

1 Кристална решетка

1. Метални елемент у основи структуре има просту кубну решетку странице $a = 2,88 \text{ \AA}$. Густина метала је $\rho = 7,2 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$. Колико има елементарних ћелија у $m = 100 \text{ g}$ овог метала?
2. Елемент релативне атомске масе $M = 100$ у основи структуре има **bcc** решетку. Константа решетке је $a = 4 \text{ \AA}$. Израчунајте густину овог елемента, као и број елементарних ћелија и број атома у $m = 10 \text{ g}$ овог елемента.
3. Елемент се кристалише у **fcc** структуру. Маса $m = 208 \text{ g}$ овог елемента садржи $N = 4,28 \times 10^{24}$ атома. Израчунајте константу његове решетке ако му је густина $\rho = 7200 \text{ kg/m}^3$.
4. Натријум-хлорид има **fcc** структуру. Њена густина је $\rho = 2,18 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$. Релативне атомске масе натријума и хлора су 23 и 35,5 респективно. Израчунајте међуатомско растојање d .
5. Алуминијум има **fcc** структуру а жељезо **bcc**. Густина алуминијума је $2,70 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ а жељеза $7,87 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$. Константа решетке алуминијума једнака је $4,04 \text{ \AA}$ а жељеза $2,86 \text{ \AA}$. Одредите релативне атомске масе ових елемената.
6. Покажите да је угао који заклапају било које двије линије које спајају чвор решетке дијаманта са најближа четири сусједа једнак $\arccos(-1/3) = 109^\circ 28'$.
7. (а) Докажите да је идеални однос за хексагоналну густо паковану структуру $c/a = \sqrt{8/3} = 1,633$.
(б) На температури прилижно једнакој 23 К натријум прелази из запремински центриране кубне фазе у хексагоналну густо паковану. Претпостављајући да при том прелазу густина остаје константна, нађите константу решетке a за хексагоналну фазу ако је у кубној фази $a = 4,23 \text{ \AA}$. Сматрати да је однос c/a једнак својој идеалној вриједности.
8. Нека су \mathbf{a}_i примитивни вектори Бравеове решетке а \mathbf{b}_i примитивни вектори реципрочне решетке, који су дефинисани сљедећим релацијама:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}; & \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_3)}; \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}. \end{aligned} \quad (1)$$

- (а) Покажите да примитивни вектори реципрочне решетке задовољавају сљедећу релацију:

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

- (б) Под претпоставком да су примитивни вектори конструисани из \mathbf{b}_i на исти начин као што су \mathbf{b}_i конструисани из \mathbf{a}_i , покажите да су такви вектори управо \mathbf{a}_i , тј. покажите да је:

$$2\pi \frac{\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3}{\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)} = \mathbf{a}_1, \quad \text{итд.}$$

(в) Покажите да је запремина примитивне ћелије Бравеове решетке

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

и нађите запремину примитивне ћелије реципрочне решетке.

9. Покажите:

- (а) да проста кубна решетка са кубном елементарном ћелијом странице a има реципрочну кубну решетку са кубном елементарном ћелијом странице $2\pi/a$;
- (б) да су Бравеове решетке **fcc** и **bcc** узајамно реципрочне, тј. да површински центрирана решетка са елементарном кубном ћелијом странице a има као своју реципрочну запремински центрирану решетку са елементарном кубном ћелијом странице $4\pi/a$, и обрнуто.

10. Примитивни вектори прости хексагоналне решетке могу се изабрати на сљедећи начин:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2} a \mathbf{e}_x + \frac{a}{2} \mathbf{e}_y, \quad \mathbf{a}_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2} a \mathbf{e}_x + \frac{a}{2} \mathbf{e}_y, \quad \mathbf{a}_3 = c \mathbf{e}_z.$$

- (а) Наћи запремину примитивне ћелије.
 - (б) Наћи примитивне векторе реципрочне решетке. Колике су константе реципрочне решетке?
 - (в) Покажите да је реципрочна решетка заротирана у односу на директну. Око које осе и за који угао?
 - (г) За коју је вриједност c/a овај однос исти и за директну и за реципрочну решетку? Ако однос c/a има идеалну вриједност за директну решетку, колику вриједност има за реципрочну?
 - (д) Описати и нацртати прву Брилуенову зону.
11. Цинк има **hcp** структуру. Константе решетке су $c = 4,94 \text{ \AA}$ и $a = 2,7 \text{ \AA}$, а његова релативна атомска маса је $M = 65,38$. Израчунајте густину цинка.

12. Нацртајте равни и осе симетрије коцке.

13. Познате су константе решетке a, b, c и углови α, β и γ кристала са триклиничком симетријом. Покажите да је запремина елементарне ћелије једнака:

$$V = abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}. \quad (3)$$

14. Користећи се формулом (3) наћи израз за запремину елементарне ћелије:

- (а) моноклиничког;
 - (б) хексагоналног;
 - (в) ромбодарског (тригоналног) система.
15. Изразити углове између примитивних вектора инверзне решетке преко углова између примитивних вектора директне решетке.

16. Наћи векторе инверзне решетке за ромбодарски (тригонални) кристал CaCO_3 , ако је $a = 6,36 \text{ \AA}$, $\alpha = 46^\circ 6'$. **Упутство:** искористити векторске идентитете

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{d}) = \begin{vmatrix} \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} & \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} \\ \mathbf{a} \cdot \mathbf{d} & \mathbf{b} \cdot \mathbf{d} \end{vmatrix}, \quad (4)$$

$$[\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})]^2 = \begin{vmatrix} \mathbf{a} \cdot \mathbf{a} & \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} & \mathbf{c} \cdot \mathbf{a} \\ \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} & \mathbf{b} \cdot \mathbf{b} & \mathbf{c} \cdot \mathbf{b} \\ \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} & \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} & \mathbf{c} \cdot \mathbf{c} \end{vmatrix}. \quad (5)$$

17. Познати су Милерови индекси (hkl) неке фамилије равни у кристалу с триклинничком симетријом. Такође су познате константе решетке a , b , c и углови α , β и γ . Извести израз за растојање међу сусједним равнима те фамилије.
18. Полазећи од формуле за растојање међу сусједним равнима триклинничког кристала извести формулу за растојање међу сусједним равнима:
- ромбичког,
 - хексагоналног,
 - тетрагоналног и
 - кубичног система.
19. Одредити угао између равни (210) и (310) у ромбичкој решеци чије су константе $a = 10,437 \text{ \AA}$, $b = 12,845 \text{ \AA}$ и $c = 24,369 \text{ \AA}$.
20. Израчунајте густину атома (чворова) у равнима (100), (110) и (111) за следеће случајеве:
- проста кубна решетка са константом $2,5 \text{ \AA}$;
 - жељезо (**bcc**) са константом решетке $2,87 \text{ \AA}$;
 - алуминијум (**fcc**) са константом решетке $4,05 \text{ \AA}$
21. Израчунајте густину атома у равни (001) цинка (**hcp** структура), чије су константе решетке $a = 2,66 \text{ \AA}$ и $c = 4,95 \text{ \AA}$.
22. Израчунајте линеарну густину атома (чворова) дуж праваца (100), (110) и (111) за следеће случајеве:
- жељезо (**bcc**) са константом решетке $2,87 \text{ \AA}$;
 - бакар (**fcc**) са константом решетке $3,61 \text{ \AA}$.
23. (а) Покажите да је густина чворова (по јединици површине) у атомској равни једнака d/v , гдје је v запремина елементарне ћелије, а d растојање међу сусједним равнима у фамилији којој припада посматрана раван.
- (б) Покажите да је у Бравеовој површински центрираној кубној решетки густина тачака максимална у равнима $\{111\}$, а у Бравеовој запремински центрираној кубној решетки у равнима $\{110\}$. **Упутство:** Најлакше је то показати користећи се односом фамилије равни и вектора инверзне решетке.

24. (а) Докажите да је за произвољну дводимензионалну Бравеову решетку Вигнер–Зајцова ћелија или шестоугаоник или правоугаоник.
- (б) Посматрајмо Вигнер–Зајцову ћелију површински центриране кубне решетке (Сл. 4.16 у Ашкрофт–Мермину). Покажите да је однос дијагонала сваке стране која има облик паралелограма једнак $\sqrt{2} : 1$.
- (в) Посматрајмо Вигнер–Зајцову ћелију запремински центриране кубне решетке (Сл. 4.15 у Ашкрофт–Мермину). Покажите да је страница многоугаоника који омеђује ту ћелију $4/\sqrt{2}$ пута мања од странице условне кубне решетке.
- (г) Покажите да су шестоугаоне стране запремински центриране Вигнер–Зајцове ћелије правилни шестоугаоници. (Примијетимо да оса која је нормална на шестоугаоник и пролази кроз његов центар јесте оса симетрије трећег реда па стога није довољна само та симетрија.)
25. Површински центрирана кубна решетка је најгушћа, а проста кубна има најмању густину од трију Бравеових кубних решетака. Структура типа дијаманта има мању густину од било које од претходних трију. То се види и из координационих бројева решетака: 12 за површински центрирану кубну решетку, 8 за запремински центрирану, 6 за просту кубну решетку и 4 за дијамант. Друга карактеристика је оваква: претпоставимо да смо у простор смјестили идентичне круте сфере тако да центри сфера леже у чворовима сваке од ових четирију структура и притом се сфере са центрима у сусједним чворовима додирују без пресијецања. (Такав распоред сфера зове се густо паковање.) Сматрајући да је густина сфера једнака 1, покажите да је густина система густо пакованих сфера за сваку од четири споменуте структуре једнака:

$$\sqrt{2} \pi/6 = 0,74 \quad \mathbf{fcc}$$

$$\sqrt{3} \pi/8 = 0,68 \quad \mathbf{bcc}$$

$$\pi/6 = 0,52 \quad \mathbf{sc}$$

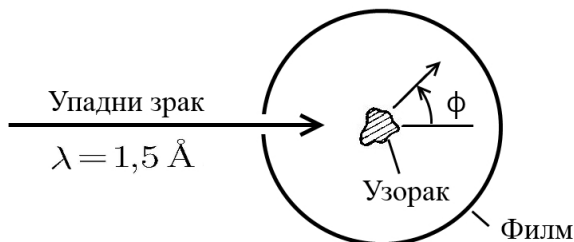
$$\sqrt{3} \pi/16 = 0,34 \quad \mathbf{дијамант}$$

26. Нека је N_n број n -тих најближих сусједа датом чвору Бравеове решетке. (Нпр., у простој кубној решетки је $N_1 = 6$, $N_2 = 12$ итд.). Нека је r_n растојање до n -тог најближег сусједа изражено као количник са растојањем до првог најближег сусједа (нпр., у простој кубној решетки $r_1 = 1$, $r_2 = \sqrt{2} = 1,414$). Саставите таблицу вриједности N_n и r_n за $n = 1, \dots, 6$ за **bcc** и **fcc** Бравеове решетке.

