

Cvičenie 8

A Kmity molekulového kryštálu (1 bod)

Nájdite spektrum kmitov lineárneho reťazca atómov s hmotnosťami M a mriežkovou konštantou a . Nech elementárna bunka je tvorená dvomi blízkymi atómami. Potenciálnu energiu modelujte pružinami s tuhosťami K_1 (väzba medzi atómami jednej molekuly) a K_2 (väzba medzi atómami z rôznych molekúl). Predpokladajte $K_1 \gg K_2$.

B Kmity fcc kryštálu (1 bod)

Uvažujme kmity monoatomárneho kryštálu s fcc štruktúrou. Nech potenciálna energia deformácie je

$$E = \frac{K}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (r_{ij} - R)^2$$

kde $\langle ij \rangle$ označuje najbližších susedov na mriežke, r_{ij} je ich aktuálna vzdialenosť a R je ich rovnovážna vzdialenosť.

(a) Ukážte, že frekvencia vlastných kmitov $\mathbf{u}_i = \mathbf{u} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i - i\omega t)$ je daná vlastnými číslami problému

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})u_\beta = \omega^2 u_\alpha,$$

kde

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 2 - c_x c_y - c_x c_z & s_x s_y & s_x s_z \\ s_x s_y & 2 - c_y c_z - c_y c_x & s_y s_z \\ s_x s_z & s_y s_z & 2 - c_z c_x - c_z c_y \end{pmatrix}.$$

a $c_\alpha = \cos(k_\alpha a/2)$ a $s_\alpha = \sin(k_\alpha a/2)$.

(b) Nájdite spektrum v smeroch (100), (110) a (111). Módy klasifikujte na pozdĺžne a priečne.