

3.1 *BaTiO₃ ma za pokojové teploty krystalovou strukturu vzniklou distorzí ze struktury kubické. Tenzor relativní permitivity má tvar*

$$\begin{pmatrix} 4500 & 0 & 0 \\ 0 & 4500 & 0 \\ 0 & 0 & 150 \end{pmatrix}.$$

Z tohoto materiálu uřízneme destičku (112) a vložíme ji do deskového kondenzátoru. Kolikanásobně se změní jeho kapacita?

(Zanedbejte změnu mřížových parametrů v důsledku distorze.)

Pro deskový kondenzátor platí $C = \varepsilon_r \varepsilon_0 \frac{S}{d}$, tj. poměr kapacit s a bez destičky je roven relativní permitivitě destičky.

Relativní permitivitu destičky ve směru kolmém na rovinu řezu určíme jako

$$\varepsilon_r = \vec{e}^T \overset{\leftrightarrow}{\varepsilon} \vec{e},$$

kde $\vec{e}$ je jednotkový normálový vektor roviny a $\overset{\leftrightarrow}{\varepsilon}$ je zadaný tenzor permitivity. Máme tedy

$$\varepsilon_r = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4500 & 0 & 0 \\ 0 & 4500 & 0 \\ 0 & 0 & 150 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} = 1600,$$

$\frac{1}{\sqrt{6}}$ plyne z normalizace $\vec{e}$.

3.2 *Ukažte, že pro tetragonální krystal je tenzor elektrické vodivosti isotropní v rovině kolmé na osu c (tj. velikost proudu nezávisí na směru aplikace napětí (v aa rovině)).*

Použijeme Ohmův zákon ve tvaru $\vec{j} = \overset{\leftrightarrow}{\sigma} \cdot \vec{E}$, kde $\vec{j}$ je vektor proudové hustoty, $\overset{\leftrightarrow}{\sigma}$ je tenzor vodivosti a $\vec{E}$ je vektor intenzity elektrického pole. Dále víme, že vektory a tenzory se transformují dle vztahů

$$\begin{aligned} v_i^* &= U_{ij} v_j \\ \sigma_{ik}^* &= U_{ip} \sigma_{pq} U_{qk}^{-1} \end{aligned}$$

a využijeme platnost vztahu $U_{ij}^{-1} = U_{ji}$ platícího pro rotační transformace.

Pro tenzor vodivosti musí se symetrie platit že tenzor vodivosti se při aplikaci čtyřčetné osy nezmění, tj.

$$\sigma^* = U_4 \sigma U_4^{-1} = \sigma$$

kde

$$U_4 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

je matice popisující aplikaci čtyřčtené osy. Po rozepsání máme tedy

$$\begin{aligned}\sigma^* &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_{yy} & -\sigma_{yx} & \sigma_{yz} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} & -\sigma_{xz} \\ \sigma_{zy} & -\sigma_{zx} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} .\end{aligned}$$

Z podmínky $\sigma^* = \sigma$ získáme následující sadu vztahů

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= \sigma_{yy} & \sigma_{xz} &= \sigma_{yz} & \sigma_{yz} &= \sigma_{xz} \\ \left. \begin{aligned} -\sigma_{yx} &= \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} &= -\sigma_{xy} \end{aligned} \right\} \sigma_{xy} &= -\sigma_{yx} & \left. \begin{aligned} \sigma_{zx} &= \sigma_{zy} \\ \sigma_{zy} &= -\sigma_{zx} \end{aligned} \right\} \sigma_{zx} &= \sigma_{zy} = 0 & \left. \begin{aligned} \sigma_{xz} &= \sigma_{yz} \\ \sigma_{yz} &= -\sigma_{xz} \end{aligned} \right\} \sigma_{xz} &= \sigma_{yz} = 0\end{aligned}$$

a tedy informaci, že náš tenzor má tvar

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_a & \sigma_b & 0 \\ -\sigma_b & \sigma_a & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_c \end{pmatrix} .$$

Ukažme si, že nám tento tvar tenzoru zajišťuje izotropii, tj. velikost proudové hustoty nezávisí na směru aplikace elektrické intenzity (v rovině kolmé na čtyřčtenou osu).

$$\begin{pmatrix} j_x \\ j_y \\ j_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_a & \sigma_b & 0 \\ -\sigma_b & \sigma_a & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E \cos \alpha \\ E \sin \alpha \\ E_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_a E \cos \alpha + \sigma_b E \sin \alpha \\ -\sigma_b E \cos \alpha + \sigma_a E \sin \alpha \\ \sigma_c E_z \end{pmatrix}$$

A tedy velikost

$$\|j\| = \sqrt{(\sigma_a^2 + \sigma_b^2)E^2 + \sigma_c^2 E_z^2}$$

nezávisí na úhlu v rovině kolmé na čtyřčtenou osu.

3.3 Určete podmínku pro n , m , tak aby následující výraz pro potenciální energii atomů ve vzdálenosti r popisoval stabilní konfiguraci.

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}$$

Stabilní konfigurace je dána minimem potenciální energie, tj. $\frac{dU}{dr} = 0$ a současně $\frac{d^2U}{dr^2} > 0$. Dostáváme tedy rovnici a nerovnici

$$\begin{aligned}\frac{n\alpha}{r^n} &= \frac{m\beta}{r^m} \\ \frac{n(n+1)\alpha}{r^{n+2}} &< \frac{m(m+1)\beta}{r^{m+2}} .\end{aligned}$$

Dosažením dostáváme podmínku na existenci minima ve tvaru $m > n$.

3.4 *Potenciální energii v krystalu neonu (kubická, FCC struktura) může být popsána následujícím (Lennard–Jones) tvarem:*

$$U(r) = -4\varepsilon \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^6 - \left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} \right]$$

s parametry $\varepsilon = 0,0031$ a $r_0 = 0,282$ nm.

Určete mřížový parametr a a srovnejte jej s experimentálním ($a_{\text{exp}} = 0,45$ nm).

Postupujeme analogicky jako v předchozím případě, z nulovosti první derivace získáme podmínku na nejkratší Ne — Ne vzdálenost:

$$r_{\text{Ne-Ne}} = \sqrt[6]{2} r_0 .$$

Mřížový parametr je pak roven $a = \sqrt{2} r_{\text{Ne-Ne}} = \sqrt{2} \sqrt[6]{2} r_0 \approx 0,446$ nm.