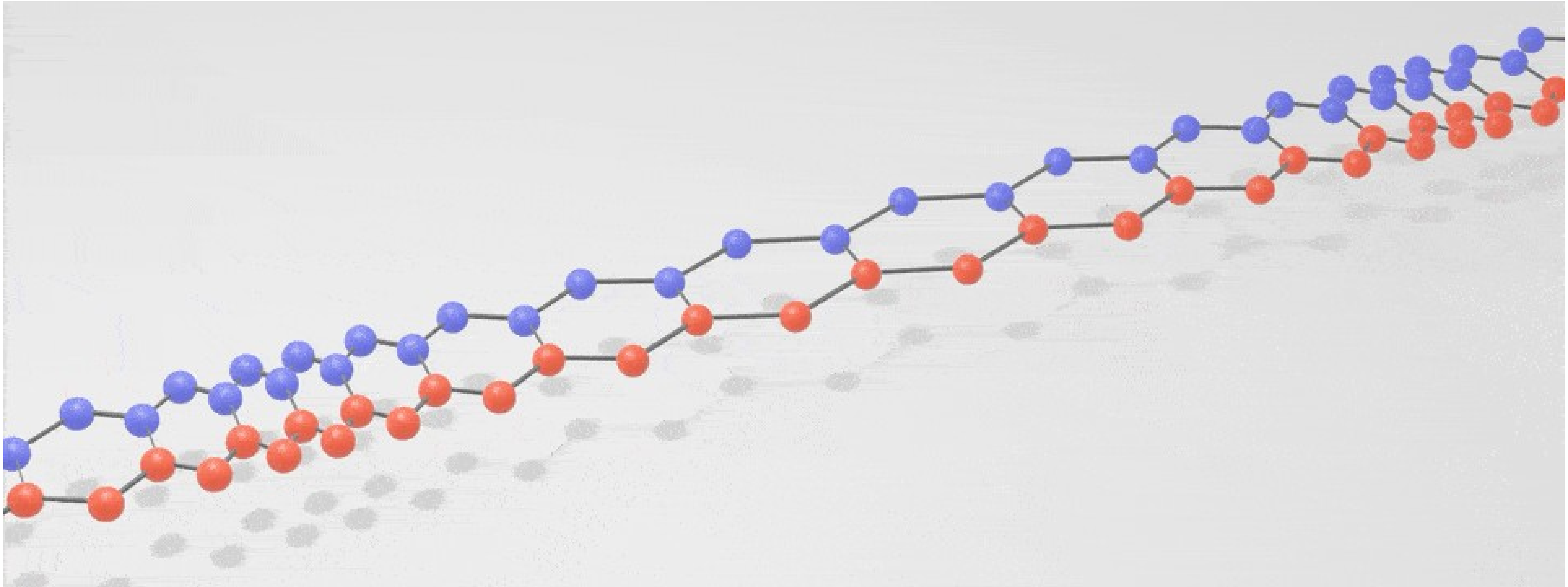
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Co byste měli po dnešní přednášce umět:

- definovat a ve správných souvislostech použít termíny: fonon, Brillouinova zóna, periodické okrajové podmínky, hustota stavů, disperzní relace
- objasnit termín Brillouinova zóna, vysvětlit její používání (nejen) při studiu kmitů atomů v krystalové mříži a zakreslit ji v případě jednoduchých struktur (čtvercová, kubická mříž)
- porovnat Debyeův a Einsteinův model měrného tepla pevných látek
- vysvětlit princip měření fononů pomocí rozptylu neutronů
- popsat vliv vibrací atomů na difrakční záznam krystalu



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži

v krystalu máme *N* základních buněk, v každé buňce <u>*s*</u> atomů, které kmitají kolem rovnovážných poloh

$$H = \sum_n \frac{P_n^2}{2M_n} + \sum_n \sum_m U(|\vec{R}_n - \vec{R}_m|) \qquad \vec{R}_{nm} = \vec{R}_n - \vec{R}_m \quad \vec{R}_{nm} - \vec{R}^0_{nm} = \vec{u}_{nm}$$

výchylky kmitů jsou malé (Taylorův rozvoj):

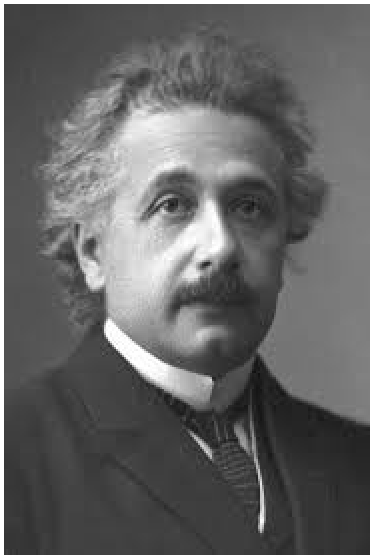
$$U(R_{nm}) \approx U(R^0_{nm}) + \underbrace{A u_{nm}}_{\langle \dots \rangle = 0} + B u^2_{nm} + \underbrace{C u^3_{nm}}_{\langle \dots \rangle = 0} + \dots$$

harmonická aproximace

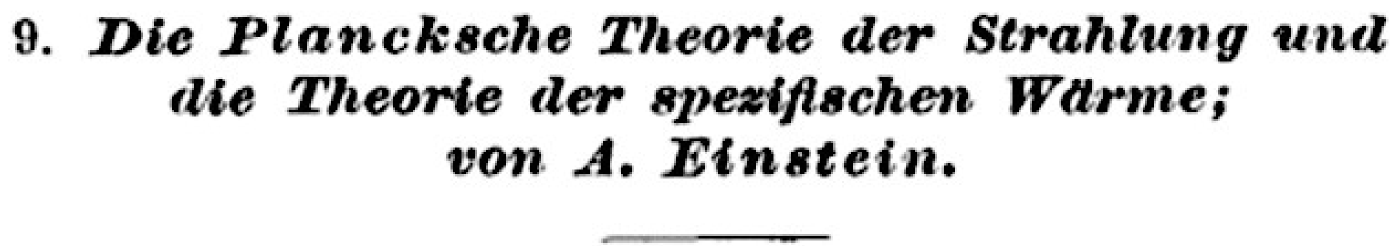
krystal v harmonické aproximaci – soubor (vázaných) 3*Ns* LHO

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži



Albert Einstein
1879-1955



9. *Die Plancksche Theorie der Strahlung und die Theorie der spezifischen Wärme; von A. Einstein.*

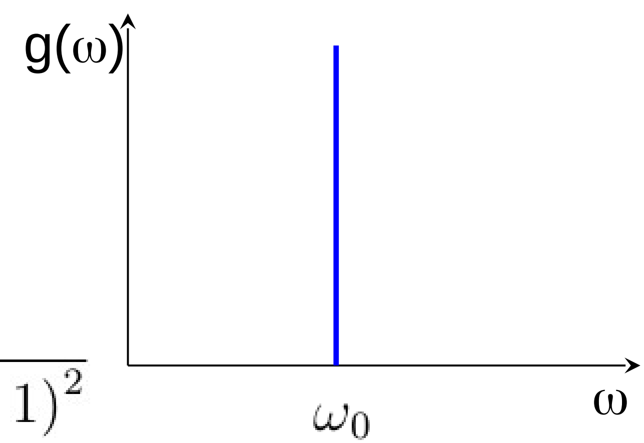
1907

Einsteinův model: všechny LHO mají stejnou frekvenci ω_0

$$\langle U \rangle_{Einstein} = 3Ns\hbar\omega_0 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_0} - 1} \right)$$

každý atom
v základní buňce

$$C_V = \frac{\partial \langle U \rangle_{Einstein}}{\partial T} = 3N_A k_B \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\beta\hbar\omega_0}}{\left(e^{\beta\hbar\omega_0} - 1\right)^2}$$



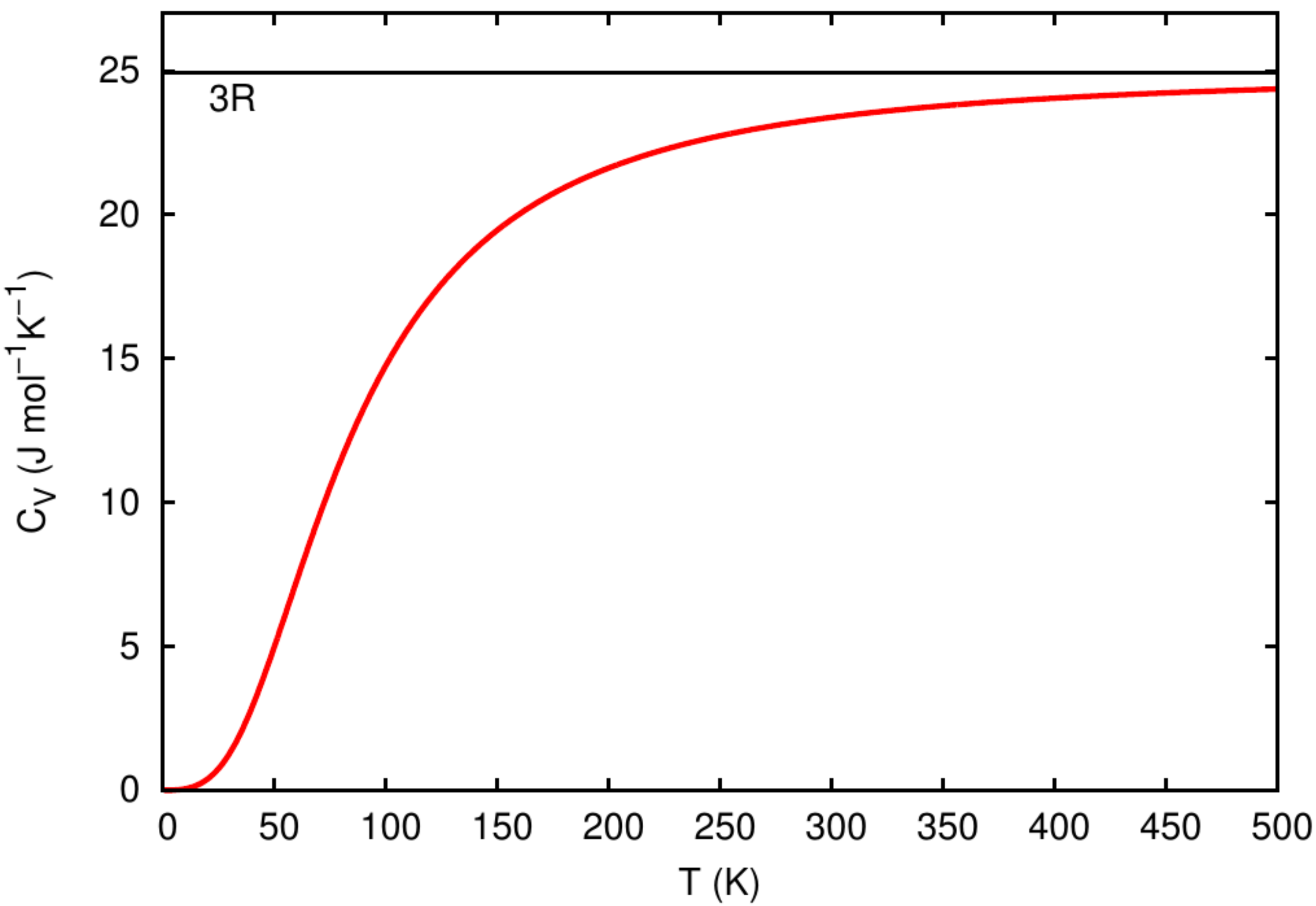
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži

limita vysokých teplot v Einsteinově modelu:

$$\lim_{T\to\infty}\langle U\rangle_{Einstein} = 3Nsk_BT \quad C_V = \frac{\partial\langle U\rangle_{Einstein}}{\partial T} = 3Nsk_B$$

