- PŘESKOČÍ ADIAB. TEORÉM + HELLMANN – FEYN. TEORÉM (UČEBNICE 4–6 STRANA)

$H|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$

součet přes ∀ iontů

$$H = \underbrace{-\hbar^2 \cdot \sum_I \frac{1}{2M_I}\frac{\partial^2}{\partial R_I^2}}_{\text{kinetická energie}} + V(R_I)$$

(+) odpudivý
(−) přitažlivý

potenciál

nábojová čísla iontů

$$V(R_I) = +\sum_{I>J}^{N} \frac{e^2 Z_I Z_J}{4\pi|R_I - R_J|} + E(R_I)$$

jejich vzdálenost

odpuzují se

párový potenciál

↓ párová složka

elektronová energie ↓ není rozložitelná na párové interakce

- V krystalu předpokládáme rovnovážné polohy + výchylky

$R_I = R_I^0 + u_I$ $\frac{\partial V}{\partial R_I^0}\Big|_{R^0} = 0$

→ pokud ∀ deriv. jsou nula ⇓ minimum potenciálu

$$V(u_I) = V(R_I^0) + \sum_I \frac{\partial V}{\partial R_I}\Big|_{R^0} \cdot u_I + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 V}{\partial R_I \partial R_J} u_I u_J + \dots$$ (harmonické přiblížení)

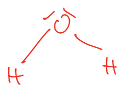
(skal. souč.)

mají vyšší řády (ty se projeví u objem. změn s teplotou) ↓ viz níže (kub. člen)

↓ vypadne na základě minima v rovnováze

↓ konstantní ⇒ nebudeme uvažovat. Pouze v případě přestavby mříže

Předpoklady: 1) přiblížíme v podobě párových interakcí (když reálné (zejména v kovalentních) systémech nelze tak jednoduše aproximovat ↳ např. molekula H_2O



- předp: v rovnovážné poloze můžu systém rozepsat jako systém párových interakcí

2) první změní kubický člen (pojem z tep. roztažnosti)

⇒ postupně sice vyšší stavy, ale těžiště je stále stejné (myšlena poloha minima a tedy i vzdálenost)

nesym. systém – vyšší stavy mají těžiště posunuté

HARM. PŘIBL.

- pokud vložím E → daný mód bude kmitat věčně

+ KUB. ČLENY

– rozpad fononů o f na měší frekvence

- budeme tedy uvažovat jen kvadratické, kubické členy nebudeme uvaž.

$$\boxed{H = -\hbar^2 \sum_I^N \frac{1}{2M_I}\frac{\partial^2}{\partial u_I^2} + \frac{1}{2}\sum_{IJ} B_{IJ} \cdot u_I \cdot u_J}$$ → skal. součiny

kde $B_{IJ}^{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 V}{\partial R_I^\alpha \partial R_J^\beta}\Big|_{R^0}$ → v rovnov. polohách jader

↓ „MATICE TUHOSTI"

hybnost $p_I^\alpha = i\hbar \frac{\partial}{\partial R_I^\alpha} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial u_I^\alpha}$

$$\boxed{H = \underbrace{\sum_I \frac{p_I^2}{2M_I}}_{\text{kin. E}} + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{IJ} B_{IJ}u_I u_J}_{\text{deform. energie}}}$$

sada komutačních relací

$[p_I^\alpha, u_J^\alpha] = -i\hbar\,\delta_{IJ}\delta_{\alpha\beta}$

$[p_I^\alpha, p_J^\beta] = 0$

$[u_I^\alpha, u_J^\beta] = 0$

Heisenbergova rce pro výchylku

$$\frac{\partial u_I^\alpha}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[u_I^\alpha, H] = \sum_J \frac{1}{i\hbar}\left[u_I^\alpha, \frac{p_J^{\beta 2}}{2M_J}\right] = \sum_J \frac{1}{2i\hbar M_J}\left(u_I^\alpha p_J^{\beta 2} - p_J^{\beta 2} u_I^\alpha\right) =$$

↳ upočítáme komutátor

$$u_I^\alpha p_J^\beta p_J^\beta - p_J^\beta u_I^\alpha p_J^\beta + p_J^\beta u_I^\alpha p_J^\beta - p_J^\beta p_J^\beta u_I^\alpha$$

přidal jsem 0

$$\underbrace{[u_I^\alpha, p_J^\beta]\,p_J^\beta}\qquad \underbrace{p_J^\beta\,[u_I^\alpha, p_J^\beta]}$$

$= -[p_J^\beta, u_I^\alpha] = i\hbar\,\delta_{IJ}\delta_{\alpha\beta}$

$$* = \sum_{J,\beta} \frac{P_J^\beta}{2 i M_J} \delta_{IJ}\delta_{\alpha\beta} = \frac{P_I^\alpha}{M_I}$$

DÍKY SUMACI PŘES J SE iħ POSČÍTAJÍ

DOSTANEME STAND. NEWT. VZTAH $\Rightarrow$ $$\frac{\partial u_I^\alpha}{\partial t} = \frac{P_I^\alpha}{M_I}$$

HEISENBERG. ROVNICE PRO SOUŘADNICI

$$\frac{\partial P_I^\alpha}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\left[P_I^\alpha, H\right] = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2}\sum_{\substack{KJ\\ \gamma,\beta}} B_{KJ}^{\gamma\beta}\left[P_I^\alpha, u_K^\gamma u_J^\beta\right] =$$

$$= \frac{1}{2i\hbar}\sum_{\substack{K,J\\ \gamma,\beta}} B_{KJ}^{\gamma\beta}\underbrace{\left(u_K^\gamma\left[P_I^\alpha, u_J^\beta\right] + \left[P_I^\alpha u_K^\gamma\right]u_J^\beta\right)}_{-i\hbar\,\delta_{IJ}\delta_{\alpha\beta}u_K^\gamma \;-\; i\hbar\,\delta_{IK}\delta_{\alpha\gamma}u_J^\beta}$$

$$= -\frac{1}{2}\sum_{K\gamma} B_{KI}^{\gamma\alpha} u_K^\gamma - \frac{1}{2}\sum_{J\beta} B_{IJ}^{\alpha\beta} u_J^\beta$$

$B_{IK}^{\alpha\gamma} u_K^\gamma$ $\wedge$ K PŘEJM. NA J A γ NA β

$$= -\sum_{J\beta} B_{IJ}^{\alpha\beta} u_J^\beta$$

+ VÍME ŽE B JE SYMETRICKÉ

$$B_{IJ}^{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 V}{\partial R_I^\alpha \partial R_J^\beta} = B_{JI}^{\beta\alpha}$$

$$\boxed{\frac{\partial P_I^\alpha}{\partial t} = -\sum_{J,\beta} B_{IJ}^{\alpha\beta} u_J^\beta}$$

VYPADÁ JAKO NEWT. ROVNICE

– JEN ZDE JSOU OPERÁTORY

ODVODILI JSME TEDY DVĚ ROVNICE

$$\boxed{\frac{\partial u_I^\alpha}{\partial t} = \frac{P_I^\alpha}{M_I}} \qquad \boxed{\frac{\partial P_I^\alpha}{\partial t} = -\sum_{J,\beta} B_{IJ}^{\alpha\beta} u_J^\beta}$$

– NYNÍ NENÍ DŮLEŽITÉ, ZDA TO u_J JE SOUŘ. NEBO HEIS. OPERÁTOR.

1) VYLOUČÍME HYBNOST

$$M_I \frac{\partial^2 u_I^\alpha}{\partial t^2} = -\sum_{J,\beta} B_{IJ}^{\alpha\beta} u_J^\beta$$

POMOCÍ F. TRANSFORMACE (NESYMETR.)

$$u_I^\alpha(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} u_I^\alpha(\omega)$$

$$u_I^\alpha(\omega) = \int dt\, e^{i\omega t} u_I^\alpha(t)$$

$$\omega^2 M_I u_I^\alpha = \sum_{J,\beta} B_{IJ}^{\alpha,\beta} u_J^\beta$$

(PODOBNÁ ROVNICI PRO VLASY. ENERGIE)

M_I .. KDYŽ V KRYST. VÍCE ČÁSTIC NEBO IZOTOPŮ

→ KOMPLIKUJE

→ VYDĚLÍME

$$\omega^2 u_I^\alpha = \sum_{J,\beta} \frac{1}{M_I} B_{IJ}^{\alpha,\beta} u_J^\beta$$

(NENÍ SYMETRICKÉ → PŘEHOZ I ⟷ J NEDÁ STEJNÝ VÝSL.)

POTOM NENÍ ANI HERMITOVSKÁ, ...

⇒ PROBLÉM

$$\omega^2 \underbrace{\sqrt{M_I}\, u_I^\alpha}_{} = \underbrace{\sum_{J\beta} \frac{1}{\sqrt{M_I}} B_{IJ}^{\alpha\beta} \frac{1}{\sqrt{M_J}}}_{} \sqrt{M_J}\, u_J^\beta$$

REDUKOVANÁ VÝCHYLKA $\quad w_I^\alpha = \sqrt{M_I}\, u_I^\alpha$

$$\to D_{IJ}^{\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{M_I}} B_{IJ}^{\alpha\beta} \frac{1}{\sqrt{M_J}}$$

DYNAMICKÁ MATICE HERMIT. – SYMETR., REÁLNÁ

$$\boxed{\omega^2 w_I^\alpha = D_{IJ}^{\alpha\beta} w_I^\alpha}$$

→ ZDE JIŽ MŮŽEME POUŽÍVAT DIAGONALIZ. PROCEDURY

MŮŽEME TEDY NAJÍT VLASTNÍ STAVY

w … REDUKOVANÁ VÝCHYLKA

D … DYNAMICKÁ MATICE (SYMET, REÁLNÁ, HERMITOVSKÁ)

$$\omega^2 w = D w$$

– POKUD SE SYSTÉM CHYSTÁ KE ZMĚNĚ (NAPŘ. FÁZ. PŘECHOD) → NEJDŘÍV ZE SIL ZAČÍNÁ SLÁBNOUT A TEDY 2. DER JE MENŠÍ A MENŠÍ → PARABOLA SE OTEVÍRÁ → MĚKNUTÍ MÓDŮ

– PRO HARM. PŘIBLÍŽENÍ NELZE ↗ POPSAT

↳ MUSELI BYCHOM ZAVÉST DALŠÍ ČLENY

– PROTO PŘEDPOKLÁDÁME, ŽE JSME VE STAB. FÁZI A POTOM ∀ VLAST. FREKVENCE A KVADRÁTY JSOU NEZÁPORNÉ ! $\omega^2 \geq 0$

– PRO $\omega = 0$ (TRANSL. MÓD) → OPĚT PROBL.
(MOLEKULA)

$\omega = 0$: AKUSY. VĚTVE PRO $\lambda = \infty$
KRYSTAL

$$\omega_\nu^2 e_\nu = D e_\nu$$

e_ν … VLASTNÍ VEKTORY ; ν … VLASTNÍ ČÍSLO

MŮŽEME Z NICH SESTAVIT HERMITOVSKOU MATICI (ORTONORMÁLNÍ BÁZE)

$$\sum_{\alpha I} e_{\nu}^{\alpha I} e_{\mu}^{\alpha I} = \delta_{\nu\mu} \quad ; \quad \sum_\nu e_\nu^{\alpha I} e_\nu^{\beta J} = \delta_{IJ}^{\alpha\beta}$$

1) VÝCHYLKY:

$$\boxed{u_\nu = \sum_{\alpha I} w_I^\alpha e_\nu^{\alpha I}}$$

POT. VLOŽ. VÝCHYLKA

AKORÁT PROVEDEMA SUBSTITUCE

$$w_I^\alpha = \sum_\nu u_\nu e_\nu^{\alpha I}$$

$$u_I^\alpha = \frac{1}{\sqrt{M_I}} \cdot \sum_\nu u_\nu e_\nu^{\alpha I}$$

LIN. KOMB.

