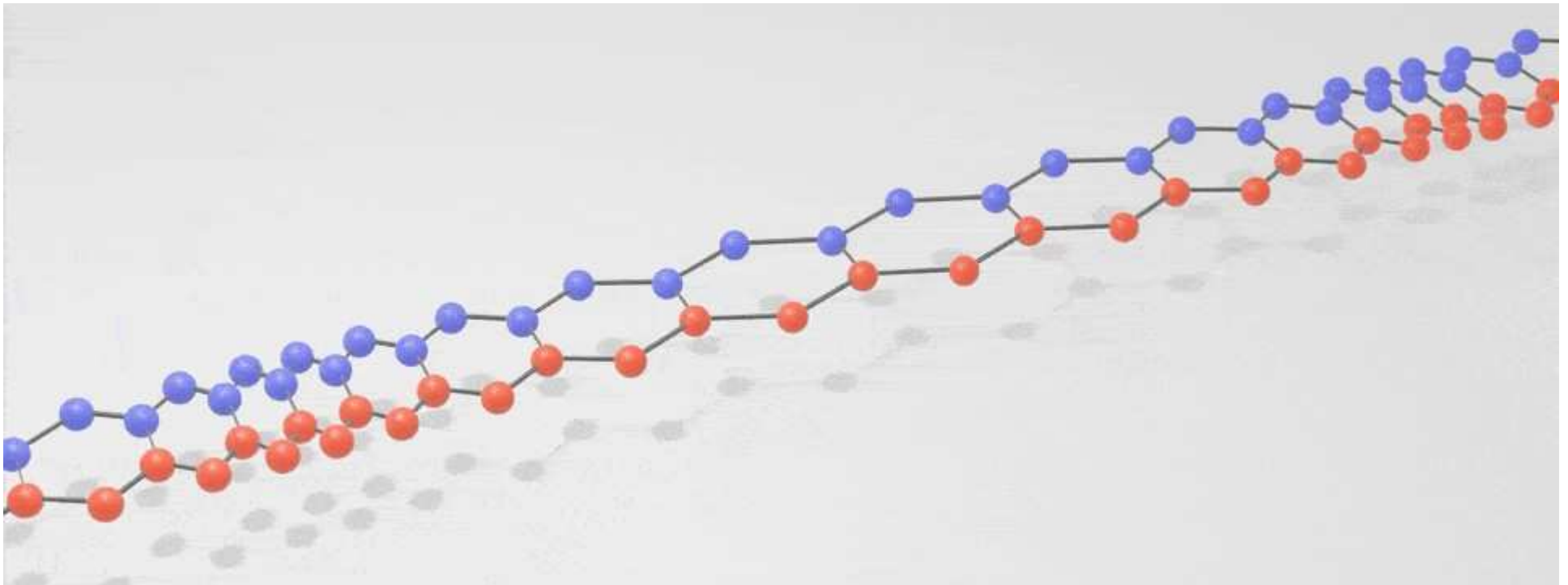


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

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 s atomů, které kmitají kolem rovnovážných poloh

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

výchyly kmitů jsou malé (Taylorův rozvoj):

$$U(R_{nm}) \approx U(R_{nm}^0) + Au_{nm} + Bu_{nm}^2 + Cu_{nm}^3 + \dots$$

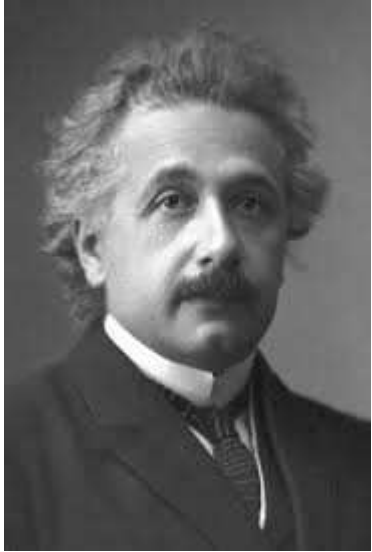
$\langle \dots \rangle = 0$

$\langle \dots \rangle = 0$
harmonická aproximace

krystal v harmonické aproximaci – soubor $3Ns$ 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.

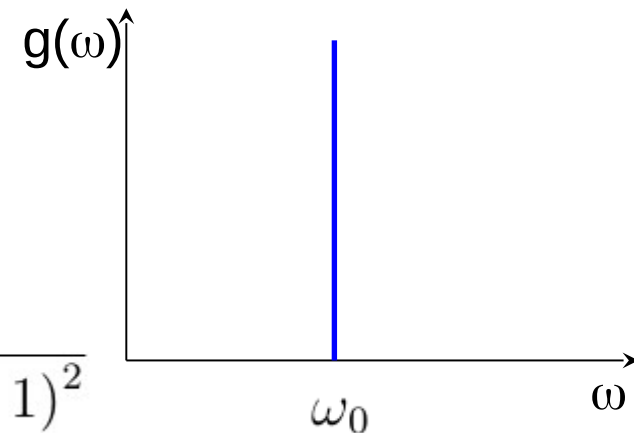
1907

Einsteinův model: všechny LHO mají stejnou frekvenci ω_0

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

každý atom
v základní buňce

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



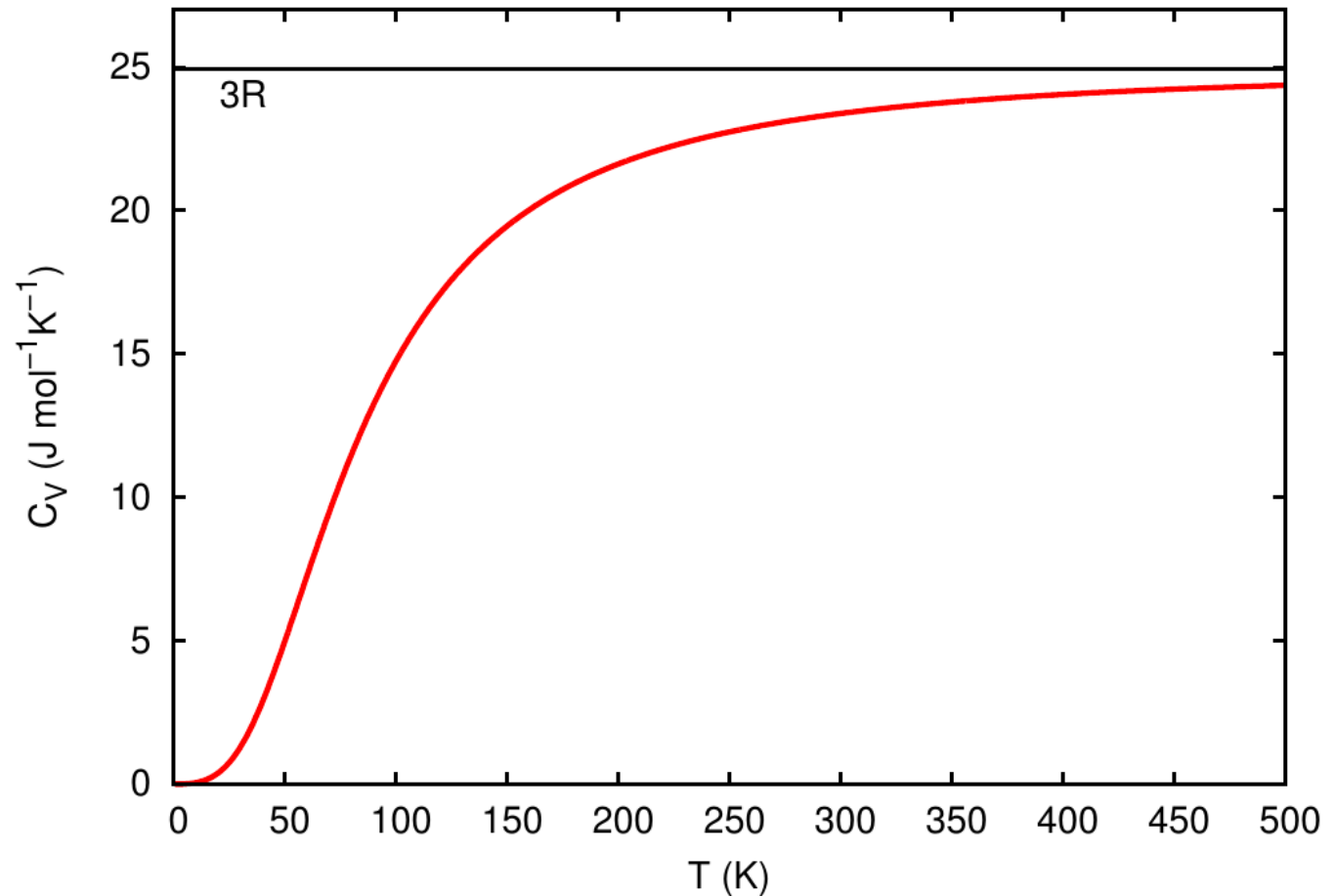
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži

limita vysokých teplot v Einsteinově modelu:

