremensku ovisnost $e^{-i\omega t}$ veličina u navedenim jednadžbama i neovisni odziv normalnog i supravodljivog fluida u električnom polju.

(b) Pokažite da je, u granici niskih frekvencija, odziv normalnog fluida samo omski dok je odziv supravodljivog fluida induktivni.

Zadatak 24.5 U modelu dva fluida za supravodiče pretpostavljamo da se na temperaturama $0 < T < T_c$ gustoća struje može napisati kao suma doprinosa struje normalnih i supravodljivih elektrona: $\mathbf{j} = \mathbf{j}_n + \mathbf{j}_s$, gdje je $\mathbf{j}_n = \sigma_e \mathbf{E}$, a $\mathbf{j}_s$ zadovoljava Londonovu jednadžbu. Električna provodnost σ_e je dana za normalne elektrone s tim da je broj elektrona na temperaturi T smanjen u odnosu na normalno stanje.

(a) Iz Maxwellovih jednadžbi i Londonove jednadžbe pokažite da je disperzivna relacija elektromagnetskih valova unutar supravodiča jednaka (cgs)

$$k^2 c^2 = 4\pi\sigma_e \omega i - \frac{c^2}{\Lambda^2} + \omega^2$$

(b) Ako je τ vrijeme relaksacije za normalne elektrone i n_n njihova gustoća, pomoću relacije

$$\sigma_e = \frac{n_n e^2 \tau}{m}$$

pokažite da na frekvencijama $\omega \ll \tau^{-1}$ doprinos normalnih elektrona disperzijskoj relaciji možemo zanemariti (odnosno, $\Lambda^{-2} \gg 4\pi\sigma_e \omega / c^2$) pa gibanje elektrona možemo opisati samo pomoću Londonove jednadžbe no pri tome mora vrijediti da je $\hbar\omega$ puno manje od energijskog procjeka supravodljivog stanja i $\omega \ll \omega_p$, gdje je $\omega_p = (4\pi n_n e^2 / m)^{1/2}$ plazmena frekvencija.

Uputa: (a) krenite od jednadžbe

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

i pretpostavite da je $\mathbf{B} \propto \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$.

Zadatak 24.6 Promotrite beskonačnu supravodljivu ploču omeđenu s dvama paralelnim ravninama okomitim na y os koordinatnog sustava na položajima $y = \pm d$. Primijenimo jednoliko magnetsko polje H_0 u smjeru pozitivne z osi.

(a) Za rubni uvjet uzmite da je paralelna komponenta polja $\mathbf{B}$ neprekinuta na površini supravodiča te pomoću Londonove jednadžbe i Maxwellove jednadžbe $\text{rot } \mathbf{B} = (4\pi/c)\mathbf{j}$ pokažite da je u unutar supravodiča

$$\mathbf{B}(y) = H_0 \frac{\cosh(y/\Lambda)}{\cosh(d/\Lambda)} \mathbf{e}_z.$$

(b) Pokažite da je dijamagnetska gustoća struje koja protječe u ravnotežnim uvjetima jednaka

$$\mathbf{j}(y) = \frac{c}{4\pi\Lambda} H_0 \frac{\sinh(y/\Lambda)}{\cosh(d/\Lambda)} \mathbf{e}_x.$$

(c) Magnetizacija u točki unutar ploče je $\mathbf{M}(y) = (\mathbf{B}(y) - \mathbf{H}_0)/4\pi$. Pokažite da je prosječna magnetizacija, gdje je prosjek uzet po debljini ploče, jednaka

$$\bar{M} = -\frac{H_0}{4\pi} \left(1 - \frac{\Lambda}{d} \tanh \frac{d}{\Lambda} \right).$$

Kolika je susceptibilnost u granici $d \gg \Lambda$ (debela ploča) i $d \ll \Lambda$ (tanka ploča)?

Zadatak 24.7 Ravnotežno stanje supravodiča u jednolikom magnetskom polju određeno je temperaturom T i iznosom magnetskog polja H . Pretpostavite da je tlak P konstantan i da je supravodič dugi cilindar čija je os paralelna polju tako da su demagnetizacijski efekti zanemarivi. Gibbsova slobodna energija G jednaka je

$$dG = -SdT - \Gamma dH$$

gdje je S entropija, a Γ ukupni prosječni magnetski moment sustava, $\Gamma/V = M$. Fazna granica između supravodljivog i normalnog stanja dana je krivuljom kritičnog polja $H_c(T)$ u H - T dijagramu.

