

Koncepční otázky k přednášce fyzika pevných látek SLO/FPLX

1 Prostorové uspořádání krystalu

Pevná látka z pohledu kvantové mechaniky je soubor $\sim 10^{23}$ částic na cm^3 . Jaké aproximace se používají při přechodu k jednoelektronové aproximaci? $\Rightarrow (0, 1, 2)$

Bohrův model atomu vodíku, ekvivalentní kvantovací podmínky, popis stabilních energetických hladin (parametry R_y , a_B , atomární orbitály).

Jakým způsobem pomáhá translační symetrie krystalu k popisu uspořádání atomů pevné látky? Jak se definují mřížkové translační vektory $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ a $\vec{T}$?

Krystalografie, 14 Bravaisových mřížek, 7 krystalografických skupin. Jaké jsou operace bodové grupy symetrie?

Popište všechny bodové operace symetrie krychle.

Namalujte a popište nejčastější krystalové struktury a jejich parametry: solí (CsCs, NaCl), kovů (SC, FCC, HCP, BCC), polovodičů (diamant, sfalerit GaAs, wurtzit ZnS).

Co je elementární/primitivní buňka? Co je báze? Uveďte na příkladu kovů a solí. Jaký je rozdíl mezi strukturou FCC u dvou solí NaCl a GaAs?

Jak se značí směry v krystalu? Jak se definují Millerovy indexy krystalových rovin? Jaký je geometrický vztah mezi směrem $[hkl]$ a rovinou (hkl) ?

Jaké je zaplnění prostoru tuhými koulemi u struktur SC, BCC, FCC, HCP, diamant.

2 Difrakce na krystalu, reciproká mřížka

Jaké částice se používají pro difrakci ke studiu prostorového uspořádání krystalu, jejich vlnová délka a energie?

Co je reciproká mřížka? Jak jsou definovány báze vektory reciproké mřížky $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ a $\vec{G}$? Jaký je vztah mezi symetrií přímé a reciproké mřížky? $\Rightarrow$ (3D Fourierova transformace, přechod k prostorovým frekvencím.)

Z čeho plyne základní podmínka difrakce ($\Delta\vec{k} = \vec{G}$)? Výpočet amplitudy difraktované RTG vlny.

Braggův zákon difrakce ($2d \sin \theta = n\lambda$), jaká je geometrická interpretace Braggova zákona difrakce?

Jak souvisí podmínka difrakce ($\Delta\vec{k} = \vec{G}$) s definicí Brillouinových zón (BZ)? (Koncový bod k -vektoru RTG fotonu musí ležet na hranici BZ.)

Laueho podmínky pro maximum difrakce. 3 podmínky v 3D prostoru. V jakém prostoru je tato podmínka.

Jaká je reciproká mřížka k přímé mřížce FCC? Jak vypadá 1. BZ této mřížky?

Jaké jsou tři nejběžnější experimentální difrakční metody? Popište jejich fungování pomocí Braggova zákona difrakce.

Vysvětlete, co jsou strukturní faktory krystalu? Např. na příkladu kubického krystalu BCC. Proč pro více atomů v elementární buňce vymizí některé difrakční řády?

Ewaldova metoda pro geometrickou konstrukci směrů difrakčních maxim.

3 Krystalová vazba

Jmenujte 4 typy krystalových vazeb, typické příklady krystalů a jejich vlastnosti.

Jaká je energetická podmínka pro stabilitu krystalu? (definice kohezní energie)

Čím je způsobena přitažlivá interakce v krystalech inertních plynů? ($-A/R^6$). Čím je způsobena odpuzivá energie (B/R^{12})?

Jak se z Lennard-Jonesova potenciálu spočítá rovnovážná mřížková konstanta dvouatomární molekuly a krystalu?

Jak se počítají mřížkové sumy $\sum_j' p_{ij}^{-6}$ a $\sum_j' p_{ij}^{-12}$? Proč jsou tyto mřížkové sumy stejné pro všechny krystaly se stejnou mřížkou např. BCC, nebo FCC?

Co je Madelungova energie u iontových krystalů? Jak se počítá Madelungova konstanta α a proč se v sumě pro Madelungovu konstantu střídají kladné a záporné členy?

Čím je způsobena kovalentní vazba? Jaká je síla kovalentní vazby např. u diamantu? Komentujte poměry zastoupení kovalentní vazby a iontové vazby u solí typu III-V: GaAs, II-VI: MgO, I-VII: NaCl?