2 X-зраци

1. Колика би требала бити енергија протона да би за њих кристална решетка чија је константа решетки $a = 1 \text{ \AA}$ могла играти улогу дифракционе решетки?
2. Таласна дужина карактеристичног рендгенског зрачења добијеног из бакарне аноде износи $\lambda = 1,537 \text{ \AA}$. Кад зраци падају на кристал алуминијума, дифракција од равни (111) јавља се под углом $\vartheta = 19,2^\circ$. Алуминијум има **fcc** структуру и густину $\rho = 2699 \text{ kg/m}^3$, атомски број је 26,98. На основу датих величина одредити Авогадров број.
3. Колики се максималан број линија може појавити на рендгенограму просте кубне решетки чија је константа $a = 2,86 \text{ \AA}$ ако је испитивање вршено кобалтним зрачењем таласне дужине $\lambda = 1,789 \text{ \AA}$?
4. Што је већи Брагов угао то је већа тачност у одређивању константе решетки. Докажите то.
5. Калијум-хлорид кристалише се у облику просте кубне структуре. Одредите међуатомско растојање d и Брагов угао ϑ под којим се за X-зрак таласне дужине $\lambda = 1,787 \text{ \AA}$ појављује максимум трећег реда. Густина калијум-хлорида је $\rho = 1990 \text{ kg/m}^3$ а релативна молекулска маса $M = 74,6$.
6. Тетрагонална решетка има основне векторе $\mathbf{a} = a\mathbf{e}_x$, $\mathbf{b} = a\mathbf{e}_y$ и $\mathbf{c} = c\mathbf{e}_z$. Таласни вектор упадног снопа X-зрака лежи у xy -равни и заклапа угао α са x -осом. Позната је таласна дужина λ упадног зрачења.
 - (а) Показати да се пикови еластично расијаног зрачења од равни (hkl) појављују ако је
$$h \cos \alpha + k \sin \alpha = -\frac{\lambda a}{2} \left[\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \right].$$
 - (б) Показати да се при расијању од равни $(00l)$ пикови не појављују.
 - (в) Узевши $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$, $a = 4,73 \text{ \AA}$ и $c = 5,71 \text{ \AA}$ наћи угао α који упадни снап мора заклапати са x -осом да би се појавили пикови од следећих равни: (100), (101) и (111).
 - (г) Наћи угао расијања за сваки од пикова датих под бв).
7. Дат је ланац атома АВАВА \cdots А, код којег дужина везе А–В износи $a/2$. Форм-фактори за атоме А и В су f_A и f_B , респективно. Сноп X-зрака који пада управно на ланац расијава се под углом α .
 - (а) Наћи услов интерференције расијаног зрачења у овом случају.
 - (б) Наћи интензитет дифрагованог снопа X-зрака.
8. Покажите да је геометријски структурни фактор за површински центрирану кубну решетку једнак нули за рефлексije од равни (100) и (110) и различит од нуле за рефлексije од равни (111).

9. У експерименту са дифракцијом X -зрака на кристалу са **fcc** решетком опажен је пик под углом $2\vartheta = 84^\circ$. Коришћена је K_α линија бакра, чија је таласна дужина $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$. Одредите Милерове индексе фамилија равни од којих је могућа рефлексија и одговарајућа најкраћа растојања између равни унутар тих фамилија.
10. Кристални прах са **fcc** решетком константе $a = 3,52 \text{ \AA}$ обасјан је X -зрацима таласне дужине $\lambda = 1,79 \text{ \AA}$. Одредите најмању и највећу могућу вриједност Браговог угла.
11. У експерименту са дифракцијом X -зрака на узорку са **fcc** решетком опажен је само један пик под углом $2\vartheta = 121^\circ$. Коришћени су X -зраци таласне дужине $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$. Одредите Милерове индексе фамилије равни и међураванско растојање. Покажите да је немогућ пик дифракције сљедећег (вишег) реда.
12. Брагов угао $\vartheta = 14,35^\circ$ одговара рефлексији за коју је $h^2 + k^2 + l^2 = 8$. Одредите константу решетке ако је у експерименту коришћено X -зрачење таласне дужине $\lambda = 0,71 \text{ \AA}$. Ако постоје још двије рефлексије којима одговарају мањи Брагови углови од измјереног, одредите кристалну структуру.
13. Дифрактометар елемента са кубном решетком даје пикове под угловима 2ϑ једнаким $44,46^\circ$, $51,64^\circ$, $75,78^\circ$ и $93,22^\circ$. Ако је коришћено зрачење таласне дужине $\lambda = 1,543 \text{ \AA}$, одредите кристалну структуру, константу решетке и идентификујте који је то елемент.
14. Дифрактометар елемента са кубном решетком даје пикове под угловима 2ϑ једнаким $38,60^\circ$, $55,71^\circ$, $69,70^\circ$, $82,55^\circ$, $95,00^\circ$ и $107,67^\circ$. Ако је коришћено зрачење таласне дужине $\lambda = 1,543 \text{ \AA}$, одредите кристалну структуру, константу решетке и идентификујте који је то елемент.
15. Са Лауеовог рендгенограма **fcc** кристала одређена је константа решетке $a = 4,50 \text{ \AA}$. Напон у рендгенској цијеви је $U = 50 \text{ kV}$. Растојање од кристала до филма је $D = 5 \text{ cm}$. Колико је максимално растојање од центра слике на филму до мјеста на којем се опажа рефлексија од равни са максималним међураванским растојањем.
16. Узорци трију различитих кубних кристала самљевени су у прах и анализирају се помоћу Дебај–Шерерове коморе (види скицу). Познато је да је један од узорака површински центрирани кубни, други запремински центрирани кубни и да трећи има структуру типа дијаманта. Одговарајуће положаје првих четирију дифракционих прстенова описују подаци дати у сљедећој табели:



| А | Б | В |
|--------------|--------------|---------------|
| $42,2^\circ$ | $28,8^\circ$ | $42,8^\circ$ |
| $49,2^\circ$ | $41,0^\circ$ | $73,2^\circ$ |
| $72,0^\circ$ | $50,8^\circ$ | $89,0^\circ$ |
| $87,3^\circ$ | $59,6^\circ$ | $115,0^\circ$ |

(а) Одредите кристалну структуру образаца А, Б, и В.

- (б) Ако је таласна дужина упадног рендгенског зрака $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$, колика је страница условне кубне решетке за сваки од узорака?
- (в) Под којим угловима ће се опажати прва четири прстена ако структуру типа дијаманта замијенимо структуром типа сфалерита са истом страницом кубне ћелије?
17. Сноп неутрона енергије $E = 0,04 \text{ kV}$ дифрагује на калијум-хлориду на равнима $d_{100} = 3,14 \text{ \AA}$. Одредите Брагов угао ϑ на којем се опаж максимум првог реда. Дата је маса мировања неутрона $m = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}$.
18. Често је врло подесно површински центрирану кубну решетку представити као просту кубну решетку странице a са базисом који се састоји од четири чвора.
- (а) Покажите да је структурни фактор за све чворове инверзне просте кубне решетке једнак тада или 4 или 0.
- (б) Ако удаљимо све тачке са нултом вриједношћу структурног фактора, покажите да тада преостале тачке инверзне решетке образују запремински центрирану кубну решетку са условном ћелијом странице $4\pi/a$. Зашто се могао очекивати такав резултат?
19. (а) Када вектор \mathbf{K} припада инверзној простој хексагоналној решетки, покажите да тада структурни фактор моноатомске хексагоналне густо паковане структуре може имати једну од 6 могућих вриједности: $1 + \exp(in\pi/3)$, $n = 1, \dots, 6$.
- (б) Покажите да у равни нормалној на c -осу и која садржи тачку $\mathbf{K} = 0$ све тачке инверзне решетке имају ненулти структурни фактор.
- (в) Докажите да тачке са нултим структурним фактором леже у свакој другој равни инверзне решетке које су нормалне на c -осу.
- (г) Покажите да у било којој од тих равни тачка чији је положај у односу на тачку $\mathbf{K} = 0$ одређен вектором паралелним c -оси мора да има нулти структурни фактор.
- (д) Покажите да послије одстрањивања из такве равни свих тачака са нултим структурним фактором преостала троугла мрежа се трансформише у решетку типа „пчелињег саћа”.
20. Посматрајмо решетку са базисом који се састоји од n јона. Ако i -ти јон базиса премјестимо у тачку $\mathbf{r} = 0$, претпоставимо да можемо сматрати да се тај јон састоји од m_i тачкастих честица с наелектрисањем $-z_{ij}e$ које се налазе у тачкама с вектором положаја \mathbf{b}_{ij} , $j = 1, \dots, m_i$.
- (а) Покажите да тада атомски форм-фактор f_i има облик

$$f_i = \sum_{j=1}^{m_i} z_{ij} \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{b}_{ij}).$$

- (б) Узевши у обзир претходни израз за атомске форм-факторе, покажите да се тада укупни структурни фактор, по дефиницији

$$S_{\mathbf{K}} = \sum_{j=1}^n f_j(\mathbf{K}) \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{d}_j),$$

поклапа са оним који бисмо добили ако бисмо користили еквивалентан опис те решетке изабравши базис од $m_1 + \dots + m_n$ тачкастих јона.

21. (а) Структура натријум-хлорида може се посматрати као Бравеова површински центрирана кубна решетка са страницом коцке a и са базисом који се састоји од позитивно наелектрисаног јона у почетној тачки и негативно наелектрисаног јона у тачки $\frac{1}{2}a\mathbf{e}_x$. Инверзна решетка је запремински центрирана кубна решетка, при чему произвољни вектор инверзне решетке има облик

$$\mathbf{K} = \frac{4\pi}{a}(\nu_1\mathbf{e}_x + \nu_2\mathbf{e}_y + \nu_3\mathbf{e}_z),$$

гдје су сви коефицијенти ν_i или цијели бројеви или збир цијелог броја и $1/2$. Ако су атомски форм-фактори тих јона f_+ и f_- , покажите да је структурни фактор $S_{\mathbf{K}} = f_+ + f_-$ ако су ν_i цијели бројеви и $S_{\mathbf{K}} = f_+ - f_-$ ако су ν_i збир цијелог броја и $1/2$. (Зашто је $S_{\mathbf{K}} = 0$ при $f_+ = f_-$ у посљедњем случају).

- (б) Структура типа сфалерита такође се може описати као Бравеова запремински центрирана кубна решетка с коцком странице a и са базисом који се састоји од позитивно наелектрисаног јона у почетној тачки и негативно наелектрисаног јона у тачки $\frac{1}{4}a(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)$. Покажите да је за структурни фактор $S_{\mathbf{K}}$ тачна сљедећа релација: $S_{\mathbf{K}} = f_+ \pm if_-$ ако су ν_i збир цијелог броја и $1/2$; $S_{\mathbf{K}} = f_+ + f_-$ ако су ν_i цијели бројеви и њихова сума $\sum_i \nu_i$ паран број; $S_{\mathbf{K}} = f_+ - f_-$ ако су ν_i цијели бројеви и њихова сума $\sum_i \nu_i$ непаран број.
- (в) Узмимо да нам је познато да кубни кристал образују јони са попуњеним љускама (које су стога сферно-симетричне), па према томе, атомски форм-фактори $f_{\pm}(\mathbf{K})$ зависе само од апсолутне вриједности вектора \mathbf{K} . Положају Брагових максимума указују на то да Бравеова решетка јесте површински центрирана кубна решетка. Размотрите како би се на основу структурних фактора повезаних са Браговим максимумима могло одредити која је структура вјероватнија – структура натријум-хлорида или структура типа сфалерита.

