Příklad 3.6 do cvičení z úvodu do fyziky pevných látek

Tomáš Záležák

Za úkol je spočítat poměr c/a šesterečné těsně uspořádané mřížky.
Nejkratší vzdálenost dvou atomů v jedné vrstvě je a. Atomy jsou těsně vedle sebe a tvoří síť tak, že jeden atom má kolem sebe šest uspořádaných do pravidelného šestiúhelníku. Na této vrstvě leží další vrstva tak, aby vzdálenost těchto rovin byla co nejmenší. Jeden atom je posazen na třech ve spodní vrstvě, takže leží nad těžištěm trojuhelníku, který tyto atomy spodní vrstvy tvoří. Každá druhá vrstva má tedy atomy přesně nad sebou. Vzdálenost těchto vrstev je c.
Dvě vrstvy jsou tedy od sebe vzdáleny o $c/2$. Jeden atom tedy vždy spočívá na třech ve vrstvě pod ním a všechny jsou od sebe vzdáleny o a. Jejich středy tvoří vrcholy pravidelného čtyřstěnu. Je tedy potřeba spočítat výšku $c/2$ pravidelného čtyřstěnu s hranami délky a.
Horní vrchol spočívá nad těžištěm podstavy. Průmět jeho vzdálenosti od jednoho z ostatních vrcholů do podstavy je tedy roven dvěma třetinám délky těžnice. Pro její délku t platí Pythagorova věta $a^2 = t^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2$, tedy $t = \frac{\sqrt{3}}{2}a$. Nicméně tato vzdálenost je rovna a, lze tedy opět použít Pythagorovu větu $a^2 = \left(\frac{c}{2}\right)^2 + \left(\frac{2}{3}t\right)^2 = \left(\frac{c}{2}\right) + \left(\frac{1}{3}\,a\right)^2$. Z toho vyjde, že $c = \sqrt{8/3}\,a$.
Poměr c/a u šesterečné těsně uspořádané mřížky je $\sqrt{8/3}$.

Příklad 8.4 do cvičení z úvodu do fyziky pevných látek

Tomáš Záležák

V této úloze jsou zkoumány kmity lineárního řetězce iontů stejné hmotnosti m se střídajícím se nábojem $\pm e$. Ionty na sebe působí elektrostaticky na velkou vzdálenost a také další silou na krátkou vzdálenost (její konstanta úměrnosti je C).

Pro vyšetření pohybu je dobré znát závislost síly na výchylce. Působení n-tých nejbližších sousedů $j-n$ a $j+n$ na iont j bude vypadat takto:

$$F_e = \frac{(-1)^n e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{(na+u_j-u_{j-n})^2} - \frac{1}{(na+u_{j+n}-u_j)^2}\right)$$

Jsou-li výchylky malé, což je zde vhodné předpokládat, lze vztah přepsat takto:

$$F_e = \frac{(-1)^n e^2}{4\pi\varepsilon_0 (na)^2}\left(\frac{1}{(1+X_1)^2} - \frac{1}{(1+X_2)^2}\right)$$

Zde je $X_1 = \dfrac{u_j - u_{j-n}}{na}$ a $X_2 = \dfrac{u_{j+n}-u_j}{na}$. Díky Taylorovu rozvoji $(1+X)^\alpha \approx 1+\alpha x$ vyjde:

$$F_{ej} \approx \frac{(-1)^n e^2}{4\pi\varepsilon_0 (na)^2}\left[(1-2X_1)-(1-2X_2)\right] = \frac{(-1)^n e^2}{2\pi\varepsilon_0 (na)^2}(X_2 - X_1) =$$
$$\frac{(-1)^n e^2}{2\pi\varepsilon_0 (na)^3}\left[(u_{j+n}-u_j)-(u_j-u_{j-n})\right]$$

Pro potenciální energii tedy bude platit

$$U_{ej} \approx \frac{1}{2}\overbrace{\frac{(-1)^n e^2}{2\pi\varepsilon_0 (na)^3}}^{C_n}\left[(u_{j+n}-u_j)-(u_j-u_{j-n})\right]$$

Pro celkovou potenciální energii včetně krátkodosahové interakce tak bude platit:

$$U \approx U_{e0} + \frac{1}{2}\sum_m \sum_{n\neq m} C_n (u_n - u_{n+m})^2 + \frac{1}{2}\sum_m C(u_m - u_{m+1})^2$$

Ještě je třeba odvodit disperzní relaci.

Langrangián soustavy má tvar $L = T - V$, tedy:

$$L = \overbrace{\sum_n M\dot{u}_n^2}^{T\text{ - kinetická energie}} - \overbrace{\sum_n \sum_{m\neq n} \frac{1}{2} C_m (u_n - u_{n+m})^2 - \frac{1}{2}\sum_m C(u_m - u_{m+1})^2}^{V\text{ - potenciální energie}}$$

Konstanta C_m byla odvozena v předchozím textu, konstanta C připadá krátkodosahové interakci. Hmotnost iontu je M.

Z langrangiánu lze vyjádřit pohybové rovnice: $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\dfrac{\partial L}{\partial \dot{u}_j} = \dfrac{\partial L}{\partial u_j}$. V obecném tvaru tedy takto:

$$M\ddot{u}_j = -\tfrac{\partial V}{\partial u_j} = -\tfrac{\partial}{\partial u_j}\left[\textstyle\sum_n \sum_{m\neq n} \frac{1}{2}(u_n - u_{n+m})^2 + \sum_m \frac{1}{2}C(u_m - u_{m+1})^2\right]$$

Po zderovování vyjde

$$M\ddot{u}_j = -\textstyle\sum_m C_m (2u_j - u_{j-m} - u_{j+m}) - C(2u_j - u_{j-1} - u_{j+1})$$

Předpokládáme-li tvar funkce $u_j = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kja-\omega t)}$, platí pro úhlovou rychlost tento vztah:

$$-\omega^2 M A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kja} = -\textstyle\sum_m C_m (2A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kja} - A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(j-m)a} - A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(j+m)a}) -$$
$$C(2A\mathrm{e}{-}\mathrm{i}\omega t\mathrm{e}^{\mathrm{i}kja} - A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(j-1)a} - A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(j+1)a})$$

Po upravení vyjde:

$$\omega = \sqrt{\sum_m \frac{C_m}{M}(2 - 2\cos kma) + \frac{C}{M}(2 - 2\cos ka)}$$

Po dosazaní $M = 1, C = 10, a \in 5, 10$ nm vyjde takovýto graf: