

F6121 Základy fyziky pevných látek – příklady do cvičení

1	Drudeho model volných elektronů	1
1.1	Poissonovo rozdělení	1
1.2	Jouleho teplo	1
1.3	Elektrická vodivost kovů	1
2	Sommerfeldův model volných elektronů	2
2.1	Nízkorozměrný elektronový plyn	2
2.2	Betheho–Sommerfeldův rozvoj	2
2.3	Tepelná závislosti v Sommerfeldově modelu	2
2.4	Číselné odhady; 2D plyn volných elektronů	2
2.5	Tepelná vodivost	2
3	Krystalová struktura	3
3.1	Kuprátové roviny	3
3.2	Operace symetrie 2D krystalových mřížek	3
3.3	Osy rotace v prostorových mřížkách	3
3.4	Hustota diamantu	3
3.5	Součinitele zaplnění	3
3.6	Hexagonální těsně uspořádaná mřížka	3
3.7	Dvourozměrné mřížky	4
3.8	Reciproké mřížky a 1. Brillouinova zóna kubických mřížek	4
3.9	Mezirovinné vzdálenosti a úhly	4
4	RTG difrakce na krystalech	5
4.1	Strukturní faktor, vyhasínání difrakcí	5
4.2	Difrakční úhly	5
4.3	Difrakční efekty spojené s konečnou velikostí krystalu	5
4.4	RTG difrakce na A_2C_{60}	5
5	Elektron v periodickém potenciálu	6
5.1	Jednorozměrný potenciál	6
5.2	Model Kroning–Penney	6
5.3	Dvourozměrná Fermiho plocha	7
5.4	Pásové schéma volných elektronů	7
5.5	Odhad šířky zakázaného pásu – metoda téměř volných elektronů	7
5.6	Metoda těsné vazby pro s -pás v fcc mřížce	7
5.7	Metoda těsné vazby pro p -pásky ve čtvercové mřížce	7
6	Kvaziklasická aproximace	8
6.1	Elektrony v okolí minima pásu	8
6.2	Oscilace v homogenním elektrostatickém poli	8
7	Polovodiče	9
7.1	Příměsový stav	9
7.2	Statistika nositelů náboje v polovodiči typu N	9
7.3	Hallův jev pro dva typy nositelů	9
7.4	Intrinsický polovodič	9
8	Kmity mřížky v harmonickém přiblížení	10
8.1	Kmity dvouatomového řetězce	10
8.2	Kmity lineární mřížky s dalekodosahovou interakcí	10
8.3	Konstantní rychlost zvuku	10
8.4	Měkký fononový mód	10
8.5	Rychlost zvuku v křemíku	10
8.6	Tepelná kapacita jednoduché 1D a 2D mřížky	11
8.7	Hustota stavů akustické fononové větve	11

1 Drudeho model volných elektronů

1.1 Poissonovo rozdělení

V Drudeho modelu je pravděpodobnost, že se elektron srazí za elementární časový úsek dt , rovna dt/τ .

1. Dokažte, že elektron libovolně vybraný v daný časový okamžik se nesrazil v předchozích t sekundách s pravděpodobností $e^{-t/\tau}$.
2. Dokažte, že pravděpodobnost toho, že doba mezi dvěma následujícími srážkami je v intervalu $(t, t + dt)$, je $e^{-t/\tau} dt/\tau$.
3. Dokažte, že doba od poslední srážky vystředovaná přes všechny elektrony je τ .
4. Dokažte, že střední doba mezi dvěma srážkami pro libovolně vybraný elektron je τ .

1.2 Jouleho teplo

Kus kovu se nachází v homogenním elektrostatickém poli \mathbf{E} , teplota kovu je konstantní. Vyberme libovolný elektron z elektronového plynu a předpokládejme, že tento elektron vykonal srážku v čase $t = 0$ a další srážku v čase t .

1. Dokažte, že střední energie předaná elektronem při druhé uvažované srážce je $(eEt)^2/2m$.
2. Dokažte, že střední energie předaná elektronem při libovolné srážce je $(eE\tau)^2/m$.
3. Nechť má kus kovu tvar válce s plochou podstavy S a výškou L a nechť je intenzita elektrického pole \mathbf{E} rovnoběžná s výškou válce. Z výsledku části 2 odvod'te vztah pro elektrický odpor válce.
4. Najděte tepelný výkon generovaný při průchodu proudu a ověřte, zda v Drudeho modelu platí známý vztah $P = RI^2$.