3 Класификација Бравеових решетки

- Покажите да било која Бравеова решетка има симетрију инверзије у односу на произвољну тачку решетки. (**Упутство:** Представите трансляције решетки у облику линеарних комбинација основних вектора са цјелобројним коефицијентима.)
 - Покажите да је структура типа дијаманта инваријантна у односу на инверзију с центром у тачки која је средина везе између најближих сусједа.
 - Покажите да је структура типа дијаманта неинваријантна у односу на инверзију с центром у произвољним другим тачкама.
- Ако три основна вектора Бравеове тригоналне решетки један са другим образују угао од 90° , тада решетка има вишу симетрију и решетка је проста кубна. Ако су ти углови једнаки 60° или $\arccos(-1/3)$, докажите да тада опет решетка има вишу симетрију од тригоналне и да је решетка или **bcc** или **fcc** типа.
 - Покажите да се проста кубна решетка може представити као тригонална решетка с основним векторима \mathbf{a}_i који један са другим заклапају угао од 60° и са двотачкастим базисом $\pm(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)/4$. (Упоредите те бројеве са подацима за кристалне структуре из Табеле 7.5 у Ашкрофту–Мермину.)
 - Која ће се добити структура структура ако се у тој истој тригоналној решетки као базис узму тачке $\pm(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)/8$?
- Ако су два кристалографска система повезана стрелицама у хијерархији симетрије тада се Бравео решетке из симетричнијег система може добити може учини мање симетричном помоћу бесконачно малог изобличења. Изузетак чини само пар хексагонални–тригонални систем. Одговарајући начини изобличења за све случајеве детаљно су описани у глави 7. књиге Ашкрофт–Мермин, уз изузетак парова хексагонални–ромбички и тригонални–моноклинични систем.
 - Опишите бесконачно мало изобличење које преводи просту хексагоналну решетку у једну од Бравеових решетки из ромбичког система.
 - Који се тип Бравеове ромбичке решетки може добити на тај начин?
 - Опишите бесконачно мало изобличење које преводи тригоналну решетку у једну од Бравеових решетки из моноклиничног система.
 - Који се тип Бравеове моноклиничне решетки може добити на тај начин?
- Погледајте табелу 7.3 *Некубичне кристалографске тачкасте групе* у књизи Ашкрофт–Мермин. Која је од тригоналних тачкастих група из те табеле тачкаста група Бравеове решетки? Другим ријечима, који од карактеристичних објеката посједује симетрију објекта са приложене слике под а)?
 - На слици су под б)–д) стране објекта под а) обојене на четири различита начина који смањују симетрију, тако да би добијени објекти посједовали симетрију осталих тригоналних тачкастих група. Користећи се табелом 7.3 наведите симетрију тачкасте групе сваког објекта.

5. За које од 14 типова Бравеових решетки, осим за **fcc** и **bcc**, инверзна решетка не припада истом типу као директна?
6. (а) Покажите да постоји фамилија равни Бравеове решетке које су ортогоналне на осу ротације n -тог реда када је $n \geq 3$. [Овај закључак важи и за случај $n = 2$, али је у том случају сложеније извођење (погледај задатак 7).]
- (б) Из а) закључите да оса n -тог реда не може постојати у тродимензионалној Бравеовој решетки уколико не постоји у некој дводимензионалној Бравеовој решетки.
- (в) Покажите да ниједна дводимензионална Бравеова решетка не може имати осу ротације n -тог реда за $n = 5$ и $n \geq 7$. [**Упутство.** У почетку докажете да се та оса може изабрати тако да пролази кроз било коју тачку решетке. У даљем доказивању користи се метод „довођења до апсурда“: полазећи од мноштва тачака у које прелази најближи сусјед непокретне тачке при n ротација, конструишите тачку која лежи ближе непокретној тачки него њен „најближи сусјед“. (Примијетимо да случај $n = 5$ захтијева мало другачији приступ од свих осталих.)]
7. (а) Ако Бравеова решетка има раван огледалске симетрије, покажите да тада постоји читава фамилија атомских равних паралелних тој равни. (**Упутство.** На основу разматрања изложеног у књизи Ашкрофт–Мермин испред поглавља *Седам кристалних система* покажите да из постојања равни огледалске симетрије слиједи да постоји огледалска раван која садржи чвор решетке. Послије тога добољно је доказати да та раван садржи још два чвора решетке који са првим не леже на истој правој.)
- (б) Ако Бравеова решетка има осу симетрије другог реда, покажите да тада постоји читава фамилија атомских равних нормалних на ту осу.

4 Фонони I

1. Посматрајте дводимензионалну квадратну решетку која се састоји од једног типа атома масе M . Нека је u_{lm} помјерање атома на пресјеку l -те колоне и m -те врсте, при осциловању које се изводи ортогонално на раван решетке при интеракцији најближих сусједа.

(а) Покажите да је једначина кретања:

$$M \frac{d^2 u_{lm}}{dt^2} = C [(u_{l+1,m} + u_{l-1,m} - 2u_{lm}) + (u_{l,m+1} + u_{l,m-1} - 2u_{lm})].$$

(б) Под претпоставком да је рјешење облика

$$u_{lm} = u(0) \exp\{i(lk_x a + mk_y a - \omega t)\},$$

гдје је a растојање међу најближим сусједима, покажите да је дисперзиона релација дата изразом

$$\omega(\mathbf{k}) = \left\{ \frac{2C}{M} [2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)] \right\}^{1/2}.$$

- (в) Нацртајте зависност $\omega(k)$ када је $k_x = k$, $k_y = 0$ и такође када је $k_x = k_y = k$, за k у првој Брилуеновој зони.
 (г) За $ka \ll 1$ покажите да је:

$$\omega(\mathbf{k}) = \left\{ \frac{Ca^2}{M} (k_x^2 + k_y^2) \right\}^{1/2}.$$

2. Дата је једнодимензионална решетка са наизмјенично постављеним јонима типа А и типа В, чије су масе M_A и M_B , респективно. При томе је знатна само интеракција међу најближим сусједима, са константом интеракције K .

(а) Покажите да закон дисперзије за нормалне моде има сљедећи облик:

$$\omega(\mathbf{k}) = \left\{ \frac{K}{M_A M_B} \left[M_A + M_B \pm (M_A^2 + M_B^2 + 2M_A M_B \cos ka)^{1/2} \right] \right\}^{1/2}. \quad (6)$$

- (б) Дискутујте претходни израз и карактер нормалних мода у случају када је $M_A \gg M_B$.
 (в) Упоредите израз (6) у случају када ја $M_A \approx M_B$ са законом дисперзије за моноатомску решетку.

3. За једнодимензионалну моноатомску решетку са двоатомским базисом закон дисперзије нормалних мода, у случају кад интерагују само најближи сусједи, има облик

$$\omega(\mathbf{k}) = \left[\frac{K + G}{M} \pm \frac{1}{M} (K^2 + G^2 + 2KG \cos ka)^{1/2} \right]^{1/2}, \quad (7)$$

гдје је M маса атома, а K и G константе интеракције. Претпоставимо да су константе K и G веома блиске једна другој, тј. да је

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

- (а) Покажите да се за $\Delta = 0$ закон дисперзије (7) своди на израз за једнодимензионалну линеарну решетку с интеракцијом међу најближим сусједима. [*Предострожност*: Ако је дужина елементарне ћелије за двоатомски ланац једнака a , тада ланац при $K = G$ прелази у моноатомски ланац с константом решетке $a/2$ а Брилуенова зона ($-\pi/a < k < \pi/a$) за двоатомски ланац представља само половину Брилуенове зоне ($-\pi/(a/2) < k < \pi/(a/2)$) за моноатомски ланац. Стога треба показати на који се начин двије гране (акустичка и оптичка) у половини зоне свде на једну грану у пуној зони. Да бисте то демонстрирали на увјерљив начин, потребно је изучити понашање односа амплитуда $\varepsilon_1/\varepsilon_2$ при $\Delta = 0$.]
- (б) Покажите да се у случају када је $0 < |\Delta| \ll K_0$ $\omega(\mathbf{k})$ из (7) разликује од $\omega(\mathbf{k})$ за једнодимензионалну решетку без базиса само члановима реда (Δ/K_0) , осим у случају када је величина $|\pi - ka|$ реда Δ/K_0 . Покажите да је у посљедњем случају та разлика линеарна по Δ/K_0 .
4. Посматрајмо површински центрирану моноатомску Бравеову кубну решетку у којој сваки јон инетерагује само са својим најближим сусједима (има их 12). Претпоставимо да се интеракција између пара сусједа описује парним потенцијалом ϕ који зависи само од растојања r између тих јона.

- (а) Покажите да се учесталости трију нормалних мода с таласним вектором \mathbf{k} описују изразом

$$\omega = \sqrt{\frac{\lambda}{M}},$$

гдје су λ својствене вриједности матрице реда 3×3 :

$$D = \sum_{\mathbf{R}} \sin\left(\frac{1}{2} \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}\right) \left[A \hat{I} + B \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{R}} \right].$$

Сумирање се проводи по 12 најближих сусједа тачке $\mathbf{R} = 0$:

$$\frac{a}{2}(\pm \mathbf{e}_x \pm \mathbf{e}_y), \quad \frac{a}{2}(\pm \mathbf{e}_y \pm \mathbf{e}_z), \quad \frac{a}{2}(\pm \mathbf{e}_z \pm \mathbf{e}_x).$$

Са \hat{I} је означена јединична матрица ($(\hat{I})_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}$), са $\hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{R}}$ дијадни производ јединичних вектора $\hat{\mathbf{R}} = \mathbf{R}/R$ (тј. $(\hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{R}})_{\mu\nu} = (\hat{\mathbf{R}})_{\mu} (\hat{\mathbf{R}})_{\nu}$). Константе A и B одређене су на сљедећи начин:

$$A = \frac{\phi'(d)}{d}, \quad B = 2 \left[\phi''(d) - \frac{\phi'(d)}{d} \right],$$

гдје је d равнотежно растојање између најближих сусједа.

- (б) Када вектор \mathbf{k} лежи на правцу $[100]$ (тј. $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$ у правоуглом координатном систему), покажите да је тада једна од нормалних мода строго лонгитудинална и да има учесталост

$$\omega_L = \sqrt{\frac{8A + 4B}{M}} \sin\left(\frac{1}{4}ka\right),$$

а двије друге строго трансверзалне, дегенерисане и имају учесталост

$$\omega_L = \sqrt{\frac{8A + 2B}{M}} \sin\left(\frac{1}{4}ka\right).$$

- (в) Које су учесталости нормалних мода и поларизације када вектор \mathbf{k} лежи на правцу $[111]$ (тј. $\mathbf{k} = (k, 0, 0)/\sqrt{3}$)?
 (г) Када вектор \mathbf{k} лежи на правцу $[110]$ [$\mathbf{k} = (k, 0, 0)/\sqrt{3}$], покажите да је тада једна од нормалних мода строго лонгитудинална и да има учесталост

$$\omega_L = \sqrt{\frac{8A + 2B}{M} \sin^2\left(\frac{1}{4}\frac{ka}{\sqrt{2}}\right) + \frac{2A + 2B}{M} \sin^2\left(\frac{1}{4}\frac{ka}{\sqrt{2}}\right)},$$

да је друга строго трансверзална, поларизована дуж z -осе [$\varepsilon = (0, 0, 1)$] и да има учесталост

$$\omega_T^{(1)} = \sqrt{\frac{8A + 4B}{M} \sin^2\left(\frac{1}{4}\frac{ka}{\sqrt{2}}\right) + \frac{2A}{M} \sin^2\left(\frac{1}{4}\frac{ka}{\sqrt{2}}\right)},$$

да је трећа строго трансверзална, поларизована нормално на z -осу и да има учесталост

$$\omega_T^{(2)} = \sqrt{\frac{8A + 2B}{M} \sin^2\left(\frac{1}{4}\frac{ka}{\sqrt{2}}\right) + \frac{2A}{M} \sin^2\left(\frac{1}{4}\frac{ka}{\sqrt{2}}\right)}.$$

- (д) Шематски представите дисперзионе криве дуж линија ΓX и $\Gamma K X$ сматрајући да је $A = 0$. (Напомена: Дужина ΓX је $2\pi/a$.)

