

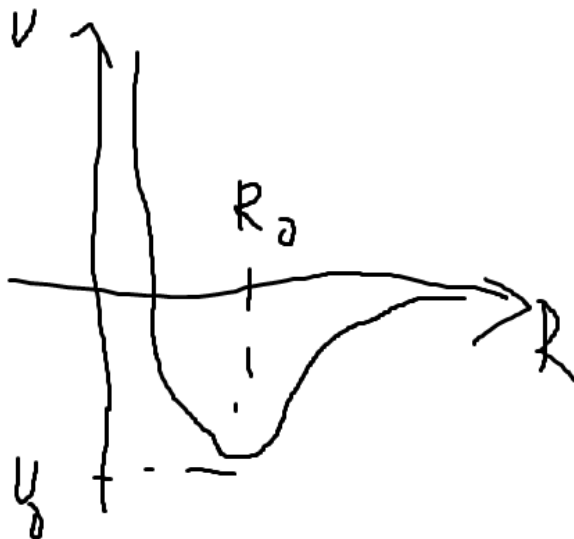
FYPL

Matěj Popdákunik

24. října 2024

Obsah

0.1	Iontové krystaly	3
0.2	Kovalentní vazba	4
1	Struktura pevných látek	7
1.1	Prvky symetrie	7
1.2	Složené prvky souměrnosti	7
1.3	Bodové grupy	7
1.4	Bravaisova mřížka	7
1.5	Značení uzlových bodů, přímek, rovin	8
1.6	Příklady	8
1.6.1	Směry	8
1.6.2	Roviny	8
1.7	Translační prvky souměrnosti	8
1.8	Prostorové grupy	8
1.9	Metody určování struktury	8
2	Neutronová difrakce	8
2.1	Dislokace a poruchy	8



Provedeme Taylorův rozvoj v R_0

$$U(R) = U(R_0) + \frac{dU}{dR}(R_0) \frac{R - R_0}{1!} + \dots \quad (1)$$

První derivace je 0, a zavádíme značení $(R - R_0) = x$, druhou derivaci označíme jako β a třetí jako -2γ .

Máme

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

Síla je pak jako

$$\vec{F} = -\frac{dU}{dx} = -\beta x + \gamma x^2 \quad (3)$$

0.1 Iontové krystaly

Pro 2 N iontů

Mezi ionty máme $U(R) \frac{A}{R^m} - \frac{B}{R^n}$ To je energie mezi i-tým a k-tým iontem

Vzdálenost je $M_{ik} = q_{ik}R$

Definujeme $B \equiv \pm e^2, n \equiv 1$

Dáme do energie

$$U_{ik} = \frac{a}{R^m} \frac{1}{q_{ik}^m} - \frac{e^2 \pm 1}{R q_{ik}} \quad (4)$$

Na jeden atom působí pak síla

$$U_i = \sum_k U_{ik} = \frac{1}{R^m} a \sum_k \frac{1}{q_{ik}^m} - \frac{e^2}{R} \sum_k \frac{(\pm 1)^k}{q_{ik}} \quad (5)$$

Madelungova konstanta

$$\alpha = \sum_k \frac{(\pm 1)^k}{q_{ik}} \quad (6)$$

Pokud bychom spočítali Madelungovu konstantu pro řetízek atomů dostaneme

$$\alpha = \sum_k \frac{(\pm 1)^k}{q_{ik}} = 2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\pm 1)^{k-1}}{k} = 2(1 - 1/2 + 1/3 - 1/4 + \dots) = 2 \ln 2 \approx 1.386 \quad (7)$$

Což je srovnatelné s naměřenými hodnotami, například

$$\alpha_{NaCl} = 1,748 \quad (8)$$

$$\alpha_{CsCl} = 1,763 \quad (9)$$

$$\alpha_{ZnS} = 1,638 \quad (10)$$

Energie krystalu je pak

$$U = \frac{1}{2} 2Nu_i = Nu_i \quad (11)$$

$$U = N \left(\frac{A}{R^m} - \frac{\alpha e^2}{R} \right) \quad (12)$$

$$\left(\frac{dU}{dR} \right)_{R_0} = N \left(\frac{du}{dR} \right)_{R_0} = 0 \quad (13)$$

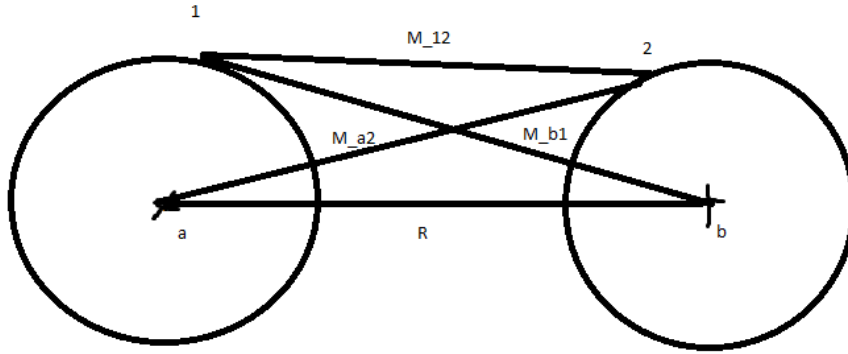
Dostáváme vztah

$$\frac{A}{R_0^m} = \frac{\alpha e^2}{mR_0} \quad (14)$$

$$U_0 = Nu_0 = \frac{-Ne^2\alpha}{R_0} \left(1 - \frac{1}{m} \right) \quad (15)$$

0.2 Kovalentní vazba

H_2 (Heitler, London)



a_0 je Bohrov poloměr
Z kvantovky máme

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r_{a1}}{a_0}\right) \equiv \psi_a(1) \quad (16)$$

$$\psi_b = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r_{b2}}{a_0}\right) \equiv \psi_b(2) \quad (17)$$

