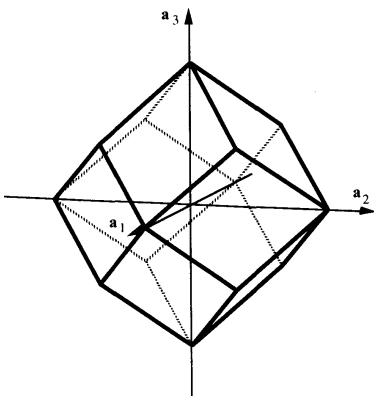


Zápočtové příklady ze fyziky pevných látek 2007/2008

1 Struktura a rentgenová difrakce

1.1 Rhombododecahedron a zóny krystalografických rovin (3b.)

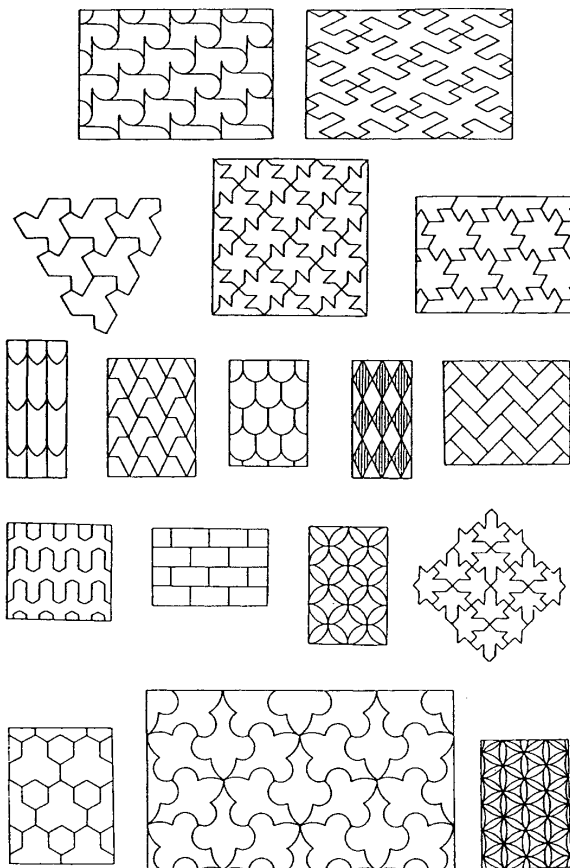
- (a) Určete Millerovy indexy dvanácti stěn rhombododecahedronu (viz obrázek). Souřadnicový systém je definován pomocí $a_1 = a_2 = a_3, \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$. Spočtete úhly mezi fazetami rhombododecahedronu.



- (b) Najděte nutnou podmínku pro to, aby tři roviny s Millerovými indexy (h_1, k_1, l_1) , (h_2, k_2, l_2) a (h_3, k_3, l_3) patří stejné zóně, t.j. jsou rovnoběžné se stejným směrem.

1.2 Krystalografické grupy v rovině (3b.)

Najděte operace symetrie a elementární buňky dvojrozměrných struktur z obrázku.



1.3 Struktura kalcitu (4b.)

Načrtněte projekce struktury kalcitu ve směrech [100] a [210]. Spočítejte nejkratší C-O a Ca-O vzdálenosti a O-Ca-O úhly. Kalcit krystalizuje v krystalografické grupě $R\bar{3}c$ s parametry $a = 4.990 \text{ \AA}$, $c = 17.002 \text{ \AA}$, $Z=6$. Atomy jsou v těchto polohách: 6 Ca atomů v poloze a , 6 C atomů v polohách b , 18 O atomů v polohách e ; $x = 0.257$. Popis krystalografické grupy $R\bar{3}c$ lze nalézt například na <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/struk/caco3.html>.

1.4 Reciproké mřížky a 1. Brillouinova zóna kubických mřížek (4b.)

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.

1.5 Difrakce na zadané mřížce (5b.)

Máme zadanou krystalovou mřížku s rozměry $a = 5, b = 10, c = 15 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ a záření s vlnovou délkou $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ (záření $\text{CuK}\alpha$):

- Určete parametry reciproké mřížky $a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*$ a objem přímé a reciproké elementární buňky.
- Spočítejte mezivinnou vzdálenost d a difrakční úhel θ pro difrakční roviny (321).
- Předpokládejme, že dopadající svazek je kolmý na osu c . Určete graficky pomocí Ewaldovy konstrukce orientaci krystalu ve které se pozoruje difrakce (320). Tato orientace může být definována úhly mezi dopadajícím svazkem \mathbf{s}_0 a vektory \mathbf{a}^* a \mathbf{b}^* . Spočítejte tyto úhly.
- Určete maximální počet Braggových difrakcí, které mohou být pozorovány $\text{CuK}\alpha$ zářením.
- Určete maximální hodnoty Laueho indexů pozorovatelné difrakce $h_{\max}, k_{\max}, l_{\max}$.

