

1. (Kittel, str.69, řešený)

- najděte reciprokou mřížku k mřížce sc
- najděte reciprokou mřížku k mřížce bcc
- najděte reciprokou mřížku k mřížce fcc

2. (Kittel, str.81, př.1)

Inverze Fourierovy řady.

- Ukažte, že Fourierův koeficient n_p v rovnici

$$n(x) = \sum_p n_p e^{i2\pi px/a}$$

je roven

$$n_p = \frac{1}{a} \int_0^a dx n(x) \exp\left(-\frac{i2\pi xp}{a}\right).$$

- Ukažte, že inverze $n(\mathbf{r}) = \sum n_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r})$ dává

$$n_{\mathbf{G}} = V_c^{-1} \int_{\text{buňka}} dV n(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}),$$

kde V_c je objem buňky krystalu.

3. Železo krystalizuje při teplotách nižších než 910°C v prostorově centrované kubické mřížce (BCC). Při vyšších teplotách krystalizuje v plošně centrované kubické mřížce (FCC). Vypočítejte poměr hustoty železa v obou uvedených mřížkách za předpokladu, že poloměr atomů r v obou mřížkách je stejný.
4. Prvky souměrnosti romboické soustavy tvoří tzv. bodovou grupu mmm. Jsou to tři reflexní roviny kolmé na souřadné osy, tři dvojčetné osy podél souřadnicových os, otočení o 360° (jednočetná osa) a inverzní bod v počátku souřadného systému. Zapište tyto operace souměrnosti pomocí matic.
5. Spočítejte maximální objem vyplněný tuhými koulemi pro tyto mřížky: sc, bcc, fcc, hcp a diamant.
6. Najděte všechny operace symetrie krychle.
7. Pomocí práškové metody zkoumáme rtg zářením o vlnové délce $\lambda = 2\text{\AA}$ vzorek india (tetragonální prostorově centrovaná mřížka): $a = b = 3.244\text{\AA}$, $c = 4.938\text{\AA}$. Spočítejte úhly, pod kterými se odklání kužele difraktovaného záření od směru dopadu.

8. (Kittel, str.186, př.3)

Ukažte, že chemický potenciál dvojrozměrného Fermiho plynu je

$$\mu(T) = k_B T \ln \left[\exp \left(\frac{\pi n \hbar^2}{m k_B T} \right) - 1 \right]$$

pro n elektronů na jednotkovou plochu.

9. (Kittel, str.186, př.6)

Frekvenční závislost elektrické vodivosti.

Využijte rovnice $m(dv/dt + v/\tau) = -eE$ pro driftovou rychlost elektronů a ukažte, že vodivost při frekvenci ω je

$$\sigma(\omega) = \sigma(0) \left(\frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2} \right),$$

kde $\sigma(0) = ne^2\tau/m$.

10. Najděte energetické spektrum elektronu pohybujícího se v periodickém potenciálu $V(x)$ nenulovém pouze v okolí bodů $x = n.a$ (n je celé číslo), kde $V(x) = V$. Proveďte pro případ, kdy šířka oblasti d , kde $V(x) = V$ se blíží k nule a výška V k ∞ ; přičemž $V.d = konst$.

11. V metodě těsné vazby sestrojujeme vlnovou funkci elektronu pomocí Blochovské kombinace lokálních funkcí. Najděte pro případ prosté krychlové soustavy vyjádření pro energii elektronu a spočítejte jeho efektivní hmotnost.

Základní stav elektronu v potenciálu $U(\mathbf{r})$ izolovaného atomu je popsán vlnovou funkcí $\phi(\mathbf{r})$ a přísluší mu energie E_0 . Vliv jednoho atomu na ostatní je malý, takže přibližná vlnová funkce elektronu v celém krystalu je daná kombinací

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \sum_j C_{jk} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j).$$

V případě Blochovské kombinace lokálních funkcí platí

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j),$$

kde N je počet atomů.

Energii elektronu spočítejte v prvním řádu poruchové teorie a vezměte v úvahu pouze případ, kdy se ovlivňují jen nejbližší sousední atomy.

12. (Kittel, str.209, př.6)

Čtvercová mřížka.

Uvažujte dvourozměrnou čtvercovou mřížku s krystalovým potenciálem tvaru

$$V(x, y) = -4V \cos \frac{2\pi x}{a} \cos \frac{2\pi y}{a}.$$

Použijte ústřední rovnici a nalezněte přibližně velikost zakázaného pásu v bodě $(\pi/a, \pi/a)$ v rohu Brillouinovy zóny. K tomu postačí řešit determinant řádu 2×2 .