5. У хармонијској апроксимацији потенцијална енергија линеарне 1D решетке са интеракцијом m најближих сусједа дата је изразом

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

- (а) Покажите да закон дисперзије има облик

$$\omega(\mathbf{k}) = 2 \left[\sum_{m>0} \frac{K_m}{M} \sin^2\left(\frac{mka}{2}\right) \right]^{1/2}. \quad (8)$$

(б) Покажите да је у дуготаласној апроксимацији

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

под условом да сума $\sum_{m>0} m^2 K_m$ конвергира.

(в) Ако је $K_m = 1/m^p$, $1 < m < 3$, и консеквентно сума дивергира, онда у дуготаласној области имамо

$$\omega \propto \sqrt{k^{p-1}}.$$

Упутство: У овом случају није могуће користити у формули 8 развој синуса за мале вриједност таласног вектора k , али је могуће у дуготаласној апроксимацији суму замијенити интегралом.

(г) Посебно, када је $p = 3$ важи: $\omega \propto k \sqrt{|\ln k|}$.

6. У линеарном ланцу на међусобном растојању a честице масе m повезане су са првим сусједима опругом константе еластичности K . На сваку честицу, поред еластичне силе, дјелује дисипативна сила $F_n = -\Gamma \dot{u}_n$, гдје је u_n помјерај n -те честице из свог равнотежног положаја, а \dot{u}_n њена брзина. Како дисипација мијења дисперзиону релацију $\omega = \omega(k)$ и колико је вријеме релаксације добијених нормалних мода? Претпоставити да је $\Gamma \ll K/m$ и продискутовати случајеве $k = \pi/a$ и $k \sim 0$.

7. Посматрајте бесконачни ланац јона масе M наизмјенично наелектрисаних наелектрисањем $q_n = (-1)^n e$, гдје је n индекс јона, а e наелектрисање електрона. Јони међусобно интерагују Кулоновом дугодометном интеракцијом, а најближи сусједи интерагују и хармонијским силама. Константа еластичности је K .

(а) Покажите да дисперзиона релација фонона у оваквом систему има облик

$$\omega(\mathbf{k}) = \omega_0 \left\{ \sin^2 \left(\frac{ka}{2} \right) + \sigma \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^3} [1 - \cos(nka)] \right\}^{1/2},$$

гдје је $\omega_0 = (4K/M)^{1/2}$, а $\sigma = e^2/(Ka^3)$.

(б) Одредите услов који мора задовољити константа σ да би дошло до нестабилности рјешења ($\omega^2 < 0$) на ивици прве Брилуенове зоне ($ka = \pi$). Резултат изразите помоћу Риманове ζ -функције:

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}, \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^s} = \left[\frac{1}{2^{s-1}} - 1 \right] \zeta(s), \quad \zeta(3) \approx 1,202.$$

8. Нађите брзину лонгитудиналних и трансверзалних таласа који се простиру у правцу

(а) $[100]$,

- (б) [110],
(в) [111] у кубном кристалу.

9. Покажите да је топлотни капацитет у Дебајевом моделу на ниским температурама облика:

$$C_V = \frac{12\pi^4}{5} nk_B \left(\frac{T}{T_D} \right)^3$$

гдје је T_D Дебајева температура а n број атома у јединици запремине.

10. Користећи Дебајеву теорију специфичне топлоте кристала, одредите количину топлоте ΔQ потребну да се кристал NaCl масе $m = 20$ g загрије за $\Delta T = 2$ K у случају да је почетна температура:

- (а) $T_1 = T_D$;
(б) $T = 2$ K.

Узети да је Дебајева температура за кухињску со $T_D = 320$ K. Моларна маса кухињске соли је $M_{\text{NaCl}} = 58,443$ g/mol, гасна константа $R = 8,314$ J/(mol · K).

$$\int_0^1 \frac{x^3}{e^x - 1} dx = 0,225, \quad \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$$

11. У једнодимензионалном ланцу N атома распоређени су на једнаком растојању један од другог. Покажите да у Дебајевој апроксимацији топлотни капацитет овог ланца на ниским температурама линеарно зависи од температуре T .
12. Покажите да у Дебајевој апроксимацији топлотни капацитет дводимензионалног кристала на ниским температурама зависи од температуре као T^2 .

5 Фонони II

1. (а) У линеарном хармонијском ланцу са интеракцијама између најближих сусједа познат је закон дисперзије за нормалне моде

$$\omega(k) = \omega_0 \left| \sin \left(\frac{ka}{2} \right) \right|,$$

гдје је ω_0 максимална вриједност фреквенције, која се достиже на граници Брилуенове зоне. Покажите да је у овом случају густина нормалних мода (густина фононског спектра) дата изразом:

$$g(\omega) = \frac{2}{\pi a \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}}.$$

(Сингуларитет на $\omega = \omega_0$ зове се Ван Хофова аномалија).

- (б) У 3D случају Ван Хофова аномалија се састоји у дивергенцији не саме густине нормалних мода, него њених извода. Покажите да нормалне моде у близини максимума $\omega(\mathbf{k})$ дају у густини нормалних мода допринос који је пропорционалан са $\sqrt{|\omega_0 - \omega|}$.
2. (а) Покажите да израз за густину нормалних мода у Дебајевој апроксимацији

$$g(\omega) = \begin{cases} \frac{3\omega^2}{2\pi^2 c^3}, & \omega \leq \omega_D = ck_D, \\ 0, & \omega > \omega_D, \end{cases} \quad (9)$$

представља у области ниских учесталости први члан развоја тачног (у хармонијског апроксимацији) израза за $g(\omega)$, уколико се брзина узима према изразу:

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

- (б) Покажите да се у d -димензионалном кристалу на ниским фреквенцијама густина нормалних мода понаша као ω^{d-1} .
- (в) Из 2б) изведите да се специфична топлота на ниским температурама код хармонијских кристала у d -димензија понаша као $C_V \propto T^d$.
- (г) Ако би фреквенција нормалних мода тежила нули као k^ν , покажите да би се онда специфична топлота понашала као $C_V \propto T^{d/\nu}$.
3. (а) Показати да се прва квантна поправка Дилонг–Птиовог закона може представити у облику

$$\frac{\Delta c_V}{c_V^0} = -\frac{1}{12} \frac{\int g(\omega) \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 d\omega}{\int g(\omega) d\omega}, \quad (10)$$

гдје је c_V^0 Дилонг–Птиова специфична топлота а $g(\omega)$ густина нормалних мода.

- (б) Показати да је следећи по реду члан у високотемпературском развоју c_V/c_V^0 облика

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

- (в) Ако кристал представља Бравеову решетку која се састоји од јона који узајамно интерагују само парном интеракцијом с потенцијалом $\phi(\mathbf{r})$, показати да је тада (у хармонијској апроксимацији) други момент расподјеле учесталости, који улази у формулу (10), дат изразом

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

- (г) Израчунати израз (10) за густину мода дату у задатку 1а).

4. Посматрајмо тродимензионални моноатомски кристал чију структуру описује проста кубна решетка с константом решетке a . Узмимо да интерагују само најближи сусједи са константом интеракције K_s , гдје $s = 1, 2, 3$ пребројава нормалне моде (и трансверзалне и лонгитудиналну). Покажите да зависност густине стања од учесталости у нискофреквентној области фононоског спектра има облик

$$g(\omega) = \frac{\omega^2}{2\pi^2} \sum_s \left(\frac{m}{a^2 K_s}\right)^{3/2}.$$

Шта ће се десити ако је $\omega_i = \omega_{mi} \sin(ka/2)$ за сваку грану у читавом спектралном дијапазону? Нађите израз за $g(\omega)$ и нацртајте график те зависности за случај $v_L = 2v_T$.

5. Посматрајмо изотропан тродимензионалан кристал у којем су дисперзионе релације фонона једнаке за све правце и имају облик $\omega = (2v_0/a) \sin(ka/2) = \omega_m \sin(ka/2)$. Познато је такође да су брзине лонгитудиналних и трансверзалних таласа скоро исте. Покажите да зависност укупне густине стања од учесталости има облик

$$g(\omega) = \frac{6 \arcsin^2(\omega/\omega_m)}{\pi^2 a^2 v_0 [1 - (\omega/\omega_m)^2]^{1/2}},$$

тако да је $g(\omega) \sim \omega^2$ у области спектра гдје нема дисперзије. Нацртајте криву $g(\omega)$ у читавој области ω користећи се добијеном формулом и објасните зашто формула није тачна у горњој области дијапазона.

6. Посматрајмо тродимензионални кристал у којем се густина стања описује изразом (9) у Дебајевом моделу. Покажите да је на температурама испод Дебајеве температуре T_D , највјероватнија енергија фонона једнака $\hbar\omega_p$, гдје је ω_p одређено изразом

$$\exp\left(\frac{\hbar\omega_p}{k_B T}\right) \left(1 - \frac{\hbar\omega_p}{2k_B T}\right) = 1.$$

Одавде слиједи да је највјероватнија таласна дужина фонона $\lambda_p = aT_D/T$.

6 Фермијева површ

1. (а) Нека се у 3D кубном кристалу у јединици запремине налази N атома, од којих сваки има z електрона у валентној љусци. Нађите израз за полупречник Фермијеве сфере (k_F) у апроксимацији слободних електрона.
- (б) За случај 2D квадратне решетке нацртајте Фермијеву површ за атоме са једним, односно два, три и четири валентна електрона. Нацртајте такође Фермијеву површ у првој Брилуеновој зони за случај четири валентна електрона по атому.

2. Нађите енергијске нивое електрона у једнодимензионалној решетки са периодом a , са периодичним потенцијалом који је дат следећим изразом ($U(x+a) = U(x)$):

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & -b \leq x < 0 \\ 0, & 0 < x < a - b. \end{cases}$$

Одредите вриједност енергије на врху доње, и на дну горње енергијске зоне, ако је дато $U_0 = 0,1$, $a = 8$ и $b = 3$, у одговарајућим јединицама.