1.6 Analýza práškové difrakce (4b.)

V tabulce jsou výsledky měření práškové difrakce čtyř kubických materiálů měřených zářením $\text{CuK}\alpha$ s vlnovou délkou $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$. Braggovy úhly jsou naměřené s přesností 0.01° ; intenzity jsou normovány tak, že nejsilnější difrakce má intenzitu $I = 100$. Určete Laueho difrakční indexy jednotlivých difrakčních čar a typ Bravaisovy mřížky.

| Line No. | NaCl | | CuZn | | W | | Si | |
|----------|--------------|-----|-------------------|-----|-------------------|-----|-------------------|-----|
| | $0 [^\circ]$ | I | $\theta [^\circ]$ | I | $\theta [^\circ]$ | I | $\theta [^\circ]$ | I |
| 1 | 13.68 | 13 | 15.15 | 6 | 20.15 | 100 | 14.23 | 100 |
| 2 | 15.86 | 100 | 21.75 | 100 | 29.16 | 15 | 23.67 | 55 |
| 3 | 22.74 | 55 | 26.93 | 1 | 36.63 | 23 | 28.08 | 30 |
| 4 | 26.95 | 2 | 31.53 | 15 | 43.55 | 8 | 34.60 | 6 |
| 5 | 28.26 | 15 | 35.76 | 2 | 50.38 | 11 | 38.22 | 11 |
| 6 | 33.14 | 6 | 39.85 | 29 | 57.53 | 4 | 44.06 | 12 |
| 7 | 36.57 | 1 | 47.72 | 5 | 65.69 | 18 | 47.52 | 6 |
| 8 | 37.69 | 11 | 51.65 | 1 | 76.99 | 2 | 53.42 | 3 |
| 9 | 42.03 | 7 | 55.81 | 8 | | | 57.11 | 7 |
| 10 | 45.25 | 1 | 60.13 | 1 | | | 63.86 | 8 |

1.7 Difrakce na různých fázích BaTiO_3 (2b.)

Při teplotách nad 120°C je struktura BaTiO_3 kubická, krystalová grupa $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$, $a \approx 4 \text{ \AA}$. Při teplotě 120°C dochází k fázovému přechodu a krystal se stane ferroelektrickým. Mezi teplotami 0°C a 120°C má krystal tetragonální strukturu, prostorová grupa $\text{P}4\text{mm}$, $a = 3.99, c = 4.03 \text{ \AA}$ (při pokojové teplotě). Tento přechod může být pozorován práškovou difrakcí, protože určité difrakční čáry se rozštěpí při změně struktury z kubické na tetragonální. Určete které to jsou.

2 Elektronová struktura

2.1 Tepelná vodivost (10b.)

Přibližným řešením Boltzmannovy kinetické rovnice pro rozdělovací funkci $f(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ elektronů v elektronovém plynu v aproximaci relaxačního času

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{a} = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

spočtete tepelnou vodivost elektronového plynu v Sommerfeldově modelu. Rovnovážná rozdělovací funkce bez přítomnosti gradientu teploty je označena f_0 , \mathbf{a} značí zrychlení způsobené případnými externími silami, které ovšem v našem případě neuvažujeme. Porovnejte výsledek s tepelnou vodivostí v Drudeho modelu kovu a s tabulkovými hodnotami pro reálné kovy.

2.2 Metoda těsné vazby pro p -pásky ve čtvercové mřížce (6b.)

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 $M - \Gamma - X$.

2.3 Metoda těsné vazby pro s -pásky v bcc mřížce (5b.)

Uvažujme o kubické prostorově centrované mřížce s jednoatomovou bází. Najděte disperzní relace pásů odvozených z s -orbitalů. Při výpočtu se omezte pouze na maticové elementy mezi nejbližšími sousedy a matici překryvových integrálů aproximujte jednotkovou maticí. Pásově schéma zobrazte podél lomené čáry $L - \Gamma - X - K - \Gamma$.