V čem spočívá kohezční energie a stabilita kovů? V čem se liší kovalentní vazba a kovová vazba?

4 Fonony, kmity mřížky

Proč právě harmonická aproximace? Pokud je krystal stabilní, musí se při výchylce iontu z rovnovážné polohy celková energie zvyšovat. Celková energie je tedy závislá na druhé mocnině výchylky z rovnovážné polohy?

Pro 1D řetězek stejných atomů jaká je kinetická rovnice pro výchylku atomu z rovnováhy při použití silových konstant? (hmotnost $\times$ zrychlení = síla)

Proveďte výpočet disperzní relace pro kmity mřížky v nejjednodušším případě 1D atomárního řetězku.

Vysvětlete definici různých rychlostí (zvuku, fázová, grupová) na příkladu disperzní závislosti pro 1D atomární řetězek. Proč je vlnový vektor $\vec{q}$ vždy v 1.BZ?

Jak se změni disperzní relace popisující kmity 1D řetězku, pokud se v řetězku střídají dva různé atomy?

Namalujte disperzní relace typický 3D krystal (např. Ge nebo GaAs) pro popis vibračních módů podélných/příčných a akustických/optických. Kolik je jednotlivých módů?

Při malých výchylkách můžeme diagonalizovat Hamiltonián přechodem k normálním módům a získáme nezávislé harmonické oscilátory. Jaká kvazičástice se pro popis excitací vibrací mřížky zavádí? Energie fononů.

Jaká statistika popisuje obsazení daného fononového módu při dané teplotě? (Boseho-Einsteinovo rozdělení).

Napište zákony zachování pro nepružný rozptyl neutronů dopadajících na krystalovou mřížku? Jak se tyto zákony zachování používají pro experimentální studium fononových disperzních relací.

5 Termální vlastnosti fononů

Co je tepelná kapacita? Jaké je chování měrné tepelné kapacity krystalů při pokojové teplotě?

Jaké je chování měrných tepelných kapacit krystalů za nízkých teplot u dielektrik a u kovů?

Einsteinův model tepelných kapacit je použitelný u dlouhovlnných optických fononů, proč? Jaké má předpoklady a jaké dává výsledky?

Jak a proč se zavádí hustota fononových módů? Vysvětlete na jednoduchém příkladu např. 1D atomární řetězek nebo 2D čtvercová mřížka.

V rámci Debyeova modelu se uvažují pouze akustické kmity mřížky. 1.BZ se nahradí koulí v k -prostoru. Jaké je chování získané měrné tepelné kapacity v limitách nízkých a vysokých teplot? Co určuje Debyeova teplota?

Proč se anharmonické efekty jako je tepelná roztažnost nedají vysvětlit s použitím harmonické aproximace kmitů mřížky?

Jaký je vztah mezi tepelnou vodivostí mřížky a měrnou tepelnou kapacitou?

6 Kovy, Fermiho plyn volných elektronů

Vysvětlete výpočet energetických hladin vodivostních elektronů v přiblížení pravoúhlé potenciálové jámy.

Vysvětlete obsazení elektronových energetických hladin s využitím Pauliho vylučovacího principu a Fermiho-Diracova rozdělení.

Popište význam Fermiho energie a chemického potenciálu. Kdy se dá Fermiho-Diracovo rozdělení nahradit Boltzmannovým rozdělením?

Jaká je závislost hustoty elektronových stavů na energii pro různé dimenze? (1D: $E^{-1/2}$, 2D: konstanta, 3D: $E^{1/2}$)

Jakou má závislost na teplotě příspěvek od vodivostních elektronů k měrnému teplu kovu za nízkých teplot? Jak se dá z měření tepelné kapacity kovu určit příspěvek elektronů a příspěvek mřížky?

Pro kovy jsou obvyklé Fermiho teploty 10^4 K. Jaký to má význam pro popis kovu za pokojové teploty?

Ukažte, jak se dá pro daný kov ze znalosti koncentrace vodivostních elektronů dopočítat Fermiho vlnový vektor, Fermiho rychlost, Fermiho energie a Fermiho teplota. ($n \rightarrow k_F \rightarrow v_F \rightarrow E_F \rightarrow T_F$)

Jaký je vztah pro měrnou elektrickou vodivost σ v Ohmově zákonu pro kovy? Zaveďte relaxační dobu τ , střední dobu mezi srážkami (s fonony, s nečistotami v mřížce).

