Test č. 2 čtvrtek 7. 1. 2021

Úloha 1. (3 body) 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 a také v souboru t2b_u1.txt). Přesnost určení *J* byla pro použitou výpočetní metodu odhadnuta na 0.02 meV (uvažujte ji jako standardní chybu).

výpočet č.	*J* (meV)
1	6.374
2	6.708
3	6.329
4	6.021
5	6.524
6	6.058
7	6.922
8	6.658
9	6.857
10	6.673
11	6.546
12	6.831

Zpracujte spočítané hodnoty *J*.
Výsledek vyjádřete se standardní odchylkou („σ“, *P* ~ 68 %).

Řešení:

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

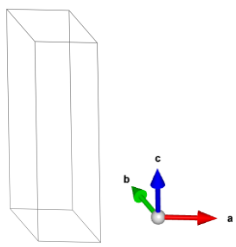
$\bar{J} = 6.54175\ \mathrm{meV}$, $s_J = \sqrt{\frac{1}{11}\Sigma(J_i - \bar{J})^2} = 0.29618\ \mathrm{meV}$.

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:

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

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

Úloha 2. (4 body) Dále jsme pro tuto látku chtěli z výpočtů vyjádřit celkovou magnetizaci, tedy celkový magnetický moment připadající na jednotku objemu. K tomu jsme spočítali 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 ± 0,007) μ_B, (μ_B = Bohrův magneton)

a = *b* = (5,989 ± 0,001) Å. (1 Å = 1 ångström = 10^{-10} m)

c = (23,477 ± 0,002) Å.

Udané nejistoty jsou standardní odchylky.

Vyjádřete (objemovou) magnetizaci *M* (např. v jednotkách μ_B/m^3).

Řešení:

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

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

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

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

Převedeme na metry, zaokrouhlíme a zapíšeme výsledek: $M = 5.486(2) \times 10^{28}\ \mu_B \mathrm{m}^{-3}$.

Úloha 3. (8 bodů) Při určování mřížových parametrů v předchozí úloze jsme hledali rovnovážný objem elementární buňky, tj. objem V_0, pro který vyjde nejnižší spočítaná celková energie E. Ze sady výpočtů pro různé objemy jsme získali energie v tabulce (a také v souboru t2b_u3.txt). Závislost energie na objemu V lze v širokém rozsahu tlaků popsat polynomem třetího stupně. Nicméně v blízkosti rovnovážného objemu lze (v harmonické aproximaci) uvažovat závislost $E(V)$ přibližně jako kvadratickou.

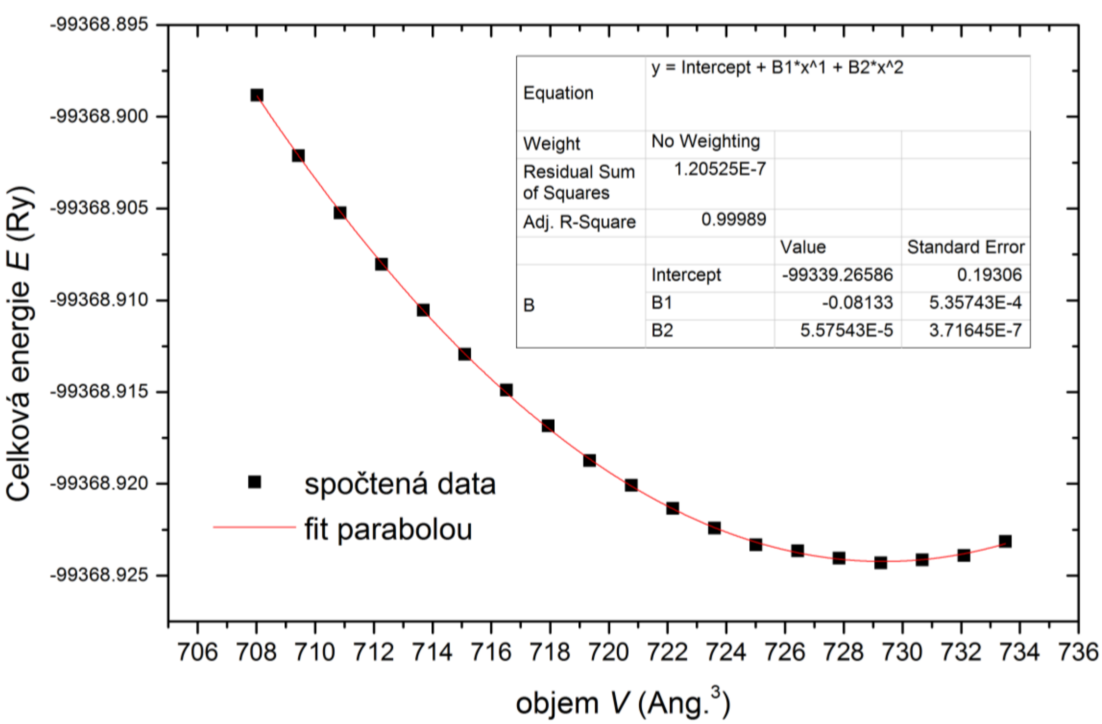
Nafitujte (v nějakém programu dle vlastního výběru) závislost $E(V)$, tj. určete parametry příslušné paraboly a získanou závislost nakreslete. (Individuální nejistoty jednotlivých E nebo V zde neuvažujeme.)