2.4 Metoda těsné vazby pro s -pásky v diamantové mřížce (7b.)

Uvažujme o diamantové s jednoatomovou bází. Najděte disperzní relace pásů odvozených z s -orbitalů. Při výpočtu se omezte pouze na maticové elementy mezi nejbližšími sousedy a matici překryvových integrálů aproximujte jednotkovou maticí. Pásově schéma zobrazte podél lomené čáry $L - \Gamma - X - K - \Gamma$.

2.5 Termodynamické vlastnosti elektronového plynu (7b.)

- Ukažte, že kinetická energie trojrozměrného elektronového plynu o N elektronech při nulové teplotě je $U_0 = \frac{3}{5}N\epsilon_F$.
- Odvoďte vztah spojující tlak p a objem elektronového plynu při nulové teplotě. Pomůcka: Použijte předchozí vztah a relaci mezi ϵ_F a elektronovou koncentrací. Výsledek může být zapsán ve formě $p = \frac{2}{3} \frac{U_0}{V}$.
- Ukažte, že objemový modul pružnosti $B = -V \frac{\partial p}{\partial V}$ elektronového plynu při nulové teplotě je $B = \frac{5}{3}p = \frac{10U_0}{9V}$.
- Odhadněte příspěvek elektronového plynu k modulu pružnosti pro draslík a sodík.

2.6 Magnetorezistence systému se dvěma typy nositelů náboje (9b.)

Sommerfeldův model elektronového plynu nevede k magnetorezistivitě v systému s jedním typem nositelů náboje. V přítomnosti dvou typů nositelů náboje je situace jiná. Předpokládejte systém s koncentrací elektronů n , jejich efektivní hmotností m_e a relaxačním časem τ_e ; koncentrací děr p , jejich efektivní hmotností m_h a relaxačním časem τ_h . Použijte aproximace velmi silného magnetického pole $\omega_c \tau \gg 1$.

- Ukažte, že v této limitě $\sigma_{yx} = (n - p)ec/B$.

(b) Ukažte, že Hallovo elektrické pole je dáno vztahem

$$E_y = -(n - p) \left(\frac{n}{Q_e} + \frac{p}{Q_h} \right)^{-1} E_x,$$

kde $Q = \omega_c \tau$ a že vymizí pokud $n = p$.

(c) Ukažte, že efektivní vodivost ve směru x je

$$\sigma_{\text{eff}} = \frac{ec}{B} \left[\left(\frac{n}{Q_e} + \frac{p}{Q_h} \right) + (n - p)^2 \left(\frac{n}{Q_e} + \frac{p}{Q_h} \right)^{-1} \right].$$

Pokud $n = p$, pak $\sigma \sim B^{-2}$. Pokud $n \neq p$, σ se saturuje pro silná magnetická pole.

2.7 Téměř volný elektron v čtvercové mřížce (5b.)

Předpokládejme elektrony v dvourozměrné čtvercové mřížce s velmi slabým periodickým potenciálem s periodou $a = 5\text{\AA}$. Pro \mathbf{k} vektory dalekou od hranice Brillouinovy zóny je vlnová funkce dobře aproximována rovinou vlnou. Předpokládejme, že chceme znát vlnovou funkci v Blochově tvaru $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u(\mathbf{r})$. Jaké budou čtyři nejnižší energetické stavy pro $\mathbf{k} = (0.5\text{\AA}^{-1}; 0)$? Jaké budou odpovídající funkce $u(\mathbf{r})$? (Pozn. $\hbar/2m = 3.806\text{ eV\AA}^2$).

2.8 Efektivní hmotnost v prosté kubické mřížce (8b.)

Spočítejte tenzor efektivní hmotnosti (M_{ij}) pro elektrony v prosté kubické mřížce v jednoduchém těsnovazebním pásu ve středu Brillouinovy zóny Γ ($\mathbf{k} = (0, 0, 0)$), ve středu stěny X ($\mathbf{k} = (1, 0, 0)$), ve středu hrany M ($\mathbf{k} = (1, 1, 0)$) a ve vrcholu Brillouinovy zóny L ($\mathbf{k} = (1, 1, 1)$). Diskutujte užitečnost aproximace efektivní hmotnosti v bodě M. (Pozn. Jednoduchý těsnovazební pás vznikne z s-orbitalů).