FYZ. VÝCHYLKA

VÝCHYLKY CHAP. ~~KMITY~~ KMITY UVNITŘ

HYBNOST: $p_\nu = -i\hbar \frac{\partial}{\partial u_\nu} = -i\hbar \sum_{I\alpha} \frac{\partial u_I^\alpha}{\partial u_\nu} \cdot \frac{\partial}{\partial u_I^\alpha} =$

EINS. SUM. KONV.

$$\frac{\partial u_I^\alpha}{\partial u_\nu} = \frac{1}{\sqrt{M_I}} \sum e_\nu^{\alpha I}$$

$$= \sum_{I\alpha} \frac{\partial u_I^\alpha}{\partial u_\nu} \cdot p_I^\alpha = \sum_{I\alpha} \frac{1}{\sqrt{M_I}} e_\nu^{\alpha I} \cdot p_I^\alpha$$

$$\sum_\nu p_\nu e_\nu^{\beta J} = \sum_{I\alpha} \frac{1}{\sqrt{M_I}} \underbrace{\sum_\nu e_\nu^{\alpha I} e_\nu^{\beta J}}_{\delta_{\alpha\beta}\delta_{IJ}} p_I^\alpha = \frac{1}{\sqrt{M_J}} p_J^\beta$$

JAK VYPADÁ HAMILTONIÁN?

$$H = \underbrace{\sum_{I\alpha} \frac{{p_I^\alpha}^2}{2M_I}}_{K} + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{\substack{IJ\\ \alpha\beta}} B_{IJ}^{\alpha\beta} u_I^\alpha u_J^\beta}_{V}$$

$$K = \sum_{I\alpha} \frac{1}{2\cancel{M_I}} \sum_\nu \cancel{\sqrt{M_I}} e_\nu^{\alpha I} p_\nu \sum_\mu e_\mu^{\alpha I} p_\mu \cancel{\sqrt{M_I}}$$

$$= \sum_\nu \sum_\mu \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{I\alpha} e_\nu^{\alpha I} e_\mu^{\alpha I}}_{\delta_{\nu\mu}} p_\nu p_\mu = \frac{1}{2}\sum_\nu p_\nu^2$$

$$V = \frac{1}{2}\sum_{\substack{IJ\\ \alpha\beta}} \underbrace{B_{IJ}^{\alpha\beta} \frac{1}{\sqrt{M_I}} \frac{1}{\sqrt{M_J}}}_{D} \sum_\nu u_\nu e_\nu^{\alpha I} \sum_\mu u_\mu e_\mu^{\beta J}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_\nu \sum_\mu u_\nu u_\mu \sum_{\substack{IJ\\ \alpha\beta}} \underbrace{D_{IJ}^{\alpha\beta} e_\mu^{\beta J}}_{\omega_\mu^2 e_\mu^{\alpha I}} e_\nu^{\alpha I}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_\nu \sum_\mu u_\nu u_\mu \sum_{I\alpha} \omega_\mu^2 \underbrace{e_\mu^{\alpha I} e_\nu^{\alpha I}}_{\delta_{\nu\mu}}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_\nu \omega_\nu^2 u_\nu^2$$

ODVOZENÉ VZTAHY

$$u_I^\alpha = \frac{1}{\sqrt{M_I}} \sum_\nu u_\nu e_\nu^{\alpha I}$$

$$p_I^\alpha = \sqrt{M_I} \sum_\nu p_\nu e_\nu^{\alpha I}$$

ROVNICE PRO VLAST. STAV

$$\boxed{\sum_{J\beta} D_{IJ}^{\alpha\beta} e_\mu^{\beta J} = \omega_\mu^2 e_\mu^{\alpha I}}$$

$$\omega^2 e = De$$

$$\boxed{H = \sum_\nu \frac{1}{2}\left(p_\nu^2 + \omega_\nu^2 u_\nu^2\right)}$$

HAMILTONIÁN SE NÁM ROZPADL NA SOUČET HAMILTONIÁNŮ PRO NEZÁV. KMITY

- KAŽDÝ HAMILT. MŮŽE KMITAT NEZÁV. NA OSTATNÍCH
- U REÁL. KRYSTALŮ MÁ VLIV DISPERZE
  - VÝCHYLKA SE DEFÁZUJE

2. PŘEDNÁŠKA

OPAKOVÁNÍ: – VYŠLI JSME Z NEWTONOVY ROVNICE

B BĚŽÍ PŘES NĚKOLIK SOUSEDŮ

$$M_I \frac{\partial^2 u_I^\alpha}{\partial t^2} = -\sum_{J\beta} B_{IJ}^{\alpha\beta} u_J^\beta$$

TUHOST

$$\omega^2 M_I u_I^\alpha = \sum_{J\beta} B_{IJ}^{\alpha\beta} u_J^\beta$$

PŘEVEDLI DO TVARU URČOVÁNÍ VLAST. HODNOT HERMIT. FCÍ

RED. VÝCHYLKA $w_I^\alpha = \sqrt{M_I} \cdot u_I^\alpha$

DYN. MATICE $D_{IJ}^{\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{M_I}} B_{IJ}^{\alpha\beta} \frac{1}{\sqrt{M_J}}$

– PŘEŠKÁLOVANÁ MATICE TUHOSTI

ÚLOHA URČENÁ K DIAGONALIZACI

$$\boxed{\omega^2 w_I^\alpha = D_{IJ}^{\alpha\beta} w_J^\beta}$$

$$\omega^2 w = D w$$

→ HLEDÁM DIAG. REPREZENTACI D ⇒ POTOM VLASTNÍ ČÍSLA D JSOU ∀ ŘEŠENÍ ω A VLASTNÍ VEKTORY D DÁVAJÍ BÁZE PRO VÝCHYLKY

VLASTNÍ ČÍSLA:

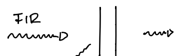
$$\boxed{\omega_\nu^2 e_\nu^{\alpha I} = \sum_{J\beta} D_{IJ}^{\alpha\beta} e_\nu^{\beta J}}$$

MATEM. ÚLOHA NA ŘEŠ. VLASTNÍCH STAVŮ

$$\boxed{D_{IJ}^{\alpha\beta} = \sum_\nu \omega_\nu^2 e_\nu^{\alpha I} e_\nu^{\beta J}}$$

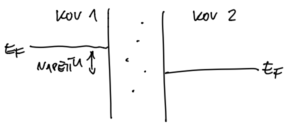
ROZKLAD DYN. MATICE DO VLASTNÍCH STAVŮ

SPEKTROSKOPIE V DALEKÉ IČ

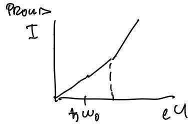


– SLEDUJI: PROPUSTNOST, ODRAZIVOST, OHŘEV VZORKU PŘI OZÁŘENÍ

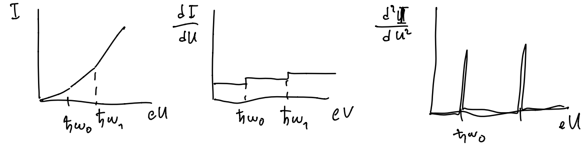
NEELASTICKÉ TUNELOVÁNÍ



U… NAPĚTÍ



– MĚNÍ SE ÚHEL



VÝPOČET DIELEKTRICKÉ FUNKCE

MUSÍME ZADEFINOVAT VLOŽENOU SÍLU

NÁBOJ IONTU

$$M_I \frac{\partial^2 u_I^\alpha}{\partial t^2} = -\sum_{J\beta} B_{IJ}^{\alpha\beta} u_J^\beta + \underbrace{q_I E^\alpha(R_0^I + u_I, t)}_{\text{VLOŽENÁ SÍLA}}$$

MAG. SLOŽKU LOR. SÍLY NEUVAŽUJEME

$$q_I E^\alpha(t)$$

ZADEFINUJEME TEDY VNĚJŠÍ POLE

$$E = -\frac{\partial}{\partial t} A$$

VEKT. POTENCIÁL SPLŇUJE

$$-\nabla^2 A + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = \mu_0 j_T$$

PŘÍČNÁ SLOŽKA EL. PROUD

ROVINNÁ VLNA $A = A e^{ikr - i\omega t}$

$$k^2 A - \mu_0 \varepsilon_0 \omega^2 A = \mu_0 j_T$$

$$-\omega^2 M_I u_I^\alpha = \underbrace{-\sum_{J\beta} B_{IJ}^{\alpha\beta} u_J^\beta}_{\text{VOLNÉ KMITY}} + \underbrace{i q_I \omega A^\alpha}_{\text{VYNUCENÁ ČÁST}}$$

$$\sum_{J\beta} \underbrace{\left(\omega^2 M_I \delta_{IJ}^{\alpha\beta} - B_{IJ}^{\alpha\beta}\right)}_{\text{JAKO INVERZNÍ REZOLVENTA}} u_J^\beta = -i q_I \omega A^\alpha$$

– MUSÍME OBRÁTIT

– CO SE STANE KDYŽ ω → VLASTNÍ FREKVENCI

KMITY KRYSTALICKÉ MŘÍŽE

VÝZKUMY POHYBU NA 1D ŘETÍZKU

1686 – NEWTON
– NAPSAL SOUST. DIF. ROVNIC

1713 – TAILOR – ODVODIL ROVNICI PRO KMITY STRUNY
1727 – BERNOULLI – KONEČNÝ ŘETÍZEK N ATOMŮ ⇒ N FREKVENCÍ
1748 – EULER – ŘEŠENÍ STRUNY
1753 – BERNOULLI – HYPOTÉZA O SUPERPOZICI STAVŮ
1759 – LAGRANGE
1807 – EULER ŘEŠ. FCE $x-vt$ A $x+vt$ A JEJICH SUPERPOZICE

$$y = A\sin(kx)\sin(\omega t)$$

STOJATÁ VLNA; PODM.

$$y(0,t)=0$$
$$y(l,t)=0$$

200 let

1830 CAUCHY – RYCHLOST ZVUKU ZÁVISÍ NA VL. DÉLCE
– U DLOUHÝCH VLN TÉMĚŘ NEMĚNÍ

1841 BADEN-POWELL – SPOČETL RYCHL. VLN NA ŘETÍZKU

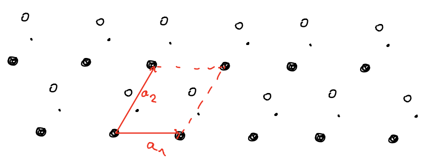
$$v = v_\infty \frac{\left|\sin\frac{\pi d}{\lambda}\right|}{\frac{\pi d}{\lambda}}$$

d ... VZDÁL. MEZI ATOMY
v_∞ ... RYCHL. ∞ DLOUH. VLN

1881 KELVIN – NEPOČÍTEJME RYCHLOSTI ALE FREKVENCE

$$\omega = \omega_{MAX}\left|\sin\frac{\pi d}{\lambda}\right|$$

ELEMENTÁRNÍ CELA



T_n ... TRANSLAČNÍ MATICE
$\bar{n} = (n_1, n_2, n_3)$ $n_1 = \dots -3,-2,-1,0,1,2,3,\dots$

$$T = n_1\bar{a}_1 + n_2\bar{a}_2 + n_3\bar{a}_3$$

① ZVOLÍME POČÁTEK n_1,n_2,n_3
② URČENÍ ATOMU $I = n, l$
ATOM MÁ INDEX [TYPU] $= l$
A INDEX POSUNU $\bar{n} = (n_1,n_2,n_3)$ } CELKEM 4 PARAM

PROČ TAKOVÉ URČENÍ?
– SLEDUJI VLIV POSUNU JEDNOHO ATOMU NA OSTATNÍ
↓ SKRZE MATICITUHOSTI

$$B_{IJ}^{\alpha\beta} = B^{\alpha\beta}_{n,l;m,\varkappa} = B^{\alpha\beta}_{l,\varkappa}(n-m)$$

URČÍ 2 BODY – n, l; $m, \varkappa$ (m_1,m_2,m_3)

↓ OBDOBNĚ PRO DYNAMICKOU MATICI

$$D_{n,l;m\varkappa} = D_{l\varkappa}(n-m) \qquad M_I = M_l$$

↓ DYNAM. MATICE JE TEDY „TRANSLAČNĚ INVARIANTNÍ"

HMOTNOST ZÁVISÍ JEN NA ATOMU A NE NA POSUNUTÍ

ROVNICE PRO VLASTNÍ FREKV.

$$\omega^2 \bar{w}^\alpha_{l\bar{n}} = \sum_{\beta=1}^{3}\sum_{\varkappa=1}^{s}\sum_{\bar{m}} D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(n-m)\,\bar{w}^\beta_{\varkappa\bar{m}}$$

→ MÁ CHARAKT. TVAR KONVOLUCE

NORMOVÁNÍ

$$\bar{w}^\alpha_{lq} = \frac{1}{\sqrt{N_c}}\sum_{\bar{n}} \bar{w}^\alpha_{l\bar{n}}\, e^{-i\bar{q}T_{\bar{n}}}$$

FOUR. TRANSFORMACE (PŘES. DISKR.???)

KONVOLUCE
– MATEM. OPERÁTOR ZPRAC. 2. FCE

$$(f*g)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\alpha)\,g(x-\alpha)\,d\alpha$$

$$T_n = T_{n-m} + T_m$$

$$\omega^2 \bar{w}^\alpha_{lq} = \sum_{\varkappa,\beta}\sum_{\bar{n}} D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(\bar{n}-\bar{m})\, e^{-iqT_{n-m}} \cdot \underbrace{\frac{1}{\sqrt{N_c}}\, e^{-iqT_m}\, w^\beta_{\varkappa m}}_{w^\beta_{\varkappa q}}$$

POSUNU $n \to n-m$

\# D JE LOK. FCE; POUZE MALÝ TOUCH DŮLEŽITÝ
– MOHU ZANEDBAT

$$* \; D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(\bar{q}) = \sum_{n-m} D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(n-m)\, e^{-iqT_{n-m}}$$

$$\boxed{\omega^2 \bar{w}^\alpha_{lq} = \sum_{\varkappa,\beta} D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(\bar{q})\, w^\beta_{\varkappa q}}$$

– MÁME STEJNÝ MOTIV JAKO PRO MOLEKULU
– $D(q)$ OBECNĚ KOMPLEXNÍ
↓ PRO MOLEK. BYLA $\mathbb{R}$ A SYMETR.

↓ POTŘEBUJI VĚDĚT ...

$* \; D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(\bar{q}) = \sum_{n-m} D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(n-m)\, e^{-iqT_{n-m}}$

$D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(-q) = \sum D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(n-m)\, e^{+iqT_{n-m}}$

$D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(-q) = \bar{D}^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(q)$ ✱

VYŠETŘUJEME VLASTNOSTI $D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(\bar{q})$

① $D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(n-m) = D^{\beta\alpha}_{\varkappa l}(m-n)$ – DOSADÍM

$D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(q) = \sum_{n-m} D^{\beta\alpha}_{\varkappa l}(m-n)\, e^{-iqT_{n-m}}$ – POUŽIL JSEM * A DOSADIL PRAVOU Z HLEDANÉHO TVARU

A POUŽIJI $T_{n-m} = -T_{m-n}$

$D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(q) = \sum_{n-m} D^{\beta\alpha}_{\varkappa l}(m-n)\, e^{iqT_{m-n}} = D^{\beta\alpha}_{\varkappa l}(-q)$

KOMPL. SDRUŽ.