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

Dulong-Petitův zákon

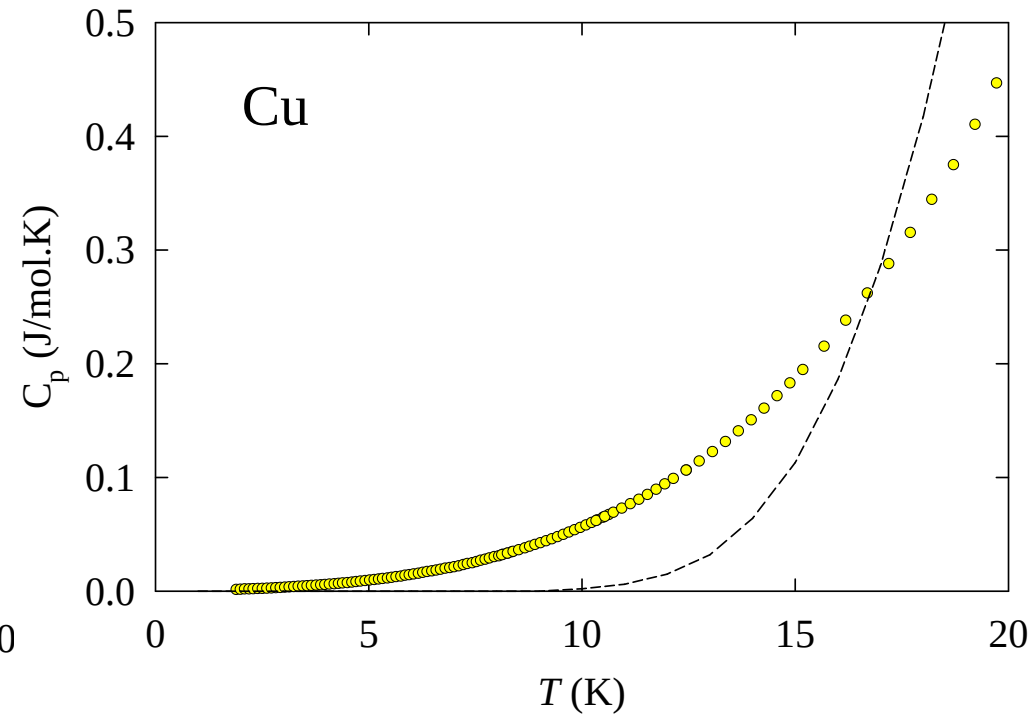
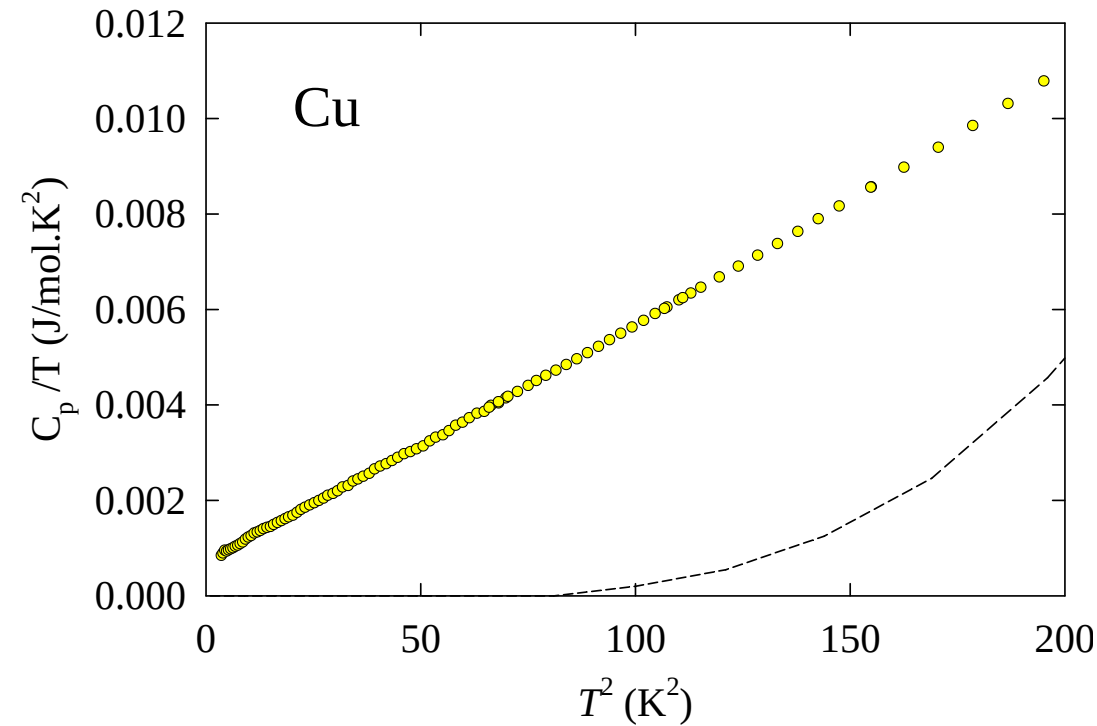


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži

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

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



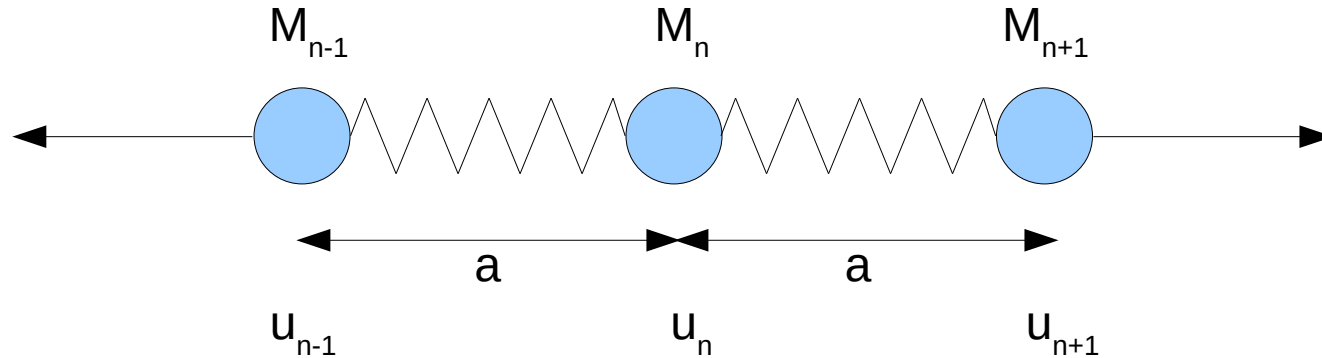
experiment: $C_V \sim \beta T^3$



oscilátory jsou vázané!

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

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



jednoatomový řetízek: $M_n = M$

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

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

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

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

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

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

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

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

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

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

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

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

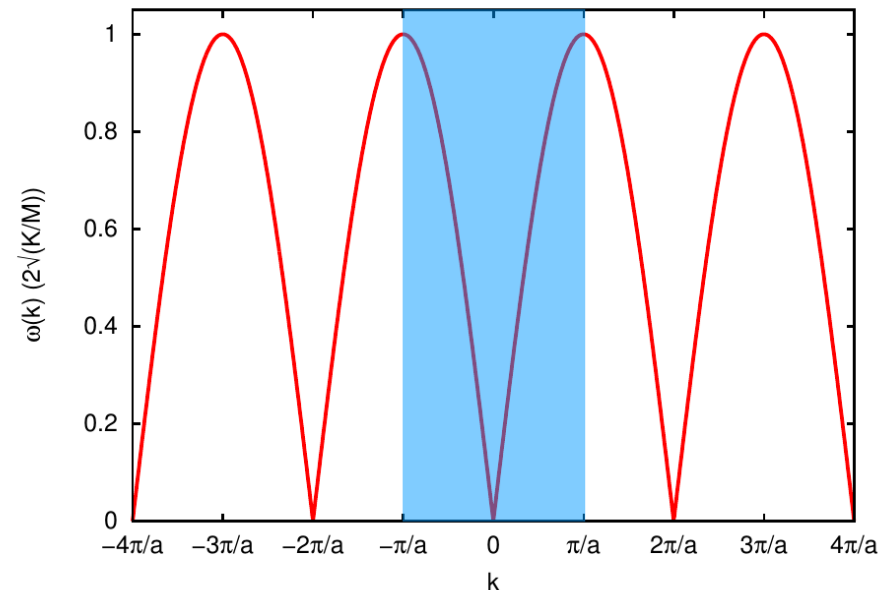
disperzní zákon

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

(periodické v k)