Jaká je odezva systému vodivostních elektronů (elektronového plynu) na vnější elektrické nebo magnetické pole?

Popište Hallův jev. Jaký má význam měření Hallova napětí pro charakterizaci vzorku?

Jaká je tepelná vodivost kovů? Jaký je vztah mezi tepelnou a elektrickou vodivostí kovů? Obě jsou způsobeny pohybem vodivostních elektronů.

7 Energetické pásy

Pokud chceme popsat polovodiče, musíme vysvětlit existenci energetických pásů. Jaký je vztah mezi energetickými hladinami např. atomu sodíku a energetickými pásy sodíku v kovovém krystalu?

Model téměř volných elektronů bere v úvahu slabý periodický potenciál. Jaký je zápis periodické funkce s periodou krystalické mřížky pomocí Fourierovy řady? (V sumě jsou vektory $\vec{G}$.)

Popište Blochův teorém,

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}),$$

pro zápis jednoelektronové vlnové funkce v periodickém potenciálu. Vysvětlete vztah mezi třemi různými zápisy Blochovy vlnové funkce.

Proč se při řešení Schrödingerovy rovnice přechází Fourierovou transformací k Ústřední rovnici? (Diferenciální rovnice je nahrazena soustavou algebraických rovnic pro fourierovské složky rozvoje vlnové funkce a potenciálu.)

Jak vystupuje kvazihybnost elektronu v zákonech zachování $\hbar k$ při srážkách elektronů s fonony? Proč není Blochova vlnová funkce vlastním stavem operátoru hybnosti?

Nakreslete redukované pásové schéma pro volné elektrony v přiblížení prázdné mřížky. (zanedbatelný potenciál, žádné zakázané pásy)

Popište vznik zakázaného pásu na hranici 1.BZ v nejjednodušším 1D přiblížení s harmonickým potenciálem. Jaký je vlnový vektor stavu v zakázaném pásu?

Popište slovně způsob řešení Kronigova-Penneyova modelu pevné látky a vysvětlete výsledky tohoto modelu. Vysvětlete limitní případy pro $P \rightarrow 0$ a $P \rightarrow \infty$.

8 Polovodiče

Jaké jsou charakteristické vlastnosti polovodičů? Jaká je pásová struktura polovodičů? (valenční, vodivostní a zakázaný pás, Fermiho mez v zakázaném pásu)

Vysvětlete pojmy přímý a nepřímý zakázaný pás? Jaký to má vliv na optickou absorpci, případně na použití v optoelektronice (laserové diody)?

Popište pohybovou rovnici pro elektron v energetickém pásu? Zavedení kvazičástice elektronu a díry s efektivní hmotností. Jak souvisí efektivní hmotnost elektronu a díry v pásové schématu s tvarem daného pásu? Jak se dá měřit efektivní hmotnost elektronů a děr.

Podrobný popis parametrů díry jako kvazičástice popisující skoro úplně obsazený pás. (náboj, energie, hmotnost, vlnový vektor, rychlost, spin, statistické rozdělení a pohybová rovnice)

Popište typické energetické disperzní relace na hraně pásů, zjednodušené pásové schéma.

Koncentrace vlastních nositelů proudu, zákon působení aktivních hmotností pro součin np .

Popište chování příměsí v polovodiči, donory a akceptory, příměsová vodivost. Využití znalosti řešení modelu atomu vodíku.

Termoelektrické jevy, jak se projevují a jak se využívají? (Peltierův, Seebeckův)

9 Fermiho plochy v kovech

Vysvětlete zavedení tří pásových schémat (rozšířené, redukované, periodické).

Fermiho plocha v modelu volných elektronů a v modelu téměř volných elektronů. Vysvětlete na příkladu 2D čtvercové mřížky.

Vysvětlete různé orbity pro elektron na Fermiho ploše v magnetickém poli.

Výpočet pásové struktury metodou těsné vazby s využitím atomárních vlnových funkcí.

Jmenujte některé metody výpočtu pásové struktury pevné látky.

Experimentální metody zkoumání Fermiho ploch, využití magnetického pole. Kvantování elektronových stavů do Landauových hladin. Degenerace Landauovy hladiny.

Jak jsou periodické závislosti magnetického momentu nebo elektrického odporu na magnetickém poli? ($1/B$)

10 Kvazičástice

Proč se zavádějí pro popis pevné látky kvazičástice?

Vysvětlete některý z pojmů: fonon, Blochův elektron, díra, plazmon, polariton, exciton.