(a) Pokažite da iz činjenice da je G neprekinuta pri prijelazu fazne granice, slijedi

$$\frac{dH_c}{dT} = \frac{S_n - S_s}{\Gamma_s - \Gamma_n}$$

gdje se indeksi n i s odnose na normalno i supravodljivo stanje.

(b) Iskoristite činjenicu da supravodljivo stanje pokazuje savršeni dijamagnetizam ($B = 0$), a normalno stanje ima zanemarivi dijamagnetizam ($M \approx 0$), te pomoću (a) pokažite da je skok entropije prilikom prijelaza fazne granice jednak

$$S_n - S_s = -\frac{V}{4\pi} H_c \frac{dH_c}{dT}$$

pa je zato latentna toplina jednaka

$$Q = -TV \frac{H_c}{4\pi} \frac{dH_c}{dT}$$

ako se fazni prijelaz zbiva u magnetskom polju.

(c) Pokažite da ako se prijelaz zbiva bez magnetskog polja, tada postoji diskontinuitet za specifičnu toplinu

$$(c_p)_n - (c_p)_s = -\frac{T}{4\pi} \left(\frac{dH_c}{dT} \right)^2$$

Zadatak 24.8 Deblji uzorak metalnog supravodiča tipa I ima kritično polje $H_{cb} = 500$ Oe. Također, izmjereno je da tanki film debljine $2d = 5 \cdot 10^{-5}$ cm istog supravodiča ima kritično polje $H_{cf} = 550$ Oe. Ovisnost kritičnog polja o debljini uzorka izračunat ćemo pomoću stabilizacijske slobodne energije.

(a) Postavimo li uzorak pri konstantnoj temperaturi $T < T_c$ u vanjsko magnetsko polje $\mathbf{H}_a$ za gustoću Helmholtzove slobodne energije F možemo pisati $dF = -\mathbf{M} \cdot d\mathbf{H}_a$. U supravodiču je ukupno polje jednako nuli pa vrijedi $\mathbf{M} = -\mathbf{H}_a/4\pi$. Pokažite da je ukupna promjena slobodne energije F_s za supravodič kojeg smo iz područja gdje je polje nula postavili u područje s magnetskim poljem H_a , jednaka

$$F_s(H_a) - F_s(0) = \frac{H_a^2}{8\pi}$$

(b) Ako je metal nemagnetičan i ima malu susceptibilnost koju možemo zanemariti, tada za slobodnu energiju u normalnom stanju vrijedi $F_N(H_a) = F_N(0)$. Neka je vanjsko polje jednako kritičnom polju $H_a = H_c$ pa je slobodna energija za normalno i supravodljivo stanje uzorka metala je jednaka, $F_N(H_c) = F_s(H_c)$. Iz ovih razmatranja, pokažite da je stabilizacijska slobodna energija

$$\Delta F = F_N(0) - F_s(0) = \frac{H_c^2}{8\pi}$$

(c) Kod veoma tankih uzoraka, ne smijemo zanemariti prodiranje magnetskog polja u unutrašnjost supravodiča. Magnetizacija je $\mathbf{M} = (\mathbf{B} - \mathbf{H}_a)/4\pi$, a promjena slobodne energije $F_s(H_a) - F_s(0) = H_a(H_a - B)/8\pi$. Pokažite da je prosječna vrijednost ovog izraza za $H_a = H_{cf}$ (što je jednako stabilizacijskoj energiji tankog uzorka supravodiča) po debljini uzorka oblika ravne ploče

$$\frac{1}{2d} \int_{-d}^d \frac{H_{cf} (H_{cf} - B)}{8\pi} dy = H_{cf}^2 \left[1 - \frac{\Lambda}{d} \tanh\left(\frac{d}{\Lambda}\right) \right]$$

(d) Slobodna energija ne ovisi o volumenu uzorka. Izjednačavanjem slobodne energije za deblji uzorak $H_{cb}^2/8\pi$ i izraza izračunatog pod (c), nađite jednadžbu koja povezuje kritična polja za oba uzorka. Koju vrijednost kritičnog polja očekujete za uzorak debljine 10^{-6} cm? Koristite aproksimaciju $\tanh(d/\Lambda) \approx 1$ za $d \gg \Lambda$ koja vrijedi prilikom računanja dubine prodiranja Λ .