Dulong-Petitův zákon

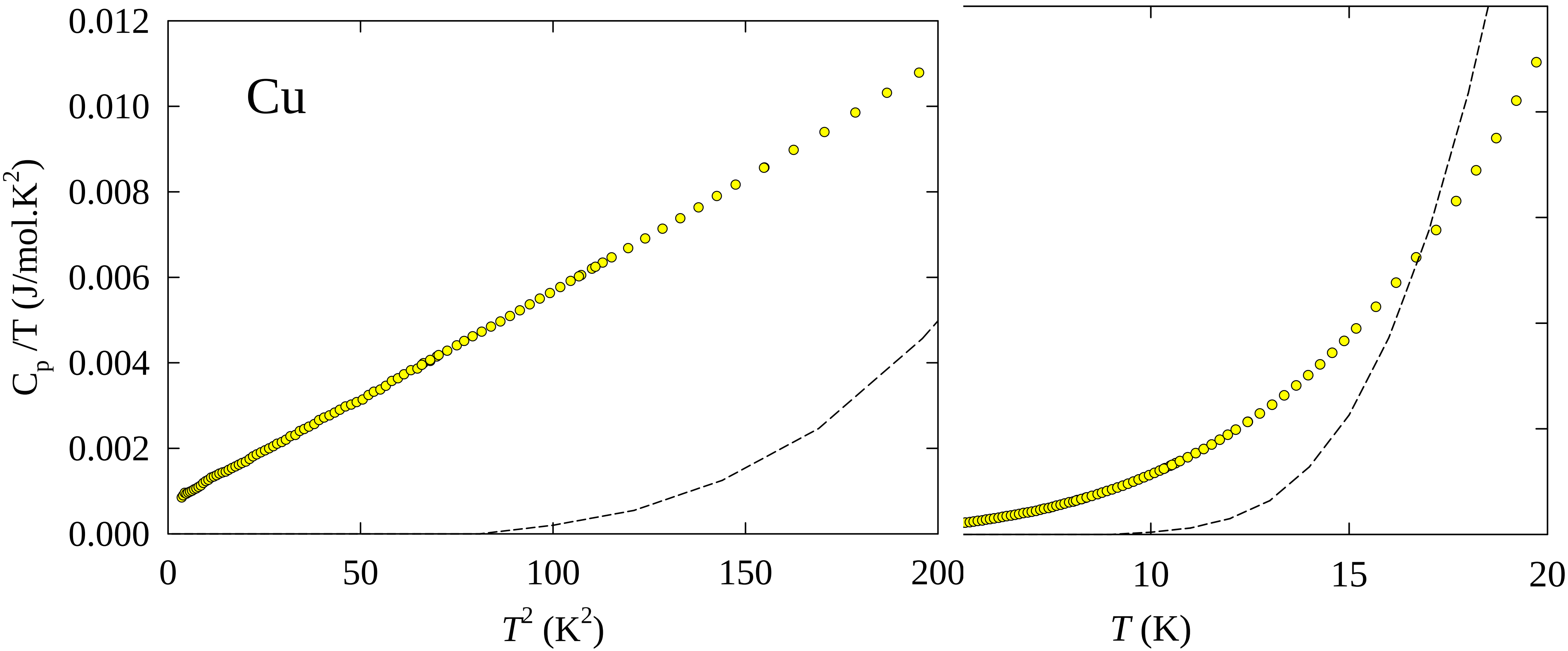


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži

limita nízkých teplot v Einsteinově modelu: $$C_V = 3N_A k_B \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{\beta\hbar\omega_0}}{\left(e^{\beta\hbar\omega_0}-1\right)^2}$$

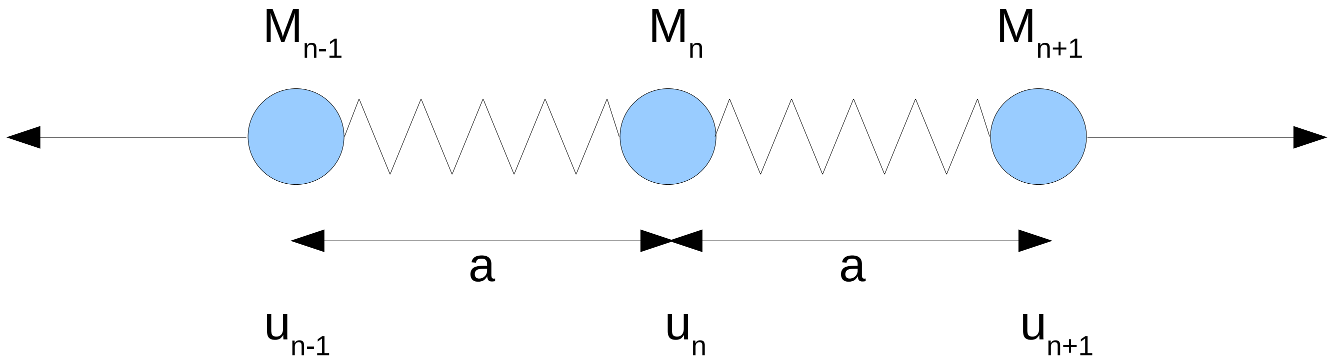
$$C_V \sim \frac{(\beta\hbar\omega_0)^2}{e^{\beta\hbar\omega_0}} \quad \text{pro} \quad \beta \to \infty$$



experiment: $C_V \sim \beta T^3$ **oscilátory jsou vázané!**

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – vázané oscilátory v lineární mříži



jednoatomový řetízek: M_n=M

$$x_n^{(0)} = n.a \quad x_n = x_n^{(0)} + u_n \qquad\qquad F = -K(x_n - x_{n-1}) - K(x_n - x_{n+1})$$

pohybová rovnice: $M\ddot{x}_n = -K(u_n - u_{n-1}) - K(u_n - u_{n+1})$

$$M\ddot{x}_n = -K(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) \qquad\qquad u_n = U_n \mathrm{e}^{-i\omega t}$$

$$M\omega^2 U_n = K(2U_n - U_{n-1} - U_{n+1})$$

řešení hledám ve tvaru rovinné vlny: $U_n = U_0 \mathrm{e}^{inka}$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – vázané oscilátory v lineární mříži

$$M\omega^2 U_n = K(2U_n - U_{n-1} - U_{n+1})$$

řešení hledám ve tvaru rovinné vlny: $U_n = U_0 \mathrm{e}^{inka}$

$$u_n = U_0 \mathrm{e}^{-i(\omega t - nka)}$$

$$M\omega^2 = K\left(2 - \mathrm{e}^{-ika} - \mathrm{e}^{ika}\right)$$

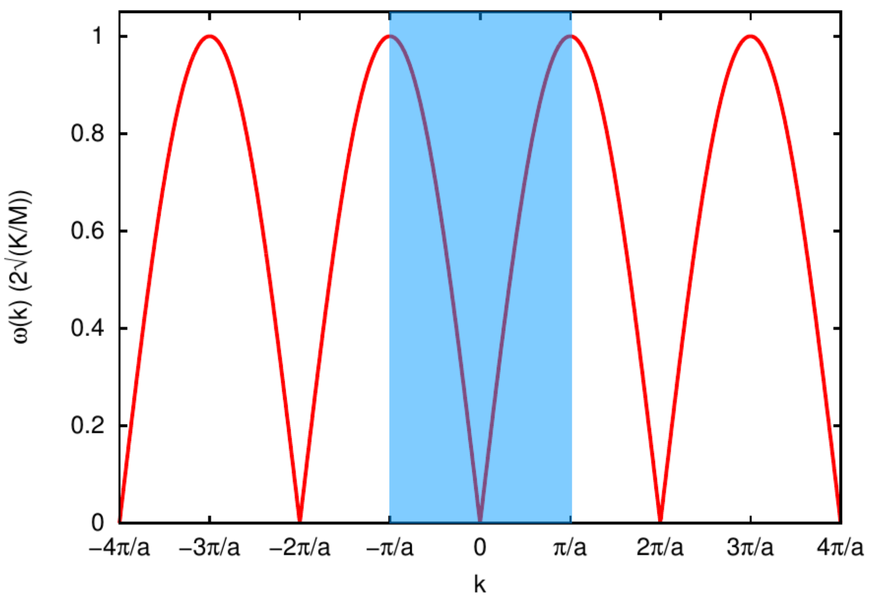
$$\omega^2 = \frac{K}{M} 2\left(1 - \cos(ka)\right)$$

disperzní zákon $$\boxed{\omega(k) = 2\sqrt{\frac{K}{M}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|}$$

(periodické v k)

1.Brillouinova zóna

$$\langle -\frac{\pi}{a}; \frac{\pi}{a} \rangle$$

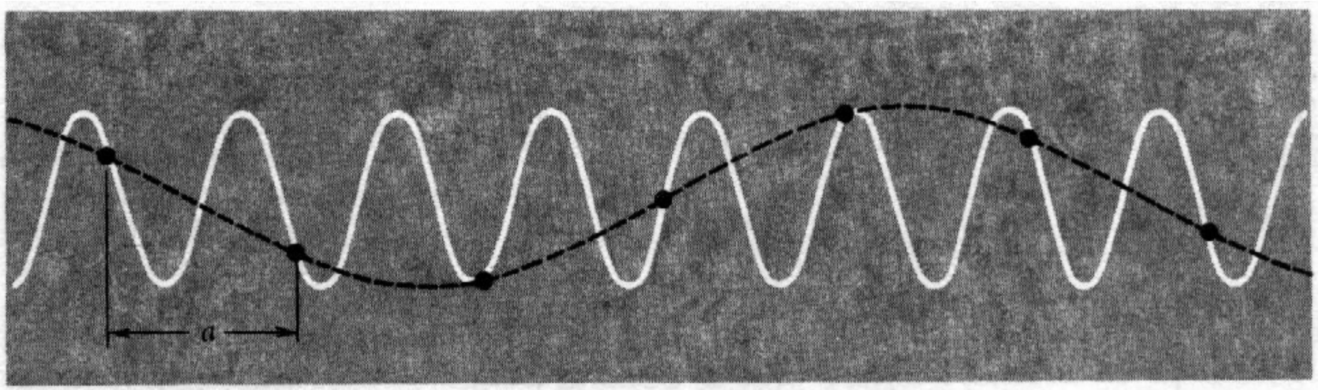


Vibrace jader atomů v krystalové mříži – vázané oscilátory v lineární mříži

jak je to s řešením mimo 1BZ?