3. Нека је потенцијал у претходном задатку облика

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \sum_n \delta(x - na),$$

гдје Δ има димензију L^{-1} . Показати да први извод таласне функције има скок у тачкама у којима је аргумент δ -функције једнак 0, односно да је

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{0+} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{0-} \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi(0) \Delta.$$

Рјешење између било којих сусједних δ -функција је облика

$$\psi(x) = A e^{\varkappa x} + B e^{-\varkappa x},$$

гдје је \varkappa реалан или имагинаран број ($\mathcal{E} = -\hbar^2 \varkappa^2 / 2m$), а A и B се могу мијењати од ћелије до ћелије.

- (а) Написати двије једначине за A , B и \varkappa које слиједи из граничних услова за таласну функцију и њен први извод у једној ћелији за стање с редукованим таласним вектором k .
 - (б) Наћи једначину за \varkappa .
4. (а) За слободне електроне густина стања се на Фермијевом нивоу може написати у облику: $g(\mathcal{E}_F) = mk_F / \hbar^2 \pi^2$. Покажите да се општи израз за гуштину стања своди на такав израз ако је $\mathcal{E}_n(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m$ и (сферна) Фермијева површ у цјелости лежи у границама једне елементарне ћелије.

(б) Посматрајмо зону у којој за довољно мале вриједности k важи релација

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} + \frac{k_z^2}{m_z} \right), \quad (11)$$

гдје су m_x , m_y и m_z позитивне константе (што може бити тачно за кристал са ромбичком симетријом). У случају када је вриједност енергије \mathcal{E} довољно блиска вриједности \mathcal{E}_0 , тако да \mathcal{E}_n има наведени облик, покажите да је тада величина $g_n(\mathcal{E})$ пропорционална $(\mathcal{E} - \mathcal{E}_0)^{1/2}$ па стога њен извод тежи бесконачности када се \mathcal{E} примиче дну зоне (Ван Хофова аномалија).

Упутство: За рачунање густине стања пођите од формуле

$$g_n(\mathcal{E}) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{4\pi^3} \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_n(\mathbf{k})).$$

На основу овога, покажите, уколико зависност $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$ остаје квадратна све до \mathcal{E}_F , да се тада $g_n(\mathcal{E}_F)$ може написати као уопштење израза за густину стања слободних електрона ($g_n(\mathcal{E}_F) = 3n/(2\mathcal{E}_F)$), тј. да се може написати у облику

$$g_n(\mathcal{E}_F) = \frac{3}{2} \frac{n}{\mathcal{E}_F - \mathcal{E}_0}, \quad (12)$$

гдје n представља допринос електрона ове зоне укупној густини електрона.

(в) Посматрајмо густину стања у околини седласте тачке, гдје се $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$ може представити у облику

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

гдје су m_x , m_y и m_z позитивне константе. Покажите да за $\mathcal{E} \approx \mathcal{E}_0$ први извод густине стања има облик

$$g'_n(\mathcal{E}) \approx \begin{cases} \text{const}, & \mathcal{E} > \mathcal{E}_0, \\ (\mathcal{E}_0 - \mathcal{E})^{-1/2}, & \mathcal{E} < \mathcal{E}_0. \end{cases} \quad (13)$$

5. За испитивање зонске структуре скоро слободних електрона у близини Брагове равни погодно је мјерити таласни вектор \mathbf{q} од тачке $\mathbf{K}/2$ на Браговој равни, тј. $\mathbf{q} = \mathbf{K}/2 + \mathbf{k}$, и представити \mathbf{k} у виду двије компоненте: паралелне k_{\parallel} и ортогоналне k_{\perp} на \mathbf{K} . У том случају је енергија

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\mathbf{K}/2}^0 + \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \pm \sqrt{4\mathcal{E}_{\mathbf{K}/2}^0 \frac{\hbar^2}{2m} k_{\parallel}^2 + |U_{\mathbf{K}}|^2}. \quad (14)$$

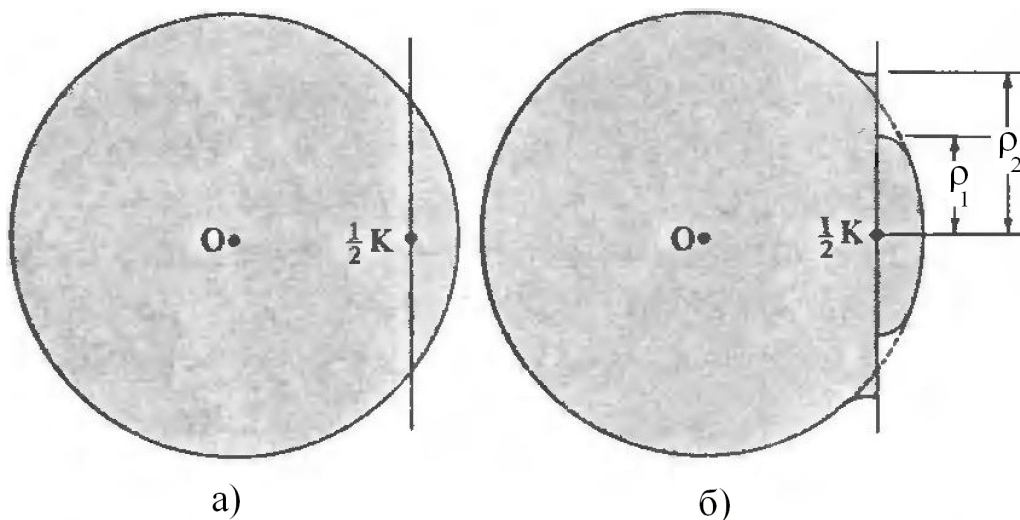
Такође је погодно мјерити Фермијеву енергију $\mathcal{E}_F = \mathcal{E}_{\mathbf{K}/2}^0 - |U_{\mathbf{K}}| + \Delta$, тако да за $\Delta < 0$ Фермијева површ не сијече Брагову раван.

(а) Покажите да за $0 < \Delta < 2|U_{\mathbf{K}}|$, Фермијева површ лежи у доњој енергетској зони и сијече Брагову раван по кругу радијуса $\varrho_1 = (2m\Delta/\hbar^2)^{1/2}$ (слика 1а).

- (б) За $\Delta > 2|U_{\mathbf{K}}|$ Фермијева површ лежи у објема зонама и сијече Брагову раван по двама круговима радијуса ρ_1 и ρ_2 (слика 1б) и да је разлика површина ових кругова

$$\pi(\rho_2^2 - \rho_1^2) = \frac{4\pi m}{\hbar^2} |U_{\mathbf{K}}|.$$

(Површине ових кругова могу се мјерити директно код неких метала помоћу Де Хас – Ван Алфеновог ефекта, и према томе, $|U_{\mathbf{K}}|$ може бити одређено из експеримента.)



Слика 1: а) Фермијева сфера слободних електрона која сијече Брагову раван удаљену $K/2$ од почетне тачке $|U_{\mathbf{K}}| = 0$. б) Деформација Фермијевог сфера слободних електрона у близини Брагове равни при $|U_{\mathbf{K}}| \neq 0$.

6. Ако се вектор \mathbf{q} разложи на двије компоненте – паралелну (q_{\parallel}) и нормалну (q_{\perp}) на вектор \mathbf{K} – тада се израз за енергију може написати у облику

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2}{2m} q_{\perp}^2 + h_{\pm}(q_{\parallel}), \quad (15)$$

гдје

$$h_{\pm}(q_{\parallel}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[q_{\parallel}^2 + \frac{1}{2}(K^2 - 2q_{\parallel}K) \right] \pm \sqrt{\left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2}(K^2 - 2q_{\parallel}K) \right]^2 + |U_{\mathbf{K}}|^2} \quad (16)$$

зависи само од q_{\parallel} . Густина стања може се израчунати на стандардан начин интегралњем по свим таласним векторима који припадају једној те истој елементарној ћелији и користећи се цилиндричним координатним системом са осом z која је оријентисана дуж вектора \mathbf{K} .

- (а) Покажите да последице извршене интеграције по \mathbf{q} резултат за сваку зону има облик

$$g(\mathcal{E}) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) (q_{\parallel}^{\max} - q_{\parallel}^{\min}), \quad (17)$$

гдје за сваку зону q_{\parallel}^{\max} и q_{\parallel}^{\min} представљају рјешења једначине $\mathcal{E} = h_{\pm}(q_{\parallel})$. Покажите да се у граничном случају када $|U_{\mathbf{k}}| \rightarrow 0$ добија познати резултат за слободне електроне.

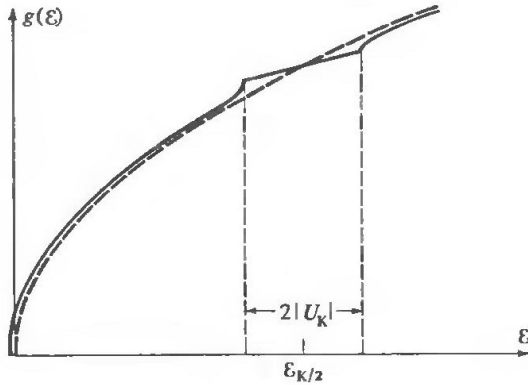
- (б) Када изоенергијска површ (с енергијом \mathcal{E}) пресијеца Брилуенову раван (тј. када је $\mathcal{E}_{\mathbf{k}/2} - |U_{\mathbf{k}}| \leq \mathcal{E} \leq \mathcal{E}_{\mathbf{k}/2} + |U_{\mathbf{k}}|$), покажите да тада за доњу зону важи релација

$$q_{\parallel}^{\min} = -\sqrt{\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2}} + \mathcal{O}(U_{\mathbf{k}}^2) \quad (\mathcal{E} > 0), \quad q_{\parallel}^{\max} = \frac{1}{2} K. \quad (18)$$

- (в) Покажите да за горњу зону формулу (17) треба схватати у том смислу да она даје густину стања

$$g_+(\mathcal{E}) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \left(q_{\parallel}^{\max} - \frac{1}{2} K \right) \quad \text{при } \mathcal{E} > \mathcal{E}_{\mathbf{k}/2} + |U_{\mathbf{k}}|. \quad (19)$$

- (г) Покажите да $dg/d\mathcal{E}$ има сингуларитет у тачкама $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\mathbf{k}/2} \pm |U_{\mathbf{k}}|$ па стога густина стања и изгледа као што је показано на слици 2.

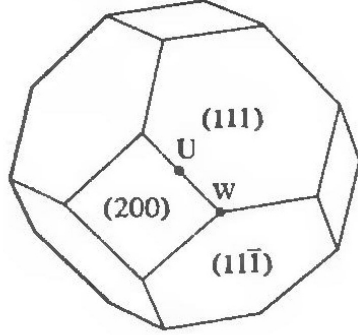


Слика 2: Густина стања у апроксимацији двију зона. Испрекидана линија односи се на слободне електроне. Пуна линија приказује поправку другог реда далеко од Брагових равни.

7. Посматрајмо тачку W ($\mathbf{k}_W = (2\pi/a)(1, 1/2, 0)$) на површини Брилуенове зоне запремински центриране структуре (слика 3). У тој тачки пресијецају се три Брагове равни: $(2, 0, 0)$, $(1, 1, 1)$ и $(1, 1, \bar{1})$. Стога су енергије слободних електрона

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_1^0 &= \frac{\hbar^2}{2m} k^2, \\ \mathcal{E}_2^0 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\mathbf{k} - \frac{2\pi}{a}(1, 1, 1) \right)^2, \\ \mathcal{E}_3^0 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\mathbf{k} - \frac{2\pi}{a}(1, 1, \bar{1}) \right)^2, \\ \mathcal{E}_4^0 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\mathbf{k} - \frac{2\pi}{a}(2, 0, 0) \right)^2 \end{aligned} \quad (20)$$

у тачки $\mathbf{k} = \mathbf{k}_W$ дегенерисане и једнаке $\mathcal{E}_W = \hbar^2 \mathbf{k}_W^2 / 2m$.