1. Brillouinova zóna

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

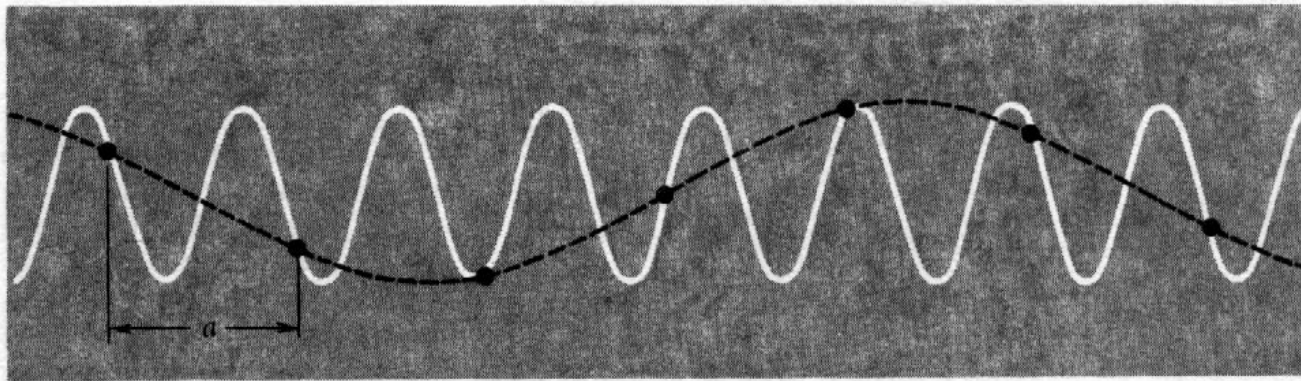


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

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

jak je to s řešením mimo 1BZ?

$$\left. \begin{aligned} U_n &= U_0 e^{inka} \\ U_n &= U_0 e^{ink'a} \end{aligned} \right\} 1 = e^{ina(k'-k)} \xrightarrow{\text{blue arrow}} 1 = e^{ia(k'-k)}$$
$$k' = k + \frac{2\pi}{a}h, \quad h \in \mathbb{Z}$$



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

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

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



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) $k \approx 0$

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

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

$$v_f \simeq \sqrt{\frac{K a^2}{M}}$$

$$v_g \simeq \sqrt{\frac{K a^2}{M}}$$

$$\omega(k) \approx v|k| \quad v = \sqrt{\frac{K a^2}{M}} = \sqrt{\frac{K a}{\frac{M}{a}}} = \sqrt{\frac{K a}{\rho}} \quad \longleftrightarrow \quad c = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$$

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):

$$k \approx 0 \quad \lambda \rightarrow \infty \quad u_n \rightarrow u(x)$$

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

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

vlnová rovnice

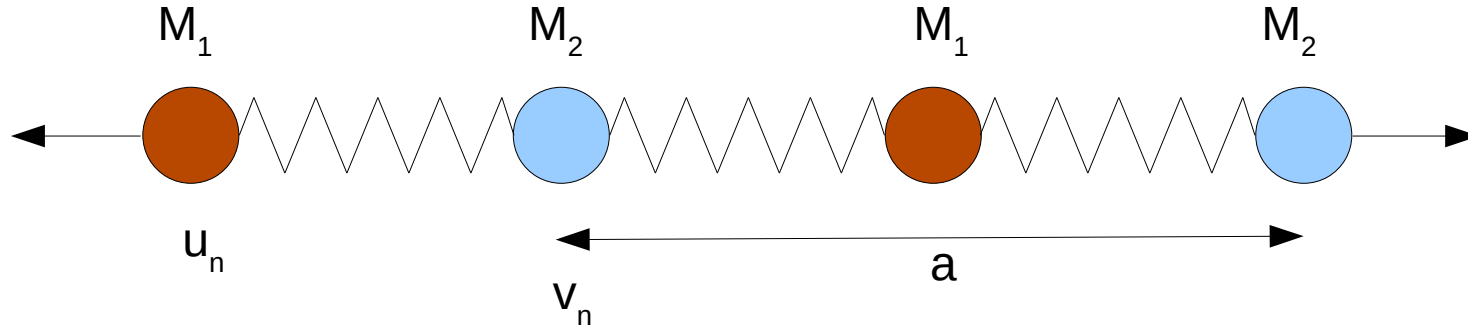
$$u_{tt} - v^2 u_{xx} = 0$$

$$v^2 = \frac{K a^2}{M}$$

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:

$$\begin{aligned} u_n &= U_n e^{-i\omega t} = U_0 e^{inka} e^{-i\omega t} \\ v_n &= V_0 e^{inka} e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

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

řešení – determinant roven 0

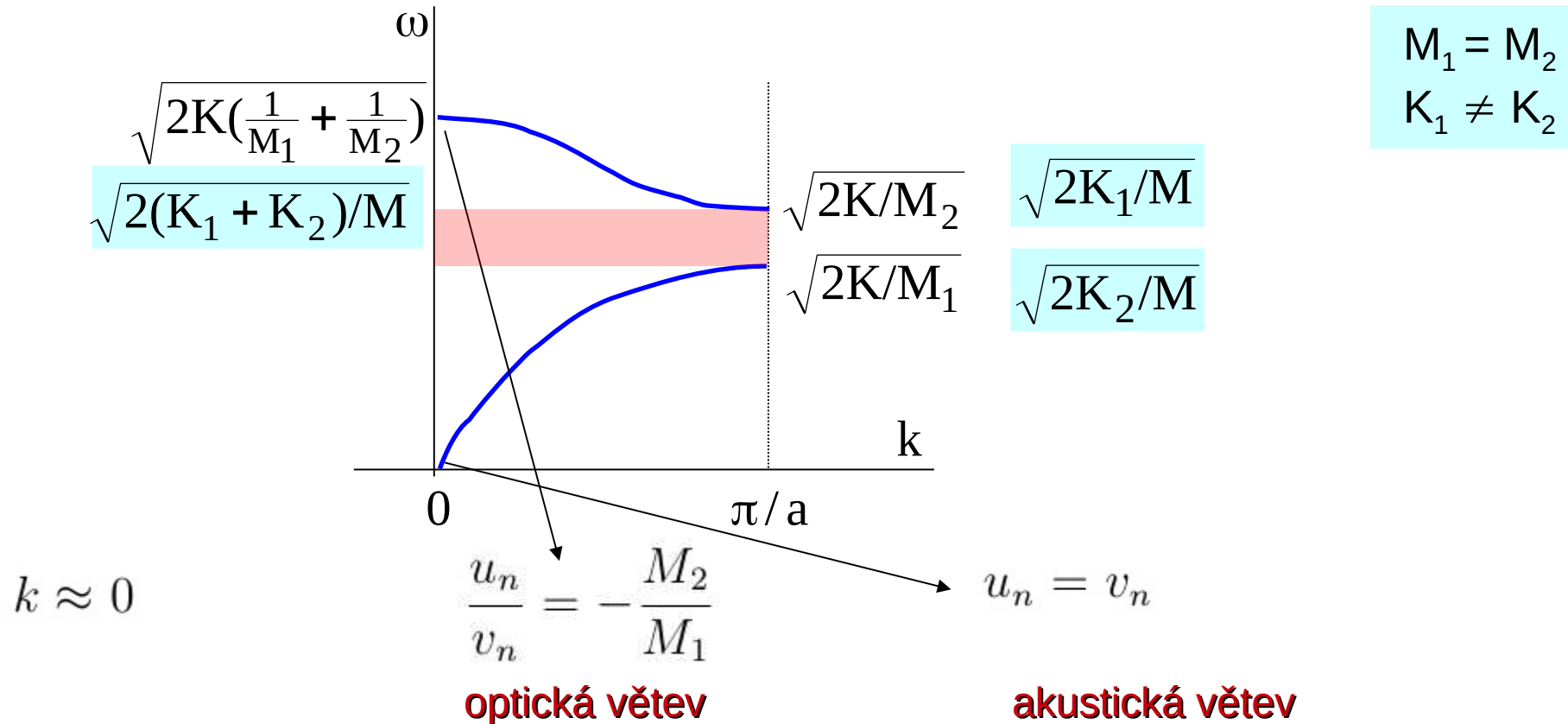
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