$$\left.\begin{array}{l} U_n = U_0 \mathrm{e}^{inka} \\ U_n = U_0 \mathrm{e}^{ink'a} \end{array}\right\} \quad 1 = \mathrm{e}^{ina(k'-k)} \quad \Rightarrow \quad 1 = \mathrm{e}^{ia(k'-k)}$$

$$k' = k + \frac{2\pi}{a} h,\ h \in Z$$



Obr. 4.5 Vlna zobrazená plnou čárou obsahuje tutéž informaci jako vlna zobrazená čárkovaně. Ke znázornění pohybu jsou zapotřebí pouze vlnové délky větší než 2*a*.

hranice BZ: $k = \pm \frac{\pi}{a}$

$$U_n = U_0 \mathrm{e}^{\pm \pi n} = \pm U_0$$

$\Downarrow$

stojatá vlna na hranici BZ

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – vázané oscilátory v lineární mříži

fázová a grupová rychlost:

fázová rychlost $$v_f = \frac{\omega}{k}$$

grupová rychlost $$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$$

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{K}{M}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|$$

hranice BZ (stojatá vlna) $$v_g = 0$$

(dlouhovlnná limita) $$k \approx 0$$

$$v_f = \frac{\omega(k)}{k} = \sqrt{\frac{Ka^2}{M}}\left|\frac{\sin\frac{ka}{2}}{\frac{ka}{2}}\right|$$

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \sqrt{\frac{Ka^2}{M}}\cos\frac{ka}{2}$$

$$v_f \simeq \sqrt{\frac{Ka^2}{M}}$$

$$v_g \simeq \sqrt{\frac{Ka^2}{M}}$$

$$\omega(k) \approx v|k|$$

$$v = \sqrt{\frac{Ka^2}{M}} = \sqrt{\frac{Ka}{\frac{M}{a}}} = \sqrt{\frac{Ka}{\varrho}} \quad \longleftrightarrow \quad c = \sqrt{\frac{E}{\varrho}}$$

Kundtova trubice

rychlost šíření zvuku v PL

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – vázané oscilátory v lineární mříži

fázová a grupová rychlost (rychlost zvuku):

$$k \approx 0 \qquad \lambda \to \infty \qquad u_n \to u(x)$$

$$\begin{aligned} M\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} &= -K(u(x)-u(x-a)) - K(u(x)-u(x+a)) \\ &= Ka^2\,\frac{\frac{u(x+a)-u(x)}{a} - \frac{u(x)-u(x-a)}{a}}{a} \\ &= Ka^2\,\frac{\frac{\partial u(x+a)}{\partial x} - \frac{\partial u(x)}{\partial x}}{a} = Ka^2\,\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = \frac{Ka^2}{M}\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}}$$

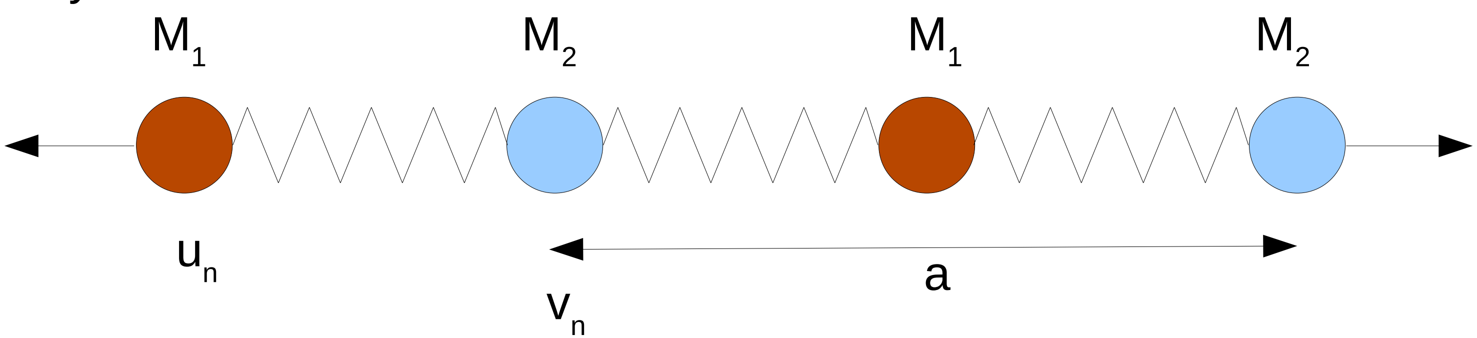
vlnová rovnice

$$u_{tt} - v^2 u_{xx} = 0 \qquad v^2 = \frac{Ka^2}{M}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – vázané oscilátory v lineární mříži

dvouatomový řetízek



pohybové rovnice:

$$\begin{aligned} M_1 \ddot{u}_n &= -K(2u_n - v_n - v_{n-1}) \\ M_2 \ddot{v}_n &= -K(2v_n - u_{n+1} - u_n) \end{aligned}$$

hledám řešení ve tvaru:

$$u_n = U_n \mathrm{e}^{-i\omega t} = U_0 \mathrm{e}^{inka} \mathrm{e}^{-i\omega t}$$
$$v_n = V_0 \mathrm{e}^{inka} \mathrm{e}^{-i\omega t}$$

$$\begin{aligned} -M_1\omega^2 U_0 &= -2KU_0 + KV_0\left(1 + \mathrm{e}^{-ika}\right) \\ -M_2\omega^2 V_0 &= -2KV_0 + KU_0\left(1 + \mathrm{e}^{ika}\right) \end{aligned}$$

řešení – determinant roven 0

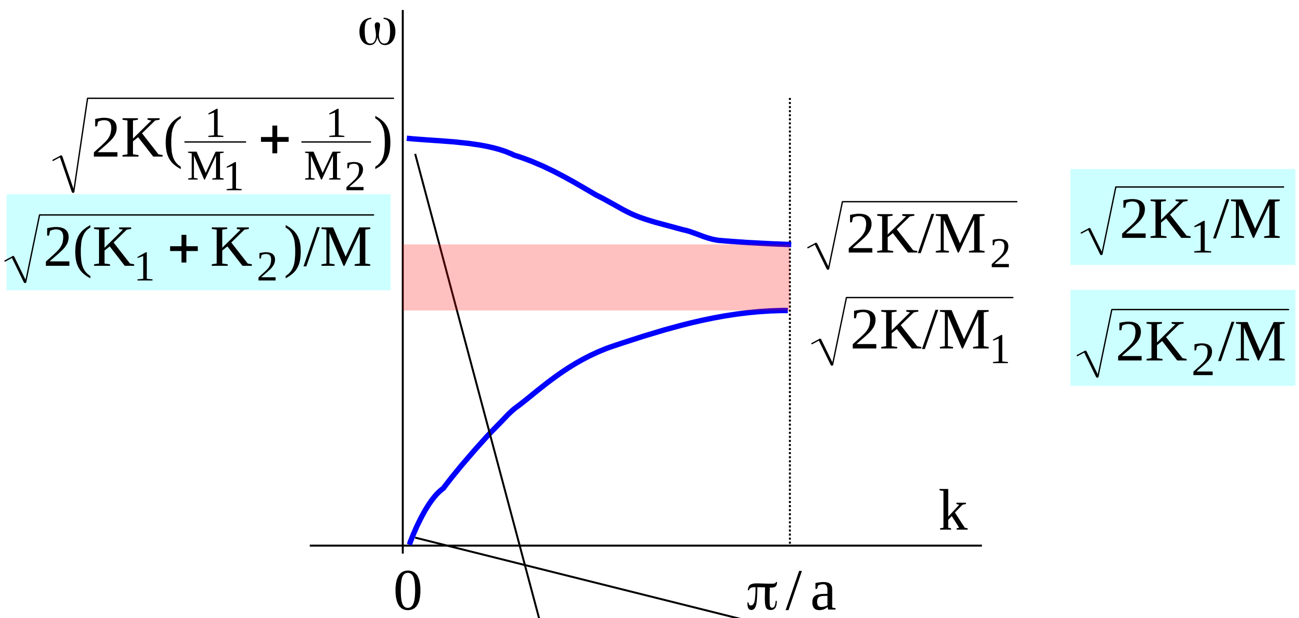
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – vázané oscilátory v lineární mříži

dvouatomový řetízek

$$\begin{vmatrix} 2K - M_1\omega^2 & -K\left(1+\mathrm{e}^{-ika}\right) \\ -K\left(1+\mathrm{e}^{+ika}\right) & 2K - M_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$M_1 M_2 \omega^4 - 2K(M_1+M_2)\omega^2 + 2K^2(1-\cos(ka)) = 0$$