Слика 3: Прва Брилуенова зона за површински центрирану кубну решетку.

- (а) Покажите да су у области k -простора у близини тачке W енергије нивоа у првом реду теорије пертурбације одређене рјешењем једначине

$$\begin{vmatrix} \mathcal{E}_1^0 - \mathcal{E} & U_1 & U_1 & U_2 \\ U_1 & \mathcal{E}_2^0 - \mathcal{E} & U_2 & U_1 \\ U_1 & U_2 & \mathcal{E}_3^0 - \mathcal{E} & U_1 \\ U_2 & U_1 & U_1 & \mathcal{E}_4^0 - \mathcal{E} \end{vmatrix} = 0,$$

гдје је $U_2 = U_{200}$, $U_1 = U_{111} = U_{11\bar{1}}$. Покажите да у тачки W та једначина има сљедеће корјенове:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_W - U_2 \quad (\text{двоструки}), \quad \mathcal{E} = \mathcal{E}_W + U_2 \pm 2U_1. \quad (21)$$

- (б) Користећи се аналогним методом покажите да у тачки U ,

$$\mathbf{k}_U = \frac{2\pi}{a} \left(1, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \right),$$

енергија има сљедеће вриједности:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_U - U_2, \quad \mathcal{E} = \mathcal{E}_U - \frac{1}{2}U_2 \pm \frac{1}{2}\sqrt{U_2^2 + 8U_1^2}, \quad (22)$$

гдје је $\mathcal{E}_U = \hbar^2 \mathbf{k}_U^2 / 2m$.

8. Наћи израз за имагинарни дио таласног вектора у забрањеној зони на граници прве Брилуенове зоне претпостављајући да се таласна функција може представити као линерана комбинација двају равних таласа. Представити резултат као функцију $\Im(k)$ у зависности од σ , гдје је σ енергија у односу на центар енергијског процјепца. Показати да за мале вриједности σ и мале вриједности $\Im(k)$ важи

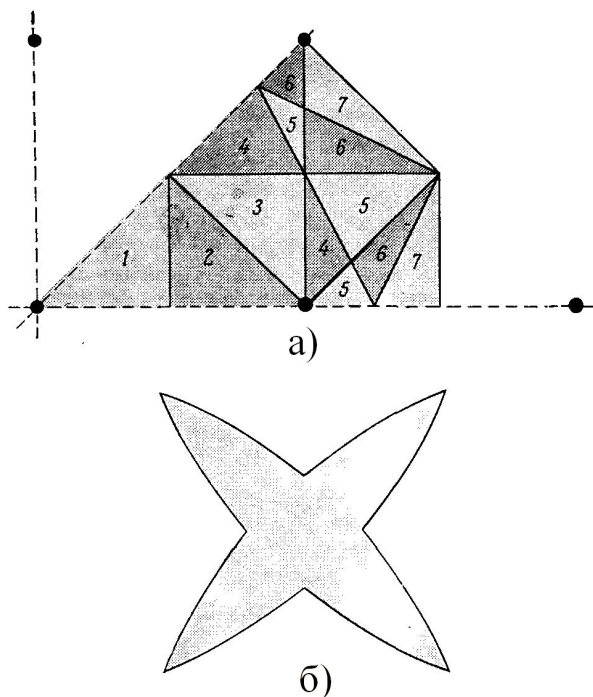
$$\frac{\hbar^2}{2m} [\Im(k)]^2 \approx \frac{U^2 - \sigma^2}{\hbar^2 G^2 / 2m}.$$

9. Нека тачка чији положај описује вектор \mathbf{k} представља чвор инверзне решетке. Претпоставимо да су око сваке тачке \mathbf{K} инверзне решетке, осим почетне, описане сфере полупречника k . Ако се тачка \mathbf{k} налази унутар $n - 1$ сфера и не

припада површи ниједне од сфера, покажите да тада она лежи унутар n -те Брилуенове зоне. Ако се тачка k налази унутар $n - 1$ сфера и, осим тога, лежи на површи m других сфера, покажите да је тада та тачка заједничка граница n -те, $(n + 1)$ -прве, \dots , $(n + m)$ -те Брилуенове зоне.

10. Размотримо дводимензионалну квадратну решетку с константом решетке a .

- (а) Изразите у јединицама $2\pi/a$ полупречник круга у дводимензионалном k -простору који садржи (круг) m слободних електрона по елементарној ћелији. Саставите табелу у којој ће бити указано које су од првих седам зона квадратне решетке (слика 4 под а)) попуњене у цјелини, које дјелимично, а које су потпуно празне, за $m = 1, 2, \dots, 12$. Провјерите тврђење: за $m \leq 12$ сви попуњени нивои потпуно леже унутар првих седам зона, а за $m \geq 13$ почињу да се попуњавају осма и више зоне.
- (б) Нацртајте у одговарајућим елементарним ћелијама све „шупљине” Фермијеве површи за случајеве $m = 1, 2, \dots, 7$. На примјер, површ треће зоне за $m = 4$ може бити приказана као на слици 4 под б).



Слика 4: а) Првих седам Брилуенових зона за дводимензионалну квадратну решетку. Због симетрије решетке довољно је нацртати само $1/8$ фигуре. б) Фермијева површ у трећој зони за квадратну решетку са 4 електрона у елементарној ћелији. Димензије су знатно увећане.

7 Ефективна маса

1. Посматрајмо једнодимензионални кристал с константом решетке a и енергијом електрона

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right).$$

- (а) Нацртајте енергијску зону.
 (б) Нађите ефективну масу на дну и на врху зоне разлажући E по k у околини тих тачака
 (в) Одредите ефективну инертну масу електрона из једначине

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{m_i} F,$$

гдје је F приложена сила. Нацртајте зависност m_i од k .

- (г) Нађите ефективну масу ако је брзина електрона дата изразом

$$v = \frac{1}{m_v} \hbar k$$

и нацртајте је. (Ова ефективна маса улази у израз за проводљивост.)

- (д) Број стања по јединици дужине кристала у интервалу таласних вектора dk је $dk/2\pi$. Изразите густину стања по јединици енергије преко k и масе m_d , која се дефинише преко густине стања. (Формула мора давати правилан израз за случај слободних електрона у једној димензији, ако се умјесто m_d стави m .)

2. Полазећи од израза

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_s - \beta - \sum_{\mathbf{R}} \gamma(\mathbf{R}) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}),$$

гдје сума иде само по оним векторима \mathbf{R} из Бравеове решетке који повезују дату тачку (координатни почетак) са њеним најближим сусједима,

- (а) Нађите израз за енергију s -зоне у случају **fcc** решетке.
 (б) Нађите на шта се овај израз своди када се посматрају главни правци симетрије у првој Брилуеновој зони:

$$\text{ГХ: } k_y = k_z = 0, \quad k_x = \mu \frac{2\pi}{a}, \quad 0 \leq \mu \leq 1;$$

$$\text{ГЛ: } k_x = k_y = k_z = \mu \frac{2\pi}{a}, \quad 0 \leq \mu \leq \frac{1}{2};$$

$$\text{ГК: } k_z = 0, \quad k_x = k_y = \mu \frac{2\pi}{a}, \quad 0 \leq \mu \leq \frac{3}{4};$$

$$\text{ГW: } k_z = 0, \quad k_x = \mu \frac{2\pi}{a}, \quad k_y = \frac{1}{2} \mu \frac{2\pi}{a}, \quad 0 \leq \mu \leq 1.$$

3. Посматрајмо једнодимензионални кристал у којем енергија зависи од таласног вектора по закону

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 + (\mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_1) \sin^2(ak_x/2)$$

Поставите у ту зону један електрон сматрајући да се он не расијава. Посматрајте понашање ефективне масе електрона, његову брзину и положај у реалном простору под дјеловањем константног електричног поља, сматрајући да се Брагова рефлексија одвија на границама зона. Ако је $a = 1 \text{ \AA}$, колико времена мора дјеловати поље јачине $E = 100 \text{ V/m}$ да би електрон извршио једну пуну осцилацију у простору? Ако је ширина зоне $\Delta\mathcal{E} = 1 \text{ eV}$, који је дијапазон растојања која електрон пређе током једне осцилације?

4. Посматрајмо електрон из претходног задатка. Опишите понашање електрона у синусно модулисаном електричном пољу. Најприје поставите електрон у дно зоне, а затим посматрајте дјеловање синусног поља на електрон смјештен у средњу по енергији тачку зоне.
5. Ако није хомогено магнетно поље у металном узорку који се користи у Де Хаас – Ван Алфеновом експерименту, онда ће се та нехомогеност поља одразити на густини стања. Различите области у кристалу имаће максимум густине $g(\mathcal{E})$ за различите вриједности поља и, као последица, суцептибилност узорка (која сумира доприносе из свих области) може изгубити свој осцилаторни карактер. Да се то не би догодило, произвољна просторна варијација поља δH може изазвати варијације енергије $\delta\mathcal{E}$ које су мале у поређењу са разликом $\mathcal{E}_{\nu+1} - \mathcal{E}_\nu$ у случају екстремне орбите. Користећи се чињеницом да је $\partial A/\partial k_z = 0$ за екстремну орбиту, нађите промјене енергије изазване пољем, тј. $\partial\mathcal{E}_\nu(k_z)/\partial H$. Одатле закључите да би се осцилаторни карактер очувао, нехомогеност поља мора задовољити услов

$$\frac{\Delta H}{H} < \frac{\Delta A}{A},$$

гдје је $A = 2\pi eH/\hbar c$.

6. Размотрите задатак о екстремној циклотронској орбити у $k_x k_y$ -равни Фермијеве површи за анизотропно тврдо тијело. Израз за Фермијеву енергију је облика $\mathcal{E} = \alpha k_x^2 + \beta k_y^2$. Нека на тијело дјелује магнетно поље индукције B_z . Нађите брзину којом се мијења \mathbf{k} при кретању по орбити, ако се α и β међусобно разликују. Нађите орбиту коју електрон описује у реалном простору за дату ситуацију
7. (а) Хамилтонијан који описује N електрона у металу може се написати у облику

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - Ze^2 \sum_{\mathbf{R}} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (23)$$

гдје члан са негативном потенцијалном енергијом (у даљем тексту: $U^{\text{ion}}(\mathbf{r})$) описује привлачни електростатички потенцијал језгара учвршћених у тачкама \mathbf{R} Бравеове решетке, а последњи члан описује интеракцију међу електронима. Може се узети да такав N -честични систем описује таласна функција

$$\Psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_N s_N) = \psi_1(\mathbf{r}_1 s_1) \psi_2(\mathbf{r}_2 s_2) \cdots \psi_N(\mathbf{r}_N s_N), \quad (24)$$

гдје функције ψ_i чине скуп од N ортонормираних једноелектронских функција. Покажите да је очекивана вриједност хамилтонијана (23) у стању (24) дата изразом:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle = & \sum_i \int d\mathbf{r} \psi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U^{ion}(\mathbf{r}) \right) \psi_i(\mathbf{r}) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \left[\frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\psi_i(\mathbf{r})|^2 |\psi_j(\mathbf{r}')|^2 \right]. \end{aligned} \quad (25)$$

Све функције ψ_i су нормиране на 1, тј. $\int d\mathbf{r} |\psi_i(\mathbf{r})|^2 = 1$.