1.3 Elektrická vodivost kovů

1. Vypočtete hustotu volných elektronů v mědi, je její hustota $\rho_{\text{Cu}} = 8960 \text{ kg m}^{-3}$ a relativní atomová hmotnost 63.5.
2. Měděným vodičem s příčným průřezem 0.2 cm^2 prochází proud 1 A. Jaká je střední driftová rychlost elektronů?
3. Vypočtete pohyblivost elektronů v sodíku, je-li jeho specifická vodivost $\sigma = 0.23 \cdot 10^8 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$ a koncentrace nositelů náboje $2.652 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$.
4. Specifická elektrická vodivost mědi je $\sigma = 6 \cdot 10^7 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$. Určete relaxační dobu elektronu.
5. Určete střední volnou dráhu vodivostních elektronů v sodíku. Jeho specifická vodivost je $\sigma = 0.23 \cdot 10^8 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$.

2 Sommerfeldův model volných elektronů

2.1 Nízko rozměrný elektronový plyn

Pro jednorozměrný, dvou rozměrný a trojrozměrný plyn volných elektronů najděte:

1. souvislost k_F a \mathcal{E}_F a hustoty elektronů n (počet elektronů na jednotku délky, plochy resp. objemu)
2. souvislost k_F a veličiny r_s definované jako poloměr koule¹ s objemem rovným objemu připadajícímu v elektronovém plynu na jeden elektron
3. energiovou hustotu stavů $g(E)$

Pozn.: Vzájemnou konzistentnost výsledků je možné ověřit vztahem $\int_0^{\mathcal{E}_F} g(E) dE = n$.

2.2 Betheho–Sommerfeldův rozvoj

Ukažte, že integrál $\int_0^\infty H(E) f_{FD}(E) dE$ je možné aproximovat rozvojem

$$\int_0^\infty H(E) f_{FD}(E) dE = \int_0^\mu H(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 H'(\mu) + \frac{7\pi^4}{360} (k_B T)^4 H'''(\mu) + \mathcal{O} \left[\left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^6 \right]$$

2.3 Teplotní závislosti v Sommerfeldově modelu

Pomocí Betheho–Sommerfeldova rozvoje určete teplotní závislost chemického potenciálu $\mu(T)$, střední hodnoty hustoty energie $u(T)$ a tepelnou kapacitu 3D elektronového plynu. Předpokládejte přitom, že v uvažovaném intervalu teplot je $T/T_F \ll 1$ a stačí tedy vzít pouze první opravu z příkladu 2.2.

2.4 Číselné odhady; 2D plyn volných elektronů

1. S využitím předchozích výsledků spočtete Fermiho mez k_F , Fermiho energii \mathcal{E}_F , Fermiho rychlost v_F , Fermiho teplotu T_F , střední energii elektronu $\langle E \rangle$ a hustotu energie u v elektronovém plynu s hustotou odpovídající stříbru ($n = 5.85 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$). Dále stanovte chemický potenciál a střední hustotu energie při teplotě 300 K. Jaká je tepelná kapacita elektronového plynu? Porovnejte se skutečnou hodnotou a pokuste se vysvětlit případný rozdíl.
2. Určete chemický potenciál dvou rozměrného elektronového plynu. Díky příznivému průběhu hustoty stavů není v tomto případě třeba aproximací.

2.5 Tepelná vodivost

Spočtete tepelnou vodivost elektronového plynu v Sommerfeldově modelu. Porovnejte výsledek s tepelnou vodivostí v Drudeho modelu kovu a s tabulkovými hodnotami pro reálné kovy.

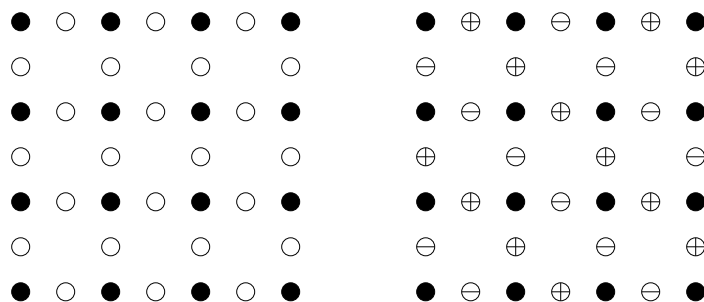
¹rozumí se zobecněná D -dimenzionální koule, která je zadána vztahem $\sqrt{x_1^2 + \dots + x_D^2} \leq r_s$

3 Krystalová struktura

3.1 Kuprátové roviny

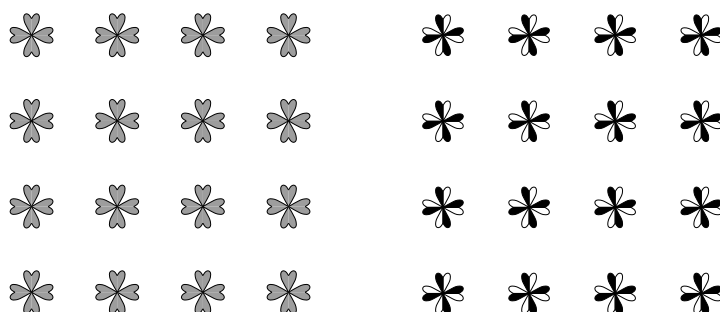
Ve většině vysokoteplotních supravodičů se lze setkat s tzv. kuprátovými rovinami, které jsou tvořeny atomy mědi a kyslíku uspořádanými jako na následujících obrázcích. Atomy mědi jsou znázorněny plnými kroužky, atomy kyslíku prázdnými.