$M_1 = M_2$

$K_1 \neq K_2$

$k \approx 0$

$$\frac{u_n}{v_n} = -\frac{M_2}{M_1}$$

$$u_n = v_n$$

optická větev

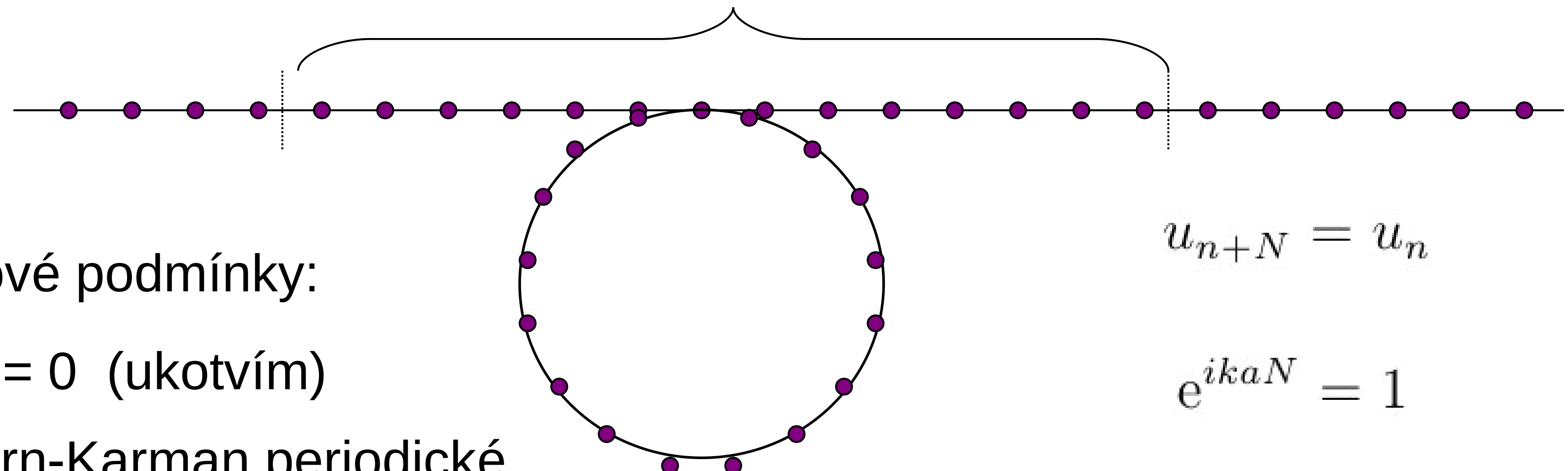
akustická větev

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – vázané oscilátory v lineární mříži

nekonečný vs. konečný vzorek

N atomů



okrajové podmínky:

- $u_N = 0$ (ukotvím)
- Born-Karman periodické
- .... jiné

$$u_{n+N} = u_n$$

$$\mathrm{e}^{ikaN} = 1$$

$$k = \frac{2\pi}{aN}p, \quad p = \pm 1, \pm 2, \ldots$$

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a} \quad \Rightarrow \quad -\frac{\pi}{a} \leq \frac{2\pi}{aN}p \leq \frac{\pi}{a} \quad \Rightarrow \quad -\frac{N}{2} \leq p \leq \frac{N}{2}$$

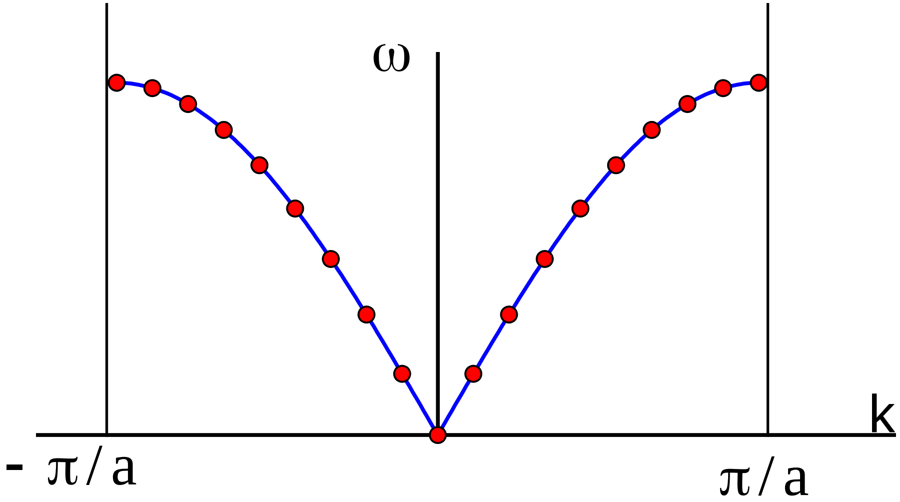
N atomů (vázané kmity) $\Rightarrow$ N nezávislých vibrací k, ω(k)

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – vázané oscilátory v lineární mříži

na jedno $\vec{k}$ připadá v rec.prostoru

$$\Delta k = \frac{2\pi}{aN} = \frac{2\pi}{L}$$ → délka řetízku



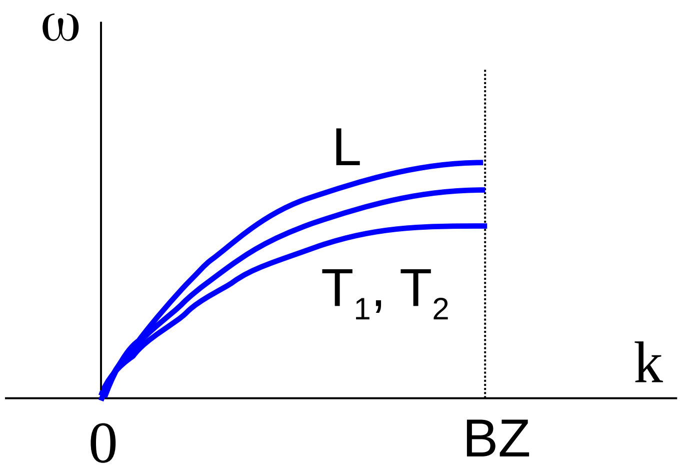
krystal (3D)

objem $\Omega \; (= L_x L_y L_z)$ objem buňky

atomů $N \; (N_x N_y N_z)$ $\Omega_0 = \dfrac{\Omega}{N}$

3N (-6) stupňů volnosti ... 3N nezávislých vibrací

$$\vec{k} = (k_1, k_2, k_3), \;\; \omega(\vec{k})$$



na jedno $\vec{k}$ připadá v rec.prostoru

$$\Delta\vec{k} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} = \frac{(2\pi)^3}{N\Omega_0} = \frac{1}{N}\frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}$$

počet $\vec{k}$ je N → 3 větve kmitového spektra

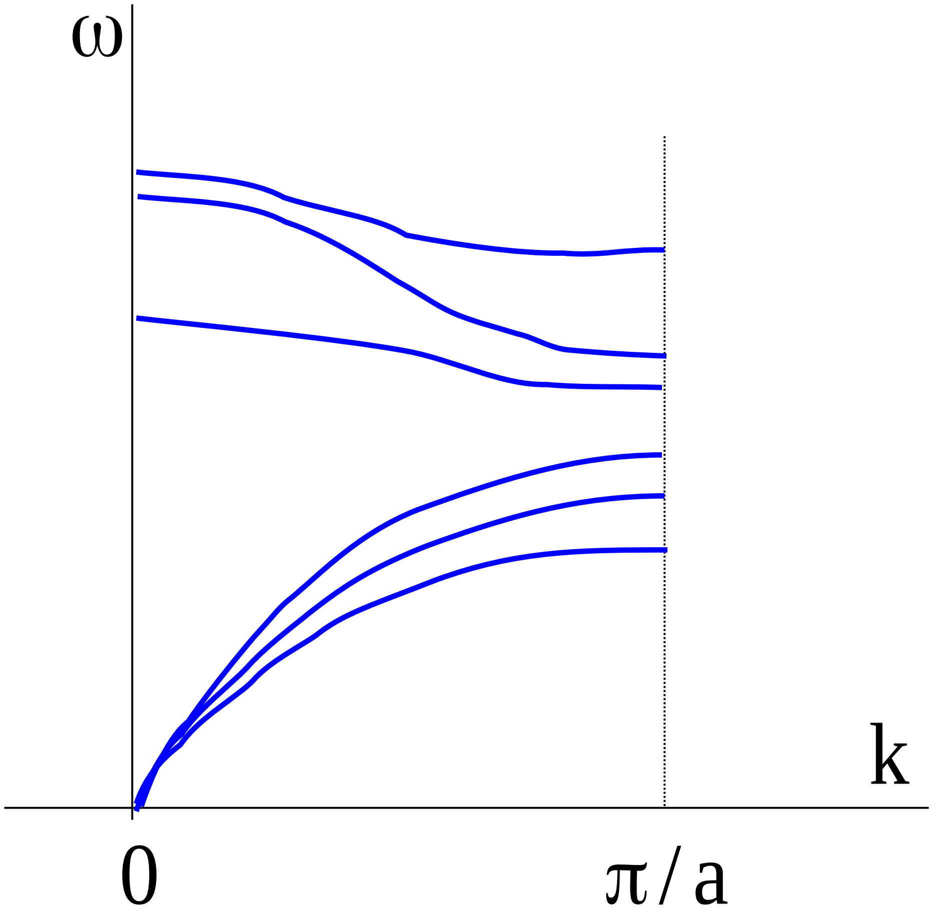
$$\omega_b(\vec{k}), \;\; b = 1, 2, 3$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – vázané oscilátory v krystalu

obecně: v krystalu **s** atomů v základní buňce

3**s** větví $\omega(k)$



3 akustické
1 LA
2 TA

3s-3 optické
(s-1) LO
(2s-2) TO

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony, kvantování

každý kmit (LHO) se kvantuje samostatně $$H = \sum_b \sum_{\vec{k}} H_{b\vec{k}}$$

kvantum energie kmitů mřížky: **FONON**

$$E = \sum_b \sum_{\vec{k}} \hbar\omega_b(\vec{k}) \left(\frac{1}{2} + n_{b\vec{k}}\right)$$

kvantové číslo; mód obsazen *n* fonony
stav PL .... $\left\{n_{b\vec{k}}\right\}$

střední energie kmitů: $$\langle E \rangle = \frac{\sum E\mathrm{e}^{-\beta E}}{\sum \mathrm{e}^{-\beta E}}$$

$$\langle E \rangle = \sum_b \sum_{\vec{k}} \langle E \rangle_{b\vec{k}} = \sum_b \sum_{\vec{k}} \hbar\omega_b(\vec{k}) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_b(\vec{k})} + 1}\right)$$

$$= \sum_b \sum_{\vec{k}} \hbar\omega_b(\vec{k}) \left(\frac{1}{2} + \langle n_{b\vec{k}} \rangle\right)$$

na 1 atom: $\dfrac{1}{N}\langle E \rangle$

na 1 mol: $\dfrac{N_A}{N}\langle E \rangle$

vysoké teploty: $T \to \infty \longrightarrow \beta \to 0$

$$\frac{1}{N}\langle E \rangle \approx \frac{1}{N}\sum_b \sum_k k_B T$$ (celkem 3N módů)

$$\frac{1}{N} 3N k_B T = 3k_B T$$ Dulong-Petitův zákon

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony, kvantování

fonony jako kvazičástice

	oscilátor	fonony
základní stav	$\frac{1}{2}\hbar\omega_0$	nejsou fonony
excitovaný stav	$\hbar\omega_0\left(\frac{1}{2}+n\right)$	$n_{b\vec{k}}$ $\left\{n_{b\vec{k}}\right\}$ $\langle n_{b\vec{k}}\rangle$