Uputa: pretpostavite da prodiranje magnetskog polja u supravodič možemo opisati Londonovom jednadžbom za ploču debljine $2d$ čije smo rješenje našli na vježbama

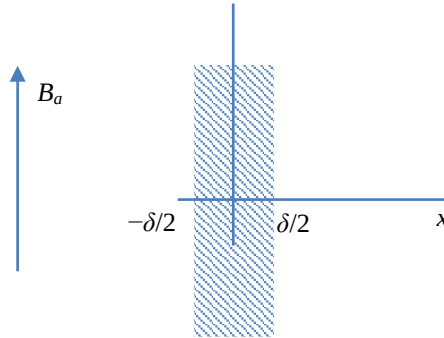
$$\mathbf{B}(y) = H_a \frac{\cosh(y/\Lambda)}{\cosh(d/\Lambda)} \mathbf{e}_z$$

gdje je polje $\mathbf{H} = H_a \mathbf{e}_z$, a Λ Londonova dubina prodiranja ne ovisi o magnetskom polju.

Zadatak 23.9 Magnetsko polje unutar supravodljive ploče debljine δ za koju je duljina prodiranja Λ glasi (pogl. vježbe):

$$B = B_a \frac{\cosh(x/\Lambda)}{\cosh(\delta/2\Lambda)}$$

gdje je primijenjeno polje B_a izvan supravodiča (slika).



(a) Pokažite da je efektivna magnetizacija definirana relacijom $4\pi M(x) \equiv B(x) - B_a$ (cgs sustav) za $\delta \ll \Lambda$ približno jednaka

$$4\pi M(x) \approx -\frac{B_a}{8\Lambda^2} (\delta^2 - 4x^2)$$

(b) Upotrijebite rezultat pod (a) i pokažite da je gustoća slobodne energije na $T = 0$ unutar supravodljive ploče u vanjskom polju B_a za $\delta \ll \Lambda$ jednaka

$$F_s(x, B_a) = U_s(0) + \frac{B_a^2}{64\pi\Lambda^2} (\delta^2 - 4x^2)$$

gdje smo zanemarili doprinos kinetičke energije.

(c) Pokažite da je magnetski doprinos slobodnoj energiji usrednjen po debljini tankog filma jednak

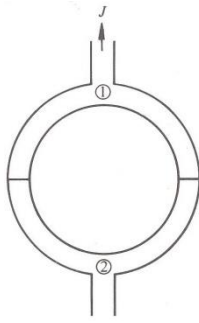
$$B_a^2 \frac{\delta^2}{96\pi\Lambda^2}$$

(d) Pokažite da je kritično polje tankog filma razmjerno $(\Lambda/\delta)H_c$, gdje je H_c kritično polje masivnog supravodiča pri čemu uzimamo u obzir samo magnetski doprinos unutrašnjoj energiji U_s .

Zadatak 24.10 Slika prikazuje dvostruki Josephsonov spoj. Kada gustoća struja J koja protječe supravodičima dostigne kritičnu vrijednost, napon naglo iščezne. Opaženo je da takva kritična struja J_c modulirana ako primijenimo magnetsko polje okomito na ravninu prstena. S povećanjem vrijednosti magnetskog polja, modulacija kritične struje je periodička funkcija magnetskog polja.

(a) Objasnite ovu pojavu i izračunajte periodu modulacije.

(b) Pojasnite kako se ova pojava može iskoristiti za mjerenja veoma malih napona. Procijenite najmanju promjenu napona koju možemo zabilježiti ako vremenska konstanta ne prelazi vrijednost 1 s.



Zadatak 24.11 Razmotrite par elektrona u singletnom stanju ($s = 0$) koji su opisani simetričnom prostornom valnom funkcijom

$$\phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \chi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}$$

U impulsnoj reprezentaciji, odnosno, u k -reprezentaciji, Schrödingerova jednadžba ima oblik:

$$\left(E - 2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \chi(\mathbf{k}) = \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \chi(\mathbf{k}')$$

Pretpostavljamo da elektroni u paru interagiraju u prisutnosti degeneriranog slobodnog elektronskog plina pri čemu uzimamo u obzir Paulijev princip isključenja. Elektronska stanja s valnim vektorima $k < k_F$ su zabranjena za bilo koji elektron u paru pa je

$$\chi(\mathbf{k}) = 0, \quad k < k_F$$

Uzet ćemo da je interakcija u paru privlačna i da ima jednostavan oblik:

$$V(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \begin{cases} -V, & \mathcal{E}_F \leq \hbar^2 k_i^2 / 2m \leq \mathcal{E}_F + \hbar\omega, \quad i = 1, 2; \\ 0, & \text{drugo.} \end{cases}$$