1. Vyznačte bázové vektory, primitivní buňku a atomy báze krystalové mřížky z levého obrázku.
2. Ve skutečnosti leží atomy kyslíku střídavě nad a pod kuprátovou rovinou, což je v pravém obrázku označeno znaménky + a -. Vyznačte bázové vektory, primitivní buňku a atomy báze i v tomto případě.



3.2 Operace symetrie 2D krystalových mřížek

Najděte všechny bodové operace symetrie následujících krystalových mřížek a srovnajte je s operacemi symetrie prosté mřížky.



3.3 Osy rotace v prostorových mřížkách

Dokažte, že trojrozměrné prostorové mřížky mohou mít pouze 2-, 3-, 4- a 6-četné osy symetrie.

3.4 Hustota diamantu

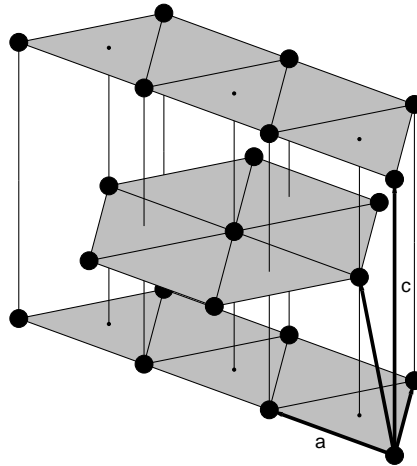
Spočítejte hustotu diamantu, víte-li, že jeho mřížkový parametr je $a = 3.57 \text{ \AA}$ a relativní atomová hmotnost uhlíku je 12.

3.5 Součinitele zaplnění

Vypočítejte součinitele zaplnění při umístění koulí maximálního poloměru do uzlů prostorové mřížky pro tyto mřížky: prostá kubická, kubická plošně centrovaná, kubická prostorově centrovaná a diamantová.

3.6 Hexagonální těsně uspořádaná mřížka

Vypočítejte poměr c/a pro hexagonální těsně uspořádanou mřížku.



3.7 Dvourozměrné mřížky

Najděte reciproké mřížky a několik prvních Brillouinových zón (alespoň pět) pro dvourozměrnou čtvercovou a hexagonální mřížku.

3.8 Reciproké mřížky a 1. Brillouinova zóna kubických mřížek

Najděte reciproké mřížky a první Brillouinovu zónu pro kubické mřížky – prostou, prostorově centrovanou a plošně centrovanou. Porovnejte rozměry první Brillouinovy zóny prosté mřížky s mřížkovým parametrem $a = 3 \text{ \AA}$ a vlnová čísla typická pro viditelné a RTG záření. Najděte souvislost objemu primitivní buňky přímé a reciproké mřížky.

Pozn.: Tato souvislost je obecná a lze ji nejsnadněji získat přímo pomocí definice reciproké mřížky.

3.9 Mezirovinné vzdálenosti a úhly

Najděte vztahy pro mezirovinné vzdálenosti a mezirovinné úhly pro tyto syngonie: kubická, tetragonální a ortorombická.

4 RTG difrakce na krystalech

Intenzita RTG záření rozptýleného krystalem je úměrná kvadrátu absolutní hodnoty Fourierova obrazu elektronové hustoty s argumentem rovným rozptylovému vektoru

$$I \sim |\rho_{el}^{FT}(\mathbf{Q})|^2, \quad \mathbf{Q} = \mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i.$$

Zapišme elektronovou hustotu v krystalu ve tvaru

$$\rho_{el}(\mathbf{r}) = \Omega(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{R}} \sum_{j=1}^N \rho_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{R}),$$

kde $\Omega(\mathbf{r})$ je tvarová funkce krystalu, \mathbf{R} značí vektory poloh elementárních buněk (tvoří prostorovou mřížku), j indexuje atomy v elementární buňce, \mathbf{r}_j jejich polohy v rámci elementární buňky a $\rho_j(\mathbf{r})$ je nábojová hustota charakteristická pro daný atom. Fourierova transformace dává

$$\rho_{el}^{FT}(\mathbf{Q}) = \frac{1}{V_{PB}} \sum_{\mathbf{G}} \Omega^{FT}(\mathbf{Q} - \mathbf{G}) F(\mathbf{G}), \quad F(\mathbf{G}) = \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}_j} f_j(\mathbf{G}), \quad f_j(\mathbf{k}) = \int d^3\mathbf{r} \rho_j(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}.$$

Zde V_{PB} je objem primitivní buňky, Ω^{FT} geometrický faktor, $F(\mathbf{G})$ je strukturní faktor a f_j je atomový rozptylový faktor atomu j .