$$\vec{k}_f - \vec{k}_i = \vec{B} \qquad E_f = E_i$$

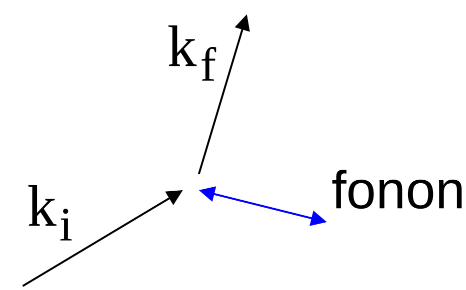
pružný, elastický, rozptyl

$$\vec{k}_f - \vec{k}_i = \vec{B} \pm \vec{q} \qquad E_f = E_i \pm \hbar\omega$$

nepružný, neelastický, rozptyl

$$\hbar\vec{k}_f - \hbar\vec{k}_i = \hbar\vec{B} \pm \hbar\vec{q}$$

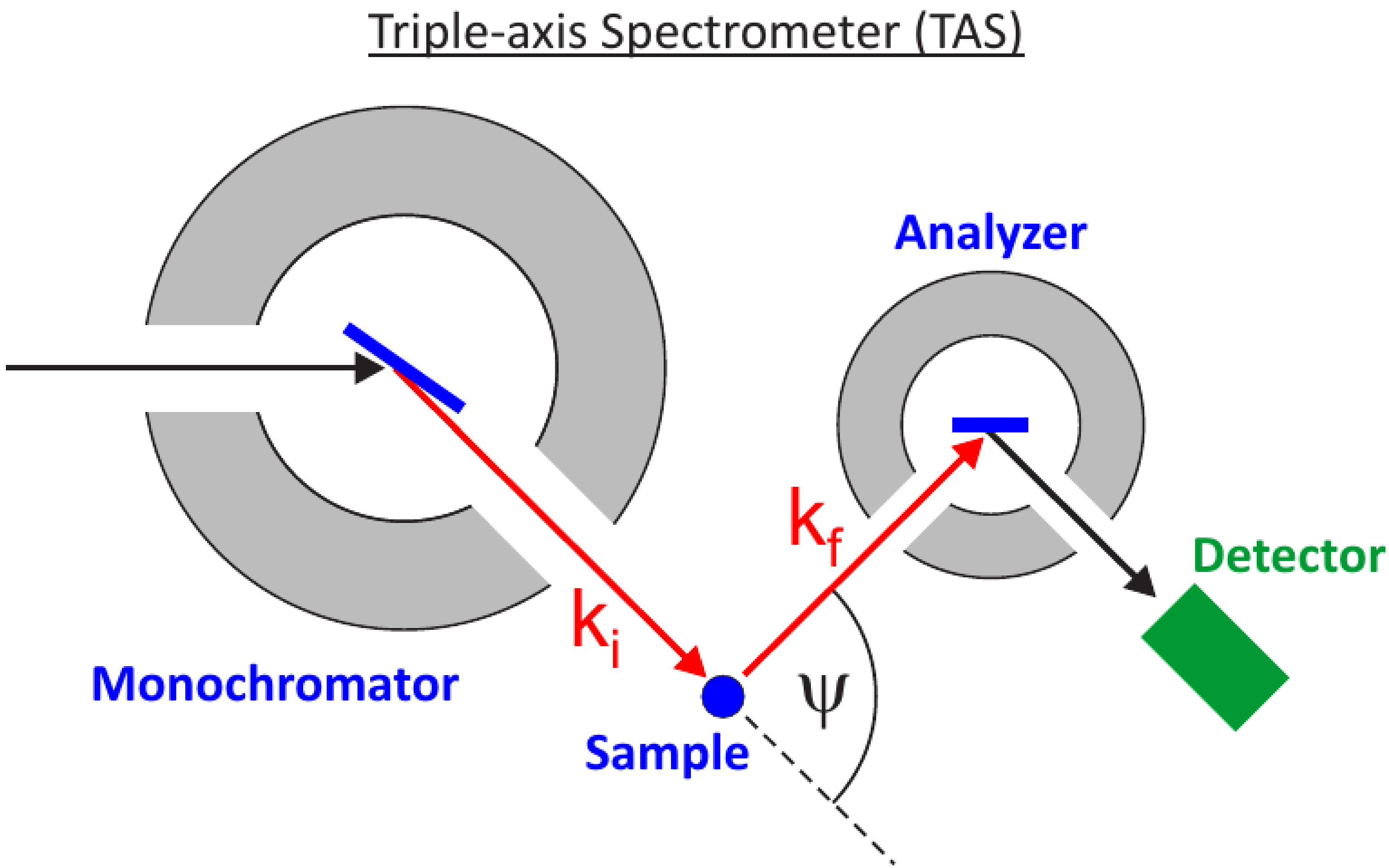
$$\frac{\hbar^2 k_f^2}{2M_n} = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2M_n} \pm \hbar\omega$$



Brockhouse, Chalk River (1964)

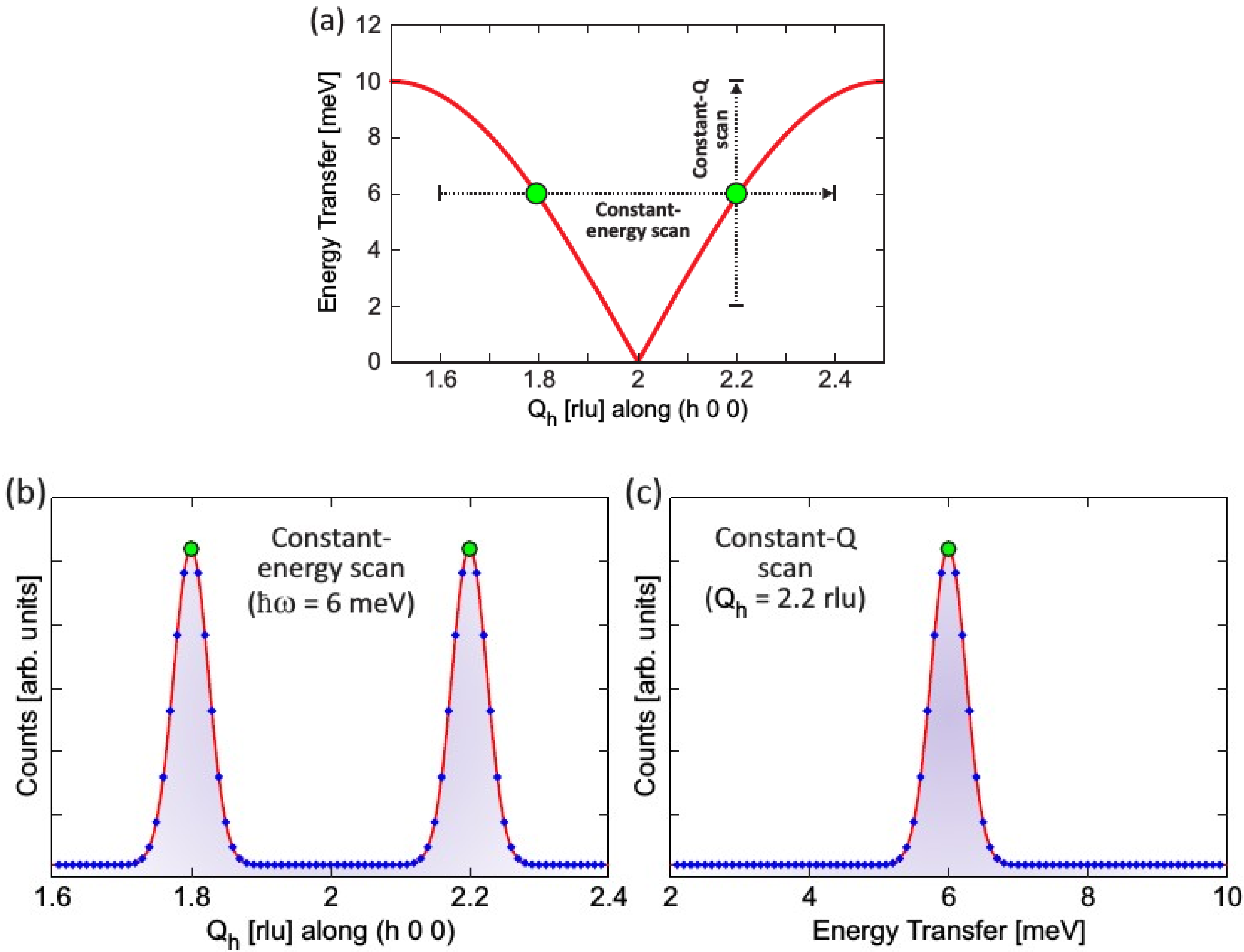
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony, kvantování



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony, kvantování



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony, kvantování

fonony jako kvazičástice

kvazičástice jen uvnitř krystalu, interaguje jako částice

silně interagující systém jader ⇒ systém neinteragujících kvantových kvazičástic

kvazičástice:

fonon	elastická vlna
plasmon	kolektivní elektronová vlna
magnon	magnetizační vlna
polaron	elektron + elastická deformace
exciton	polarizační vlna

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony – měrné teplo

$$C_V = \left.\frac{\partial U}{\partial T}\right|_V \qquad C_V = \frac{1}{N}\sum_b\sum_k k_B\left(\frac{\hbar\omega_{bk}}{k_BT}\right)^2\frac{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_{bk}}}{\left(\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_{bk}}-1\right)^2}$$

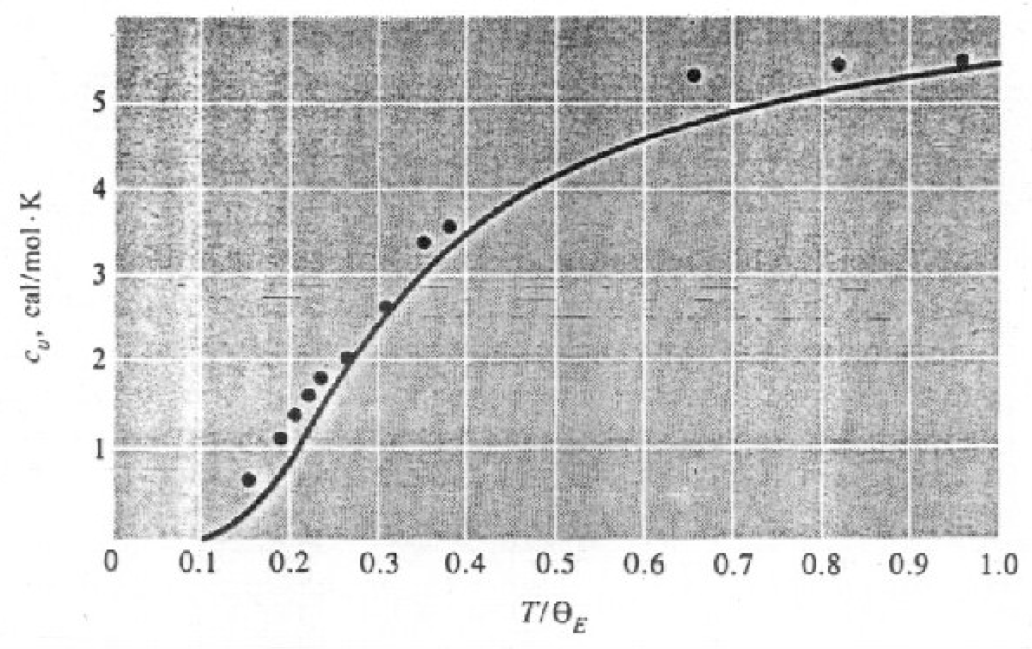
Einsteinův model $\omega_b(\vec{k}) = \omega_E \text{ pro } \forall\, bk$