Z principu nerozlišitelnosti máme $1 \leftrightarrow 2$
Hamiltonián má tvar

$$\mathcal{H}_a^0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{r_{a2}} \quad (18)$$

$$\mathcal{H}_b^0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{b1}} \quad (19)$$

Z principu nerozlišitelnosti

$$\mathcal{H}_a^0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{r_{a1}} \quad (20)$$

$$\mathcal{H}_b^0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{b2}} \quad (21)$$

Poruchovou teorií máme (0. aproximace)

$$\mathcal{H}_a^0 \psi_a(1) = \varepsilon_0 \psi_a(1) \quad (22)$$

$$\mathcal{H}_b^0 \psi_b(2) = \varepsilon_0 \psi_b(2) \quad (23)$$

kde $\varepsilon_0 = \frac{-e^2}{2a_0}$
2 nezávislé atomy

$$[\mathcal{H}_a^0 + \mathcal{H}_b^0] \psi(1, 2) = E \psi(1, 2) \quad (24)$$

$$\psi(1, 2) = \psi_a(1)\psi_b(2) \quad (25)$$

$$E = 2\varepsilon_0 \quad (26)$$

Pokud uděláme 1. aproximaci máme

$$E = 2\varepsilon_0 + \epsilon \quad (27)$$

$$\Phi = c_1\psi_a(1)\psi_b(2) + c_2\psi_a(2)\psi_b(1) \quad (28)$$

$$W(1, 2) = \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{-e^2}{r_{a1}} + \frac{-e^2}{r_{b2}} \quad (29)$$

Pak máme

$$[\mathcal{H}_a^0 + \mathcal{H}'_1 + W(1, 2)] \Phi = E\Phi \quad (30)$$

dostaneme

$$\psi_S^0(1, 2) = \psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1), \text{symetrické} \quad (31)$$

$$\psi_{AS}^0(1, 2) = \psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1), \text{antisymetrické} \quad (32)$$

Z principu nerozlišitelnosti

$$\psi_S^0(1, 2) = \psi_S^0(2, 1) \quad (33)$$

$$\psi_{AS}^0(1, 2) = -\psi_{AS}^0(2, 1) \quad (34)$$

Z toho odvozujeme že

$$\psi_S^0 \quad (35)$$

odpovídá singletnímu stavu

$$\psi_{AS}^0 \quad (36)$$

odpovídá tripletnímu stavu.

Pro energii máme

$$E = 2\varepsilon_0 + \epsilon_s \quad (37)$$

a

$$E = 2\varepsilon_0 + \epsilon_{as} \quad (38)$$

kde

$$\epsilon_s = \frac{K + A}{1 + S^2} \quad (39)$$

$$\epsilon_{as} = \frac{K - A}{1 - S^2} \quad (40)$$

$$K = \int \psi_a(1)\psi_b(2)W(1,2)d\tau_1d\tau_2 \quad (41)$$

$$A = \int \psi_a(1)\psi_b(1)\psi_a(2)\psi_b(2)W(1,2)d\tau_1d\tau_2 \quad (42)$$

$$S^2 = \int \psi_a(1)\psi_b(1)\psi_a(2)\psi_b(2)d\tau_1d\tau_2 \quad (43)$$

1 Struktura pevných látek

1.1 Prvky symetrie

1. Inverze - bodová symetrie
2. Osa souměrnosti
3. Rotace
4. Rovina souměrnosti

1.2 Složené prvky souměrnosti

- Rotačně inverzní osy - rotace kolem osy a inverze
- Rotačně reflexní osy - rotace kolem osy a zrcadlení

1.3 Bodové grupy

Prvky souměrnosti které při operacích zachovávají alespoň 1 bod prostoru nepohyblivý nazýváme bodovými grupami.

Celkem existuje 32 bodových grup.

Lze rozdělit do 7 skupin, tzv. krystalových soustav.

Existuje popis např 6mm nebo 43m. . Číslo říká četnost osy, m říká rovinu souměrnosti.

Bude na zkoušce k interpretaci

1.4 Bravaisova mřížka

Pro volbu elementárního prvku platí pár pravidel které jsou v prezentaci.

Mřížka + báze spolu tvoří strukturu.

1.5 Značení uzlových bodů, přímek, rovin

- Bod = $[[u \ v \ w]]$
- Směr = $[u \ v \ w]$
- Rovina = $(h \ k \ l)$
- Krystalově ekvivalentní roviny = $\{h \ k \ l\}$
- Krystalově ekvivalentní směry = $\langle u \ v \ w \rangle$

1.6 Příklady

1.6.1 Směry

Máme krychli, její souřadnice vrcholů jsou 000 až 111.

Pro šipku z 001 do 110 máme lehce $110 - 001 = 11(-1)$ to ale značíme jako $11\bar{1}$ protože nechceme -, celkově $[11\bar{1}]$.

Pro šipku ze středu strany mezi 101 a 100 do 111 máme $111 - 10\frac{1}{2} = 01\frac{1}{2}$ ale nechceme zlomky tak značíme $[021]$

1.6.2 Roviny

Máme krychli abc.

Rovina prochází body mimo krychli, 2a 2b 1c.

Poté provádíme inverzi a máme $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{1}$, nechceme zlomky tak vynásobíme 2.

Celkem (112)

1.7 Translační prvky souměrnosti

- Šroubové osy
- Roviny skluzu

1.8 Prostorové grupy

Celkem 230 grup.

1.9 Metody určování struktury

2 Neutronová difrakce

2.1 Dislokace a poruchy

V testu budou bodové poruchy, a máme vědět že čárové jsou dislokace.