4.1 Strukturní faktor, vyhasínání difrakcí

Vypočtete strukturní faktor difrakce na krystalech s touto strukturou: kubická plošně centrovaná mřížka, kubická prostorově centrovaná mřížka, mřížka se sfaleritovou strukturou a mřížka s diamantovou strukturou. Zjistěte, které difrakce vyhasnou.

4.2 Difrakční úhly

Vypočtete všechny možné difrakční úhly při difrakci záření o vlnové délce 0.1541 nm (charakteristická čára $\text{CuK}\alpha_1$) na krystalu Si (mřížkový parametr 0.54309 nm).

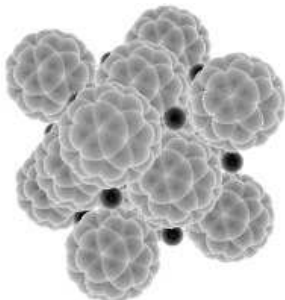
4.3 Difrakční efekty spojené s konečnou velikostí krystalu

Spočítejte Fourierovu transformaci nábojové hustoty malého krystalu s prostou kubickou mřížkou

$$\rho_{el}(x, y, z) = \sum_{j_1=-N_x}^{N_x} \sum_{j_2=-N_y}^{N_y} \sum_{j_3=-N_z}^{N_z} \rho_0(x - j_1 a, y - j_2 a, z - j_3 a)$$

a srovnajte výsledek s výrazem pro ρ_{el}^{FT} obsahujícím geometrický faktor. Odpovídá elektronová hustota zadaná v tomto příkladu elektronové hustotě uvažované výše, nebo je zde nějaký rozdíl? Diskutujte o souvislosti konečné velikosti krystalu s divergencí rozptýleného rentgenového záření.

4.4 RTG difrakce na $\mathbf{A}_x\text{C}_{60}$



Experimentálně bylo zjištěno, že difrakční pík (200) fcc mřížky fullerenu C_{60} (mřížkový parametr $a = 14.11 \text{ \AA}$) je velmi slabý. Předpokládejte, že nábojová hustota fullerenu je reprezentována nábojem rovnoměrně rozloženým na povrchu koule s poloměrem 3.5 \AA . Spočítejte strukturní faktor molekuly C_{60} v této aproximaci a s jeho pomocí ukažte, že difrakční pík (200) je mnohem slabší než pík (111).

5 Elektron v periodickém potenciálu

5.1 Jednorozměrný potenciál

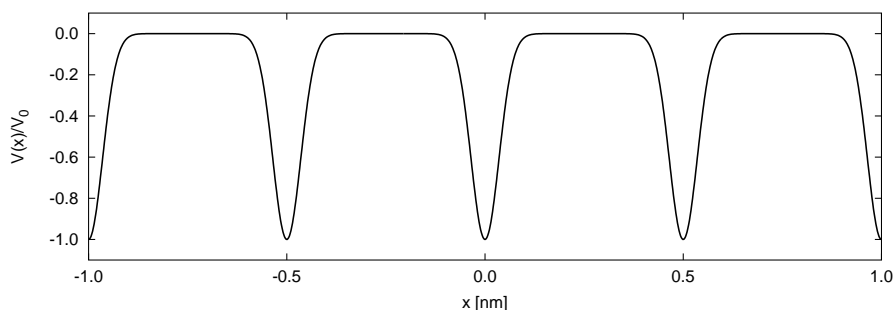
Metodou rozvoje do rovinných vln najděte vlastní energie elektronu v jednodimenzionálním potenciálu s periodou a zadaném funkcí

$$U(x) = -V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{(x - na)^2}{\sigma^2} \right]$$

jehož Fourierovy složky jsou

$$U_G = -V_0 \sqrt{\pi} \frac{\sigma}{a} \exp \left(-\frac{\sigma^2 G^2}{4} \right), \quad G = \frac{2\pi n}{a}.$$