- (б) Узимајући у обзир услов нормирања сваке функције ψ_i , помоћу Лагранжевих множилаца \mathcal{E}_i и разматрајући $\delta\psi_i$ и $\delta\psi_i^*$ као независне варијације, покажите да из услова стационарности,

$$\delta_i \langle H \rangle = 0,$$

слиједи Хартријеве једначине:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_i(\mathbf{r}) + \left[e^2 \sum_j \int d\mathbf{r}' |\psi_j(\mathbf{r}')|^2 \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \mathcal{E}_i \psi_i(\mathbf{r}).$$

8. (а) Полазећи од интегралне репрезентације Диракове δ -функције

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

као и чињенице да Кулонов потенцијал $\phi(\mathbf{r}) = -e/r$ задовољава Поасонову једначину

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

покажите да се парни потенцијал електрон-електронске интеракције $V(\mathbf{r}) = -e\phi(\mathbf{r}) = e^2/r$ може представити у облику

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

гдје је Фуријеов лик $V(\mathbf{k})$ облика

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

- (б) Покажите да Фуријеов лик екраниране Кулонове интеракције

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{e}{r} \exp(-k_0 r)$$

има сљедећи облик:

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

(в) Полазећи од резултата под 8б), покажите да $V_s(\mathbf{r})$ задовољава једначину

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

9. Покажите да је

$$\int_{k' < k_F} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} = \frac{2e^2}{\pi} k_F F\left(\frac{k}{k_F}\right),$$

гдје је

$$F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|. \quad (26)$$

10. Покажите да је енергија електрона у гасу слободних електрона дата релацијом:

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{2e^2 k_F}{\pi} F\left(\frac{k}{k_F}\right), \quad (27)$$

гдје је функција $F(x)$ одређена формулом (26).

11. Покажите да је у околини дна зоне ($k = 0$) Хартри–Фокова једноелектронска енергија (27) квадратична по k :

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (28)$$

гдје је m^* ефективна маса електрона дата формулом

$$\frac{m^*}{m} = \frac{1}{1 + 0,22(r_s/a_0)}. \quad (29)$$

Овдје је $a_0 = \hbar^2/m_e^2 = 5,29$ нм Боров радијус, а $r_s = (3/4\pi n)^{1/2}$, гдје је n концентрација електрона.

8 Магнетизам

- (а) Посматрајте систем са два енергијска нивоа који се међусобно разликују за $k_B\Delta$. Та разлика може да се повећа под утицајем магнетног поља или на неки други начин. Покажите да је специфична топлота по честици за овај систем дата изразом

$$C = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{\Delta} = k_B \frac{(\Delta/T)^2 e^{-\Delta/T}}{(1 + e^{-\Delta/T})^2}.$$

- (б) Покажите да је

$$C \approx k_B (\Delta/2T)^2 + \dots,$$

када је испуњен услов $T \gg \Delta$.

- Покажите да је у случају феромагнетика са простом кубном решетком једначина кретања за x , односно за y -компоненту спина облика:

$$\frac{dS^x}{dt} = \frac{2JS}{\hbar} \left(6S^y_{\rho} - \sum_{\rho} S^y_{\rho+\delta} \right); \quad \frac{dS^y}{dt} = \frac{2JS}{\hbar} \left(6S^x_{\rho} - \sum_{\rho} S^x_{\rho+\delta} \right),$$

гдје је ρ радијус-вектор централног атома који је са својим најближим сусједима повезан са шест вектора δ . Полазећи од ових једначина изведите дисперзиони закон за магноне у овом случају.

- Користећи се дисперзионим законом из претходног задатка, израчунајте топлотни капацитет тродимензионалног феромагнетика на ниским температурама ($k_B T \ll J$). **Напомена:** На ниским температурама можемо писати $\omega_k = Ak^2$, гдје је A нека константа.
- Користећи се Ланжвеновом теоријом парамагнетизма показати да су при разлагању у ред диференцијалне сусцептибилности прва два члана облика

$$\chi = \mu_0 \frac{dM}{dB} = \mu_0 \frac{N\mu^2}{3k_B T} \left[1 - \frac{1}{5} \left(\frac{\mu B}{k_B T} \right)^2 + \dots \right].$$

- Посматрајмо проводне електроне на апсолутној нули и нека им је концентрација једнака N . Нека су

$$N_+ = \frac{1}{2} N(1 + \xi) \text{ и} \\ N_- = \frac{1}{2} N(1 - \xi)$$

концентрације спинова \uparrow и \downarrow .

- (а) Показати да је у магнетном пољу B укупна енергија спинова оријентисаних \uparrow и који заузимају одговарајућу енергијску подзону одређена изразом

$$E_+ = E_0(1 + \xi)^{5/3} - \frac{1}{2} N\mu B(1 + \xi),$$

гдје је $E_0 = \frac{3}{10} N\mathcal{E}_F$, а \mathcal{E}_F је Фермијева енергија ван магнетног поља. Наћи аналоган израз за E_- .

(б) Претпостављајући да је $\xi \ll 1$, наћи минимум $E = E_+ + E_-$ по ξ и равнотежну вриједност ξ која одговара том минимуму. Показати да се магнетизација изражава формулом $M = 3N\mu^2 B/2\mathcal{E}_F$.

6. Ефект измјенске интеракције у систему проводних електрона може се приближно описати претпостављајући да је енергија интеракције електрона са паралелним спиновима ($\uparrow\uparrow$ или $\downarrow\downarrow$) једнака $-V_0$, гдје је V_0 позитивна величина, односно једнака нули у случају када су спинови електрона антипаралелни ($\uparrow\downarrow$).

(а) Покажите да је укупна енергија подзоне спинова који су оријентисани „горе” (\uparrow) дата изразом

$$E_+ = E_0(1 + \xi)^{5/3} - \frac{1}{8}V_0N^2(1 + \xi)^2 - \frac{1}{2}N\mu H(1 + \xi),$$

и нађите аналогни израз за E_- . Параметар ξ представља релативну разлику броја електрона са спином „горе” (\uparrow) и спином „доље” (\downarrow).

(б) Нађите минимум укупне енергије и равнотежну вриједност параметра ξ који томе ξ одговара у граничном случају када је $\xi \ll 1$. Покажите да је магнетизација у том случају дата овим изразом:

$$M = 3N\mu^2 H \left(2\mathcal{E}_F - \frac{3}{2}V_0N \right)^{-1}.$$

(в) Показати да је при $H = 0$ укупна енергија за $\xi = 0$ нестабилна ако је $V > 4\mathcal{E}_F/3N$. У том случају феромагнетно стање ($\xi \neq 0$) има мању енергију него парамагнетно стање. Због претпоставке $\xi \ll 1$ горе описани услови су довољни за постојање феромагнетизма, али нису и потребни услови.

7. У теорији феромагнетизма која се заснива на моделу колективних електрона претпоставља се да се енергија електрона у непопуњеној $3d$ -љусци може представити у облику

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm N_W M \mu_B,$$

гдје је m^* ефективна маса, N_W константа молекуларног поља. У претходном изразу први члан је кинетичка енергија електрона, а други енергија измјенске интеракције у апроксимацији молекуларног поља. Наћи израз за магнетизацију на температури $T = 0$ K. Наћи услов за постојање спонтане магнетизације ($M \neq 0$) на $T = 0$ K, а такође и услов када је $M = N\mu_B$.

8. Нека се систем састоји од двије честице чији су положаји строго фиксирани. Свака честица има константан магнетни моменат једнак μ ; магнетни моменат може бити оријентисан само у позитивном или само у негативном смјеру z -осе. Међу честицама дјелују само силе измјенске интеракције, тако да је укупна енергија система једнака $+V$ када су моменти паралелни, или $-V$ када су моменти антипаралелни ($\uparrow\downarrow$), при чему је $V = \text{const}$. На систем дјелује спољашње магнетно поље оријентисано дуж z -осе.

Да бисмо објаснили магнетно понашање неког чврстог магнетика, узећемо као теоријски модел ансамбл горе описаних система, тј. магнетних честица. Нека

у јединицној запремини има N таквих система. Претпоставимо да системи тог ансамбла не интерагују међусобно, нити с околином, јер се занемарује мала интеракција усљед које се успоставља термодинамичка равнотежа.

Извести тачну формулу за магнетизацију M таквог магнетика који се на произвољној температури T у пољу H налази у стању термодинамичке равнотеже. У слиједећим случајевима наћи приближне изразе за магнетизацију и продискутовати их:

- (а) $|\mu H| \ll kT, \quad |V| \ll kT;$
- (б) $|\mu H| \ll kT, \quad |V| \gg kT, \quad V < 0;$
- (в) $|\mu H| \ll kT, \quad |V| \gg kT, \quad V > 0;$
- (г) $|\mu H| \gg kT \gg |V|;$
- (д) $kT \ll |\mu H| \ll |V|, \quad |V| < 0;$
- (е) $kT \ll |\mu H| \ll |V|, \quad |V| > 0.$

9. Покажите да је на температурама много мањим од Фермијеве температурски зависна поправка Паулијеве сусцептибилности дата изразом

$$\chi(T) = \chi(0) \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left[\left(\frac{g'}{g} \right)^2 - \frac{g''}{g} \right] \right\},$$

гдје је g , g' и g'' густина стања и њени изводи на Фермијевој површи. Покажите да се за слободне електроне та формула своди на облик

$$\chi(T) = \chi(0) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\mathcal{E}_F} \right)^2 \right].$$

10. Покажите да је за идеалан парамагнетик, чија слободна енергија има облик $F = \Phi(\beta H)/\beta$, гдје је $\beta = 1/k_B T$, а k_B Болцманова константа, специфична топлота повезана са сусцептибилношћу релацијом

$$c_H = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_H = \frac{H^2 \chi}{T},$$

а у случају када важи Киријев закон релацијом

$$c_H = \frac{1}{3} \frac{N}{V} k_B T J(J+1) \left(\frac{g \mu_B H}{k_B T} \right)^2.$$

Оцјењујући допринос решетке специфичној топлоти користећи се Дебајевом апроксимацијом на ниским температурама, покажите да допринос решетке постаје мањи од спинског доприноса на температури реда

$$T_0 \approx \left(\frac{N}{N_i} \right)^{1/5} \left(\frac{g \mu_B H}{k_B \Theta_D} \right)^{2/5} \Theta_D,$$

гдје је N_i укупан број јона, а N број парамагнетних јона. Колика је типична вриједност $g \mu_B H / k_B \Theta_D$ у пољу $H = 10^4$ Gs?

9 Магнони

1. Изведите дисперзиони закон за магноне у случају једнодимензионалног антиферромагнетног ланца.
2. Посматрајте магнетну структуру која се састоји од двије врсте јона смјештених у двије подрешетке које улазе једна у другу. Нека су константе интеракције спинова у подрешетки A , подрешетки B и између подрешетки J_A , J_B и J_{AB} , респективно.