✱ $D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(-q) = \bar{D}^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(q)$

$$\boxed{D^{\beta\alpha}_{\varkappa l}(q) = \bar{D}^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(q)}$$

DŮSLEDKY: – JE HERMITOVSKY SDRUŽENÁ

MATICE TUHOSTI JE VALIDNÍ PŘES NĚKOLIK MÁLO SOUSEDŮ; T JSOU MALÉ VZDÁL. ~ PERIODOU KRYST.

⟹ D SE MĚNÍ SPOJITĚ S q

VLAST. VEKTOR

$$\boxed{\omega^2_{\tau q}\, e^{\alpha l}_{\tau q} = \sum_{\varkappa\beta} D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(q)\, e^{\varkappa\beta}_{\tau q}}$$

PŘÍSL. ROVNICE PRO VLAST. VEKTORY A VLAST. FREKV.

→ VLASTNÍ FREKV. JE SPOJITOU FCÍ q

DOVĚTEK: • $\bar{e}$ TVOŘÍ ORTONORM. BÁZI A TA JE PRO KAŽDÉ q JINÁ
• ZAVEDLI JSME DIAG. REPREZENTACI PRO MOLEKULY CO JSOU TĚSNĚ U ~~SEBE~~ (VLEVO JSME Z MOLEKUL)

↓ PROVÁŽÁNÍ SE PROJEVÍ ROZL. VLAST. KMITŮ

OPAKOVÁNÍ: ① VYUŽILI JSME TRANSL. SYMETRII KRYSTALU
→ ZAVEDLI JSME VLASTNÍ STAVY

$$w^{\alpha}_{lq} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{n} w^{\alpha}_{ln}\, e^{-i\bar{q}\cdot\bar{T}_n}$$

↓ SUBSTITUCE PRO NOVOU PROM.

② DOSTALI JSME DYN. MATICI $D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(q) = \sum_{n} e^{-iqT_n} D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(n)$ VZDÁL. MEZI 2 POZIC

↓ HERMITOVSKÁ; DIAGONALIZOVATELNÁ

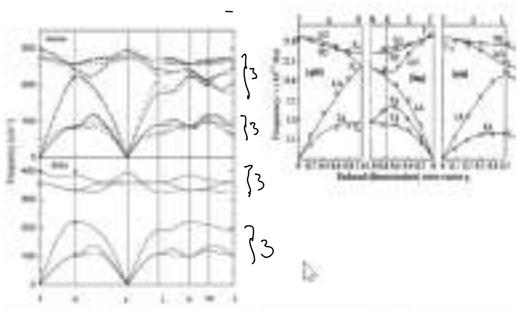
DIAGONALIZ. PROCEDURA $\omega^2_{\tau q}\, \bar{e}^{\alpha l}_{\tau q} = \sum D^{\alpha\beta}_{l,\varkappa}(\bar{q})\, e^{\beta\varkappa}_{\tau q}$

POLARIZ. OPERÁTOR

VLASTNÍ FREKVENCE

ω JSOU FCÍ q ⟹ VYTVÁŘÍ PÁSY

PŘÍKLADY GaAs, AlAs, Si



$\}3$
$\}3$
$\}3$
$\}3$

$\Gamma = q|_0 = q_0 = 0$

– ∀ MAT. MAJÍ 2 ATOMY V ZÁKL. B.
= 2.3 → 6 PÁSŮ

AlAs – DÍKY ROZDÍLU m_{Al}, m_{As}
→ DOBRÉ ROZDĚL. PÁSŮ

GaAs – OBA TĚŽKÉ

Si – TOTOŽNÉ

– 3 OPT A 3 AKUST

AKUSTICKÉ FONONY

– PŘI POSUNU KRYSTALU → NEVZNIKNOU ŽÁDNÉ NOVÉ SÍLY

$$w^{\alpha}_{lq} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{n} w^{\alpha}_{ln}\, \underbrace{e^{-i\bar{q}\cdot\bar{T}_n}}_{\overset{q=0}{=1}}$$

⇓

FREKV. KMITU MUSÍ BÝT NULOVÁ

w... REDUKOVANÉ VÝCHYLKY

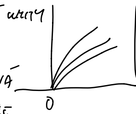
DEGENER. 3x $q = 0$ $\omega_{\tau q} = 0$ ⟹ 3 PÁSY SBÍHAJÍ DO NULY

– REPREZENTUJÍ PODÉLNÉ A PŘÍČNÉ KMITY

PODÉLNÉ ↓ OBJEM DEFOR.

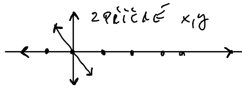
PŘÍČNÉ ↓ STŘIHOVÁ

$E_{POD} > E_{PŘÍČ}$

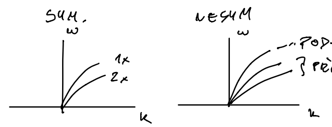


$\boxed{\text{PODÉLNÝ} + \text{2 PŘÍČNÝ}}$

↳ PROTOŽE OBJEM DEF JE VŽDY OBTÍŽNĚJŠÍ



⇒ POKUD JSME V SYM. KRYSTALU, TAK SE PŘEKRÝVAJÍ



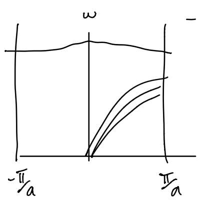
PROČ AKUSTICKÉ?

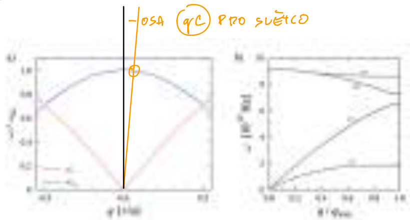
– DLOUHOVLNÁ VLNA; DÁ SE POPSAT TEORIÍ DEFORM. KONTINUA

PROČ OPTICKÉ?

– JSOU VIDĚT V OPT. MĚŘENÍCH

– MAJÍ VYŠŠÍ E





○ PROTNE SE S OPTICKÝMI PÁSY (SVĚTLO)

↓

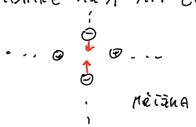
POLARITONY

– S AKUSTICKOU VĚTVÍ SE NEPROTNOU (VÝJIMKA NULY)

– A TAM NEINTERAGUJÍ

ALE

VIBRACE MUSÍ MÍT EFEKT NA DIPOL



• TATO VIBRACE MÁ PŘÍSPĚVEK KE KVADRUPOLU

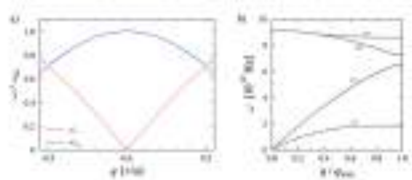
– NA DIPOLU VIDĚT NENÍ; SLABÁ VAZBA

⇓

DIPOLOVĚ NEAKTIVNÍ SYSTÉM (NENÍ V OPTICE, ALE RAMAN ANO)

– NĚKTERÉ NEJSOU ANI V RAMANOVI

– JSOU ALE VIDĚT V NEUTR. ROZP.



MÁME 3 AKUST + N OPTICKÝCH → DLE POČTU ATOMŮ V EL. BUŇCE

AKUSTICKÉ – 3 (2 TRANS x, y) (1 LONG ↔ z)

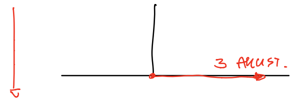
OPTICKÉ – 3s – 3

2/3 TRANS

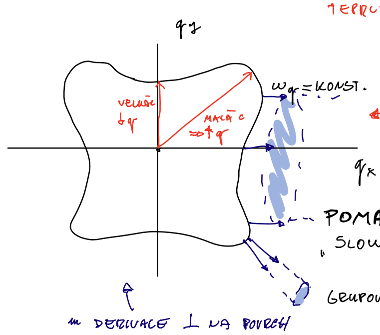
1/3 LONG.

OPTICKÉ – PŮVODNÍ VIBRACE MOLEKULY PROVÁZANÉ

AKUSTICKÉ – POSUN → PRO VOLNÉ MOLEKULY



TEPRVE VZÁJEMNOU INTERAKCÍ SE VYTV. DLOUHOVL. KMITY



FÁZOVÁ RYCHLOST

$\omega_{\tau q} = c_{\tau q} \cdot |q|$

– KOMPENZACE MEZI c A q

POMALOSTNÍ POVRCH

„SLOWNESS SURFACE"

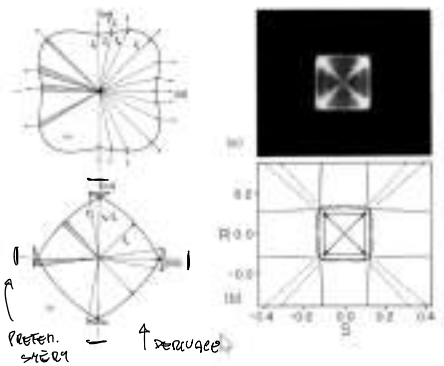
GRUPOVÁ RYCHLOST .... POPIS POHYBU FONONU V KRYSTALU

$$\boxed{\frac{\partial \omega_{\tau q}}{\partial q} = v_q}$$

⇓

– V URČITÝCH SMĚRECH SE ŠÍŘÍ VÍCE VIBRACÍ NEŽ V JINÝCH

↳ ZÁŘENÍ NA TÉ KOLMOSTI (PŘEDSTAVIT SI V 3D)



⇒ FONONOVÁ AUTOFOKUSACE

POLARIZAČNÍ OPERÁTORY

$$\omega^2_{\tau q}\, e^{\alpha l}_{\tau q} = \sum D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(q)\, e^{\beta\varkappa}_{\tau q}$$ – ROZKLAD DYN. MAT DO VLAST. STAVŮ

└ VLASTNÍ STAVY / POLARIZ. OPERÁTOR

ŘETÍZEK

$$w^\alpha_{l n} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_n \underbrace{e^{-iqT_n}}_{\text{FÁZ. POSUNUTÍ MEZI VÝCHYLKAMI}} w^\alpha_{l n}$$

→ VLNA SE ŠÍŘÍ
– ATOMY REAGUJÍ V DANÉM POŘADÍ A SE ZPOŽDĚNÍM

$$D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(q) = \sum_n e^{-iqT_n} D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(n) \xrightarrow{\text{sdružíš}} \bar D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(q) = \sum_n e^{+iqT_n} D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(n)$$

$$\boxed{\bar D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(q) = D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(-q)}$$

$$\omega^2_{\tau q}\, e^{\alpha l}_{\tau q} = \sum D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(q)\, e^{\beta\varkappa}_{\tau q} \xrightarrow{\text{sdružím}} \omega^2_{\tau q}\, e^{\alpha l}_{\tau -q} = \sum D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(-q)\, e^{\beta\varkappa}_{\tau -q}$$

$q \to -q$

$\omega^2_{\tau q} = \omega^2_{\tau -q}$

$$\boxed{\bar e^{\alpha l}_{\tau q} = e^{\alpha l}_{\tau -q}}$$

⇒ VŠE BĚŽÍ ZPÁTKY (VLNA JDE ZPĚT) JAKO PŘI ČAS. INVERZI TOHO PROCESU

BÁZE e JE ORTONORMÁLNÍ

$$\Rightarrow \sum_{\alpha l} \bar e^{\alpha l}_{\tau q}\, e^{\alpha l}_{\varkappa q} = \delta_{\tau\varkappa}$$

DIAGONALIZACE PRO KAŽDÉ q ZVLÁŠŤ

α ... ∀ 3 SMĚRY
l ... ∀ ATOMY V ZÁKL. CELE

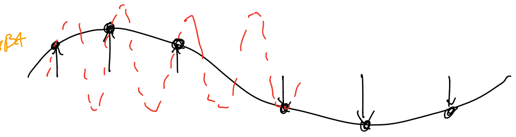
$$\Rightarrow \sum_\tau e^{\alpha l}_{\tau q}\, \bar e^{\beta\varkappa}_{\tau q} = \delta_{\alpha\beta}\,\delta_{l\varkappa}$$ A BÁZE JE ÚPLNÁ

– NYNÍ SE PODÍVÁME NA VOLBU PARAMETRŮ $\frac{1}{\sqrt{N_c}}$ A q

$$w^\alpha_{lq} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_n w^\alpha_{ln}\, \underbrace{e^{-iqT_n}}_{\text{LIN. ČLEN SUBSTITUCE}}$$

TADY JE q (MOŽNÁ CHYBA VŠUDE)

– NENÍ PRO KRYSTAL JEDNOZNAČNÉ



– UVAŽUJEME VÝCHYLKU POUZE V ATOMECH
– V URČITÝCH BODECH NABÝVÁ STEJNÝCH HODNOT

– UVAŽUJI K: $q \to q K$ DOSTANU TOTÉŽ

$K T_n = 2\pi \cdot s$ ... CELÉ ČÍSLO

– PRO ∀ s TO POTOM VYCHÁZÍ STEJNĚ
⇒ q TAK MOHU NAVOLIT RŮZNĚ

OTÁZKA: PLATÍ TO PRO T_n?