Určete rovnovážný objem V_0 a jeho nejistotu.

V (Å^3)	E (Ry)
708.02094	-99368.89882
709.43627	-99368.90213
710.85269	-99368.90523
712.26796	-99368.90804
713.68447	-99368.91054
715.10093	-99368.91294
716.51606	-99368.91490
717.93258	-99368.91685
719.34886	-99368.91873
720.76396	-99368.92008
722.18027	-99368.92135
723.59649	-99368.92242
725.01279	-99368.92332
726.42883	-99368.92365
727.84493	-99368.92406
729.26093	-99368.92431
730.67681	-99368.92414
732.09273	-99368.92390
733.50853	-99368.92314

Řešení:

Fitovat lze v čemkoliv, co nám rozumně poskytne hodnoty i chyby fitovaných parametrů hledané kvadratické závislosti. Např. v Originu lze použít PolynomialFit, se stupněm polynomu 2. Provedeme fit a získáme něco jako následující obrázek:



Fitováním rovnice typu $E = a + bV + cV^2$ jsme získali parametry:

a: -99339.26586 ± 0.19306

b: -0.08133 ± 5.36E-04

c: 5.58E-05 ± 3.72E-07

Chceme najít hodnotu objemu V_0, pro který má funkce $E(V)$ minimum, takže funkci zderivujeme podle V a výraz položíme roven nule:

$$\frac{\partial E}{\partial V} = b + 2cV \qquad 0 = b + 2cV_0 \qquad V_0 = \frac{-b}{2c} = 729.36078 \text{ Å}^3$$