te potražiti rješenje Schrödingerove jednadžbe za vezano stanje suglasno uvjetu na $\chi(\mathbf{k})$. Budući da razmatramo samo jednoelektronska stanja koja u odsutnosti privlačenja imaju energiju veću od $2\mathcal{E}_F$, vezano stanje će biti ono s energijom E koja je manja od $2\mathcal{E}_F$, a energija vezanja će biti

$$\Delta = 2\mathcal{E}_F - E$$

(a) Pokažite da je vezano stanje energije E postoji ukoliko je zadovoljena jednadžba

$$1 = V \int_{\mathcal{E}_F}^{\mathcal{E}_F + \hbar\omega} \frac{N(\mathcal{E}) d\mathcal{E}}{2\mathcal{E} - E}$$

gdje je $N(\mathcal{E})$ gustoća jednoelektronskih stanja danog spina.

(b) Pokažite da jednadžba u (a) ima rješenje za $E < 2\mathcal{E}_F$ za proizvoljno slabi potencijal V pri čemu mora biti $N(\mathcal{E}_F) \neq 0$. Primijetite važnu ulogu principa isključenja: ako donja granica u integralu ne bi bila $\mathcal{E}_F$ nego 0, tada zbog $N(0) = 0$ ne bi bilo rješenja za proizvoljno slabo vezanje.

(c) Pretpostavimo li da se $N(\mathcal{E})$ malo razlikuje od $N(\mathcal{E}_F)$ u intervalu $\mathcal{E}_F < \mathcal{E} < \mathcal{E}_F + \hbar\omega$, pokažite da je energija vezanja dana relacijom

$$\Delta = 2\hbar\omega \frac{e^{-2/N(\mathcal{E}_F)V}}{1 - e^{-2/N(\mathcal{E}_F)V}}$$

ili u granici slabog vezanja

$$\Delta = 2\hbar\omega e^{-2/N(\mathcal{E}_F)V}$$

LITERATURA

- Annett J. F., *Superconductivity, Superfluids and Condensates*, OUP, Oxford, 2004.
- Ashcroft N. Q., Mermin N. D., *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976.
- Blundell S., *Magnetism in Condensed Matter Physics*, OUP, Oxford, 2001.
- Dhawan D. K., *Problems in Solid State Physics*, Campus Book International, New Delhi, 2003.
- Dove M. T., *Structure and Dynamics: an atomic view of materials*, OUP, Oxford, 2003.
- Fox M., *Optical Properties of Solids*, OUP, 2nd. ed., Oxford, 2010.
- Goldsmid H. J., *Problems in Solid State Physics*, Pion, London, 1968.
- Han F., *Problems in Solid State Physics*, World Scientific, Singapore, 2012.
- Jones R. A. L., *Soft Condensed Matter*, OUP, Oxford, 2002.
- Kittel C., *Introduction to Solid State Physics*, 8th edition, Wiley, New York, 2005.
- Kupčić I., *Fizika čvrstog stanja - Zbirka zadataka*, Hinus, Zagreb, 1998.
- Lim Y., *Problems and Solutions on Solid State Physics, Relativity and Miscellaneous Topics*, World Scientific, Singapore, 1995.
- Mahan G. D., *Condensed Matter in a Nutshell*, Princeton University Press, Princeton, 2011.
- Marder M. P., *Condensed Matter Physics*, 2nd edition, Wiley, New York, 2010.
- Mihaly L., Martin M. C., *Solid State Physics - Problems and Solutions*, 2nd ed., Wiley VCH, Weinheim, 2009.
- Omar M. A., *Elementary Solid State Physics*, Addison-Wesley, Readings, 1975.
- Pillai S. O., *Modern Physics and Solid State Physics - Problems and Solutions*, New Age International, New Delhi, 2008.
- Simon H. S., *The Oxford Solid State Basics*, OUP, Oxford, 2013.
- Singleton J., *Band Theory and Electronic Properties of Solid*, OUP, Oxford, 2001.
- Stanić B. V., Marković M. I., *Zbirka rešenih zadataka iz atomske fizike*, Naučna knjiga, Beograd, 1973.
- Šips V., *Uvod u fiziku čvrstog stanja*, Školska knjiga, Zagreb, 2003.

Ivo Batistić - Fizički odsjek, PMF Zagreb (<http://grdelin.phy.hr/~ivo/>)

Ivan Kupčić - Fizički odsjek, PMF Zagreb (<http://www.phy.pmf.unizg.hr/~kupcic/>)