

Úloha 1. (9 bodů) Zkoumali jsme magnetický Ba-hexaferit pomocí výpočtů elektronové struktury. Pro dvanáct možných magnetických konfigurací atomových magnetických momentů této látky jsme spočítali celkové energie a z nich určili hodnoty výměnného integrálu J (uvedeny v tabulce). Přesnost určení veličiny J byla pro použitou výpočetní metodu odhadnuta na 0.02 meV (uvažujte ji jako standardní chybu).

Zpracujte spočítané hodnoty J .

Výsledek vyjádřete se standardní odchylkou („σ“, $P \sim 68\%$) a správně запиšte.

výpočet č.	J (meV)	$J - \bar{J}$ (meV)
1	6.374	-0.16775
2	6.708	0.16625
3	6.329	-0.21275
4	6.021	-0.52075
5	6.524	-0.01775
6	6.058	-0.48375
7	6.922	0.38025
8	6.658	0.11625
9	6.857	0.31525
10	6.673	0.13125
11	6.546	0.00425
12	6.831	0.28925
$\bar{J} =$	6.54175	meV
$\sum_{i=1}^{12} (J_i - \bar{J})^2 =$	0.964948	meV ²

Řešení:

Jedná se o zpracování přímo měřené veličiny, takže spočítáme odhad standardní odchylky:

$$s_J = \sqrt{\frac{1}{11} \sum (J_i - \bar{J})^2} = 0.29618 \text{ meV}.$$

S využitím 3σ kritéria zjistíme, že všechna měření vyhovují. Spočítáme tedy standardní odchylku aritmetického průměru, interval rozšíříme podle studentova rozdělení a sloučíme se standardní chybou měřidla ($u_{J,B}$) do kombinované nejistoty měření napětí:

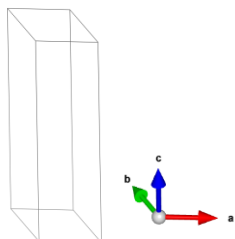
$$s_{\bar{J}} = \frac{1}{\sqrt{12}} s_J = 0.0855 \text{ meV}, \quad u_J = \sqrt{(k_{11}^{1\sigma} s_J)^2 + u_{J,B}^2} = \sqrt{0.089775^2 + 0.02^2} = 0.091976 \text{ meV}$$

(Zde $u_{J,B}$ je již přímo standardní odchylka, takže nedělíme odmocninou ze 3.)

Zaokrouhlíme a zapíšeme výsledek: $J = 6.54(9) \text{ meV}$ nebo $J = (6.54 \pm 0.09) \text{ meV}$

Úloha 2. (6 bodů)

Dále jsme pro tuto látku chtěli z výpočtů vyjádřit celkovou magnetizaci, tedy celkový magnetický moment připadající na jednotku objemu. K tomu jsme spočítali celkový magnetický moment m v jedné elementární buňce a mřížové parametry látky (rozměry elementární buňky) a , b , c . Látka má hexagonální strukturu, takže elementární buňka má tvar hranolu s podstavou kosočtverce (hrany a , b jsou stejné a svírají úhel 120° , viz obrázek) a výškou c .



Získané číselné hodnoty jsou:

$$m = (40.005 \pm 0.007) \mu_B,$$

$$a = b = (5.989 \pm 0.001) \text{ \AA}.$$

$$c = (23.477 \pm 0.002) \text{ \AA}.$$

Udané nejistoty jsou standardní odchylky.

$$(\mu_B = \text{Bohrův magneton})$$

$$(1 \text{ \AA} = 1 \text{ \AAngström} = 10^{-10} \text{ m})$$

Spočítejte (objemovou) magnetizaci $M = \frac{m}{V}$ a její standardní nejistotu.

Řešení:

Využijeme zákona přenosu chyb, takže $\bar{M} = \frac{\bar{m}}{a^2 c \sin 60} = 0.054857 \mu_B \text{ \AA}^{-3}$

A toho, že funkce $R(U, I)$ je ve tvaru podílu, takže můžeme pro relativní nejistoty psát (a je ve druhé mocnině \rightarrow faktor 4):

$$\eta_M^2 = \eta_m^2 + 4\eta_a^2 + \eta_c^2 = 0.000386516$$

$$\text{a tedy } u_M = \eta_M \bar{M} = 0.0000212 \mu_B \text{ \AA}^{-3}$$

Zaokrouhlíme a zapíšeme výsledek: $M = 0.05486(2) \mu_B \text{ \AA}^{-3}$

Případně převedeno na metry: $M = 5.486(2) \times 10^{28} \mu_B \text{ m}^{-3}$.