$\bar a_\varkappa$ ... TRANSL. VEKTORY

$$T = \bar a_1 n_1 + \bar a_2 n_2 + \bar a_3 n_3$$

– HLEDÁME TEDY $b_i \cdot a_j = 2\pi\,\delta_{ij}$

└ VEKTORY RECIPROKÉ VŮČI TRANS. VEKT.

$$b_{ix}\, a_{xj} + b_{iy}\, a_{yj} + b_{iz}\, a_{zj} = 2\pi\,\delta_{ij}$$

$$\begin{pmatrix} b_{1x} & b_{1y} & b_{1z} \\ b_{2x} & b_{2y} & b_{2z} \\ b_{3x} & b_{3y} & b_{3z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{pmatrix} = 2\pi \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

→ MATIC. INVERZE

Ω ... EL. OBJEM $\quad a_1 \cdot [a_2 \times a_3] = \Omega$

$$b_1 = \frac{2\pi}{\Omega_0}[a_2 \times a_3] \qquad b_2 = \frac{2\pi}{\Omega_0}[a_3 \times a_1] \qquad b_3 = \frac{2\pi}{\Omega_0}[a_1 \times a_2]$$

Ω_0 .. OBJEM PRIMIT. BUŇKY

⇒ POMOCÍ TOHO TEDY NAJDU LIBOVOL. K

$$K_m = m_1 \bar b_1 + m_2 \bar b_2 + m_3 \bar b_3$$

└ $m_i = \dots -2, -1, 0, 1, 2, \dots$

– b ... TRANSL. VEKTORY V PROSTORU VLN. ČÍSEL

$\Rightarrow K_m T_n = 2\pi \underbrace{(m_1 n_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)}_{\text{CELÉ ČÍSLO}}$

$\Rightarrow$ SPLNILI JSME NAŠI PODM.

$K \cdot T_n = 2\pi s$

$\Rightarrow$ MÁM ∞ MNOHO VEKTORŮ JEJICHŽ PŘS. DOSTANU TOTÉŽ ($\bar{K}$)

$\Rightarrow$ NAZÝVÁME **BRAGOVY VEKTORY**

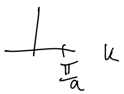
– DEFINUJÍ MŘÍŽKU PODOBNOU MŘÍŽ. KRYSTALU

= RECIPROKÁ MŘÍŽ

– MŘÍŽKA VE VLNOVÝCH ČÍSLECH

!

PROTO



$\Rightarrow$ VÝBĚR q $\quad -\pi < \bar{q}\bar{a}_i < \pi \quad i = 1,2,3$

– RECIPROKÁ MŘÍŽKA NENÍ SYMETR. VŮČI ZRCAD./OTOČENÍ !

POZN.:
- KUBICKÁ PLOŠNĚ CENT. (PŘÍMÁ)

$\downarrow$

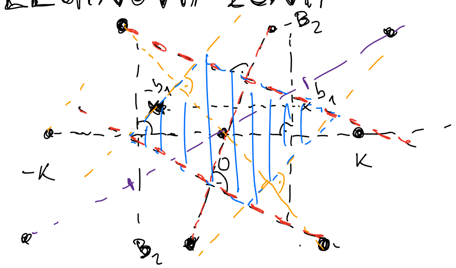
KUB. PROSTOROVĚ (RECIPR.)

JEN JEDEN DALŠÍ PŘÍPAD, JINAK SE SYMETRIE PŘÍMÝ $\to$ RECIPR. PŘENÁŠÍ V VŠECH 13 ZBYLÝCH MOŽN.

OBJEM EL. BUŇKY V RECIPR. PROSTORU

$$b_1 \cdot [b_2 \times b_3] = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}$$

BRILLUINOVA ZONA



$|0K| = \bar{p}$

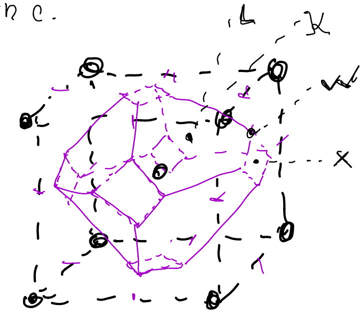
BRILLUINOVA ZONA

POZOROVÁNÍ:
- CO JE ZA $\frac{1}{2}$ INTERVALU $|0K|$ MŮŽU VRÁTIT JAKOBY ZPĚT ZA BOD O (POHYBU O $|0K|$ ZPĚT)

$\Rightarrow$ NEMUSÍME TEDY CHODIT ZA TENTO PŮL INT.

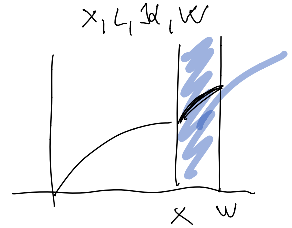
$\llcorner$ PERIODICITA

KUB. PROSTOR. C.



– DISPERZE SE VYJADŘUJE V HLAVNÍCH SMĚRECH

X, L, K, W



REPREZ. DISPERZE V TÉTO OBLASTI VYJADŘUJE CHOVÁNÍ MEZI BODY X – W

– PŘÍČNÉ MÓDY NAPŘ. V BODĚ K SE PROJEVUJÍ DÍKY SYMETRII ODLIŠNĚ

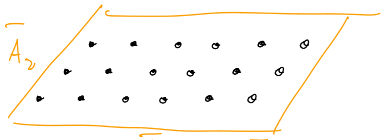
$\Rightarrow$ OPRAVDU PAK VIDÍM 3 MODY

– V OBECNÉM BODĚ VIDÍM VŽDY $\neq 3$

ZÁVĚREM: – q VŽDY VYBÍRÁM Z BRIL. ZONY

–

- DÍKY KVANTOVÁNÍ VŽDY HO MUSÍME PROVÁDĚT NA TAKOVÉM OBJEMU, KTERÝ ODPOVÍDÁ PERIODICITĚ KRYSTALU



$\bar{A}_1 = N_1 \bar{a}_1$

$\bar{A}_2 = N_2 \bar{a}_2$

$\bar{A}_3 = N_3 \bar{a}_3$

VYNÁSOBÍM TRANS. VEKTORY VELKÝM ČÍSLEM

= OPAKUJI MAKROSK. KUS KRYSTALU

„T S DVĚMA ČÁRAMI"

$$\mathbb{T}_j = j_1 \bar{A}_1 + j_2 \bar{A}_2 + j_3 \bar{A}_3$$

APROXIMACE

e^{-iqT_n} – VLNY O DELŠÍ VLN. DÉLCE JIŽ NEMOHU ZANEDBAT

$q \cdot \mathbb{T}_j = 2\pi \cdot$ CELÉ ČÍSLO ABY BYLO PERIODICKÉ

↳ VOLÍM (JAKO PŘEDTÍM K)

$$B_1 = 2\pi \frac{\bar{A}_2 \times \bar{A}_3}{\bar{A}_1 \cdot [\bar{A}_2 \times \bar{A}_3]} = \frac{N_2 \bar{a}_2 \times N_3 \bar{a}_3}{2\pi\, N_1 \bar{a}_1 \cdot [N_2 \bar{a}_2 \times N_3 \bar{a}_3]} = \frac{b_1}{N_1}$$

ZPĚTNÁ TRANSFORMACE

$$\Rightarrow \quad w^{\alpha}_{ln} = \frac{1}{\sqrt{N_e}} \sum_{q}^{BZ} e^{iqT_n}\, w^{\alpha}_{lq}$$

$N_e = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$; $\bar{q} = k_1 \bar{B}_1 + k_2 \bar{B}_2 + k_3 \bar{B}_3$

$$\bar{B}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} \bar{A}_2 \times \bar{A}_3$$

$$\bar{B}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} \bar{A}_3 \times \bar{A}_1$$

$$\bar{B}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} \bar{A}_1 \times \bar{A}_2$$

BORN-KARMÁNOVY PODM. → PŘECHOD NA $\int$

$$w^{\alpha}_{ln} = \frac{1}{\sqrt{N_e}} \sum_{q}^{BZ} e^{iqT_n}\, w^{\alpha}_{lq}$$

$$\underbrace{\bar{B}_1 \cdot [\bar{B}_2 \times \bar{B}_3]}_{\text{OBJEM RECIPR. BUŇKY}} \cdot \sum_q (\ ) = \underbrace{\int dq}_{\text{V PŘÍMÉM PROSTORU}}$$

$$\frac{(2\pi)^3}{\Omega}$$

$$\Omega = N_e \cdot \Omega_0$$

$$\boxed{\sum_q (\ ) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \cdot \int dq}$$

$$\Rightarrow \sum_q (\ ) = \Omega \int \frac{dq}{(2\pi)^3}$$

– POTOM JE TO TEDY NA JEDN. OBJEM

TRANSFORMACE OD VÝCHYLEK

w ... REDUKOVANÁ VÝCHYLKA

u ... REÁLNÁ VÝCHYLKA

$$u^{\alpha}_{ln} = \frac{1}{\sqrt{M_l}}\, w^{\alpha}_{ln} = \frac{1}{\sqrt{M_l}} \cdot \frac{1}{\sqrt{N_e}} \cdot \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int^{BZ} dq\, e^{iqT_n}\, w^{\alpha}_{lq}$$

A NAOPAK

$$w^{\alpha}_{lq} = \sum_{\tau=1}^{3s} e^{\alpha l}_{\tau q} \cdot u_{\tau q}$$

$$u_{\tau q} = \frac{1}{\sqrt{N_e}} \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{l=1}^{s} \sum_{n=0}^{N} u^{\alpha}_{ln} \sqrt{M_l}\, e^{\alpha l}_{\tau q}\, e^{-iqT_n}$$

$$u^{\alpha}_{ln} = \frac{1}{\sqrt{M_l N_c}} \sum_{\tau=1}^{3s} \sum_{q}^{BZ} e^{\alpha l}_{\tau q}\, u_{\tau q}\, e^{iqT_n}$$ (ALTER. ZÁPIS POMOCÍ SUMACÍ)

4. PŘEDNÁŠKA

OPÁČKO:

ODVODILI JSME TRANSFORMACE $u \leftrightarrow w$

u^{α}_{ln} ... FYZIKÁLNÍ VÝCHYLKA

α ... SMĚR

l ... SIGNATURA ATOMU

$n = (n_1, n_2, n_3)$ URČUJE KDE JSME V ATOMU

POČET ATOMŮ

3 SMĚRY

PŘES KVANT. OBJEM

VLN. VEKTOR Z BZ

VÝCHYLKA DO τ

TRANSLAČNÍ VEKTOR DO ELEM. CELY KDE JSME

$$u_{\tau q} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{l=1}^{s} \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{n}^{N_c} u^{\alpha}_{ln} \sqrt{M_l}\, e^{-iqT_n} \cdot \bar{e}^{\alpha l}_{\tau q}$$

NORMOVÁNÍ

HMOTA (PŘEJDU NA REDUKOVANOU VÝCHYLKU)

OSDRUŽENÝ POLARIZ. VEKTOR

④ ZPĚTNÁ TRANSFORMACE

τ ... VZNIKLE DIAGONALIZACÍ DYNAM. MATICE D

$$u^{\alpha}_{ln} = \frac{1}{\sqrt{M_l}} \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{q}^{BZ} \sum_{\tau=1}^{s3} u_{\tau q}\, e^{iqT_n}\, \bar{e}^{\alpha l}_{\tau q}$$

$\forall$ PÁSY

MUSÍM SE DOSTAT ZE REDUK. NA FYZIKÁLNÍ

PŘÍPRAVA

REPREZENTACE 2. KVANTOVÁNÍ

$$u^{+}_{\tau q} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{l\alpha n} u^{\alpha}_{ln} \sqrt{M_l}\, e^{iqT_n}\, e^{\alpha l}_{\tau q} = u_{\tau -q}$$

FYZ. OPER. → HERMITOVSKÝ

$$e^{\alpha l}_{\tau q} = e^{\alpha l}_{\tau -q}$$

- V q MÁME 2x VÍCE PARAM. (DÍKY komplexitě)
  - SDRUŽENÍM SNÍŽÍM POČET STUPŇŮ VOLNOSTI NA STEJNÝ JAKO

V IR REPREZENTACI

- PŘECHOD Z IR $\quad C(x) = A(x)\cdot B(x) \xrightarrow{\text{F.OBRAZ}} C(q) = \int \frac{dk}{(2\pi)^3} A(k)\cdot B(q-k)$

POKUD HUSTOTA ENERGIE

$H \sim \int dx$ PRO $A^2(x) \xrightarrow{\text{FO}} \int \frac{dk}{(2\pi)^3} A(k)A(-k)$

$\mathcal{L}$ ... LAGR. FCE $\qquad \mathcal{L} = K - V$ (K ... KIN., V ... POT. E)

$$K = \sum_{nl\alpha} \frac{1}{2} M_l (\dot{u}^\alpha_{ln})^2 = \frac{1}{2}\sum_{nl\alpha} M_l \dot{u}^\alpha_{ln} \cdot \frac{1}{\sqrt{N_e}} \frac{1}{\sqrt{M_l}} \sum_\tau \dot{u}_{\tau q} e^{iqT_n} e^{\alpha l}_{\tau q}$$

PŘES ∀ atomy, ionty, směry $\qquad$ 1. DRU $\qquad$ Q. ROZEDIŠU

PŘEVOD DO $u_{\tau q}$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\tau q} \dot{u}_{\tau q} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{N_e}} \sum_{nl\alpha} \sqrt{M_l}\, \dot{u}^\alpha_{ln}\, e^{iqT_n} e^{\alpha l}_{\tau q}}_{u_{\tau -q}} = \frac{1}{2}\sum_{\tau q} \dot{u}_{\tau q} u_{\tau -q}$$

=> JE TO TEDY KONVOLUCE A NE KVADRÁT RYCHLOSTÍ

$$\boxed{K = \frac{1}{2}\sum_{\tau q} \dot{u}_{\tau q} \dot{u}_{\tau -q}}$$ KINET. ENERGIE

OBDOBNĚ

VÝCHOZÍ POT. E. (Z DERIVACE INTER. POTENCIÁLU)