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

dvouatomový řetízek

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

$$M_1M_2\omega^4 - 2K(M_1 + M_2)\omega^2 + 2K^2(1 - \cos(ka)) = 0$$

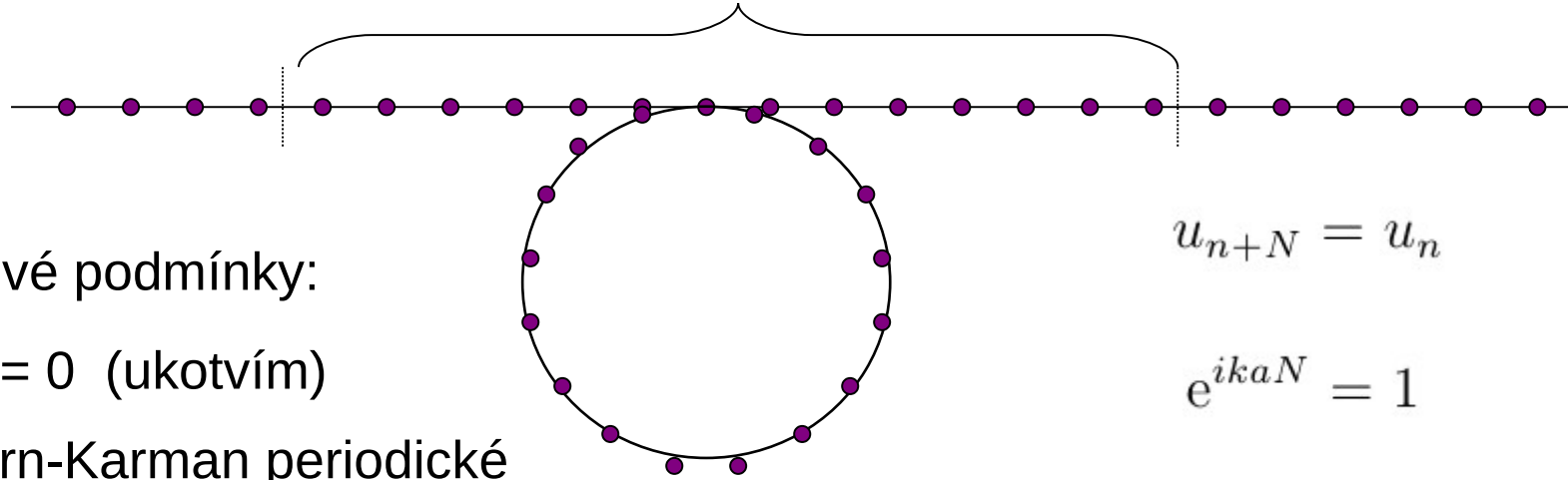


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

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

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

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

N atomů (vázané kmity)



N nezávislých vibrací k , $\omega(k)$

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

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

krystal (3D)

objem	$\Omega (= L_x L_y L_z)$	objem buňky
atomů	$N (N_x N_y N_z)$	$\Omega_0 = \frac{\Omega}{N}$

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

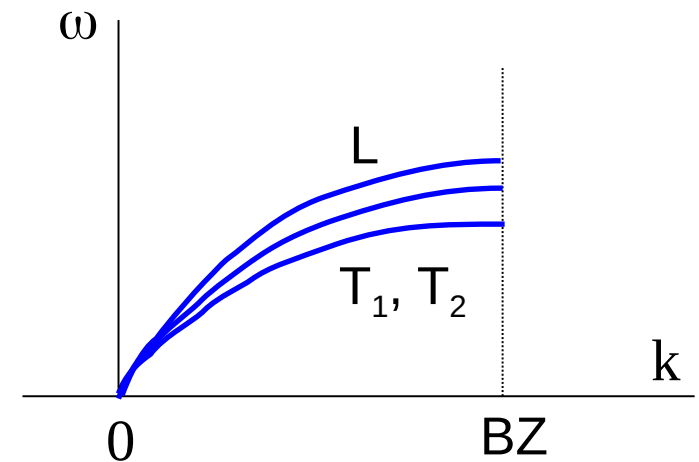
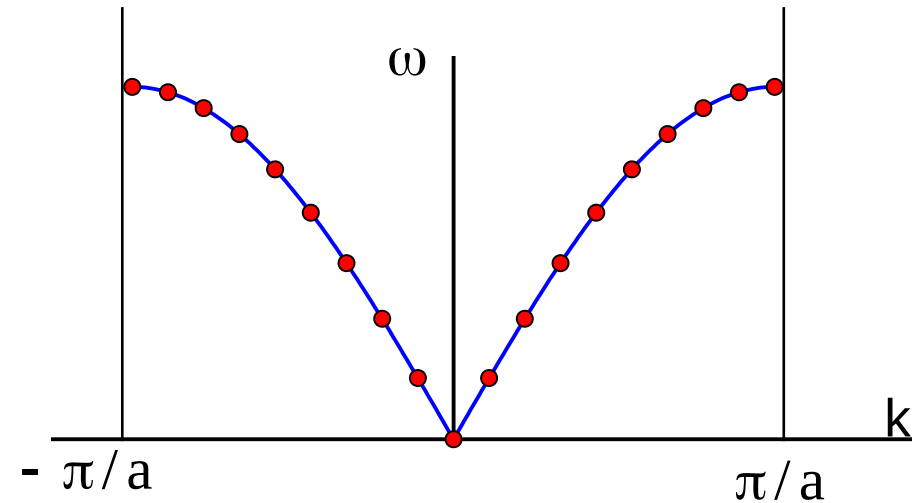
$$\vec{k} = (k_1, k_2, k_3), \quad \omega(\vec{k})$$

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 $\longrightarrow$ 3 větve kmitového spektra

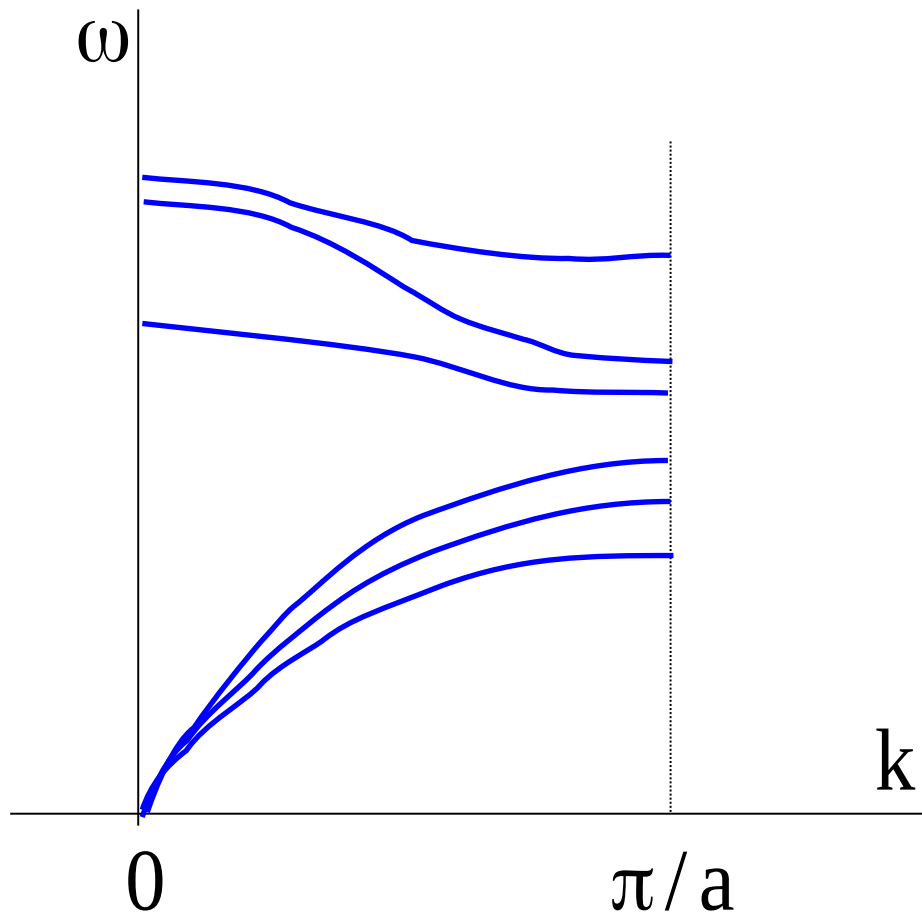
$$\omega_b(\vec{k}), \quad b = 1, 2, 3$$



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – vázané oscilátory v krystalu