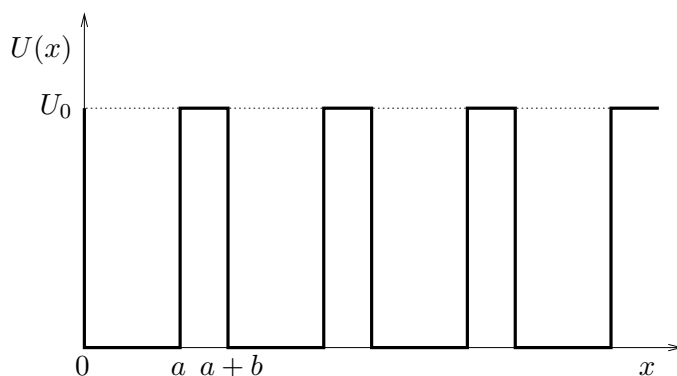
Z vlastních energií pro dostatečný počet Blochových vektorů v 1. Brillouinově zóně sestavte pásové schéma. Při numerickém řešení použijte následující hodnoty parametrů: $a = 0.5 \text{ nm}$, $\sigma = 0.1a$. Srovnajte výsledky pro $V_0 = 2 \text{ eV}$ a $V_0 = 10 \text{ eV}$ s disperzními relacemi volných elektronů.



Pozn.: Při srovnávání je výhodné použít energii vztahenou na střední hodnotu potenciálu, tj. $E - U_{G=0}$.

5.2 Model Kroning–Penney

Vyřešte Schrödingerovu rovnici pro elektron v jednorozměrném periodickém potenciálovém poli, které má tvar



Ukažte, že vlastní hodnoty energie jsou dány rovnicí

$$\cos k(a + b) = \cos a\kappa_1 \cos b\kappa_2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa_2}{\kappa_1} + \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \right) \sin a\kappa_1 \sin b\kappa_2,$$

kde

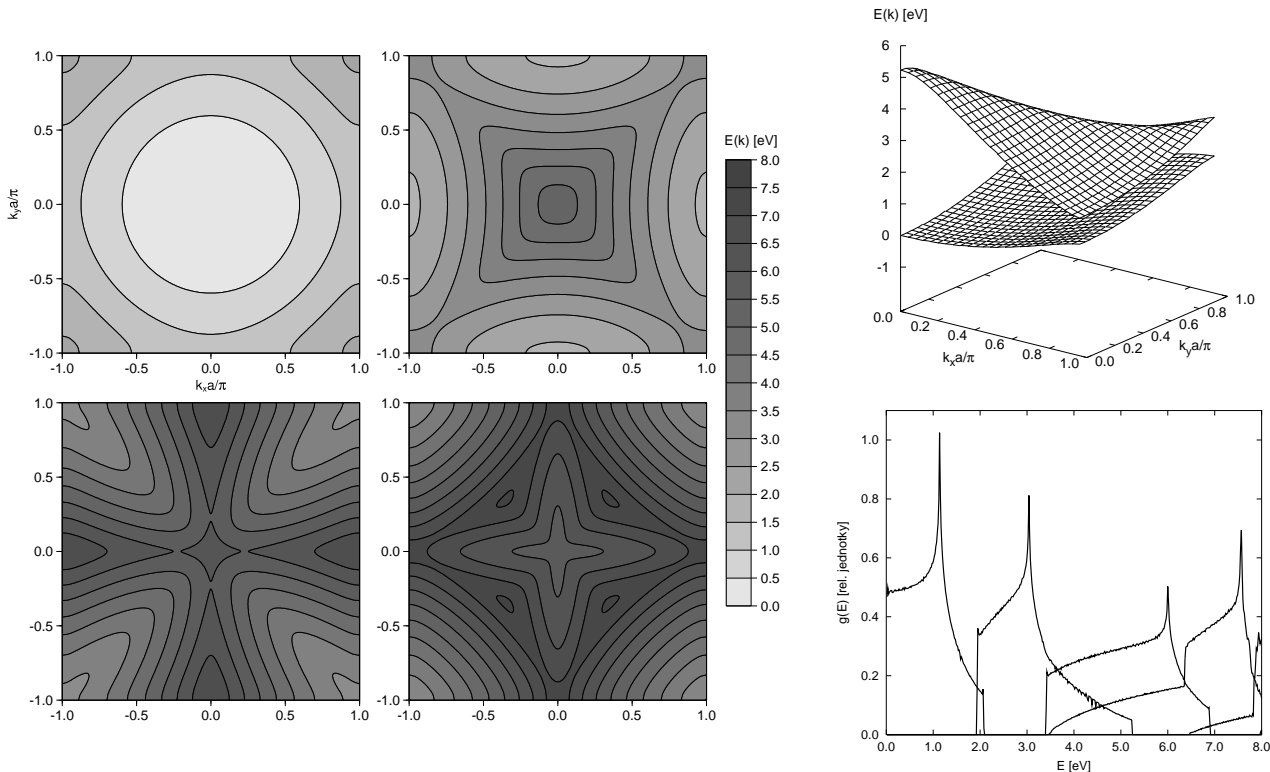
$$\kappa_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{a} \quad \kappa_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}.$$

Najděte disperzní relaci $E_n(k)$ pro několik nejnižších pásů. Vyřešte problém numericky pro vhodně zvolené číselné konstanty, např. $a = 4 \text{ \AA}$, $b = 1 \text{ \AA}$ a $V_0 = 5 \text{ eV}$.