1 mol (1-atomová mřížka): $$\boxed{C_V = 3N_Ak_B\left(\frac{\hbar\omega_E}{k_BT}\right)^2\frac{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_E}}{\left(\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_E}-1\right)^2}}$$

$$C_V = 3Rf_E\left(\frac{\theta_E}{T}\right)$$

$$f_E(x) \equiv x^2\frac{\mathrm{e}^x}{\left(\mathrm{e}^x-1\right)^2}$$

Einsteinova teplota $\theta_E \equiv \dfrac{\hbar\omega_E}{k_B}$



diamant, θ_E=1320 K

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony – měrné teplo $N \rightarrow \infty$

$$C_V = \frac{1}{N}\sum_b \sum_k f(k) \qquad \frac{1}{N}\sum_k f(k) = \frac{\Omega}{N}\sum_k \frac{(2\pi)^3}{\Omega}\frac{f(k)}{(2\pi)^3} \rightarrow \Omega_0 \int_{BZ} \frac{f(k)}{(2\pi)^3}\mathrm{d}^3k$$

Debyeův model $\omega_b(\vec{k}) = c|k| \ \forall\, bk$

$$\int_{BZ} \rightarrow \int_0^{k_D} \qquad N = \frac{\Omega}{(2\pi)^3}\frac{4}{3}\pi k_D^3 = \frac{\Omega\omega_D^3}{6\pi^2 c^3} \Rightarrow \omega_D^3 = \frac{N6\pi^2 c^3}{\Omega}$$

hustota stavů: $g(\omega) = \frac{\mathrm{d}N(\omega)}{\mathrm{d}\omega} = \frac{\Omega}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{c^3}$

pro 1 atom, 3 větve kmitů: $\langle U \rangle = 3\int_0^{\omega_D} g(\omega) f(\omega) E \mathrm{d}\omega$

$$x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$$

$$\boxed{C_V = 9k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x^4 \mathrm{e}^x}{(\mathrm{e}^x - 1)^2}\mathrm{d}x} \qquad \boxed{x_D = \frac{\theta_D}{T} = \frac{\hbar\omega_D}{k_B T}}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

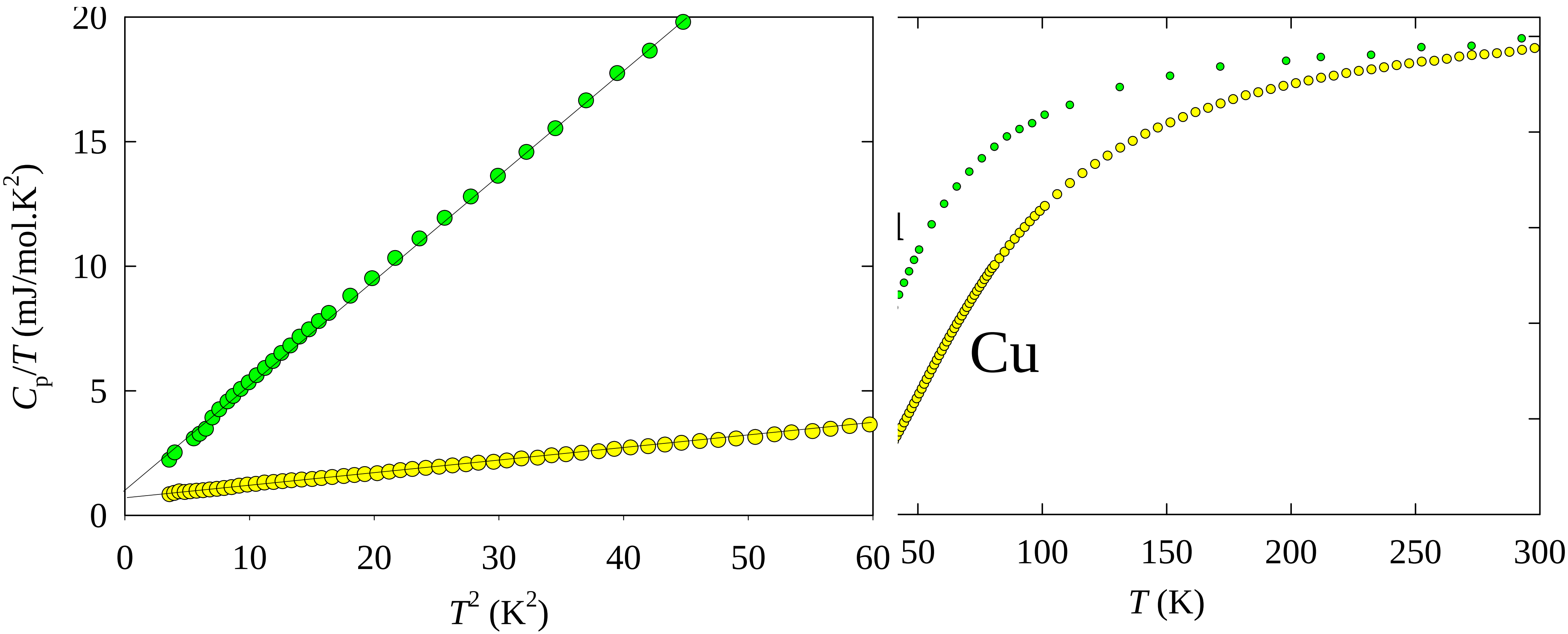
Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony – měrné teplo

Debyeův model

$$C_V = 9k_B\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3\int_0^{\frac{\theta_D}{T}}\frac{x^4\mathrm{e}^x}{(\mathrm{e}^x-1)^2}\mathrm{d}x$$

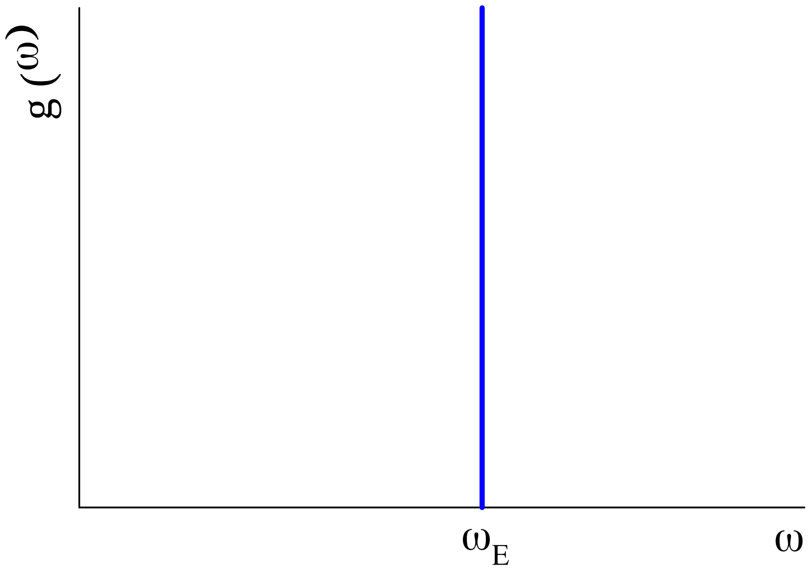
$T \to \infty \quad C_V = 3k_B$ Dulong-Petitův zákon

$T \to 0 \quad C_V = 234k_B\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$ na 1 mol: $C_V = 234N_Ak_B\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony – měrné teplo

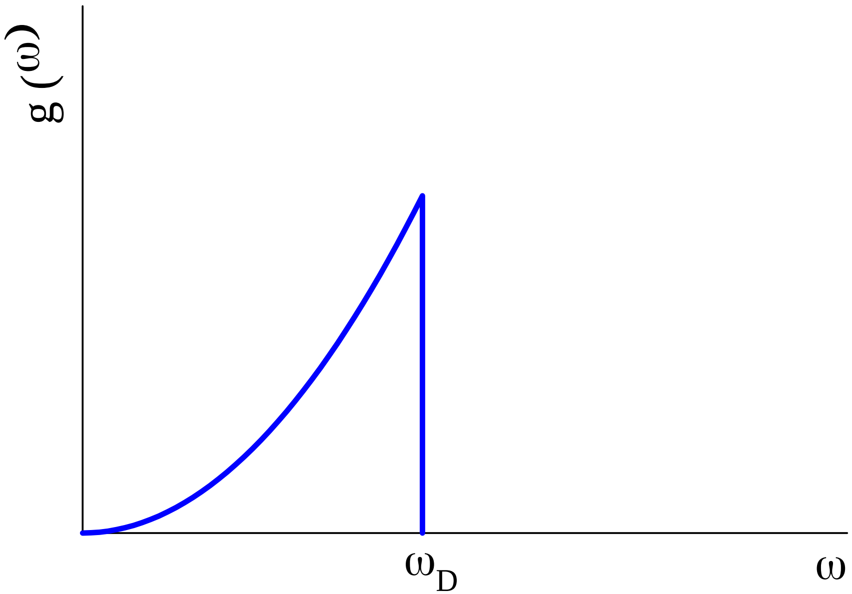


Einsteinův model

$$\omega_b(\vec{k}) = \omega_E \text{ pro } \forall\, bk$$

$$\theta_E \equiv \frac{\hbar\omega_E}{k_B}$$ Einsteinova teplota

dobré přiblížení např. pro optické fonony



Debyeův model

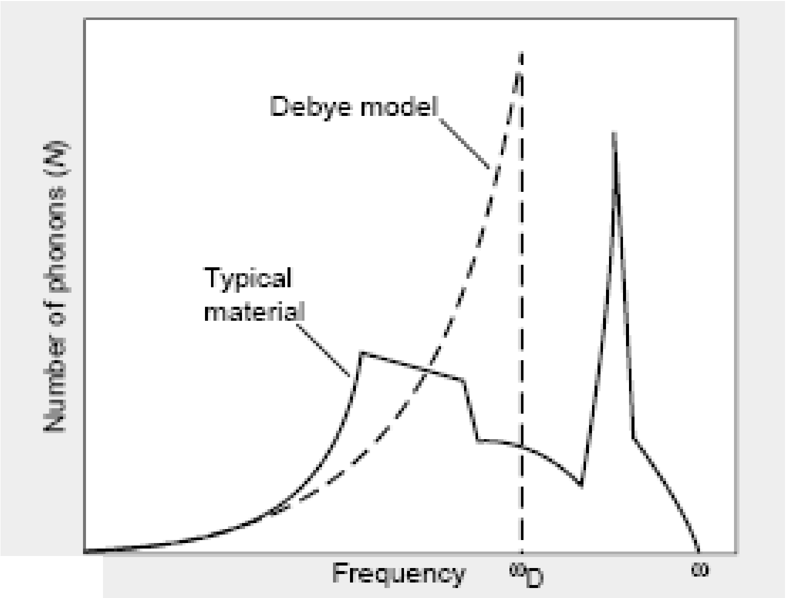
$$\omega_b(\vec{k}) = c|k| \;\forall\, bk$$