obecně: v krystalu $\underline{s}$ atomů v základní buňce



$3\underline{s}$ větví $\omega(k)$

3 akustické
1 LA
2 TA

3s-3 optické
(s-1) LO
(2s-2) TO

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

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 $\{n_{b\vec{k}}\}$

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

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

vysoké teploty: $T \rightarrow \infty \rightarrow \beta \rightarrow 0$

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

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

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

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

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony, kvantování

fonony jako kvazičástice

oscilátor

fonony

základní stav $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$

excitovaný stav $\hbar\omega_0 \left(\frac{1}{2} + n \right)$

nejsou fonony

$$n_{b\vec{k}} \quad \{n_{b\vec{k}}\} \quad \langle n_{b\vec{k}} \rangle$$

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

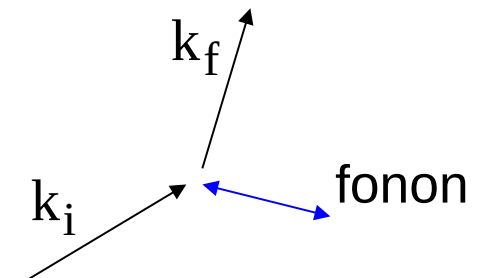
pružný, elastický, rozptyl

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

nepružný, neelastický, rozptyl

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

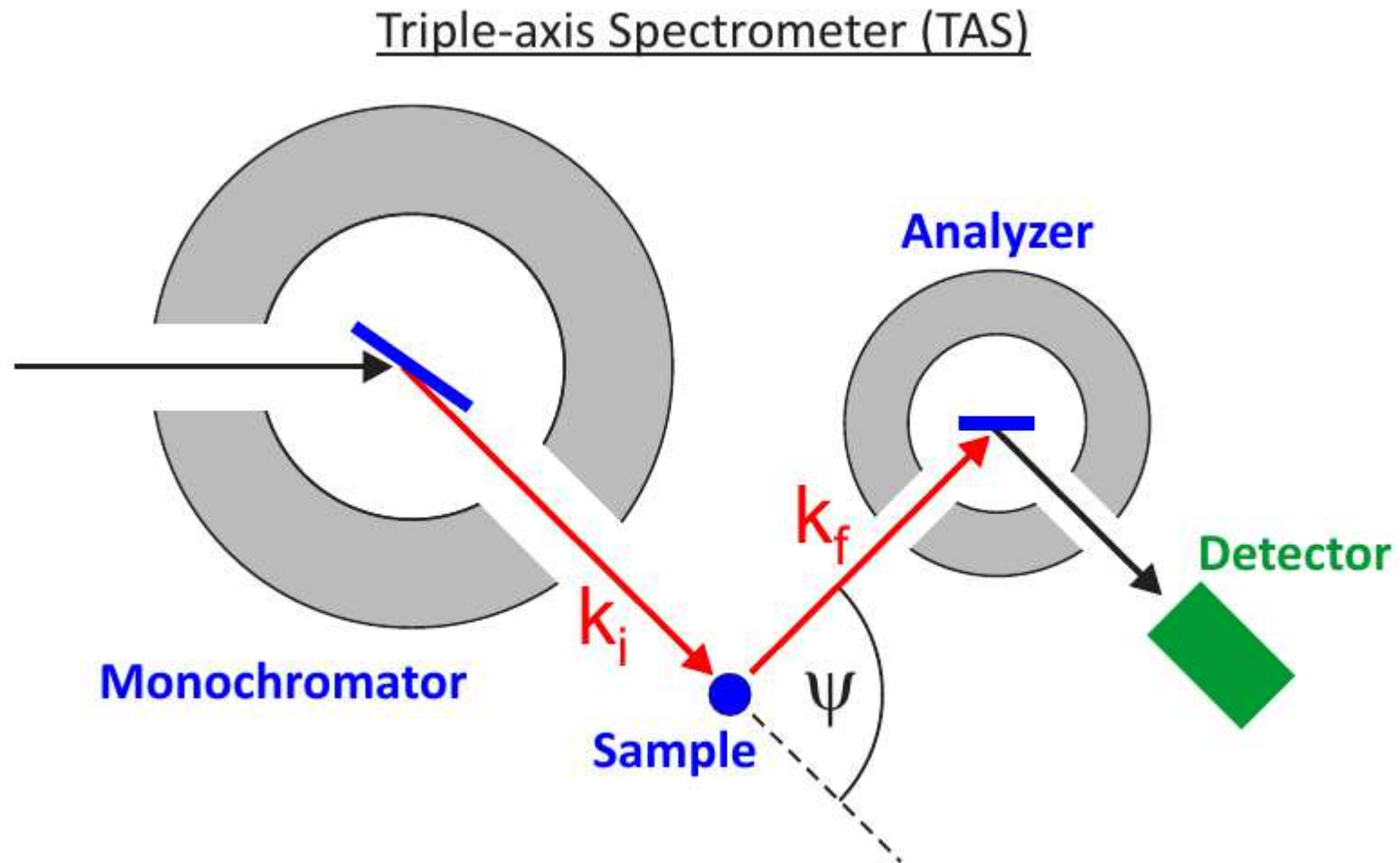
$$\frac{\hbar^2 k_f^2}{2M_n} = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2M_n} \pm \hbar\omega$$



Brockhouse, Chalk River (1964)

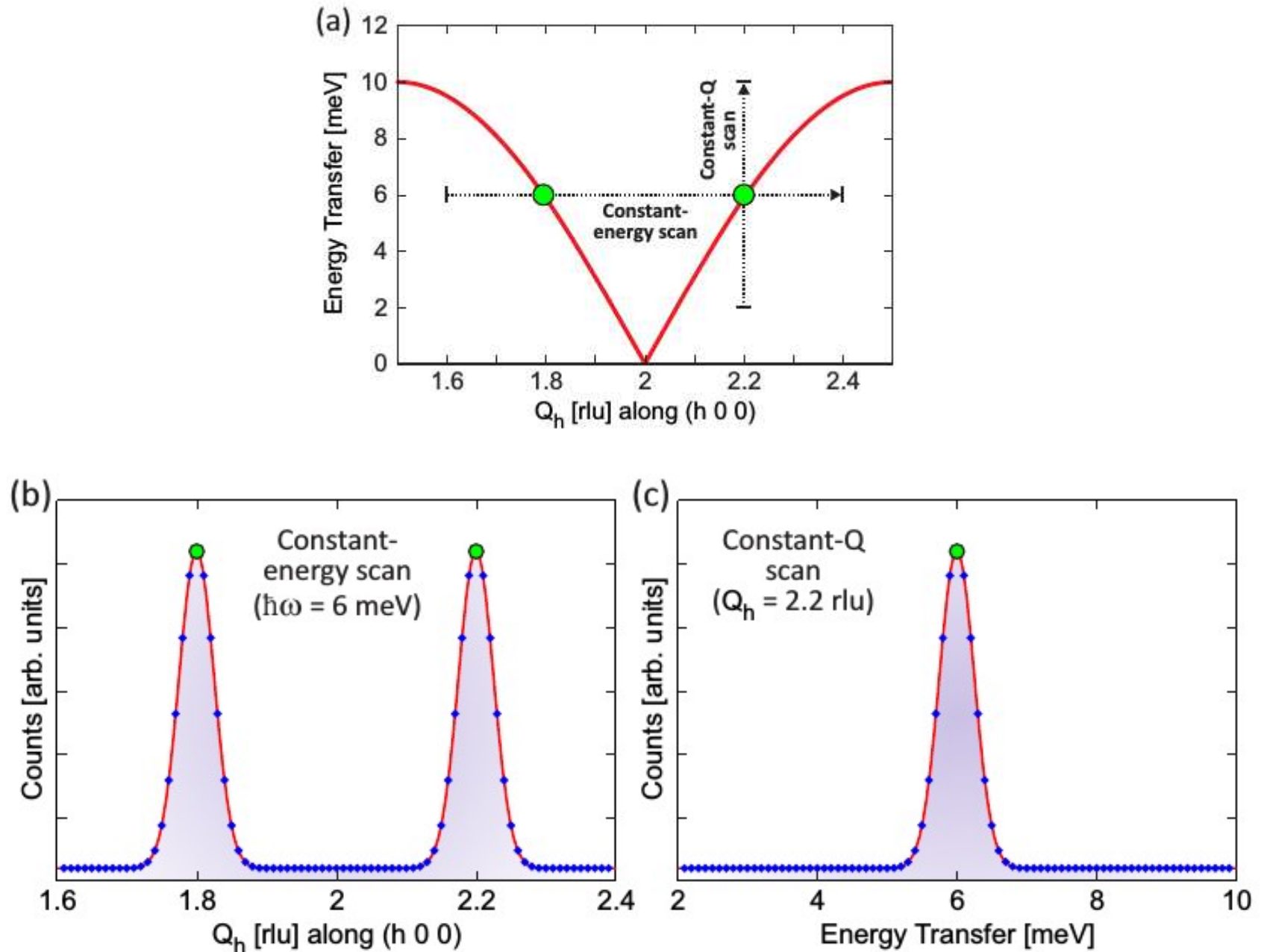
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

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 mřížce – fonony – měrné teplo

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

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

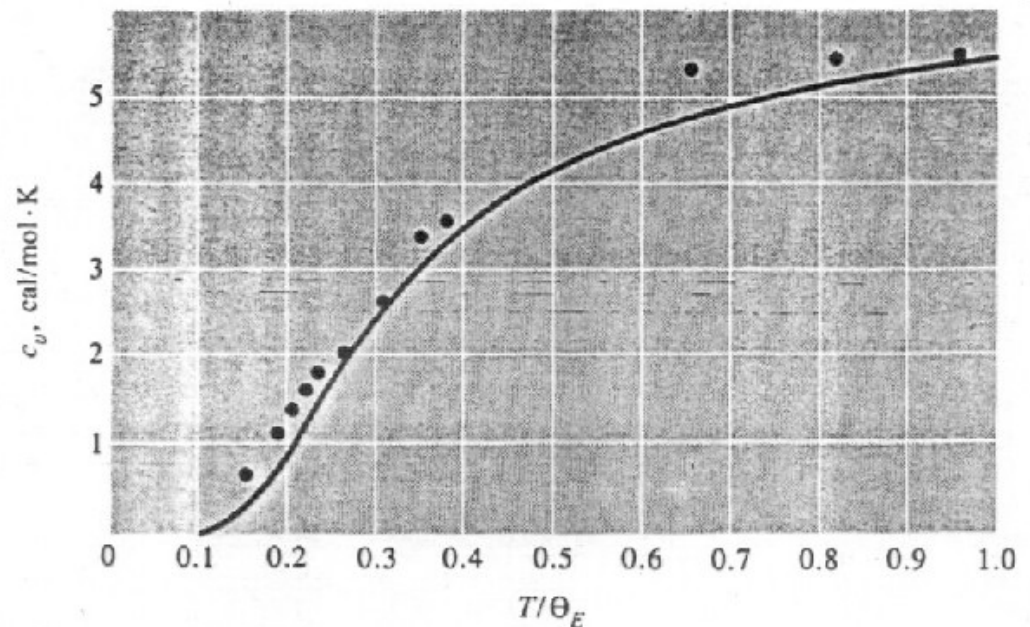
1 mol (1-atomová mřížka):

$$C_V = 3N_A k_B \left(\frac{\hbar \omega_E}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\beta \hbar \omega_E}}{(e^{\beta \hbar \omega_E} - 1)^2}$$

