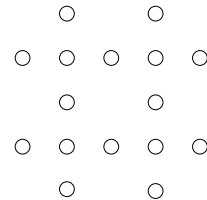
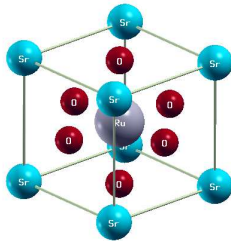


1. Izcipit iz Fizike trdne snovi, 27.6.2016

1. $SrRuO_3$ kristalizira v kubični strukturi z osnovno celico na sliki. Atomi Ru se nahajajo v centru kocke, atomi O v središčih stranic kocke, atomi Sr pa v ogliščih kocke. Kocka ima stranico $a = 0.389\text{nm}$. Obravnavaj sipanje rentgenske svetlobe na praškastem vzorcu $SrRuO_3$!

- a) Zapiši primitivne vektorje Bravaisove mreže in vektorje baze!
- b) Izračunaj strukturalni faktor $S_{\mathbf{K}} = \sum_j f_j \exp(i\mathbf{K}\cdot\mathbf{d}_j)$ ob predpostavki, da je atomski strukturalni faktor f_j konstanta, ki je za vse atome enaka!
- c) Največ kolikšna je lahko valovna dolžina rentgenske svetlobe, da bo prišlo do Braggovega sipanja? Koliko Braggovih kolobarjev in pri katerih kotih pričakuješ pri sipanju na praškastem vzorcu, če nastavimo valovno dolžino rentgenske svetlobe na polovico te vrednosti?
- d) V bolj realistični obravnavi f_j narašča s številom elektronov na ionu. Sr in Ru imata podobno veliki vrstni števili in zato podoben f_j , vrstno število kisika pa je precej manjše in f_j za kisik zato zanemarljiv v primerjavi z drugima dvema. Če valovno dolžino rentgenske svetlobe izberemo kot smo jo v primeru c), pri katerih kotih pričakuješ sipanje sedaj?



2. Obravnavaj elektronska stanja 2d kristala katerega del je prikazan na sliki v približku tesne vezi! Upoštevaj le s orbitale. Prekrivanje med najbližjimi sosedi naj znaša t . Prekrivanje med bolj oddaljenimi sosedi in popravke zaradi neortogonalnosti sosednjih orbital zanemari. Premik orbitalnih nivojev β naj bo za vse atome v mreži enak in ga ni treba upoštevati.

- a) Zapiši primitivne vektorje Bravaisove mreže in vektorje baze! Zapiši vektorje recipročne mreže in skiciraj 1. Brillouinovo cono.
- b) Zapiši Hamiltonian v približku tesne vezi v bazi ravnih valov z dodatnim indeksom podmreže!
- c) Izračunaj in nariši elektronske disperzije po poti, ki gre v ravni črti od izhodišča do oglišča 1. Brillouinove cone.
- d) Izračunaj in nariši elektronske disperzije po poti, ki gre v ravni črti od izhodišča do sredine roba 1. Brillouinove cone. Kakšno disperzijo ima srednji pas? Zapiši valovno funkcijo za srednji pas kot funkcijo valovnega vektorja in rezultat interpretiraj!
- e) Skiciraj skupno gostoto stanj (t.j., vsoto gostot stanj za posamezne pasove)! Skico komentiraj!
- f) Naj vsak atom prispeva v izračunane elektronske pasove po en elektron. Kako se kemijski potencial spreminja kot funkcija temperature?