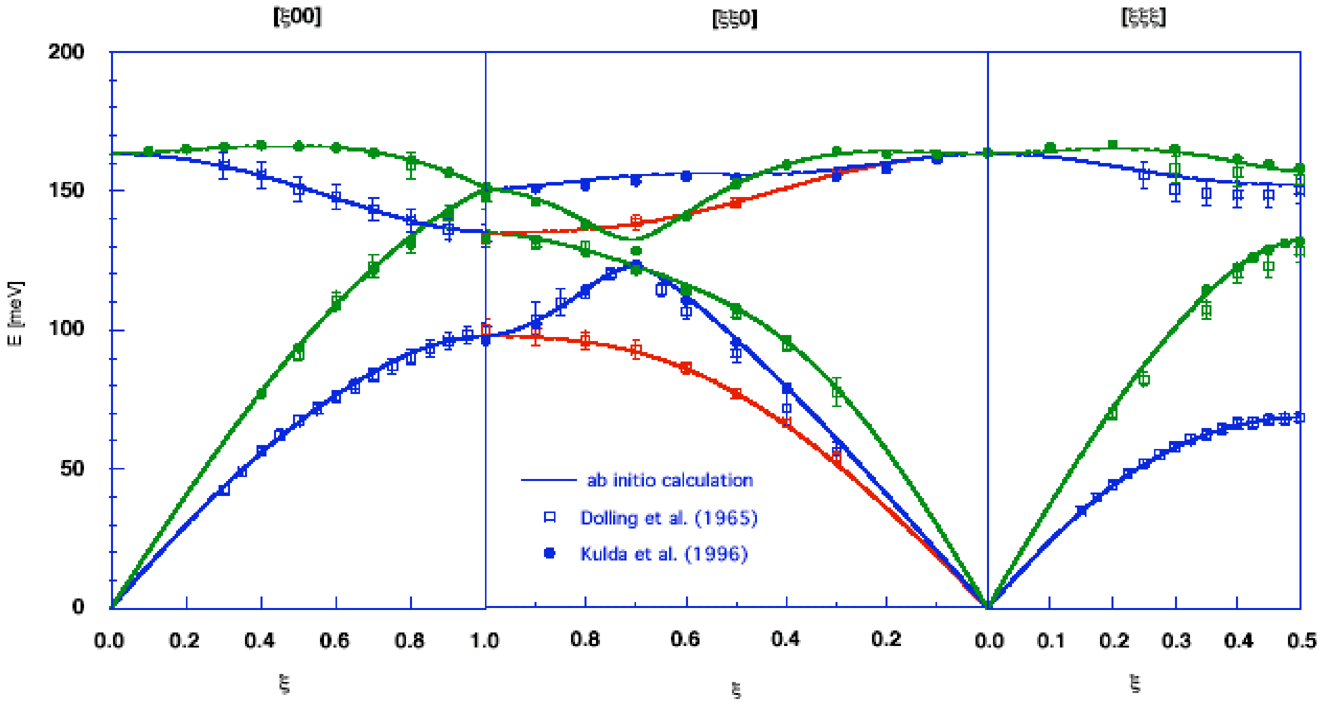
$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$$ Debyeova teplota

dobré přiblížení např. pro akustické fonony

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony – měrné teplo





diamant

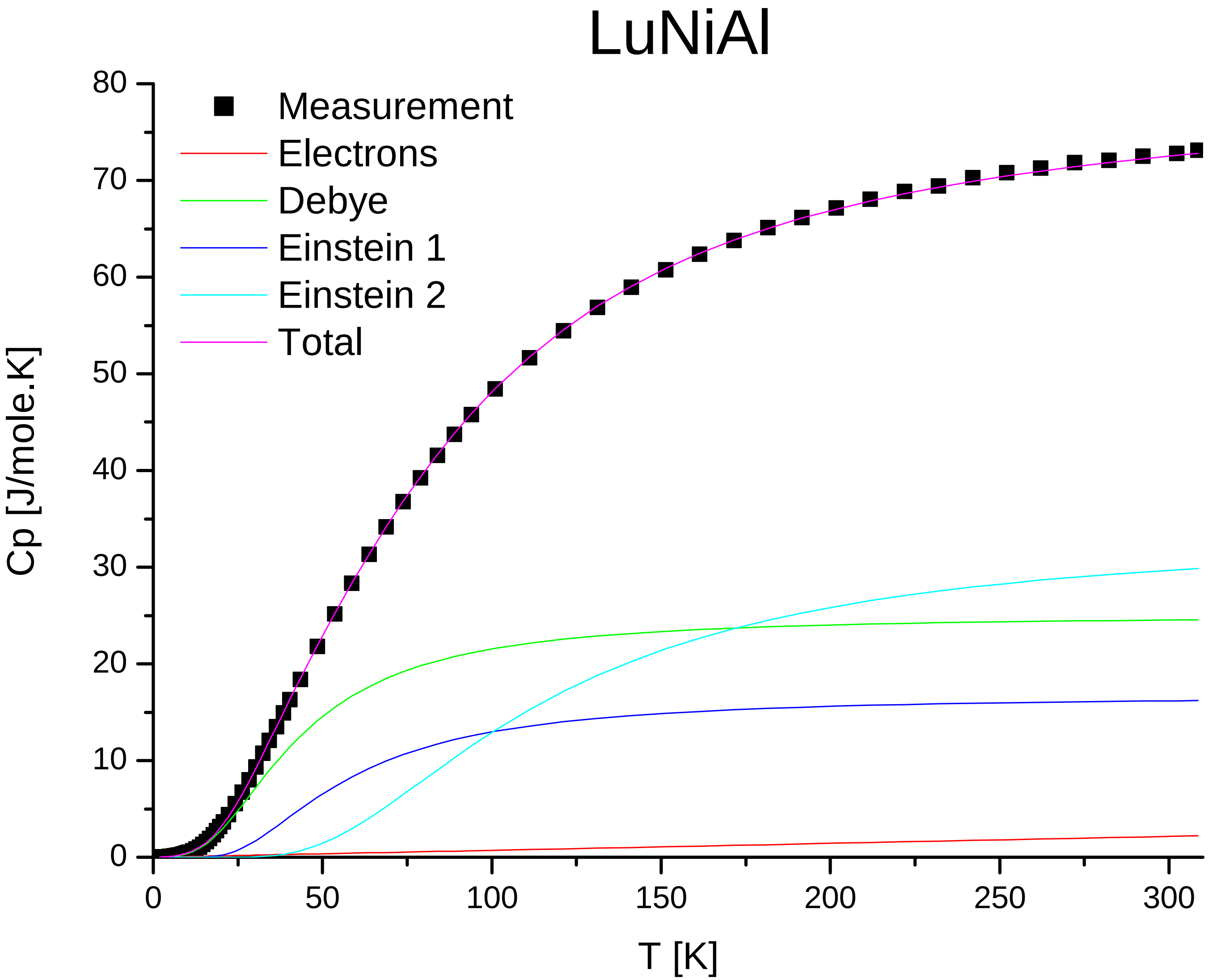
baze =
2 stejné atomy

→ 6 větví

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony – měrné teplo

LuNiAl…. 3 atomy → n = 3
3*n = 9 fononových větví → 3 akustické a 6 optických
aproximace exp. dat pomocí 3 parametrů, každý popisuje 3 fononové větve



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony – měrné teplo

Anharmonicita

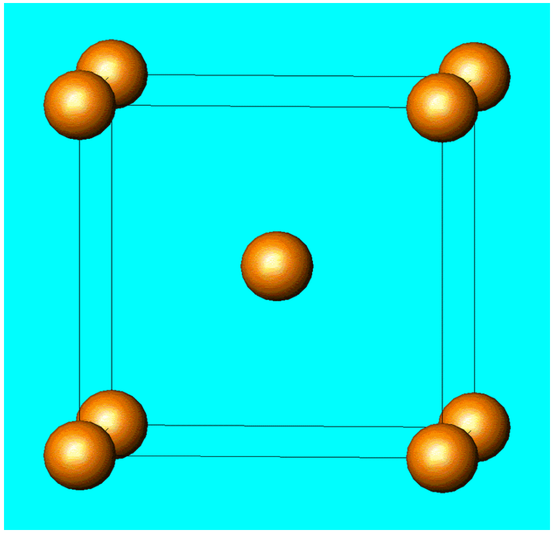
- neekvidistantně rozdělené vibrační hladiny u molekul
- „zakázané" vibrační přechody v molekulách vody → barva vody
- měrné teplo u vyšších teplot překračuje klasickou limitu (Dulong-Petit)
- vícefononové procesy

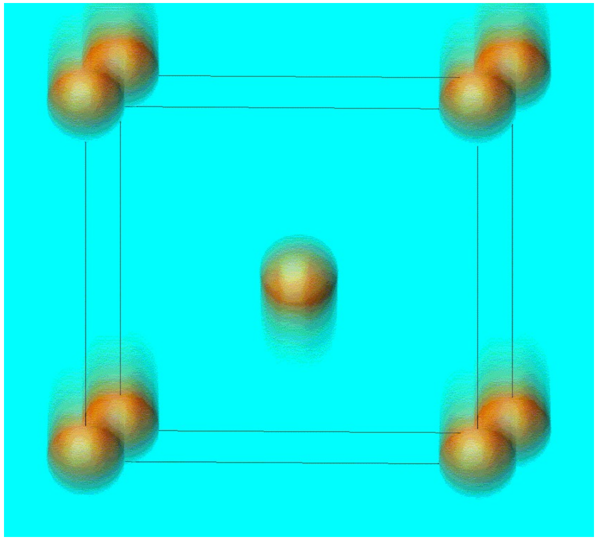
$$U(x) = U_0 + \frac{1}{2}\beta x^2 - \frac{1}{3}\gamma x^3 \ldots$$