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta l \varkappa, m, n} B^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(n-m)\, u^\alpha_{ln}\, u^\beta_{\varkappa m} =$$

JEDNU Z VELIČIN DOSADÍME

$$= \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta l\varkappa, m, n} u^\alpha_{ln} B^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(n-m) \cdot \frac{1}{\sqrt{M_\varkappa}} \frac{1}{\sqrt{N_e}} \sum_{\tau q} u_{\tau q} e^{\beta\varkappa}_{\tau q} e^{iqT_m}$$

$$e^{iqT_m} = e^{iqT_n} e^{iqT_{m-n}}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\tau q} u_{\tau q} \sum_{\alpha\beta l\varkappa m n} \frac{1}{\sqrt{N_e}} u^\alpha_{ln} \sqrt{M_l}\, D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(n-m)\, e^{\beta\varkappa}_{\tau q} e^{iqT_n} \cdot e^{iqT_{m-n}}$$

1 VYNÁSOBÍME $\sqrt{M_l}$ A $\sqrt{M_\varkappa}$ MÁME.

$$= \frac{1}{2}\sum_{\tau q} u_{\tau q} \frac{1}{\sqrt{N_e}} \sum_{\alpha l n} u^\alpha_{ln} \sqrt{M_l}\, e^{iqT_n} \underbrace{\sum_{\beta\varkappa} D^{\alpha\beta}_{l\varkappa}(q)\, e^{\beta\varkappa}_{\tau q}}_{\omega^2_{\tau q} \cdot e^{\alpha l}_{\tau q}}$$

Z DEFINICE VLASTNÍCH STAVŮ D

$$= \frac{1}{2}\sum_{\tau q} u_{\tau q} \frac{1}{\sqrt{N_e}} \sum_{\alpha l n} u^\alpha_{ln} \sqrt{M_l}\, e^{iqT_n}\, \omega^2_{\tau q} \cdot e^{\alpha l}_{\tau q}$$

$$\boxed{V = \frac{1}{2}\sum_{\tau q} \omega^2_{\tau q} u_{\tau q} u_{\tau -q}}$$ POTENC. E

$\mathcal{L} = K - V$

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\sum_{\tau q} \dot{u}_{\tau q} \dot{u}_{\tau -q} - \left(-\frac{1}{2}\omega^2_{\tau q} u_{\tau q} u_{\tau -q}\right)$$

HYBNOST JE KANONICKY SDRUŽENÁ

$$\boxed{p_{\tau q} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}_{\tau q}} = \dot{u}_{\tau -q}}$$

- POTŘEBUJEME ZNÁT RYCHL. PRO VÝPOČET DIEL. FCE, PROUDU, ...

LAGRANGEOVA TRANSFORMACE

$$\boxed{H = \sum \dot{u}_{\tau q} p_{\tau q} - \mathcal{L}} = \frac{1}{2}\sum p_{\tau -q} p_{\tau q} + \omega^2_\tau u_{\tau q} u_{\tau -q}$$

$$\left(\underbrace{\sum p_{\tau -q} p_{\tau q} - \frac{1}{2} \dot{u}_{\tau q} \dot{u}_{\tau -q}}_{\frac{1}{2} p_{\tau q} p_{\tau -q}} + \frac{1}{2}\omega_{\tau q} u_{\tau q} u_{\tau -q} \right) \checkmark$$

$\dot{u}_{\tau q} = p_{\tau -q}$, $\dot{u}_{\tau -q} = p_{\tau q}$

VÝHODA: → VELIČINY $p_{\tau-q}$, $p_{\tau q}$ SE VYSKYTUJÍ POHROMADĚ → MOHU ZAMĚŇOVAT

→ JEN POZOR NA SMĚR! PŘI PROHOZ. MŮŽE TŘEBA PROUD TÉCT OBRÁCENĚ

NEVÝHODA: NEPOHODLNÝ VÝPOČET PRO OSCILACE

REPREZENTACE 2. KVANTOVÁNÍ

– CHCEME $\boxed{u^+_{\tau q} = u_{\tau-q}}$ $\Rightarrow$ $a_{\tau q} = a^+_{\tau-q}$

└ SDRUŽENOST

$$a^+_{\tau q} \neq a_{\tau-q}$$

KREAČNÍ & ANIHILAČNÍ OPERÁTOR

$$u_{\tau q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\tau q}}}\left(a^+_{\tau-q} + a_{\tau q}\right) \qquad p_{\tau q} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{2}}\left(a^+_{\tau q} - a_{\tau-q}\right)$$

→ SDRUŽÍME $u^+_{\tau q}$, $p^+_{\tau q}$ ⇒ JEJICH KOMBINACÍ NÁSLEDNĚ ZÍSKÁME KOMUTAČNÍ RELACE

KOMUTAČNÍ RELACE — δ NA BRIL. ZÓNĚ

$$a_{\tau q}a^+_{\varkappa k} - a^+_{\varkappa k}a_{\tau q} = \delta_{\varkappa\tau}\delta_{kq}$$

$$a_{\tau q}a_{\varkappa k} - a_{\varkappa k}a_{\tau q} = 0$$

$$a^+_{\tau q}a^+_{\varkappa k} - a^+_{\varkappa k}a^+_{\tau q} = 0$$

⇒ DOSADÍME DO HAMILTONIÁNU

$$H = \sum \dot{u}_{\tau q}p_{\tau q} - \mathcal{L} = \frac{1}{2}\sum p_{\tau-q}p_{\tau q} + \omega^2_{\tau q}u_{\tau q}u_{\tau-q}$$

$$u_{\tau q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\tau q}}}\left(a_{\tau q} + a^+_{\tau-q}\right)$$

$$p_{\tau q} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{2}}\left(a^+_{\tau q} - a_{\tau-q}\right)$$

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\substack{\tau q \\ \forall\ \text{MÓDY}}} \overbrace{-\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{2}}^{i^2}\left(a^+_{\tau q} - a_{\tau-q}\right)\left(a^+_{\tau-q} - a_{\tau q}\right) + \omega^2_{\tau q}\frac{\hbar}{2\omega_{\tau q}}\left(a_{\tau q} + a^+_{\tau-q}\right)\left(a_{\tau-q} + a^+_{\tau q}\right)$$

$$-\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{2} \qquad\qquad +\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{2}$$

→ VYRUŠÍ SE KREAČNÍ A ANIHILAČNÍ

$$= \frac{\hbar}{4}\sum_{\tau q}\omega_{\tau q}\left(a^+_{\tau q}a_{\tau q} + a_{\tau-q}a^+_{\tau-q} + a_{\tau q}a^+_{\tau q} + a^+_{\tau-q}a_{\tau-q}\right)$$

q … PŘES CELOU B. ZÓNU; $\omega_{\tau q} = \omega_{\tau-q}$

⇒ MŮŽU ZASUBSTITUOVAT $q = -q$

⇒ DOSTANU STEJ. ČLENY

⇒ DOSTAL JSEM **2** (PROTO UŽ JEN $\frac{1}{2}$ PŘED Σ)

A VÍME Z KOMUTACE $a_{\tau q}a^+_{\tau q} = 1 + a^+_{\tau q}a_{\tau q}$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\tau q}\hbar\omega_{\tau q}\left(a^+_{\tau q}a_{\tau q} + a_{\tau q}a^+_{\tau q}\right)$$

$$= \boxed{\sum_{\tau q}\hbar\omega_{\tau q}\left(a^+_{\tau q}a_{\tau q} + \frac{1}{2}\right) = H}$$

HAMILT. PRO ∀ BOSON. POLE

q … JE KONEČNÉ KVŮLI BRILL. ZÓNĚ – MÁME POUZE KONEČNÝ POČET CO VYBRAT

VLASTNOSTI OPERÁTORŮ 2. KVANTOVÁNÍ

$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$ $a^+_{\varkappa k}|\phi\rangle$ JE TAKÉ VLASTNÍM STAVEM

$$H a^+_{\varkappa k}|\phi\rangle = \sum_{\tau q} \hbar\omega_{\tau q} \underbrace{(a^+_{\tau q} a_{\tau q} + \tfrac{1}{2})\, a^+_{\varkappa k}}_{\text{komutátor} = \delta} |\phi\rangle$$

$$= \sum_{\tau q} \hbar\omega_{\tau q} \left(a^+_{\tau q}\left(a^+_{\varkappa k} a_{\tau q} + \delta_{\varkappa\tau}\delta_{kq}\right) + \tfrac{1}{2} a^+_{\varkappa k}\right)|\phi\rangle =$$

$$= a^+_{\varkappa k} \sum_{\tau q} \hbar\omega_{\tau q} \left(a^+_{\tau q} a_{\tau q} + \delta_{\varkappa\tau}\delta_{kq} + \tfrac{1}{2}\right)|\phi\rangle =$$

$$= a^+_{\varkappa k}(\underset{\underset{E}{\parallel}}{H} + \hbar\omega_{\varkappa k})|\phi\rangle$$

$$= E + \hbar\omega_{\varkappa k}|\phi\rangle$$

– KREAČNÍ OPERÁTOR ZVÝŠÍ EXCITOVANÝ STAV

¿ ???

MĚRNÉ TEPLO

$$H = \sum_{\tau q} \hbar\omega_{\tau q}\left(a^+_{\tau q} a_{\tau q} + \tfrac{1}{2}\right)$$

– KLASICKÉ FYZIKY VYDE VŽDY STEJNÉ A NEZÁV. NA TEPLOTĚ

$\frac{1}{2}k_B T \cdot$ POČ. ST. VOL.

KAŽDÝ ATOM MÁ 6 STUPŇŮ

– MÁME KONST. OBJEM

– PRŮM. ENERGIE (STŘ. HODNOTA HAMILTONIÁNU)

$$U = \sum_{i} \rho_i \langle i|H|i\rangle$$

PRAVDĚP. STAVŮ

i – STAVY

ENERGIE STAVŮ

$$\rho_i \approx e^{-\frac{E}{k_B T}} \quad ; \quad \sum_i \rho_i = 1$$

i ... VLASTNÍ STAVY

BOLTZ. ROZDĚLENÍ

$\text{Trace}\,\hat{\rho} = 1$

$$\rho_i = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E}{k_B T}} \qquad H = \sum_i |i\rangle E_i \langle i|$$

$$\Rightarrow \hat{\rho} = \frac{e^{-\frac{H}{k_B T}}}{\text{Trace}\left(e^{-\frac{H}{k_B T}}\right)}$$

TRACE ... SOUČET DIAG. PRVKŮ

$$\text{Tr}\, e^{-\frac{H}{k_B T}} = \text{Tr}\left(\sum_i |i\rangle e^{-\frac{E_i}{k_B T}} \langle i|\right) = \sum_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}}$$

A ZAVEDU INVERZNÍ TEPLOTU

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

$\text{Trace}\,\hat{\rho} = 1$

$$U = \text{Trace}(\hat{\rho} H) = \sum_{\tau q} \hbar\omega_{\tau q}\, \text{Trace}\left(\hat{\rho}\, a^+_{\tau q} a_{\tau q} + \tfrac{1}{2}\right)$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{\tau q} \hbar\omega_{\tau q}}_{\text{KONST. ČLEN – DO MĚR. TEPLA NEPŘISPÍVÁ}} + \sum_{\tau q} \underbrace{\text{Trace}\left(\hat{\rho}\, a^+_{\tau q} a_{\tau q}\right)}_{n_{\tau q} \text{ – TO HLE BUDEME HLEDAT}}$$

$$n_{\tau q} = \text{Trace}\left(\hat{\rho}\, a^+_{\tau q} a_{\tau q}\right)$$

VIZ VÝŠE

$$H a^+_{\tau q} = a^+_{\tau q}(H + \hbar\omega_{\tau q})$$

$$\downarrow$$

$$f(H) a^+_{\tau q} = a^+_{\tau q} f(H + \hbar\omega_{\tau q})$$

$$= \frac{1}{Z}\text{Trace}\left(e^{-\frac{H}{k_B T}} a^+_{\tau q} a_{\tau q}\right)$$

$$= \frac{1}{Z}\text{TRACE}\left(a^+_{\tau q} e^{-\frac{H + \hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}} a_{\tau q}\right)$$

$$= e^{-\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}} \cdot \text{Tr}\left(a^+_{\tau q} \hat{\rho}\, a_{\tau q}\right)$$

– POD STOPOU MOHU PROHAZOVAT

KOMUT. RELACE

$$= e^{-\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}} \cdot \text{Tr}\left(\hat{\rho}\, a_{\tau q} a^+_{\tau q}\right) = e^{-\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}}\, \text{Tr}\left(\rho\left(a^+_{\tau q} a_{\tau q} + 1\right)\right) =$$

- ABYCH MĚL $a^{\dagger}_{\tau q} a_{\tau q}$ JAKO V ZÁKL. TVARU PRO $n_{\tau q}$

$$\boxed{n_{\tau q} = e^{-\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}} \cdot (n_{\tau q}+1)}$$

→ ŘEŠÍME

$$\boxed{n_{\tau q} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}} - 1}}$$

BOSE-EINST. ROZDĚLENÍ

DOSADÍM DO U

$$U = \mathrm{Trace}(\hat{\varrho} H) = \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{\tau q} \hbar\omega_{\tau q}}_{\text{KONST. ČLEN}} + \sum_{\tau q} \mathrm{TRACE}(\hat{\varrho}\, a^{\dagger}_{\tau q} a_{\tau q})$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\tau q} \hbar\omega_{\tau q} + \sum_{\tau q} \hbar\omega_{\tau q} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}} - 1}$$