- (а) Примјењујући теорију средњег поља на овај случај, покажите да су магнетизације подрешетки дате следећим изразима:

$$M_A = M_0 \left(\frac{H + \lambda_A M_A + \lambda_{AB} M_B}{T} \right),$$

$$M_B = M_0 \left(\frac{H + \lambda_B M_B + \lambda_{AB} M_A}{T} \right),$$

гдје је $M_0(x)$ ознака за рјешење у случају система без интеракције.

- (б) Користећи се овим једначинама покажите да је суцептибилност изнад T_C дата односом два полинома од којих је један првог, а један другог реда по T .
- (в) Покажите да израз за суцептибилност поново добија облик Киријевог закона када су јони двију подрешетки исти и интерагују ферромагнетним везама ($\lambda_A = \lambda_B > 0$, $\lambda_{AB} > 0$).
- (г) Покажите да када су јони исти и важи да је $\lambda_A = \lambda_B > 0$, али је веза међу подрешеткама антиферромагнетна ($\lambda_{AB} < 0$), температура прелаза T_C у Киријевог закону постаје негативна.
3. За мале вриједности аргумента x Брилуенова се функција $B_J(x)$ може приказати као

$$B_J(x) = Ax - Bx^2 + \dots,$$

гдје су A и B позитивне константе. Користећи се овим развојем, нађите критичне експоненте β и δ , који описују зависност магнетизације од температуре у нултом пољу, односно зависност од поља при $T = T_C$, респективно.

4. Покажите да се на температурама знатно нижим од T_C у оквиру теорије молекуларног поља добија магнетизација ферромагнетика која се разликује од магнетизације засићења за величину која експоненцијално зависи од $-1/T$.

10 Електрицитет

1. Нека је у плазми при ниском притиску концентрација слободних електрона n . Покажите да је фреквентна зависност диелектричне пропустљивости дата формулом

$$\varepsilon_r = 1 - \frac{n e^2}{m \omega^2 \varepsilon_0}.$$

Посматрајте сада простирање електромагнетног зрачења различитих фреквенција кроз ту плазму. Применијите добијени резултат на случај металног натријума и одредите вриједност фреквенције на којој ε_r постаје једнако нули. (Експериментално одређена вриједност износи $\lambda \sim 2000 \text{ \AA}$).

2. Полазећи од претпоставке о анхармонијском осциловању честица у кристалној решетки, објасните појаву пироелектричног ефекта.
3. Сви молекули диелектрика имају диполни моменат истог интензитета p . Кад се диелектрик нађе у електричном пољу јачине E , долази до оријентационе поларизације. У изразу за специфичну топлоту се стога појављује један члан који је узрокован том поларизацијом. Наћи експлицитан облик тог члана.
4. Полазећи од Ландауове теорије покажите да је поларизација засићења на $T = T_C$, у тачки прелаза првог реда, дата изразом

$$P_s^2(T_C) = \frac{3|g_4|}{4g_6},$$

а затим користећи се тим резултатом покажите да је $T_C = T_0 + \frac{3g_4^2}{16\gamma g_6}$. (У Ландауовој теорији слободна енергија је дата изразом:

$$F(P, T, E) = -EP + g_0 + \frac{1}{2}\gamma(T - T_0)P^2 + \frac{1}{4}g_4P^4 + \frac{1}{6}g_6P^6 + \dots)$$

5. Ако се у диелектрику при промјени температуре мијења и број честица у јединичној запремини, тада постоји температура на којој диелектрична пропустљивост тежи бесконачности и изнад које важи Кири–Вајсов закон. Доказати. (Претпоставити да сви остали параметри диелектрика не зависе од температуре.)
6. Потенцијал у тачки \mathbf{r} који потиче од дипола који се налази у тачки \mathbf{r}' , износи

$$\phi = -\mathbf{p} \cdot \nabla \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

Користећи ограничења која намећу услови кубне симетрије на тензор

$$\sum_{\mathbf{r}'} \nabla_\mu \nabla_\nu \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

и имајући у виду да је $\nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = 0$, $\mathbf{r} \neq 0$, покажите да је поље $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ једнако нули када распоред тачака \mathbf{r}' у којима се налазе диполи има кубну симетрију у односу на тачку \mathbf{r} .

11 Суперпроводљивост

1. Посматрајмо бесконачну суперпроводну плочу нормалну на y -осу. Нека је дебелина плоче $2d$ и нека се координатни почетак налази у средини плоче. Плоча се налази у хомогеном магнетном пољу H_0 које је оријентисано дуж z -осе.

- (а) Користећи се Лондоновим и Максвеловим једначинама покажите да је у суперпроводнику

$$\mathbf{B} = B(y)\mathbf{e}_z, \quad B(y) = H_0 \frac{\text{ch}(y/\lambda)}{\text{ch}(d/\lambda)}.$$

- (б) Покажите да је у равнотежном случају густина дијамагнетне струје једнака

$$\mathbf{j} = j(y)\mathbf{e}_x, \quad j(y) = \frac{c}{4\pi\lambda} \frac{\text{sh}(y/\lambda)}{\text{ch}(d/\lambda)}.$$

- (в) Магнетизација у некој тачки унутар плоче једнака је $\mathbf{M} = (\mathbf{B}(y) - \mathbf{H}_0)/4\pi$. Покажите да је средња магнетизација (магнетизација усредњена по дебелини плоче) једнака

$$\overline{M} = -\frac{H_0}{4\pi} \left(1 - \frac{\lambda}{d} \text{th} \frac{d}{\lambda} \right).$$

- (г) Покажите да је у случају $d \ll \lambda$

$$M(x) = -\frac{H_0}{\pi\lambda^2} (d^2 - y^2).$$

- (д) Нађите израз за суспенцибилност у случају дебеле ($d \gg \lambda$) и у случају танке ($d \ll \lambda$) плоче.

2. (а) Користећи се резултатима (1г) покажите да је густина енергије суперпроводног филма дебелине $2d \ll \lambda$ у спољашњем магнетном пољу H_0 на температури $T = 0 \text{ K}$ дата формулом

$$U_S(y, H_0) = U_S(0) + \frac{H_0^2}{8\pi\lambda^2} (d^2 - y^2).$$

- (б) Покажите да је магнетни допринос у U_S усредњен по дебелини филма једнак

$$\frac{H_0^2}{24\pi\lambda} \left(\frac{d}{\lambda} \right)^2.$$

- (в) Ако узмемо у обзир само магнетни допринос у U_S , покажите да је у том случају критично поље танког филма пропорционално $(\lambda/d)H_C$, гдје је H_C критично поље масивног суперпроводника.

3. Струја јачине I тече кроз цилиндричну суперпроводљиву жицу полупречника r . Ако је поље које генерише та струја изван жице а у непосредној близини површи жице једнако H_C , тада је

$$I = 5rH_C.$$

Доказати.

4. У оквиру Гинзбург–Ландауове теорије нађите израз за критичну струју танке жице.
5. Дискутовати равнотежну криву магнетизације за образац у облику ротационог елипсоида у пољу H_0 које је паралелно оси елипсоида. Образац је од суперпроводник друге врсте.
6. Израчунати Гибсов потенцијал за ламинарну структуру. Упоредити резултат са вортексним стањем.
7. Размотрити структуру вортекса који се формира у танком филму у магнетном пољу нормалном на филм.
8. Испитати расијање спорих неутрона на периодичној вортексној решетки у суперпроводнику.
9. Размотрити флукутације потенцијала спаривања Δ у нормалној фази $T > T_c$ ван поља.
10. Израчунати енергију NS –границе за суперпроводник првог реда у граничном случају када се може занемарити дубина продирања поља.
11. Покажите да важи релација

$$H_{C2} = \sqrt{2} \frac{\lambda}{\xi} H_C(T),$$

гдје је H_{C2} горње критично поље, H_C термодинамичко критично поље, λ Лондонова дубина продирања, а ξ кохеренциона дужина.

12. Израчунати средњи квадрат радијуса ϱ Куперовог пара.
13. У желе моделу оцијенити величину $N(0)V$ за просте метале.
14. Посматрајмо пар електрона у синглетном стању који је описан симетричном просторном таласном функцијом

$$\phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \chi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}. \quad (30)$$

У импулсној репрезентацији Шредингера једначина има облик

$$\left(E - 2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \chi(\mathbf{k}) = \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \chi(\mathbf{k}'). \quad (31)$$

Претпоставимо да ови електрони међусобно интереагују у присуству дегенерисаног електронског гаса са којим не интереагују, али са којим су повезани Паулијевим принципом забране, тј. електронски нивои са $k < k_F$ су забрањени су за сваки од та два електрона. Одатле слиједи да је

$$\chi(\mathbf{k}) = 0, \quad k < k_F. \quad (32)$$

Нека интеракција међу тим спареним електронима (која одговара привлачењу) има сљедећи облик:

$$V(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \equiv \begin{cases} -V, & \mathcal{E}_F \leq \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} \leq \mathcal{E}_F + \hbar\omega \text{ за } i = 1, 2, \\ 0, & \text{у свим другим случајевима.} \end{cases} \quad (33)$$

Тражићемо рјешења Шредингерове једначине (31) која одговарају везаним стањима и задовољавају услов (32). Пошто разматрамо само једноелектронске нивое, чије енергије када нема привлачења превазилазе $2\mathcal{E}_F$, везана стања имају енергију $E < 2\mathcal{E}_F$, а енергија везе је једнака

$$\Delta = 2\mathcal{E}_F - E. \quad (34)$$

(а) Покажите да везана стања постоје ако је задовољена једначина

$$1 = V \int_{\mathcal{E}_F}^{\mathcal{E}_F + \hbar\omega} \frac{N(\mathcal{E}) d\mathcal{E}}{2\mathcal{E} - E}, \quad (35)$$

гдје је $N(\mathcal{E})$ густина једноелектронских стања која одговарају датом спину.

- (б) Покажите да једначина (35) има рјешење са енергијом $E < 2\mathcal{E}$ за ма колико мало V ако је $N(\mathcal{E}_F) \neq 0$.
- (в) Претпостављајући да се $N(\mathcal{E})$ у области $\mathcal{E}_F < \mathcal{E} < \mathcal{E}_F + \hbar\omega$ скоро не разликује од $N(\mathcal{E}_F)$, покажите да је енергија везе одређена изразом

$$\Delta = 2\hbar\omega \frac{e^{-2/N(\mathcal{E}_F)V}}{1 - e^{-2/N(\mathcal{E}_F)V}},$$

односно у апроксимацији слабе везе

$$\Delta = 2\hbar\omega e^{-2/N(\mathcal{E}_F)V}.$$

15. Џозефсонов контакт SS' серијски је укључен у коло које се састоји од термогеног отпора R и извора напона U . Наћи струју која тече кроз коло.

16. Полазећи од једначина

$$\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (N/2)} = -2\mu$$

и

$$J = J_0 \sin(\varphi_2 - \varphi_1)$$

израчунати рад који је потребно уложити да настане разлика фаза $\Delta\varphi$ између двају слабо везаних суперпроводника. Познато је да је рад који се изврши над системом у изотермским условима једнак промјени слободне енергије. На основу тога наћи равнотежну разлику фаза између двају суперпроводника.