RNDr. Jan Prokleška Ph.D.
prokles@mag.mff.cuni.cz
(95155) 2772
kfes.troja.mff.cuni.cz/fyzikaIV

cvičení FIV 5.5.2022

12.1 *Určete koeficient zaplnění a koordinační čísla FCC a BCC kubické mříže, srovnejte s HCP hexagonální mříží.*

Koordinační číslo určuje počet sousedů daného atomu, koeficient zaplnění je poměr objemu atomů k objemu zvolené buňky. Prvé se určí poměrně jednoduše, u druhého je potřeba menší (FCC/BCC) či větší (HCP) počet aplikací Pythagorovy věty či jiného oblíbeného nástroje. Klíčovým je určení možného poloměru atomů (*linie dotyku*) pro danou buňku, u SC je jedná o hrany pro dva atomy v rozích, FCC jsou to tři atomy napříč úhlopříčkou stěny, BCC totéž pro tělesovou úhlopříčku. U HCP vyjdeme ze čtyřstěnu (s atomy ve vrcholech) s podstavou tvořenou rovnostranným trojúhelníkem o hraně a a výškou $c/2$.

Základní vodítko a výsledky poskytuje tabulka na následující straně, je třeba nezapomenout na různý počet atomů v základní buňce.

12.2 *Grafit má vrstevnatou strukturu, ve které je vazba mezi atomy v různých vrstvách výrazně menší než vazba mezi atomy jedné vrstvy. Experimentálně se ukazuje, že měrné teplo v nízkých teplotách ukazuje úměrnost T^2. Dá se (a případně jak) toto chování vysvětlit pomocí Debyova odvození příspěvku fononů k měrnému teplu?*

Budeme postupovat anologicky k postupu v přednášce. Vyjdeme z předpokladu Debyeova modelu $\omega_D \sim k$ a určíme počet stavů v jednotkové buňce jedné dvourozměrné vrstvy a následně hustotu stavů $g(\omega)$ (v souladu s nároky kladenými zadáním se nebudeme trápit konstantami)

$$N = \frac{\pi k^2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \rightsquigarrow g_{\mathrm{2D}}(\omega) \sim \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\omega} \sim \omega\ .$$

Dále budeme předpokládat, že vrstvy spolu mizivě interagují, tj. výsledná hystota stavů bude v prvním přiblížení dána prostým součtem

$$g_{\mathrm{3D}} = \sum g_{\mathrm{2D}} \sim \omega\ .$$

Toto vložíme do výrazu pro střední hodnotu energie našeho systému a vyjádříme v "obvyklém" tvaru

$$\langle U \rangle = \int g(\omega) f(\omega) E \mathrm{d}\omega = \int \omega \frac{\hbar\omega}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega} - 1} \mathrm{d}\omega \sim T^3 \int_0^{\frac{\theta_{\mathrm{D}}}{T}} \frac{x^2}{\mathrm{e}^x - 1} \mathrm{d}x$$

Pro měrné teplot v nízkých teplotách pak platí[1]

$$\left.\frac{\partial U}{\partial T}\right|_{T \to 0} \sim T^2\ .$$

[1] Analogicky s příkladem 9.1 pro určení charakteru chování v nízkých teplotách považujeme integrál za konstantu.

buňka	SC	FCC	BCC	HCP
objem	a^3	a^3	a^3	$\frac{3\sqrt{3}}{2}a^2c$
počet atomů	1	4	2	$6 = 12 \cdot \frac{1}{6} + 3 \cdot 1 + 2 \cdot \frac{1}{2}$
klíčový vztah	$r = \frac{a}{2}$	$4r = \sqrt{2}a$	$4r = \sqrt{3}a$	$2r = a \quad c = \sqrt{\frac{8}{3}}a$
koeficient zaplnění	$\frac{1 \cdot \frac{4}{3}\pi\left(\frac{a}{2}\right)^3}{a^3} = \frac{\pi}{6} \doteq 0.52$	$\frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{2}a}{4}\right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \doteq 0.74$	$\frac{2 \cdot \frac{4}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{3}a}{4}\right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \doteq 0.68$	$\frac{6 \cdot \frac{4}{3}\pi\left(\frac{a}{2}\right)^3}{\frac{3\sqrt{3}}{2}a^2\sqrt{\frac{8}{3}}a} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \doteq 0.74$
koordinační číslo	6	12	8	12