2.9 Dvojměrný elektronový plyn (7b.)

Volný pohyb elektronů může být omezen v určitém směru vhodným potenciálem. Předpokládejme elektronový plyn ve vnějším potenciálu: $V = 0$ pro $|z| < d/2$ a $V = V_0$ pro $|z| > d/2$. Jaká je hustota stavů jako funkce energi pro $V_0 \rightarrow \infty$? (Diskutujte, jak bude vypadat pro velké a malé energie.)

Předpokládejme $d = 100\text{\AA}$. Do jaké teploty se elektrony budou chovat jako dvojměrné? Pokud bude potenciál $V_0 = 100\text{ meV}$ a teplota 20 mK , jaká tloušťka d je dosažitelná pro studium dvojměrného elektronového plynu? (Pozn. Dvojměrný elektronový plyn je možné vytvořit v polovodičových součástkách a je používán pro studium kvantového Hallova jevu a jiných jevů.)

3 Fonony

3.1 Hustota stavů akustické fononové větve (7b.)

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.

3.2 Atomové vibrace v kovech (8b.)

Předpokládejme bodové ionty o hmotnosti M a náboji e v homogenním moři vodivostních elektronů. Ionty jsou ve stabilní rovnováze pokud se nacházejí v mřížových polohách. Pokud je jeden iont vychýlen ze své rovnovážné polohy o malou vzdálenost r , síla vracející jej do rovnovážné polohy je převážně dána elektrickým nábojem uvnitř koule o poloměru r se středem v mřížové poloze. Předpokládejte koncentraci iontů (a tedy i vodivostních elektronů) ve tvaru $\frac{3}{4\pi R^3}$, čímž je definována veličina R .

- Ukažte, že frekvence kmitů jednoho iontu je $\omega = \sqrt{\frac{e^2}{MR^3}}$.
- Odhadněte tuto frekvenci pro sodík.
- S použitím těchto výsledků řádově odhadněte rychlost zvuku v kovu.

3.3 Kmity mřížky při nulové teplotě (8b.)

- Ukažte, že střední kvadratická výchylka atomů v Debyeově aproximaci je při nulové teplotě rovna $\langle R^2 \rangle = \frac{3\hbar\omega_D^2}{8\pi^2\rho v^3}$, kde v je rychlost zvuku.
- Ukažte, že $\langle R^2 \rangle$ diverguje v jednodimensionální mřížce, ale střední hodnota kvadrátu elastické deformace je konečná.

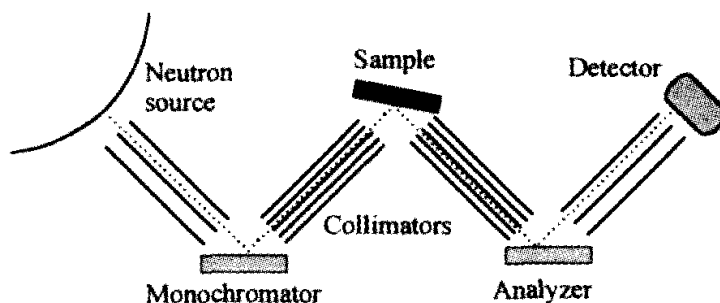
Návod k postupu je možné nalézt v příkladu 3 k páté kapitole v Kittelově učebnici (strana 128 v osmém anglickém vydání).

3.4 Tepelná kapacita vrstevnaté mříže (9b.)

- Předpokládejte dielektrický krystal tvořený vrstvami atomů s pevným spojením mezi vrstvami. Pohyb atomů je omezen pouze ve rovině vrstvy. Ukažte, že tepelná kapacita kmitů mříže je v Debyeově aproximaci a limitě nízkých teplot úměrná T^2 .
- Předpokládejte, že vrstvy jsou vázány slabě, jak je tomu v mnoha případech. Jaké chování tepelné kapacity budete očekávat při nízkých teplotách?

3.5 Trojosý neutronový spektrometr (3b.)

Trojosý neutronový spektrometr umožňuje detekci neelastického rozptylu neutronů a používá se například k měření fononových disperzních relací. Trojosý spektrometr se skládá ze tří nezávislých os rotace vzorkem monochromátizačním a analyzačním krystalem.



Neelastický rozptyl neutronů je měřen s dopadajícím svazkem neutronů o vlnové délce $\lambda = 2.502 \pm 0.002 \text{ \AA}$. Analyzační krystal umožňuje rozlišení s přesností $\delta\lambda/\lambda = 10^{-3}$. Jaké je energiové rozlišení spektrometru v této konfiguraci?