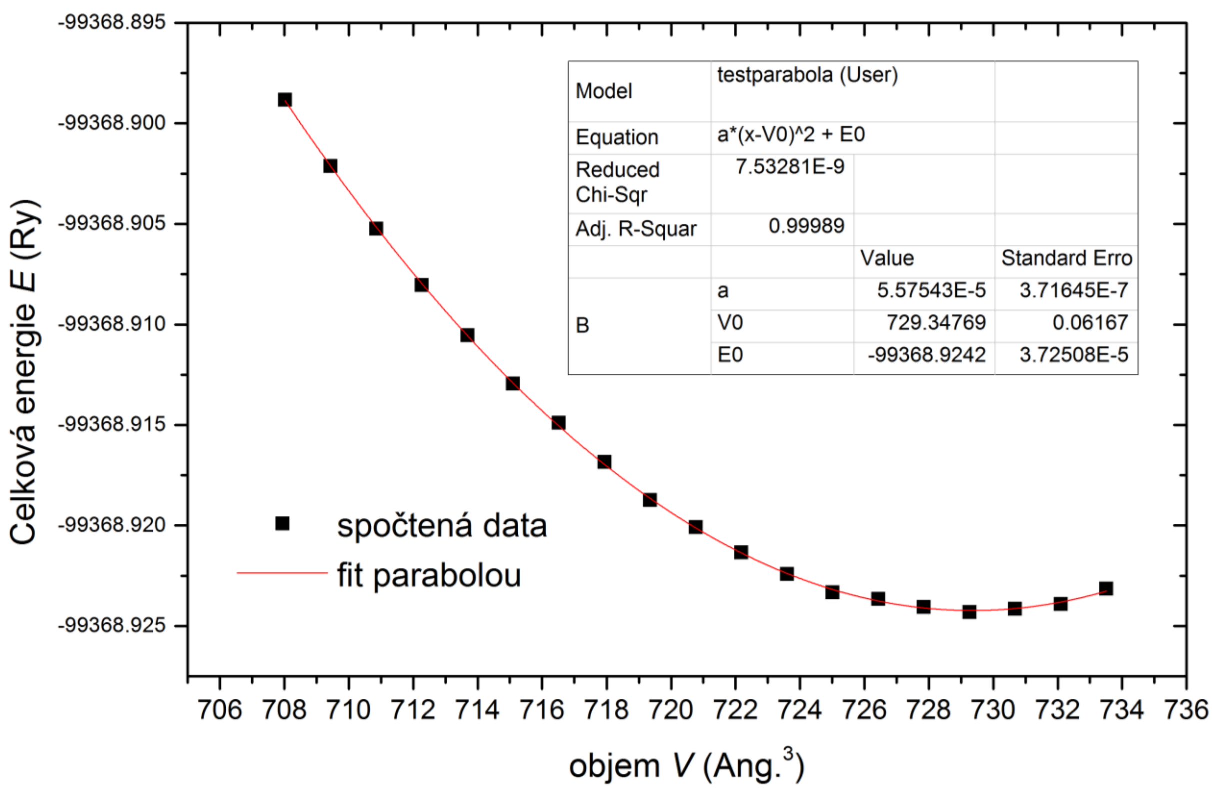
A z přenosu nejistoty určíme nejistotu V_0, kdy jen ve druhých mocninách sečteme relativní chyby[*)] b a c. Zaokrouhlíme a zapíšeme:

$$V_0 = 729(7) \text{ Å}^3$$

[*)] Správně bychom si měli uvědomit, že parametry mohou být vzájemně závislé. Potom už neplatí jednoduchý vzorec pro nezávislé veličiny a je nutno započítat i členy s korelacemi mezi jednotlivými parametry. Hodnoty korelací získáme z korelační matice, kterou obvykle programy poskytují na výstupu. To nám dá správný (a taky podstatně nižší, protože kovariance vyšla záporná)

Alternativně si můžeme parabolickou závislost vyjádřit ve tvaru vrcholové rovnice paraboly (doplněním na čtverec): $E = a\left(V + \frac{b}{2a}\right) + c - \frac{b^2}{4a} = a(V - V_0) + K$, kde $V_0 = \frac{-b}{2c}$ a zřejmě K má význam $E(V_0)$, což je nejen mnohem přehlednější tvar, ale navíc fitování nám dá přímo správnou hodnotu chyby V_0:

$$V_0 = 729.35(6) \text{ Å}^3$$



(To, že se mírně liší i hodnota V0 od předchozího postupu, je způsobeno zaokrouhlením hodnot fitovaných parametrů *b* a *c* v prvním postupu.)

Některé programy poskytují ještě jiné možnosti, např. v Originu lze při fitování (asi jen v nelineární regresi) zadefinovat a počítat odvozené parametry (*Derived parameters*), takže i v prvním případě paraboly s rovnicí $E = a + bV + cV^2$ by si prostě šlo zadefinovat odvozený parametr $V_0 = \frac{-b}{2c}$ a vyšel by nám se správnou nejistotou. (A nemuseli bychom exportovat korelační matici a počítat jeho chybu z ní.)