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

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

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



diamant, $\theta_E = 1320$ K

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

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

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

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

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

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

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

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

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

$$x_D = \frac{\theta_D}{T} = \frac{\hbar\omega_D}{k_B T}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony – měrné teplo

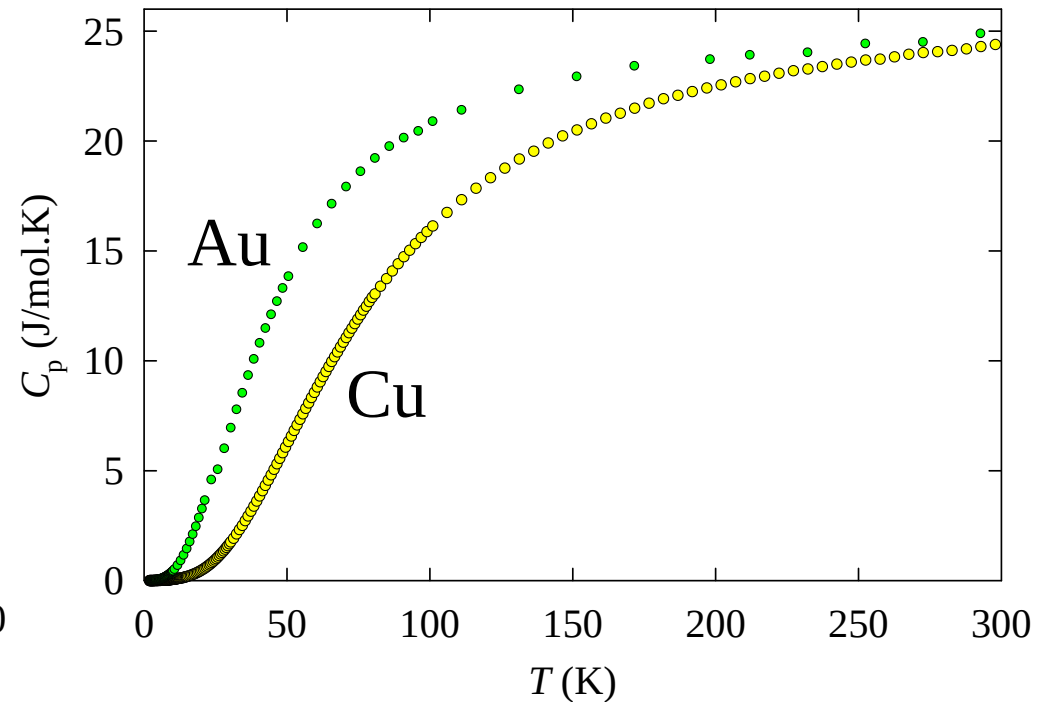
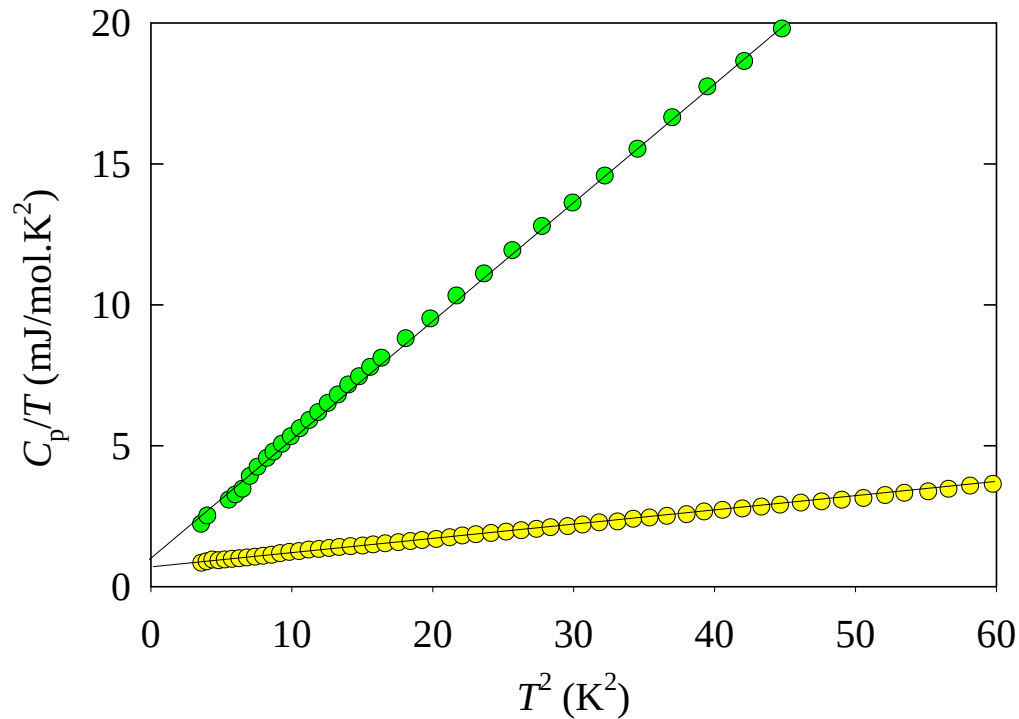
Debyeův model

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

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

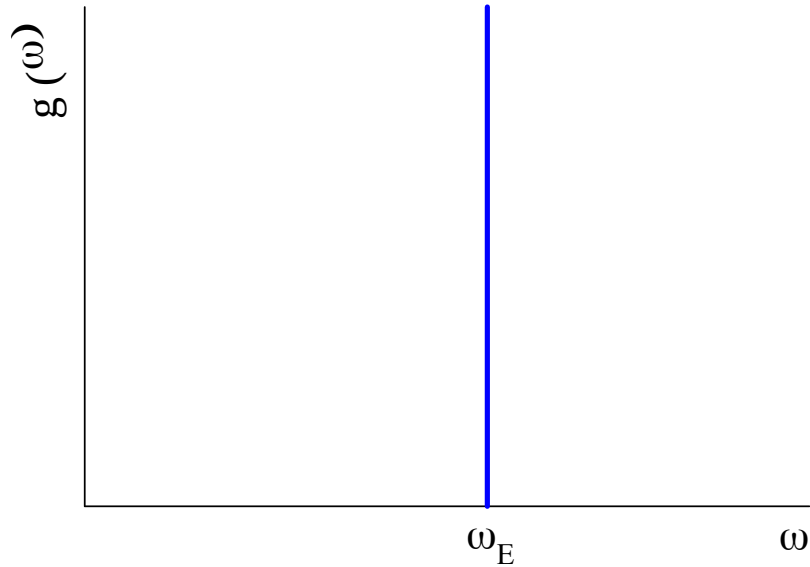
$$T \rightarrow 0 \quad C_V = 234k_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3$$

$$\text{na 1 mol: } C_V = 234N_A k_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3$$