5.3 Dvourozměrná Fermiho plocha

Na následujícím obrázku jsou zachyceny energiové pásy pro elektron pohybující se v dvourozměrné analogii potenciálu z úlohy 5.1. S použitím těchto grafů načrtněte Fermiho plochu pro látku s jedním, dvěma a třemi elektrony v primitivní buňce. Pro ilustraci je připojen graf příspěvků jednotlivých pásů do hustoty stavů.

Rozsahy energií prvních čtyř pásů jsou 0.00 eV – 2.07 eV, 1.93 eV – 5.23 eV, 3.40 eV – 6.89 eV a 3.46 eV – 8.04 eV.



5.4 Pásově schéma volných elektronů

Uvažme prostou kubickou mřížku. Sestrojte redukované pásově schéma pro volné elektrony ve směru [100] a [111].

5.5 Odhad šířky zakázaného pásu – metoda téměř volných elektronů

Uvažme dvourozměrnou čtvercovou mřížku s potenciálem $U(x, y) = -4U_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right)$. Najděte přibližnou velikost šířky zakázaného pásu v bodě $M = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$, tj. v rohu první Brillouinovy zóny.

5.6 Metoda těsné vazby pro s -pás v fcc mřížce

Odvoďte disperzní relace pásu vycházejícího z s -stavů atomů umístěných v uzlech kubické plošně centrované mřížky. Uvažujte pouze maticové elementy mezi nejbližšími sousedy $t = \langle s | \Delta U | s' \rangle$. Překryv s -orbitalů na sousedních atomech zanedbejte. Výsledek znázorněte graficky obvyklým způsobem, tj. podél lomené čáry $L - \Gamma - X - K - \Gamma$.

5.7 Metoda těsné vazby pro p -pásy ve čtvercové mřížce

Uvažujme o dvourozměrné čtvercové mřížce s jednoatomovou bází. Najděte disperzní relace pásů odvozených z dvakrát degenerovaných p -orbitalů p_x a p_y . Vlnové funkce těchto orbitalů mají tvar $\psi_{p_x}(x, y) = x f(\sqrt{x^2 + y^2})$ a $\psi_{p_y}(x, y) = y f(\sqrt{x^2 + y^2})$. Při výpočtu se omezte pouze na maticové elementy mezi nejbližšími sousedy a matici překryvových integrálů aproximujte jednotkovou maticí. Pásově schéma zobrazte podél lomené čáry $M - \Gamma - X$.

6 Kvaziklasická aproximace

6.1 Elektron v okolí minima pásu

Pro elektrony v okolí minima pásu platí

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^T \hat{M}^{-1}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \quad \hat{M}^{-1} = \begin{pmatrix} m_T^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_T^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_L^{-1} \end{pmatrix},$$

kde m_T a m_L jsou transversální a longitudinální efektivní hmotnosti. Ekvienergiové plochy mají tedy tvar rotačních elipsoidů.

1. Ukažte, že cyklotronová frekvence je

$$\omega_c = \frac{eB}{2\sqrt{m_T m_L}},$$

leží-li homogenní magnetické pole v rovině xy .

2. Vypočtěte elektronovou tepelnou kapacitu.

6.2 Oscilace v homogenním elektrostatickém poli

Elektrony vodivostního pásu odvozeného od s -orbitalů atomů v prosté kubické mřížce mají v přiblížení těsné vazby disperzní relaci

$$E(\mathbf{k}) = E_s - 2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)].$$

Najděte časový průběh rychlosti a polohy elektronu v homogenním elektrickém poli $\mathbf{E} = (E_x, 0, 0)$, je-li toto pole zapnuto v čase $t = 0$, kdy se elektron nachází ve stavu s $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$. Jaký je příspěvek elektronu do elektrické vodivosti materiálu?