13. (Kittel, str.122, odvozené, +str.135, př.5)

- Odvoďte disperzní zákon

$$\omega^2 = \frac{2}{M} \sum_{p>0} C_p [1 - \cos(pKa)]$$

pro kmity lineárního řetízku stejných atomů pokud na sebe působí i vzdálenější atomy. (pouze jeden atom v primitivní buňce)

- Kohnova anomálie

Předpokládejte, že mezirovinná silová konstanta C_p má tvar

$$C_p = A \frac{\sin(pk_0 a)}{pa},$$

kde A a k_0 jsou konstanty a index p nabývá všech celých čísel. Takovou závislost pro silovou konstantu lze očekávat v kovech. Užijte tento výraz v disperzním vztahu odvozeném v prvním bodě a nalezněte vztah pro ω_2 . Závislost ω_2 na K nebo ω na K má v bodě k_0 svislou tečnu: v disperzním zákoně $\omega(K)$ je v bodě k_0 zlom.

14. Odvoďte disperzní relaci pro kmity lineárního řetízku stejných atomů v případě, kdy se ovlivňují jen nejbližší sousední atomy. Hledejte řešení ve tvaru reálné funkce

$$u_n = u \cos(\omega t - nKa).$$

15. (Kittel, str.134, př.1)

Kmity čtvercové mřížky.

Uvažujme příčné kmity rovinné čtvercové mřížky tvořené řadami a sloupci stejných atomů a označme $u_{l,m}$ výchylky atomu v l -tém sloupci a m -té řadě, kolmou k rovině mřížky. Hmotnost každého atomu je M , silová konstanta mezi nejbližšími atomy je C .

- Ukažte, že pohybová rovnice je

$$M \frac{d^2 u_{l,m}}{dt^2} = C[(u_{l+1,m} + u_{l-1,m} - 2u_{l,m}) + (u_{l,m+1} + u_{l,m-1} - 2u_{l,m})].$$

- Předpokládejte řešení pohybové rovnice ve tvaru

$$u_{l,m} = u(0) \exp[i(lK_x a + mK_y a - \omega t)],$$

kde a označuje vzdálenost mezi nejbližšími atomy. Ukažte, že pohybová rovnice má řešení, když je splněna podmínka

$$\omega^2 M = 2C[2 - \cos(K_x a) - \cos(K_y a)].$$

Získali jsme disperzní zákon pro danou úlohu.

- Ukažte, že oblast \mathbf{K} prostoru, pro kterou existují nezávislá řešení, lze vzít ve tvaru čtverce se stranou $2\pi/a$. To je první Brillouinova zóna čtvercové mřížky. Nakreslete závislost ω na K pro případ $K = K_x, K_y = 0$ a pro případ $K_x = K_y$.
- V případě $Ka \ll 1$ ukažte, že platí

$$\omega = \left(\frac{Ca^2}{M}\right)^{\frac{1}{2}} (K_x^2 + K_y^2)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{Ca^2}{M}\right)^{\frac{1}{2}} K$$

takže rychlost je v této limitě konstantní.

16. Spočítejte limity Einsteinova modelu měrného tepla

$$C_V = 3Nk \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1)^2}$$

pro $T \rightarrow 0$ a $T \rightarrow \infty$.

17. (Kittel, str.152-153)

Tepelná roztažnost.

Ukažte, že anharmonický člen ve vztahu

$$U(x) = cx^2 - gx^3$$

pro popis potenciální energie klasického oscilátoru má za následek tepelnou roztažnost, kdy střední hodnota výchylky atomů z jejich rovnovážné polohy je závislá na teplotě.

18. (Feynmanovy přednášky z fyziky (slovenské vydání), kapitola 35, vztahy (35.10)-(35.25)) Paramagnetismus.

Pomocí kvantové mechaniky odvoďte vzorec pro indukovanou magnetizaci M ve slabých magnetických polích pro speciální případ atomů se spinem $1/2$. Výsledek porovnejte s klasickým vzorcem

$$M = \frac{N\mu^2 B}{3k_B T},$$

kde N je počet atomů v jednotce objemu, μ^2 je druhá mocnina vektoru magnetického momentu, B je magnetická indukce vnějšího pole, k_B Boltzmanova konstanta a T teplota. Konečný výsledek zobecněte pro případ atomů s libovolným spinem j .