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony – měrné teplo

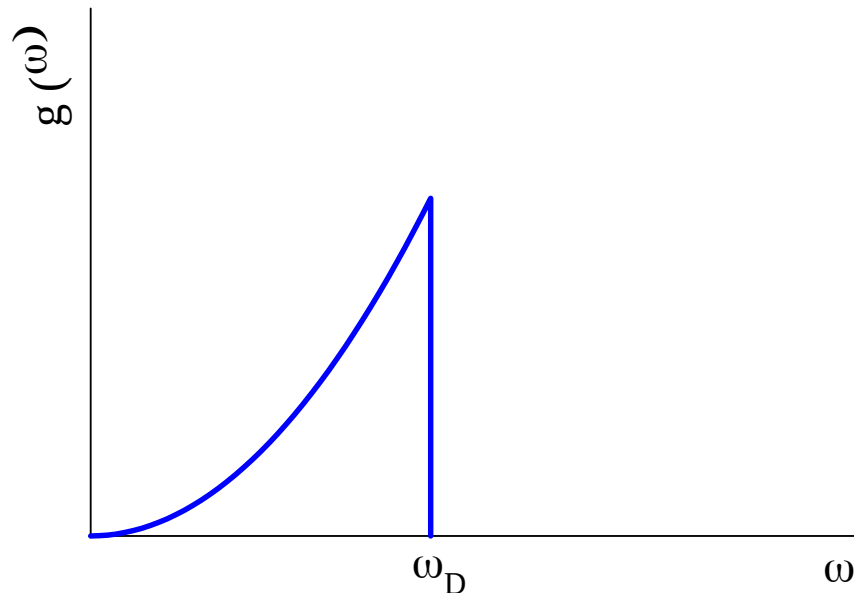


Einsteinův model

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

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

dobré přiblížení např. pro optické fonony



Debyeův model

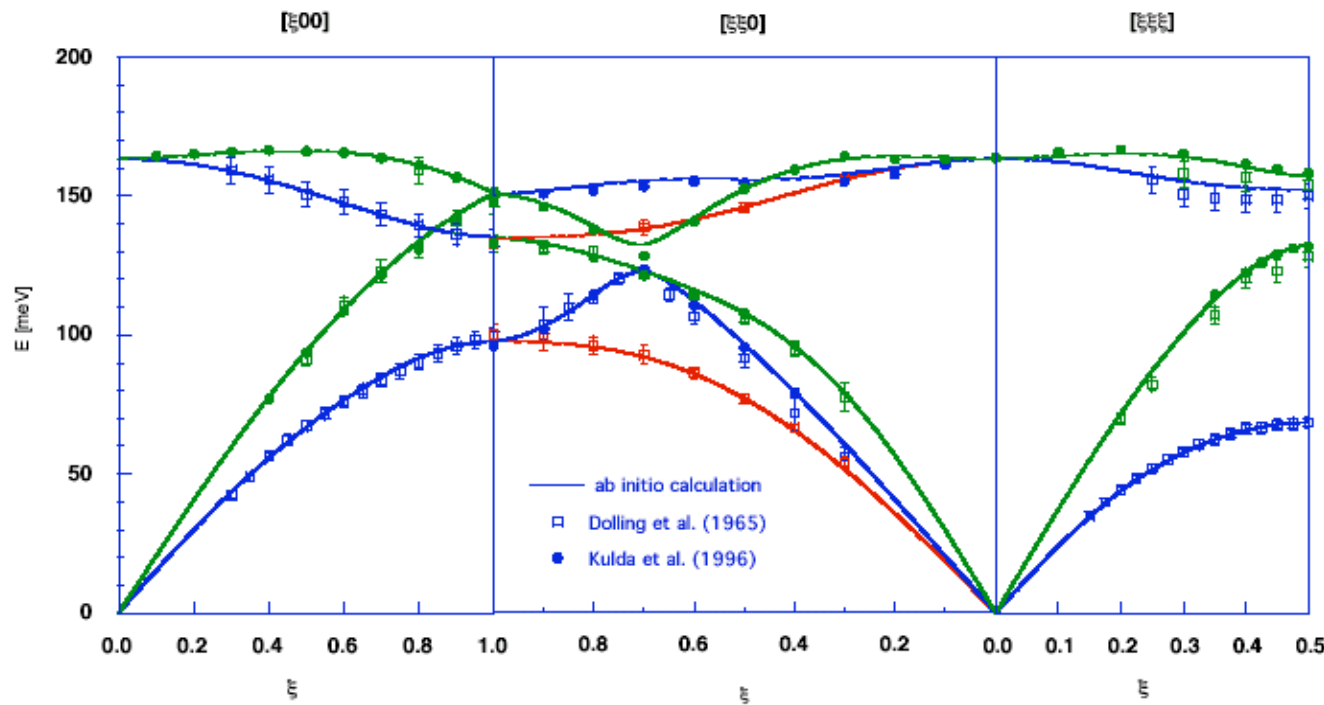
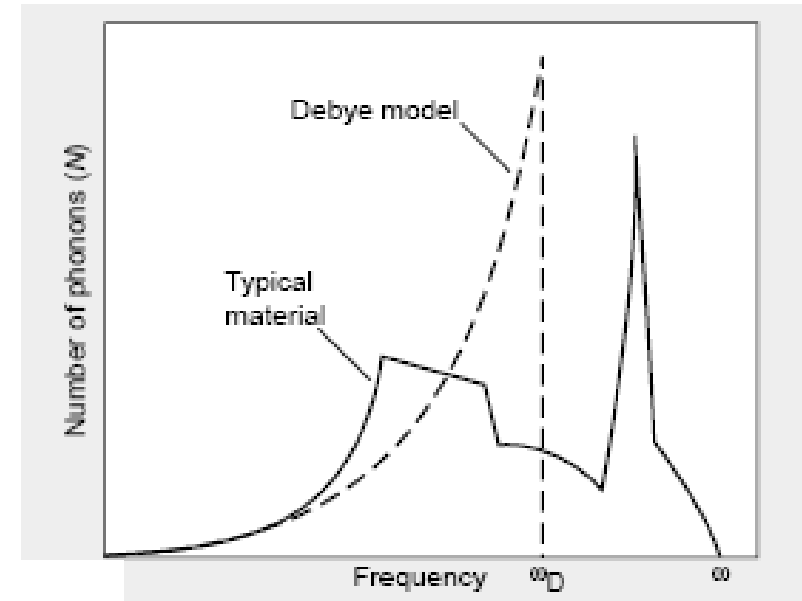
$$\omega_b(\vec{k}) = c|k| \quad \forall bk$$

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

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

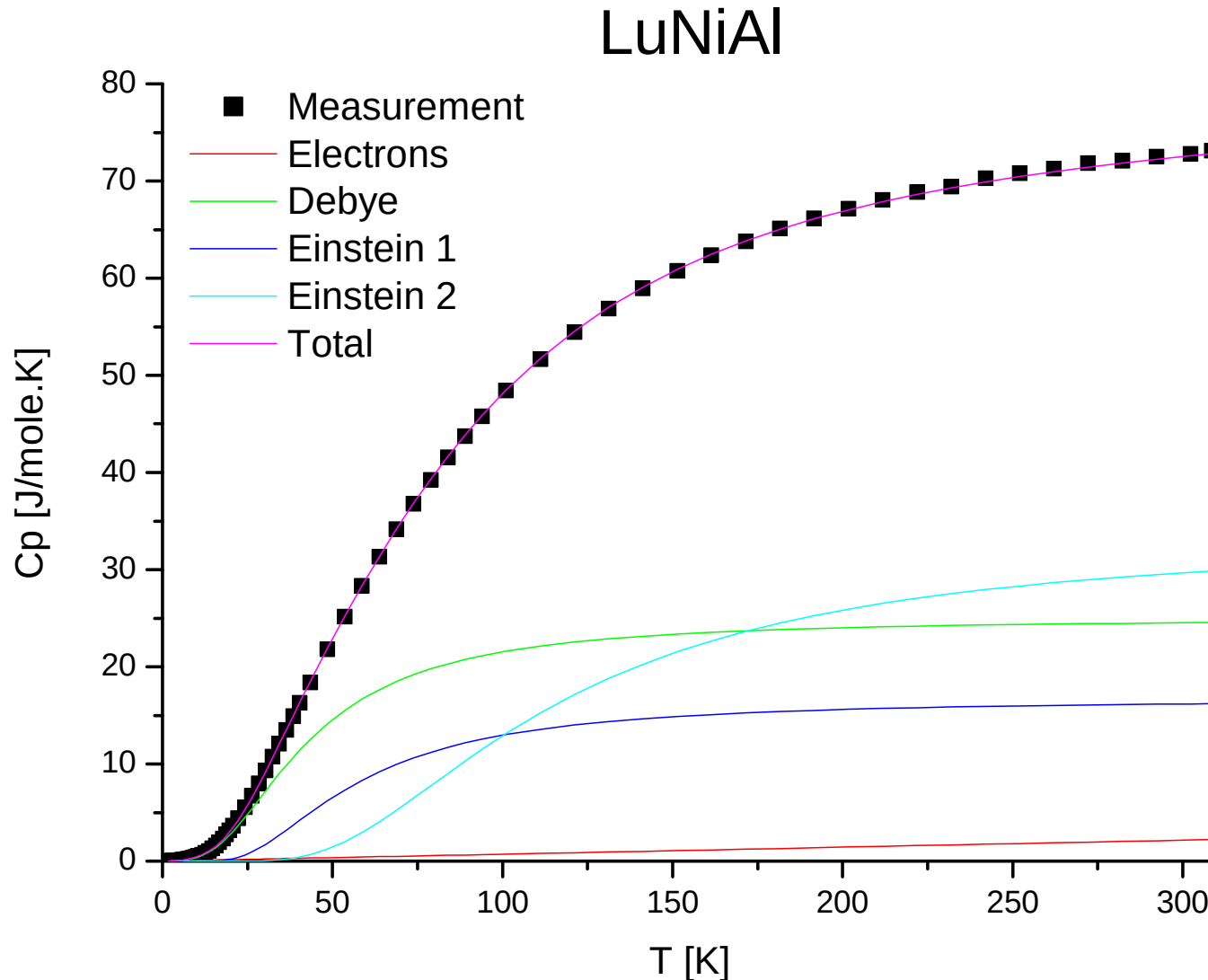
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony – měrné teplo