7 Polovodiče

7.1 Příměsový stav

Polovodič InSb má zakázaný pás o šířce $E_g = 0.23 \text{ eV}$, statickou permitivitu $\varepsilon = 18$ a efektivní hmotnost elektronů $m_{ef} = 0.15 m_e$. Vypočtěte ionizační energii donoru, poloměr dráhy odpovídající základnímu stavu a minimální koncentraci donorů, při níž se začíná projevovat překrývání elektronových drah sousedních příměsových atomů (vzniká příměsový pás).

7.2 Statistika nositelů náboje v polovodiči typu N

V polovodiči je 10^{13} donorů v cm^3 , které mají ionizační energii $E_D = 1 \text{ meV}$ a efektivní hmotnost $m_{ef} = 0.01 m_e$. Žádné akceptorové atomy nejsou přítomny a polovodič je nedegenerovaný, tj. $E_g \gg k_B T$. Odhadněte koncentraci vodivostních elektronů při $T = 4 \text{ K}$ a hodnotu Hallovy konstanty.

7.3 Hallův jev pro dva typy nositelů

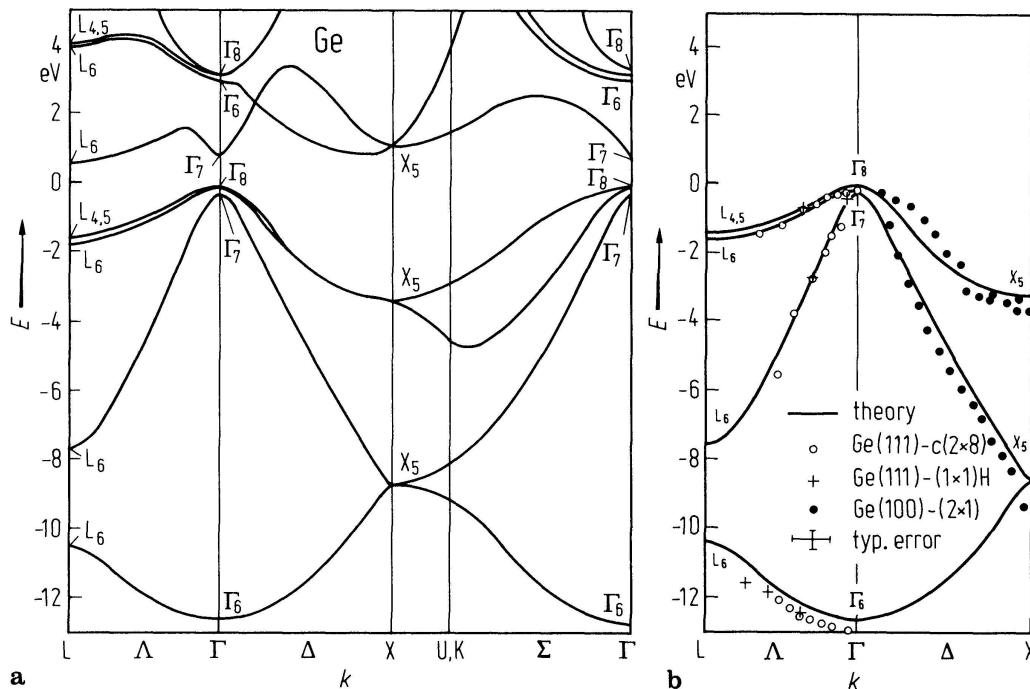
Předpokládejte, že koncentrace vodivostních elektronů a děr v polovodiči jsou n a p , relaxační doby τ_e a τ_h a efektivní hmotnosti m_e a m_h . Ukažte, že Hallův koeficient je

$$R_H = \frac{1}{e} \frac{p - nb^2}{(p + nb)^2},$$

kde $b = \mu_e/\mu_h$ je poměr pohyblivostí. Při výpočtu zanedbejte členy s B^2 .

7.4 Intrinsický polovodič

Germanium má nepřímý zakázaný pás o šířce 0.67 eV . Ve vodivostním pásu je osm L minim ve tvaru rotačních elipsoidů s efektivními hmotnostmi $m_T = 1.6 m_e$ a $m_L = 0.08 m_e$. Maximum valenčního pásu se nachází v bodě Γ a vybíhají z něj dvakrát degenerovaný pás těžkých děr s izotropní efektivní hmotností $0.28 m_e$ a dvakrát degenerovaný pás lehkých děr s izotropní efektivní hmotností $0.044 m_e$. Vypočtěte intrinsickou koncentraci nositelů náboje při teplotě 300 K .



Pásová struktura germania podle článku Wachs, A. L., Miller, T., Hsieh, T. C., Shapiro, A. P., Chiang, T. C.: Phys. Rev. B 32 (1985) 2326

8 Kmity mřížky v harmonickém přiblížení

8.1 Kmity dvouatomového řetězce

Uvažte normální módy lineárního řetězce, ve kterém jsou hmotnosti atomů střídavě M_1 a M_2 . Silové konstanty interakce mezi nejbližšími atomy jsou rovny f a tyto atomy jsou vzdáleny $a/2$. Najděte disperzní relace. Ukažte, že pro $M_1 = M_2$ se výsledek redukuje na disperzní relaci jednoatomového řetězce.