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x \mathrm{e}^{-\frac{U(x)}{k_B T}}}{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{U(x)}{k_B T}}} \quad \Rightarrow \quad \langle x \rangle \approx \frac{\gamma}{\beta} k_B T$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony





$$I \approx |F(\vec{q})|^2 = \sum_n \sum_m f_n^* f_m \mathrm{e}^{-i\vec{q}(\vec{R_n} - \vec{R_m})}$$

$$\vec{R}_n = \vec{R}_{0,n} + \vec{u}_n \qquad \vec{R}_m = \vec{R}_{0,m} + \vec{u}_m$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony

$$I \approx \left\langle \sum_n f_n^* \mathrm{e}^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_{0,n}+\vec{u}_n)} \sum_m f_m \mathrm{e}^{-i\vec{q}\cdot(\vec{R}_{0,m}+\vec{u}_m)} \right\rangle$$

$$I \approx \sum_n \sum_m f_m f_n^* \mathrm{e}^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_{0,n}-\vec{R}_{0,m})} \left\langle \mathrm{e}^{i\vec{q}\cdot(\vec{u}_m-\vec{u}_n)} \right\rangle$$

$$\left\langle \mathrm{e}^{i\vec{q}\cdot(\vec{u}_m-\vec{u}_n)} \right\rangle = \left\langle \mathrm{e}^{iq\cdot(u_{mq}-u_{nq})} \right\rangle$$

Baker-Hausdorff teorém: $\boxed{\left\langle \mathrm{e}^{ix} \right\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\left\langle x^2 \right\rangle}}$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony

$$\left\langle \mathrm{e}^{iq\cdot(u_{mq}-u_{nq})} \right\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle (u_{mq}-u_{mq})^2 \right\rangle}$$

$$\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle (u_{mq}-u_{mq})^2 \right\rangle} = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{mq}^2 \right\rangle}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{nq}^2 \right\rangle}\mathrm{e}^{q^2\langle u_{mq}u_{nq}\rangle}$$

$$\mathrm{e}^{q^2\langle u_{mq}u_{nq}\rangle} = 1 + \left\{ \mathrm{e}^{q^2\langle u_{mq}u_{nq}\rangle} - 1 \right\}$$

$$\boxed{\begin{aligned} I \;\approx\; & \sum_n \sum_m f_m f_n^* \mathrm{e}^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_{0,n}-\vec{R}_{0,m})}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{mq}^2 \right\rangle}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{nq}^2 \right\rangle} + \\ + \; & \sum_n \sum_m f_m f_n^* \mathrm{e}^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_{0,n}-\vec{R}_{0,m})}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{mq}^2 \right\rangle}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{nq}^2 \right\rangle}\left\{ \mathrm{e}^{q^2\langle u_{mq}u_{nq}\rangle} - 1 \right\} \end{aligned}}$$

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony

$$I \approx \sum_n \sum_m f_m f_n^* \mathrm{e}^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_{0,n}-\vec{R}_{0,m})} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{mq}^2\right\rangle} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{nq}^2\right\rangle} + \\ + \sum_n \sum_m f_m f_n^* \mathrm{e}^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_{0,n}-\vec{R}_{0,m})} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{mq}^2\right\rangle} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{nq}^2\right\rangle} \left\{\mathrm{e}^{q^2\langle u_{mq} u_{nq}\rangle} - 1\right\}$$

$$f_n(q) = f_n(q)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{nq}^2\right\rangle} = f_n(q)\mathrm{e}^{-M_n}$$

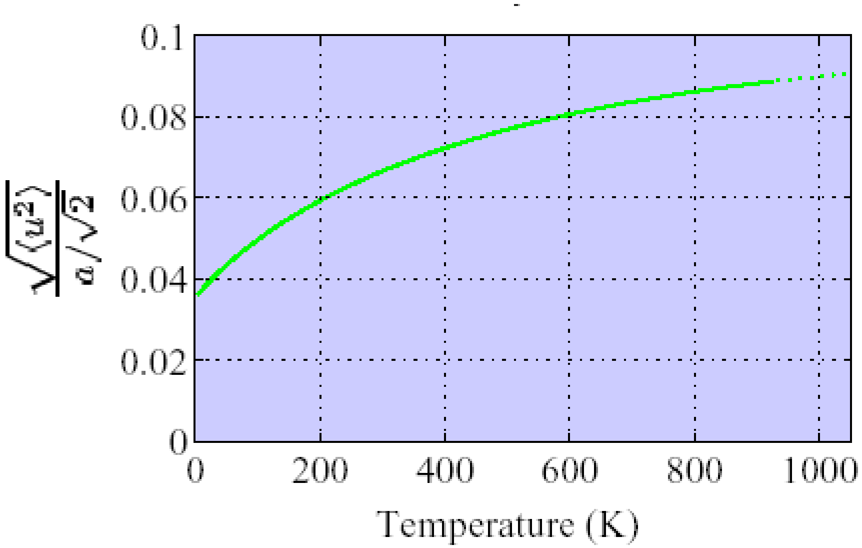
$$M_n = \frac{1}{2}q^2\left\langle u_{nq}^2\right\rangle = B_n\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2$$

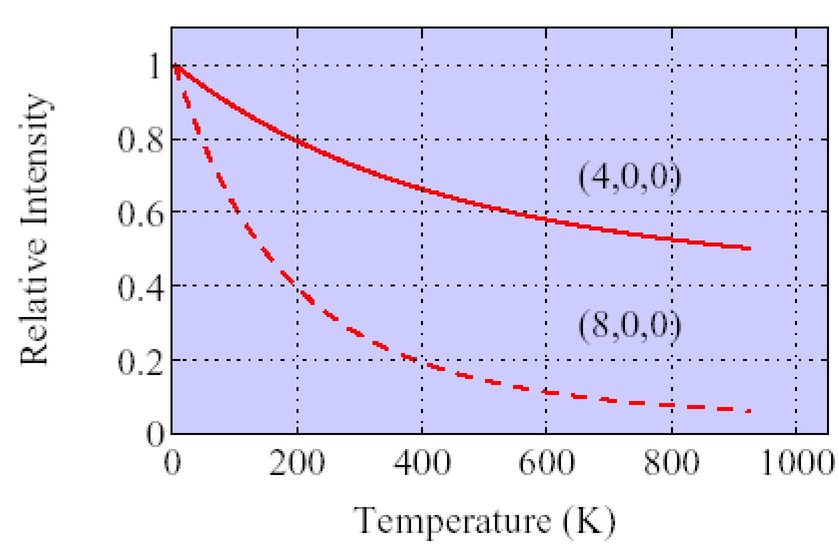
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony

Př: teplotní kmity Al v Debeyově harmonické aproximaci

$$B_T^{Al}[\mathrm{A}^2] = \frac{11492\mathrm{T}\,[\mathrm{K}]}{\mathrm{M}_{\mathrm{Al}}\Theta^2[\mathrm{K}^2]}\,\phi(\Theta/\mathrm{T}) + \frac{2873}{\mathrm{M}_{\mathrm{Al}}\Theta[\mathrm{K}]}$$





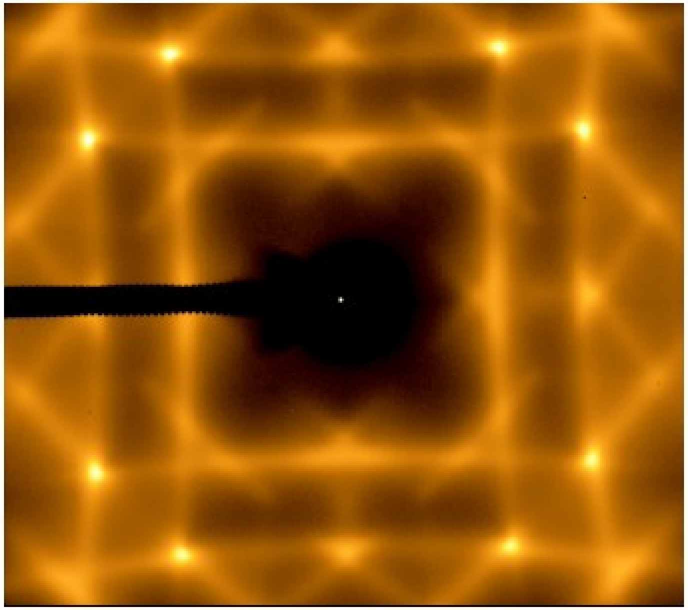
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

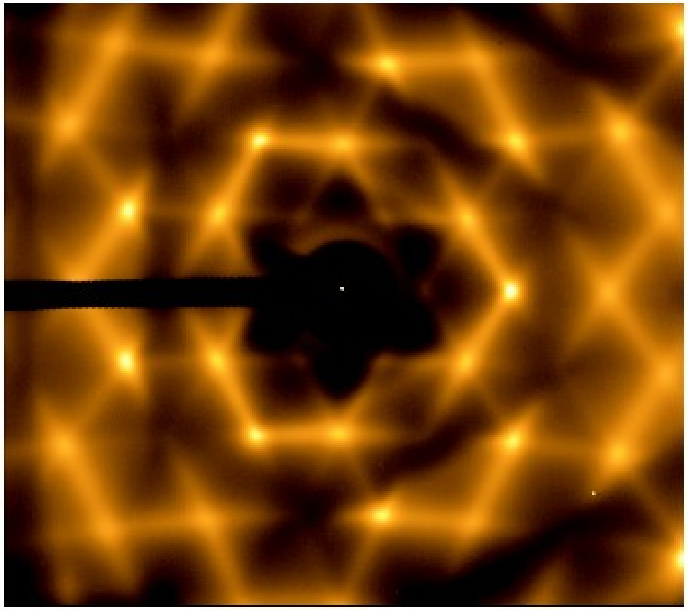
Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony

$$I \approx \sum_n \sum_m f_m f_n^* \mathrm{e}^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_{0,n}-\vec{R}_{0,m})} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{mq}^2\right\rangle} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{nq}^2\right\rangle} +$$

$$+ \sum_n \sum_m f_m f_n^* \mathrm{e}^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_{0,n}-\vec{R}_{0,m})} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{mq}^2\right\rangle} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q^2\left\langle u_{nq}^2\right\rangle} \left\{ \mathrm{e}^{q^2\langle u_{mq} u_{nq}\rangle} - 1 \right\}$$

// 100





// 111

teplotní difuzní rozptyl (TDS)