VYSOKOTEPL. LIMITA

$k_B T \gg \hbar\omega_{\tau q}$; V SYSTÉMU EXISTUJE MAX. FREKVENCE
- POKUD KRYSTAL PROJDE FÁZ. PŘECHODEM → NEMÁ REÁLNÝ SMYSL

$T \to \infty$

$$U = \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{\tau q} \hbar\omega_{\tau q}}_{\text{KONST.; } U_0} + \sum_{\tau q} \hbar\omega_{\tau q} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}} - 1}$$

- NEBUDU UVAŽ.

$$e^{\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}} \doteq 1 + \frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T} \quad !$$

$$\Rightarrow U = \sum_{\tau q} k_B T = 3N k_B T$$

$\tau = 3s$ (P

- ODPOVÍDÁ Z KLASICKÉ FYZIKY

NÍZKOTEPLOTNÍ

- VÍME, ŽE MĚŘENÉ TEPLO VYMRZÁ

EINSTEINŮV MODEL

- $\forall$ ω JSOU STEJNÉ $\omega_{\tau q} = \omega_0$

$$U = \sum_{\tau q} \frac{\hbar\omega_0}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}} - 1} = 3N \frac{\hbar\omega_0}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}} - 1}$$

- ALE CHYBNÉ; Z EXP. JE PATRNÉ, ŽE VYMRZÁ KUBICKY

DEBYE: - LINEÁRNÍ MODEL

MY ALE UDĚLÁME PŘESNOU LIMITU

LIMITA $T \to 0$

1 - UPLATNÍ SE POUZE 3 AKUSTICKÉ MODY, OPT. VYMRZNOU

AKUST. MODY
PROST. ÚHEL
RYCHLOST
PROST. ÚHEL Θ

$$U = \sum_{\tau=1}^{3} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \cdot \int d\Theta \int_0^{\infty} dq\, q^2 \frac{\hbar c_\Theta q}{e^{\frac{\hbar c_\Theta q}{k_B T}} - 1}$$

2 OBĚŽNĚ OPERUJE POUZE V BZ.; PŘI $\downarrow T$ SE UPLATNÍ POUZE POUZE MALÉ OKOLÍ KOLEM POČÁTKU

$\Rightarrow$ MOHU INT. DO ∞ PŘES CELÝ PROSTOR

- ZBYTEK EXPONENC. VYMRZÁ

3 LINEÁRNÍ CHOVÁNÍ V OKOLÍ POČÁTKU

4 SUBST. $x = \frac{\hbar c_\Theta q}{k_B T}$ $\quad dq = \frac{k_B T}{\hbar c_\Theta} dx$

$$U = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \, 3 \cdot 4\pi \underbrace{\frac{1}{3}\sum_{\tau=1}^{3}}_{\substack{\text{POKUD } \forall \text{ 3 ČLENY} \\ \text{STEJNOU RYCHLOST} \\ =1 \\ \text{STŘEDOVÁNÍ}}} \underbrace{\frac{1}{4\pi}\int d\Theta}_{\substack{\text{STŘEDOVÁNÍ} \\ \text{PŘES } \forall \text{ SMĚRY}}} \hbar c_\Theta \frac{(k_B T)^4}{(\hbar c_\Theta)^4} \underbrace{\int_0^{\infty} dx \frac{x^3}{e^x - 1}}_{\frac{\pi^4}{15}}$$

(V POZN. JE TO ŠPATNĚ)

$$\boxed{U = \Omega \frac{\pi}{10} \frac{(k_B T)^4}{\hbar^3} \left\langle \frac{1}{c^3} \right\rangle}$$

A

$$\boxed{\frac{\partial U}{\partial T} = c_V}$$

STŘ. HODNOTA

$$\left\langle \frac{1}{c^3} \right\rangle = \frac{1}{3}\sum_{\tau=1}^{3} \frac{1}{4\pi}\int d\theta \, \frac{1}{c_\theta^3}$$

$$\boxed{C_V = \frac{1}{\Omega}\frac{\partial U}{\partial T} = \frac{2\pi \, k_B^4 T^3}{5\hbar^3} \cdot \left\langle \frac{1}{c^3} \right\rangle}$$

– OBSAHUJE KUBICKÝ ČLEN

- MĚR. TEPLO FERMIONŮ (e^-) V KOVECH KLESÁ LIN. S T

TEPLOTA TÁNÍ

~~POUŽIJEME~~ ROZKLAD DO VLAST. KMITŮ → ZJISTÍME AMPLITUDY

- KVADRATICKÁ VÝCHYLKA

$$\langle uu \rangle = \frac{1}{N}\sum_{n,\alpha} \mathrm{Tr}\left(\hat{\varrho}\, u_n^\alpha u_n^\alpha\right) = g R_0^2$$

$\alpha = 1,2,3$

g ... SPOLEČNÁ KONSTANTA STEJNÁ PRO VĚTŠ. KOVŮ

R_0 ... VZDÁL. MEZI ATOMY

- LÁTKA ZAČNE TÁT, POKUD SE ATOMY ROZKMITAJÍ TAK, ŽE JSOU POROVNAT. S MEZIAT. VZDÁL.
- s ... POČET ATOMŮ ; $s = 1$ (1 ATOM V ELEM. CELE)

BUDEME HLEDAT; ROZL. DO OPER. 2. KVANTOVÁNÍ

VÝCHYLKA

$$u_n^\alpha = \frac{1}{\sqrt{N}}\frac{1}{\sqrt{M}}\sum_{\tau=1}^{3}\sum_{q}^{BZ} \underbrace{\sqrt{\frac{\hbar^2}{2\omega_{\tau q}}}\left(a^+_{\tau -q} + a_{\tau q}\right)}_{\text{ZÁKL. VÝCHYLKA (REPREZ. VLASTNÍCH KMITŮ) ①}} \, e^\alpha_{\tau q} \, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_n}$$

$\frac{1}{\sqrt{N}}$: NORMUJ

$\sum_{\tau=1}^{3}$: ③ PŘES ~~JEDNOT.~~ VĚTVE

$\sum_q$: ⑤

$e^\alpha_{\tau q}$: ② POLARIZ. OPERÁTOR

$e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_n}$: FÁZE ODPOV. EL. CELE (ROVINNÁ VLNA) ④

$$\langle uu \rangle = \frac{1}{N}\sum_{n,\alpha}\frac{1}{N}\frac{1}{M}\sum_{\tau q}\sum_{\varkappa k}\frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sqrt{\omega_{\tau q}}}\frac{1}{\sqrt{\omega_{\varkappa k}}} e^{i\vec{q}\vec{r}_n} e^{i\vec{k}\vec{r}_n} \overbrace{e^\alpha_{\tau q} e^\alpha_{\varkappa k}}^{\text{POLAR. OPER.}} \mathrm{Tr}\left(\hat{\varrho}\left(a^+_{\tau-q} + a_{\tau q}\right)\left(a^+_{\varkappa -k} + a_{\varkappa k}\right)\right)$$

FAKTOR VZEŠLÝ Z KOMUTACE

MIKLE $\mathrm{Tr}\left(\hat{\varrho}\, a^+_{\tau q} A\right) = \cancel{\mathrm{Tr}}\; e^{-\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}} \mathrm{Tr}\left(a^+_{\tau q}\hat{\varrho} A\right) = e^{-\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}} \mathrm{Tr}\left(\hat{\varrho} A a^+_{\tau q}\right)$

POKUD $A, a^+_{\tau q}$ KOMUTUJÍ → PAK $= 1 \Rightarrow e^0$

NEKOMUTUJÍ – ~~NOVÝ~~ ČLEN, PŘÍSPĚVEK

$\mathrm{Tr}\left(\hat{\varrho}\, a^+_{\tau q} a^+_{\varkappa k}\right) = 0$ KOMUTUJÍ ; STEJNĚ TAK PRO OBA KOMUTÁTORY ANIHILAČNÍ

$\mathrm{Tr}\left(\hat{\varrho}\, a^+_{\tau q} a_{\varkappa k}\right) = \delta_{\tau\varkappa}\delta_{qk} \cdot n_{\tau q}$ — BOSE EINST. ROZDĚLENÍ

$$\mathrm{Tr}\left(\hat{\varrho}\left(a^+_{\tau-q} + a_{\tau q}\right)\left(a^+_{\varkappa -k} + a_{\varkappa k}\right)\right)$$

$$\mathrm{Tr} = n_{\tau -q}\,\delta_{\tau\varkappa}\delta_{q-k} + \left(n_{\tau q} + 1\right)\delta_{\tau q}\delta_{q-k}$$

$$\langle uu\rangle = \frac{1}{N}\sum_{n,\alpha} \frac{1}{N}\frac{1}{M}\sum_{\tau q}\sum_{\varkappa k}\frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sqrt{\omega_{\tau q}}}\frac{1}{\sqrt{\omega_{\varkappa k}}}\underbrace{e^{iq\,r_n}\,e^{ik\,r_n}}_{\text{odečtou se } k=-q}\;\overbrace{e^{\alpha}_{\tau q}\,e^{\alpha}_{\varkappa k}}^{\text{POLAR. OPER.}}\;\mathrm{Tr}\left(\hat\varrho\,(a^{+}_{\tau -q}+a_{\tau q})(a^{+}_{\varkappa -k}+a_{\varkappa k})\right)$$

$\omega_q = \omega_{-q}$

$e_{\varkappa k} = \bar{e}_{\varkappa -q}$ (KOMPL. SDRUŽ.) $\Rightarrow e_{\varkappa k} = \bar{e}_{\tau q}$

$$= \frac{1}{N^2 M}\cdot\frac{\hbar}{2}\sum_{n\alpha}\sum_{\tau q}\frac{1}{\omega_{\tau q}}\,e^{\alpha}_{\tau q}\,\bar{e}^{\alpha}_{\tau q}\left(n_{\tau -q}+n_{\tau q}+1\right)$$

$\sum_{\alpha} e^{\alpha}_{\tau q}\,\bar{e}^{\alpha}_{\tau q} = 1$

NA n NIC NEZÁVISÍ A JE JICH TAM N

$$= \frac{\hbar}{2N^2 M}\,N\sum_{\tau q}\frac{1}{\omega_{\tau q}}\left(n_{\tau -q}+n_{\tau q}+1\right)$$

; τ, $-\tau$ STEJNÝ VÝSL.

$$\langle uu\rangle = \frac{\hbar}{2MN}\sum_{\tau q}\left(2n_{\tau q}+1\right)\frac{1}{\omega_{\tau q}}$$

$$\frac{2}{e^{\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}}-1}+1 = \frac{2}{e^{\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}}-1}\cdot\frac{e^{\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}}-1}{e^{\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{k_B T}}-1} = \frac{e^{x}+1}{e^{x}-1} = \frac{e^{\frac{x}{2}}+e^{-\frac{x}{2}}}{e^{\frac{x}{2}}-e^{-\frac{x}{2}}} = \mathrm{cotgh}\,\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{2k_B T}$$

ÚPRAVY: 1) PŘECHOD $\sum \to \int$

$$\langle uu\rangle = \frac{\hbar}{2MN}\sum_{\tau}\Omega\int_{BZ}\frac{dq}{2\pi^3}\frac{1}{\omega_{\tau q}}\,\mathrm{cotgh}\left(\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{2k_B T}\right)$$

M… HMOTN. JÁDRA
N… POČET
} CELK. HMOTA KRYST. OBJEMU Ω

$\varrho = \frac{NM}{\Omega}$ HUSTOTA

POUŽIJEME **DEBYŮV MODEL**

- MÁME JEDNU RYCHLOST ZVUKU $\omega_{\tau q} = c\,q$ (c … KONSTANTA)
- BZ MOHU NAHRADIT KOULÍ; q_D JE MAX. ČÍSLO DO KTERÉHO JDEME
- OBJEM KOULE ~ POČTU STAVŮ

$$\sum_{\tau=1}^{3}\Omega\int\frac{dq}{(2\pi)^3} = 3N$$

PŘES MÓDY; PŘES KOULI; POČET STUP. VOLNOSTI

$$3\,\Omega\frac{1}{(2\pi)^3}\cdot\frac{4}{3}\pi q_D^3 = 3N$$

$$\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\cdot 4\pi q_D^3 = 3N \;\Rightarrow\; \boxed{q_D^3 = 6\pi^2\frac{N}{\Omega}} \;+\; \boxed{\varrho = \frac{NM}{\Omega}}$$

- ZJISTÍM q_D $\Rightarrow$ EXPERIMENTÁLNĚ OVĚŘITELNÉ
- URČÍM HUSTOTU

ω_D… DEBYOVA FREKVENCE

Θ… DEBYOVA TEPLOTA

$\omega_D = c\,q_D$

$\boxed{k_B\Theta = \hbar\omega_D}$ $\boxed{\Theta = \frac{\hbar}{k_B}\omega_D}$

DEBYŮV MODEL:

BRILLOUINOVA ZÓNA NAHRAZENA DEB. KOULÍ O POLOM. q_D; JEDNOU 1 RYCHLOST (HLADKATÁ)

PŘEDPOKLAD: MÓDY STEJNÉ

$$\text{PŮV: } \langle uu\rangle = \underbrace{\frac{\hbar}{2MN}}_{\varrho}\sum_{\tau}\Omega\int_{BZ}\frac{dq}{2\pi^3}\frac{1}{\omega_{\tau q}}\,\mathrm{cotgh}\left(\frac{\hbar\omega_{\tau q}}{2k_B T}\right)$$

$\sum_{\tau} \to 3$

$$\langle uu\rangle = \frac{3\hbar}{2\varrho}\frac{1}{(2\pi)^3}4\pi\int_0^{q_D}dq\,q^2\frac{1}{cq}\,\mathrm{cotgh}\underbrace{\left(\frac{\hbar c q}{2k_B T}\right)}_{x}$$