Pozn.: Zajímavý je graf ω/ω_0 , kde $\omega_0^2 = f/\mu$, pro měnící se $\alpha = M_1/M_2$ při konstantní efektivní hmotnosti $\mu = M_1M_2/(M_1 + M_2)$.

8.2 Kmity lineární mřížky s dalekodosahovou interakcí

Předpokládejme jednorozměrný krystal, v němž existuje interakce i mezi dalekými sousedy. Harmonický člen v potenciální energii necht' je tvaru

$$U^{\text{harm}} = \sum_n \sum_{m>0} \frac{1}{2} K_m (u_n - u_{n+m})^2$$

Najděte disperzní relaci takového krystalu a její dlouhovlnnou limitu.

8.3 Konstantní rychlost zvuku

Jak musí být voleny konstanty K_m v předchozí úloze, aby disperzní relace byla čistě lineární, $\omega = c|k|$?

8.4 Měkký fononový mód

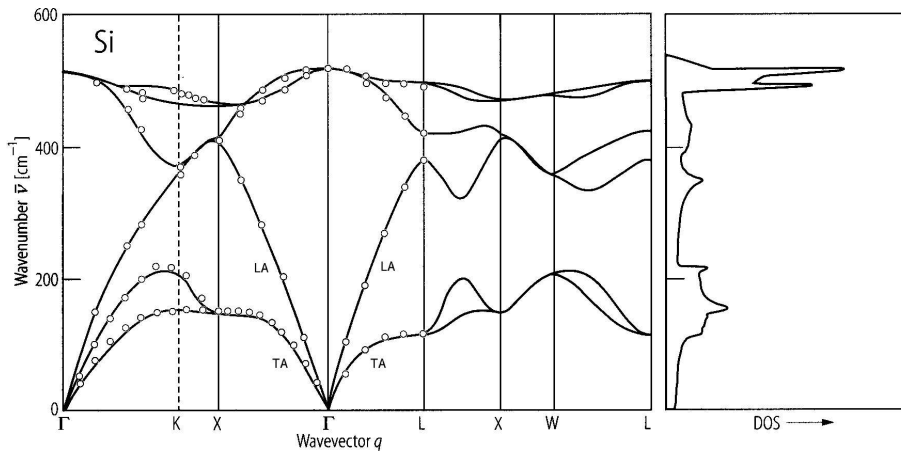
Uvažte lineární řetězec složený z iontů stejné hmotnosti, ale střídajícího se náboje $\pm e$. Meziatomový potenciál se skládá z krátkodosahové interakce se silovou konstantou C a z elektrostatické (dalekodosahové) interakce. Ukažte, že elektrostatickou interakci lze popsat silovou konstantou mezi n -tými nejbližšími sousedy

$$C_n = \frac{(-1)^n e^2}{2\pi\epsilon_0 (na)^3}$$

kde a je vzdálenost nejbližších sousedů. Najděte disperzní relaci a nakreslete její graf pro vhodně volené parametry.

8.5 Rychlost zvuku v křemíku

S použitím následujícího obrázku určete rychlost zvuku v křemíku ve směrech [100], [110] a [111].



Fononové disperzní křivky a hustota stavů podle článku Giannozzi, P., de Gironcoli, S., Pavone, P., Baroni, S.: Phys. Rev. B 43 (1991) 7231

8.6 Tepelná kapacita jednoduché 1D a 2D mřížky

Uvažujme o jednoduché jednorozměrné resp. dvourozměrné mřížce s jedním atomem v primitivní buňce, pro jejíž transverzální kmity platí pohybové rovnice

$$m\ddot{u}_i = K(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}) \quad (1D)$$

$$m\ddot{u}_{ij} = K(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} - 4u_{ij}) \quad (2D)$$

Najděte disperzní relace kmitů mřížky a teplotní závislost jejího specifického tepla při velmi nízkých teplotách.

8.7 Hustota stavů akustické fononové větve

Nechť je disperzní relace některé akustické fononové větve dána vztahem

$$\omega(\mathbf{q}) = \omega_0 \sqrt{\sum_{j=1}^D \sin^2 \frac{q_j a}{2}}$$

Numerickým výpočtem zjistěte hustotu stavů od této akustické větve pro dimenzi mřížky $D = 1, 2, 3$. Tuto hustotu stavů srovnajte s Debyeovým modelem.