LuNiAl.... 3 atomy $\rightarrow n = 3$

$3 \cdot n = 9$ fononových větví $\rightarrow$ 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

Anharmonicitata

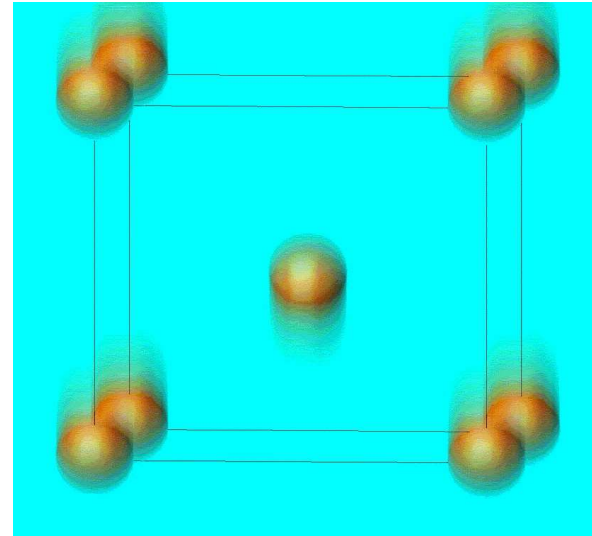
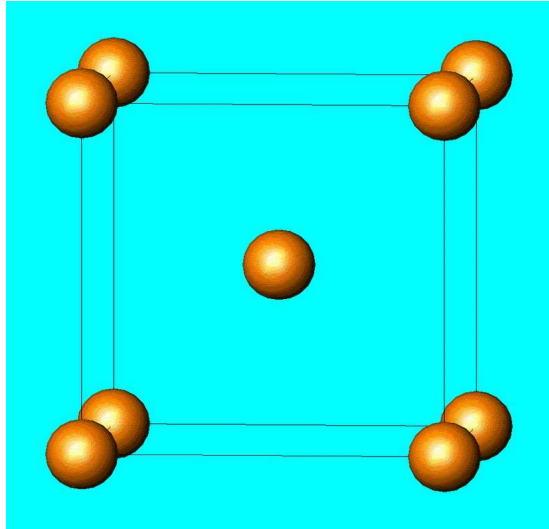
- neekvidistantně rozdělené vibrační hladiny u molekul
- „zakázané“ vibrační přechody v molekulách vody → barva vody
- měrné teplo u vyšších teplot překračuje klasickou limitu (Dulong-Petit)
- vícefononové procesy

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

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

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony



$$I \approx |F(\vec{q})|^2 = \sum_n \sum_m f_n^* f_m e^{-i\vec{q}(\vec{R}_n - \vec{R}_m)}$$

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

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

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony

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

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

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

Baker-Hausdorff teorém:

$$\langle e^{ix} \rangle = e^{-\frac{1}{2} \langle x^2 \rangle}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony

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

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

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

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

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony

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

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

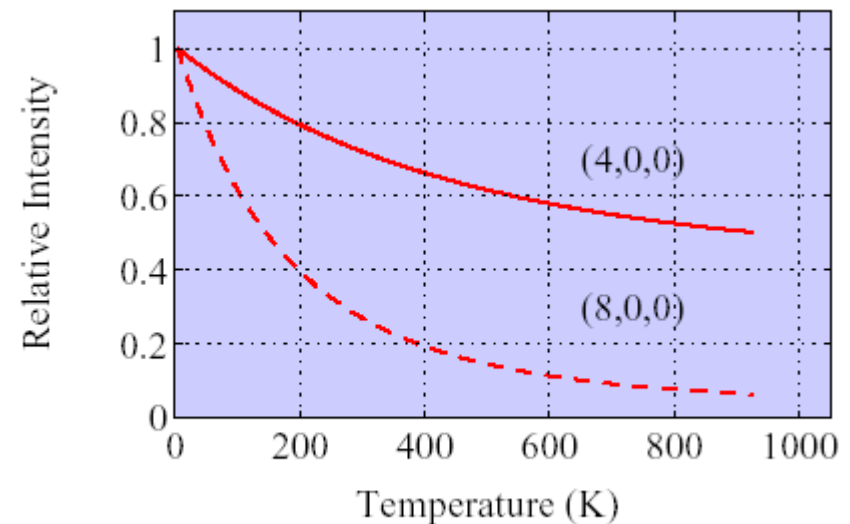
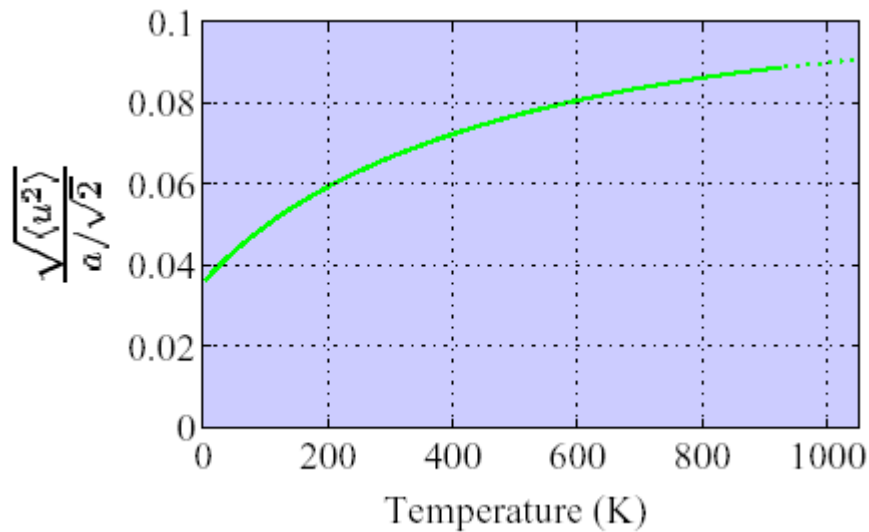
$$M_n = \frac{1}{2}q^2 \langle u_{nq}^2 \rangle = B_n \left(\frac{\sin \theta}{\lambda} \right)^2$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony

Př: teplotní kmity Al v Debeyově harmonické aproximaci

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

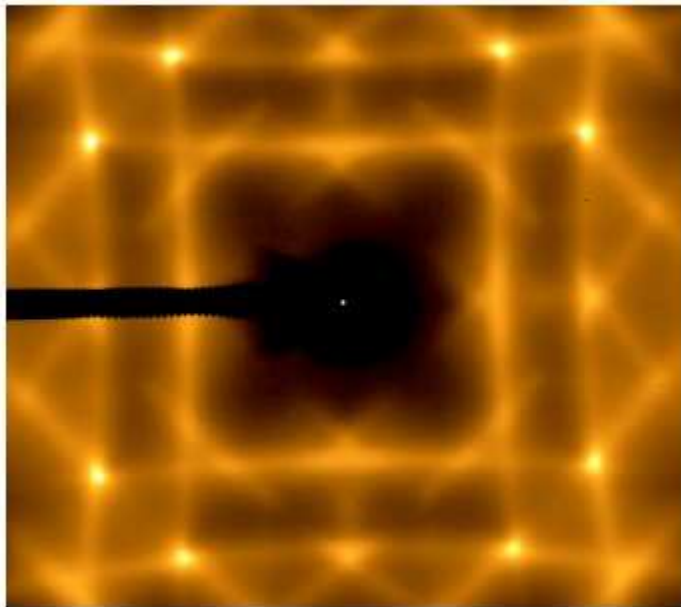


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

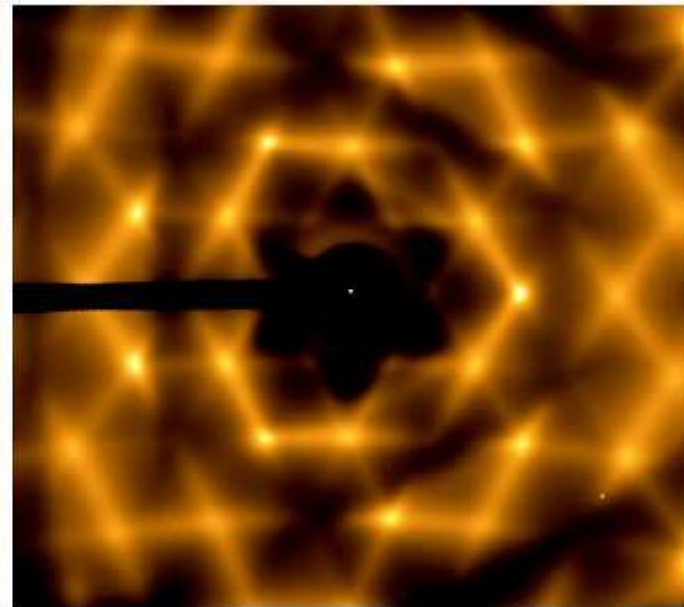
Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony

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

// 100



// 111



teplotní difuzní rozptyl (TDS)