$x = \frac{\hbar c}{2k_B T}q$

$$= \frac{3\hbar}{4\pi^2\varrho c}\left(\frac{2k_B T}{c\hbar}\right)^2\int_0^{\frac{\Theta}{2T}}dx\,x\coth(x)$$

$x_D = \frac{\overbrace{\hbar c q_D}^{\omega_D}}{2k_B T} = \frac{\Theta}{2T}$ HORNÍ MEZ (x_D … MAX)

$$\langle uu\rangle = \frac{3k_B^2T^2}{\pi^2\varrho c^3\hbar}\int_0^{\frac{\Theta}{2T}}dx\,x\coth(x)$$

NÍZKOTEPLOTNÍ LIMITA

$T \ll \theta$

$$\langle uu \rangle = \frac{3 k_B^2 T^2}{\pi^2 \varrho c^3 \hbar} \int_0^{\overset{\theta/2T \to \text{VELKÝ}}{}} dx\, x \coth(x)$$

$\coth(x) \to 1$

↓ ROZDĚLÍM

$$\int_0^{\theta/2T \,\to\, \infty} dx\, x \underbrace{\left(\coth(x) - 1\right)}_{\text{VYMÍRÁ}} + \int_0^{\theta/2T} dx\, x = \frac{1}{2}\left(\frac{\theta}{2T}\right)^2 + \frac{\pi^2}{12}$$

$$\langle uu \rangle = \frac{3 k_B^2 T^2}{\pi^2 \varrho c^3 \hbar} \cdot \left(\frac{1}{2} \frac{\theta^2}{4T^2} + \frac{\pi^2}{12}\right)$$

$$= \frac{3 k_B^2 \theta^2}{8\pi^2 \varrho c^3 \hbar} \left(1 + \frac{8\pi^2}{12} \cdot \frac{T^2}{\theta^2}\right)$$

$T \ll \theta$

- I ZA NULOVÉ TEPLOTY JSOU VIBRACE ATOMŮ VELKÉ → ŘÁDOVĚ PODOBNÉ S TĚMI KDYŽ TO TAJE

VYSOKOTEPL. ROZVOJ

$T \gg \theta$

$$\langle uu \rangle = \frac{3 k_B^2 T^2}{\pi^2 \varrho c^3 \hbar} \underbrace{\int_0^{\theta/2T \,\to\, \ll 1} dx\, x \underbrace{\coth(x)}_{\approx \frac{1}{x}}}_{\frac{\theta}{2T}} = x \cdot \frac{1}{x} = 1$$

$$\langle uu \rangle = \frac{3 k_B^2 \theta T}{2\pi^2 \varrho c^3 \hbar}$$ — ZA T DOSADÍM TEPLOTU TÁNÍ

$T \gg \theta$

EXPER. DATA

	1.A			2.A		
	Li	K	Na	Cu	Ag	Au
$g_u\ 10^{-3}$	3.27	3.30	3.20	2.35	2.36	2.04
M 10^{-26} kg	1.15	3.82	6.50	10.6	17.9	32.7
R_0 Å	3.02	3.66	4.52	2.56	2.89	2.88
Θ K	400	160	100	315	215	170
T_m K	459	370	355	1356	1233	1336

- ROSTE M, KLESÁ RYCHL. ZVUKU
- PŘI PODOB. VAZBĚ

$\sqrt{\langle uu \rangle} \approx 5 \cdot 10^{-2}$; ⇒ POKUD SE VÝCHYLKA DOSTANE DO 5% VZDÁL. MEZI ATOMY

↓ MATERIÁL SE ZAČNE TAVIT

$$\langle uu \rangle = \frac{1}{N} \sum \mathrm{Tr}\left(\hat{\varrho}\, u_n^{\alpha} u_n^{\alpha}\right) = g R_0^2$$

R_0 ... VZDÁL. MEZI ATOMY

DIFRAKCE

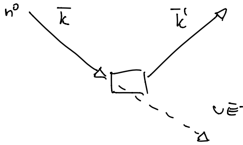
- ZAMĚŘÍME SE NA NEUTRONY → NEMAJÍ ELSTAT INTERAKCI; POUZE SLABOU MAGNETICKOU
- SILNÉ INTERAKCE S JÁDREM

$10^{-15}\,m \sim 1\,FERMI$ – VELIKOST JÁDRA
$10^{-10}\,m \sim 1\,Å$ – VZDÁL. JADER

⇒ VLN. DÉLKA POUŽ. ZÁŘENÍ MUSÍ BÝT SROVNATELNÁ S DÉLKOU VAZBY

- POTŘEBUJEME POUZE POZICI JADER (DÍKY NEINTERAKCI S e^- SNADNO)

NEUTRONOVÁ



VĚTŠINA n^0 PROJDE SKRZ

- SLABÁ INTERAKCE ⇒ POUŽIJI **FERMIHO ZLATÉ PRAVIDLO**

POČ. STAV… $|i\rangle|k\rangle \longrightarrow |f\rangle|k'\rangle$ KONC. STAV

($|i\rangle$ … VZOREK, $|k\rangle$ … NEUTRON)

$$w_{ik\to fk'} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle f|\langle k'|H_{int}|k\rangle|i\rangle\right|^2 \cdot \delta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} + E_i - \frac{\hbar^2k'^2}{2m} - E_f\right)$$

KONC. STAV, POČ. STAV, INTER. HAMILT., KIN. ENERGIE NEUTRONU, POČ. E VZORKU, m NEUTRONU, FIN. E VZORKU, ZÁKON ZACHOV. ENERGIE

ALE: UDÁVÁ POČ. A KONC. STAV VZORKU → NEMŮŽEME ZJISTIT
→ REÁLNĚ MĚŘÍME PŘECHOD $\mathbf{k \to k'}$

PRAVDĚP. ŽE SE OBJEVÍ POČÁT. VZTAH → TEPLOTNÍ ROVNOVÁHA

$$w_{k\to k'} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{f\,i} \rho_i \left|\langle f\langle k'|H_{int}|k\rangle i\rangle\right|^2 \cdot \delta\Big(\underbrace{\frac{\hbar^2k^2}{2m}}_{\hbar\omega_k} + E_i - \underbrace{\frac{\hbar^2k'^2}{2m}}_{\hbar\omega_{k'}} - E_f$$

$\forall$ KONC. STAVY

STUDUJME TEDY INTERAKCI:

$$H_{int} = \int dr\, |r\rangle H_{int}(r)\langle r| \quad \Rightarrow H_{int} = \sum_n H^{(a)}_{int}(r - T_n - u_n)$$

$\int$ … INT. PŘES PROSTOR; $H^{(a)}$ … PRO 1 ATOM; $\sum_n$ … ! $\forall$ ATOMY V KVANT. OBJEMU

#. TYP ATOMU
- NEUTRON CÍTÍ KRÁTKODOS. POTENCIÁL JADER

$$H_{int}(r) = \sum_n H^{(a)}_{int}(\bar{r} - \bar{T}_n - \bar{u}_n)$$

- DÍKY SYMETRII → ZÁVISÍ POUZE NA ROZDÍLU
$\mathbf{K = k' - k}$

NORMUJEME
$\langle r\, k\rangle = e^{ikr}$
$\langle k'\, r\rangle = e^{-ik'r}$

$H_{int} = \int dr\, |r\rangle H_{int} \langle r|$

$$\langle k'|H_{int}|k\rangle = \int dr\, e^{-ik'r} e^{ikr} \sum_n H^{(a)}(r - T_n - u_n)$$

PROHODÍM

$$\underbrace{\int dr\, e^{i\mathbf{K}r} H^{(a)}(r)}_{\text{FORM FAKTOR}} \cdot \sum_n \underbrace{e^{-i\mathbf{K}T_n}}_{\text{FÁZ. FAKTORY}} \underbrace{e^{-i\mathbf{K}u_n}}_{\text{KVANT-MECH OPERÁTOR}}$$

$$\langle \mathbf{k'}|H_{int}|\mathbf{k}\rangle = H^{(a)}_K \underbrace{\sum_n e^{-iKT_n}\; e^{-iKu_n}}_{\text{STRUKTURNÍ FAKTOR}}$$

FORMFAKTOR
(URČUJE TVAR POTENCIÁLU
V PODSTATĚ δ FUNKCE)
- ALE LEHCE ZÁV. NA K

e^{-iKT_n} … KRYSTALOGRAF. POLOHY

e^{-iKu_n} … DYNAMICKÁ ČÁST

CO HLEDÁME?

- PŘECHODOVÝ ELEMENT MEZI KONCOVÝM STAVEM A e^{-iKu_n} A POČ. STAVEM

$$\langle f|e^{-iKu_n}|i\rangle \quad + \text{KOMPL. SDRUŽ.}$$

TEDY

$$\langle i|e^{-iKu_m}|f\rangle \underbrace{\langle f|e^{-iKu_n}|i\rangle}_{\text{HLEDÁME TENTO MATICOVÝ ELEM. PRO STŘ. HODNOTU}}$$

$$\langle f| e^{-iKu_n} |i\rangle = ?$$

KON POČ

POLARIZ. OPER.

$$e^{-iKu_n} = \exp\left[-i \frac{1}{\sqrt{MN}} \sum_{\tau q}^{BZ} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\tau q}}} \left(a^+_{\tau -q} + a_{\tau q}\right) e^{\alpha}_{\tau q} K^{\alpha} \cdot e^{iqT_n}\right.$$

→ ROZDĚLÍME DLE MODŮ : SUBST. $q = -q$: $a^+_{\tau -q} = a^+_{\tau q}$

$$= \exp\left[-i \frac{1}{\sqrt{MN}} \sum_{\tau q}^{BZ} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\tau q}}} \left(a^+_{\tau q} \bar{e}^{\alpha}_{\tau q} K^{\alpha} e^{-iqT_n} + a_{\tau q} e^{\alpha}_{\tau q} K^{\alpha} e^{iqT_n}\right.\right.$$

* PROVEDENY ZMĚNY

– u e DOSAZENO SDRUŽENÍ

$$e_{\tau -q} = \bar{e}_{\tau q}$$

⇒ OBA TEDY PRO STEJNÝ MÓD

PRO LIMITY: $e^{x} = e^{N\frac{x}{N}} = \left(e^{\frac{x}{N}}\right)^N = \left(1 + \frac{x}{N}\right)^N$

PRO N VELKÉ

$$= \prod_{\tau q} \exp\left[-i \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{\tau q} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\tau q}}} \left[a^+_{\tau q} (\bar{e}_{\tau q} \cdot K) e^{-iqT_n} + a_{\tau q} (e_{\tau q} \cdot K) e^{iqT_n}\right]\right.$$

⇒ MUSÍME ROZVÍJET DO 2 ŘÁDU

$$\left(e^{\frac{2x}{N}}\right)^{\frac{N}{2}} = \left(\left(1 + \frac{x}{N}\right)^2\right)^{\frac{N}{2}} = \left(1 + \frac{2x}{N} + \frac{x^2}{N^2}\right)^{\frac{N}{2}}$$

JINO DIAG. ČLEN ZANEDBATELNÝ

$$= \prod_{\tau q} \cdot \left(1 - i \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\omega_{\tau q}}} \left(a^+_{\tau q} (\bar{e}_{\tau q} \cdot K) e^{-iqT_n} + a_{\tau q} (e_{\tau q} \cdot K) e^{iqT_n}\right)\right.$$

$$+ \underbrace{\frac{(i)^2}{2}}_{=-1} \frac{\hbar}{2MN} \frac{1}{\omega_{\tau q}} \left(a^+_{\tau q} a_{\tau q} |e_{\tau q} K|^2 + a_{\tau q} a^+_{\tau q} |e_{\tau q} K|^2\right) + \ldots$$

TYTO NEDIAG. ČLENY VYPADNOU: $a^+ a^+ \ldots$

BRAGGŮV ROZPTYL

– ELASTICKÝ FINÁLNÍ STAV JE TOTOŽNÝ S POČÁTEČNÍM

$$w_{k\to k'} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i \rho_i \left|\langle f \langle k'| H_{int} |k\rangle i\rangle\right|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_i - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - E_f\right)$$

PŘECHOD MEZI POČ. A POČ. STAVEM

POKUD SE V KRYSTALU NIC NEZMĚNILO (VYMIZÍ E_i, E_f – ODEČTOU SE)

$$w^{ELAST}_{k\to k'} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i \rho_i \left|\underbrace{\langle i \langle k'| H_{int} |k\rangle i\rangle}_{\text{MATICOVÝ EL. ELASTICKÉHO PROCESU}}\right|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}\right)$$

$$\langle k'| H_{int} |k'\rangle$$

– POTŘEBUJEME JEN TUTO DIAG. ČÁST

$K = k' - k$

$$\left(e^{-iKu_n}\right)_{\text{POUZE DIAG.}} = \prod_{\tau q} \cdot \left(1 - i \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\omega_{\tau q}}} \cancel{\left(a^+_{\tau q} (\bar{e}_{\tau q} \cdot K) e^{-iqT_n} + a_{\tau q} (e_{\tau q} \cdot K) e^{iqT_n}\right)}\right.$$

$$+ \underbrace{\frac{(i)^2}{2}}_{=-1} \frac{\hbar}{2MN} \frac{1}{\omega_{\tau q}} \left(a^+_{\tau q} a_{\tau q} |e_{\tau q} K|^2 + \underbrace{a_{\tau q} a^+_{\tau q} |e_{\tau q} K|^2}_{\text{POUŽ. KOMUT. OPER.: } a^+_{\tau q} a_{\tau q} |e_{\tau q} K|^2 + 1}\right)$$

$$= \prod_{\tau q} \left[1 - \frac{1}{4} \frac{\hbar}{MN} \frac{1}{\omega_{\tau q}} \left(2 a^+_{\tau q} a_{\tau q} |e_{\tau q} K|^2 + 1\right)\right]$$

$$\sum_i \rho_i \langle i \underbrace{\langle k| H_{int} |k'\rangle}_{\text{OPĚT } D} i\rangle \langle i \underbrace{\langle k'| H_{int} |k\rangle}_{\text{BERU POUZE DIAG. ČÁST}} i\rangle =$$

Z POČ. STAVU OPĚT NA POČ. STAV

STEJNÉ

⇒ $|i\rangle\langle i|$ VNITŘNÍ PROJEKCE JE ZBYTEČNÁ

$$= \sum_i \rho_i \langle i| \underbrace{\langle k| H_{int} |k'\rangle \langle k'| H_{int} |k\rangle}_{\text{OBĚ DIAG. ČÁSTI}} |i\rangle$$

⊕ $\sum_i \rho_i \langle i| A |i\rangle = \mathrm{TRACE}(\hat{\rho} A)$ KDE $\hat{\rho} = \sum_i \rho_i |i\rangle\langle i|$

$$= \sum_i \rho_i \langle i| \langle k| H_{int} |k'\rangle \langle k'| H_{int} |k'\rangle |i\rangle = \mathrm{TRACE}\left(\hat{\rho} \langle k| H_{int} |k'\rangle \langle k'| H_{int} |k\rangle\right)$$

↓

① NAPÍŠEME POMOCÍ ROZKLADU DO 2 OPERÁTORŮ

② STŘ. HODNOTA $a^+ a$ PŘES ρ

③ VÝSLEDEK

$K = k' - k$

JEDNOU PRO k A PRO -k

$$w^{el}_{k\to k'} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}\right) \cdot \sum_{m,n} |H^{(a)}_K|^2 e^{iKT_m} e^{-iKT_n} \mathrm{Trace}\left(\hat{\rho} \left(e^{iKu_m}\right)_{DIAG} \left(e^{-iKu_n}\right)_{DIAG}\right)$$

HLEDÁME TRACE: $\mathrm{Trace}\left(\hat{\rho} \left(e^{iKu_m}\right)_{DIAG} \left(e^{-iKu_n}\right)_{DIAG}\right)$

$$\mathrm{Trace}\left(\hat{\varrho}\,(e^{iKu_m})_{DIAG}\,(e^{-iKu_n})_{DIAG}\right) =$$

POZOROVÁNÍ: – $(e^{iKu_n})_D$ – ZÁVISÍ NA ABS. HODN. K ALE NE NA n, m

– JEN PRO EL. ROZPTYL

– PRO NEEL. SE MUSÍ DOPOČ. ZÁK. ZACH. HYBN.

$$= \mathrm{Trace}\Big(\hat{\varrho}\,\underbrace{\prod_{\tau q}\Big(1-\frac{\hbar}{2MN}\frac{1}{\omega_{\tau q}}|e_{\tau q}K|^2\cdot(2a^+_{\tau q}a_{\tau q}+1)\Big)}_{e^{iKu_m}}\cdot\underbrace{\prod_{\varkappa k}\Big(1-\frac{\hbar}{2MN}\frac{1}{\omega_{\varkappa k}}|e_{\varkappa k}K|^2(2a^+_{\varkappa k}a_{\varkappa k}+1)\Big)}_{e^{-iKu_n}}\Big)$$

KAŽDÝ MÓD STŘEDNÍ ZVLÁŠŤ, MODY NEINTERAGUJÍ

MOŽNÝ PROBLÉM POKUD $a_{\tau q}$ $a_{\varkappa k}$ IDENTICKÉ, ALE PRO ↑N JE TO ŘÁDU $\frac{1}{N}$ — ODPADNE

$\Rightarrow a^+_{\tau q}a_{\tau q}$ MOHU TEDY JAKO PŘI STŘEDOVÁNÍ NAHRADIT ZA n

$$= \prod_{\tau q}\Big(1-\frac{\hbar}{2MN}\frac{1}{\omega_{\tau q}}|e_{\tau q}K|^2(2n_{\tau q}+1)\Big)^{2}$$

– JE JEDNO JESTLI τq či $\varkappa k$

MALÉ VELIČINY → 2 MOHU VYPUSTIT

$$= \prod_{\tau q}\Big(1-\frac{\hbar}{MN}\frac{1}{\omega_{\tau q}}|e_{\tau q}K|^2(2n_{\tau q}+1)\Big)^2$$

$$= \exp\Big[-\frac{\hbar}{NM}\sum_{\tau q}\frac{1}{\omega_{\tau q}}|e_{\tau q}K|^2(2n_{\tau q}+1)\Big]$$

V DEBYOVĚ MODELU

$= K^2$ (POKUD ω NENÍ ZÁVISLÁ A VLASTNÍ JEDNOM JEDNU ω)

$$e^{-\frac{1}{3}\langle uu\rangle K^2}$$

DEBYE - WALLERŮV FAKTOR

– SNIŽUJE ÚČINNOST POTENCIÁLU PŘI VELKÉM PŘENESENÉM IMPULZU

VELIKOST IMPULZU JE DÁNA; JEDNA JE KOMPLEXNĚ SDRUŽ. KE DRUHÉ, TEDY

$$\sum_{mn} e^{iKT_m}\,e^{-iKT_n} -$$

$$\Big|\sum_n e^{-iKT_n}\Big|^2$$

NENULOVÉ JEN PRO BRAG. VEKTORY

FORM FAKTOR

STŘ. HODNOTA $\langle a^+a\rangle$

BOSE-EINST. DISTRIBUCE

$$w^{EL.}_{k\to k'} = \frac{2\pi}{\hbar}\,\delta\Big(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\frac{\hbar^2k'^2}{2m}\Big)\;|H^{(a)}_K|^2\cdot\Big|\sum_n e^{-iKT_m}\Big|^2\cdot\underbrace{e^{-\frac{\hbar}{NM}\sum_{\tau q}\frac{1}{\omega_{\tau q}}|e_{\tau q}K|^2(2n_{\tau q}+1)}}_{D-W.\ FAKTOR}$$

2. PODM

JEN ZA SPEC. PODM. DOJDE K DIFRAKCI

$$\Big|\sum_n e^{-iKT_n}\Big|^2$$

– NENUL. JEN PRO BRAGG. VEKTORY > 0

IF $= 0$ $\Rightarrow e^0 = 1$ $\Big|\sum_n\Big|^2 = N^2$

– ŠÍŘKA INTERAKCE JE ZÁV. NA VELIK. VZORKU (KOLIK ODRAZÍM)

– BLÍŽÍ SE JEN O BRAGGOVSKÉ VEKTORY

6. PŘEDNÁŠKA

OPÁČKO DIFRAKCE:

INTERAKCE S KRYST.

POČ. STAV

$$\langle f| \langle k'| H_{int} |k\rangle |i\rangle$$ → DÁM DO $|\;|^2$

KONCOVÝ STAV SVAZKU

PŘICHOZÍ SVAZEK n°

KONCOVÝ STAV KRYSTALU

SDRUŽENÝ

PRAVDĚP. PŘECHODU

$$W_{k\to k'} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{if} \rho_i \langle i| \langle k|H_{int}|k'\rangle |f\rangle \langle f| \langle k'| H_{int}|k\rangle |i\rangle \, \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_i - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - E_f\right)$$

PRAVDĚP. POČÁT. STAVU KRYSTALU

PŘEPOČ PŘES ∀ POČ. A KONC. STAVY

POZOROVÁNÍ ① ELASTICKÝ PROCES E_i, E_f SE VYRUŠÍ

$$\delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}\right)$$

A OPER. PŘEJDE NA $\sum_i$ BERU JEN DIAG. ELEMENT $\langle k'|H_{int}|k\rangle$

$$\left(\langle i|\langle k|H_{int}|k'\rangle|i\rangle\right)^2$$

ZVYKNU PROVEDL

$$\rho_i \langle i| \left(\langle k|H_{int}|k'\rangle\right)_d \left(\langle k'|H_{int}|k'\rangle\right)_d |i\rangle$$

⇒ NAPÍŠU JAKO STOPU Z KVANTKANONICKÉHO OPER.

$$Tr\left(\hat{\rho} \langle i|\langle k|H_{int}|k'\rangle\langle k'|H_{int}|k'\rangle|i\rangle\right)$$

→ AŽ DO B.-W. FAKTORU

② OBTÍŽNÉ ŘEŠIT δ FUNKCI ⇒ $|f\rangle\langle f|$ JE NEŘEŠITELNÁ

⇒ PROTO ZAVEDEME ZJEDNODUŠENÍ

↓ DISKUTUJEME JEDNOTLIVÉ PŘÍSP. TĚCH δ FUNKCÍ

ELASTICKÝ (VIZ ①)

DÁLE UVEDEME OBDOBNÉ PRO PŘECHOD S 1 AKTIVNÍM FONONEM

JEDNOFONONOVÉ PŘÍSPĚVKY

- MUSÍME SE ZAMĚŘIT I NA ELEMENT S MIMODIAG. PRVKEM

PŘIPOMENUTÍ & PŘEDPOKLADY

MÓD $\omega_{\tau q}$ BYL VYBUZEN ⇒ $E_f = E_i + \hbar\omega_{\tau q}$

DOSTANEME TEDY δ FUNKCI

$$\delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \cancel{E_i} - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - \cancel{E_i} - \hbar\omega_{\tau q}\right)$$

$$W^{em,\tau q}_{k\to k'} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta\Big(\underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{n^\circ\ \text{poč.}} - \underbrace{\frac{\hbar^2 k'^2}{2m}}_{n^\circ\ \text{konc.}} - \underbrace{\hbar\omega_{\tau q}}_{\text{fonon}}\Big) \sum_{if} \rho_i \langle i| \underbrace{\left(\langle k|H_{int}|k'\rangle\right)}_{a_{\tau q}} |f\rangle \langle f| \underbrace{\left(\langle k'|H_{int}|k\rangle\right)}_{a^+_{\tau q}} |i\rangle$$

MUSÍME VYBRAT SPRÁVNÝ OPERÁTOR $(\langle k'|H_{int}|k|)$ ABY ∀ STAVY AŽ NA τq ZŮSTALY STEJNÉ

- BUDE DIAGONÁLNÍ VE ∀ KROMĚ 1
- V TOM 1 BY MĚL ZVÝŠIT +

$K = k' - k$ (PŘENESENÝ IMPULS)

$$\langle k'|H_{int}|k\rangle = \sum_n e^{-iKT_n} H^{(a)}_K e^{-iKu_n}$$ → DOPOČÍTÁVÁME

∀ POZICE VE KVANT. OBJEMU

FORMFAKTOR

ČÍSLA

u_n ... KVANT. MECH. OPERÁTOR

ROZVINULI JSME e^{-iKu_n}

$\omega_{\tau q}$ ... FREKV. MÓDU

M ... HMOTA JÁDRA, N ... POČET ATOMŮ V KVANT. OBJEMU

NEDIAG. ČLEN

ANIHILAČNÍ OPERÁTOR

$$e^{-iKu_n} = \prod_{\tau q}\left(\left(1 - i\sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\tau q}}}\left((K\cdot \bar{e}_{\tau q}) e^{-iT_n q} a^+_{\tau q} + (K\cdot e_{\tau q}) e^{iT_n q} a_{\tau q}\right) \underbrace{+ \underset{=-1}{i^2} \frac{\hbar}{4NM\omega_{\tau q}} |K e_{\tau q}|^2 \left(a^+_{\tau q} a_{\tau q} + a_{\tau q} a^+_{\tau q}\right)}_{\text{DIAG. ČLEN}}\right)\right)$$

U ELAST. → UVAŽ. JSME POUZE DIAG. ČLEN

CHCEME PRO URČ. MÓD ZVÝŠIT E V KRYST. → ZAPOJÍME NED. ČLEN $a^+_{\tau q}$

+ MUSÍME ZAPOJIT SDRUŽ. ČLEN → SNÍŽÍ E ZPÁTKY

$$\langle i| (\;)_{a_{\tau q}} |f\rangle \langle f| (k k'\; k)_{a^+_{\tau q}} |i\rangle$$

PRO OSTATNÍ MODY ($\neq \tau q$) OPĚT VYHODÍME δ (JAKO U ČÁSTI)
→ OPERÁT. DIAG. ČLENY

DIAG. ČÁSTI SE OPĚT POSČÍTAJÍ DO D-W FAKTORU e^{-W}

JEDINÝ NETRIVIÁLNÍ MOD τq

TO JE Z OFF DIAG. ČLENU ROZVOJE e^{-iku}

TOTOŽNÉ

$$w^{emit}_{k\to k'} = \frac{2\pi}{\hbar}\,\delta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\frac{\hbar^2k'^2}{2m}-\hbar\omega_{\tau q}\right)|H_k^{(a)}|^2\underbrace{\sum_m e^{ikT_m+iT_m q}\sum_n e^{-ikT_n-iT_n q}}_{\text{KVADRÁT STEJ. VÝRAZU } =\left|\sum_m e^{ikT_m+iT_m q}\right|^2}\dots$$

(PRO SPECIFIKOVANÝ HAM. MŮŽEME VYNÉST PŘED)

m, n ... PÍŠU ZA PRO KAŽDOU STRANU ⟨i| ⟨f| |i⟩ ZVLÁŠŤ

m: $\langle i|\langle k|H_m|k'\rangle|f\rangle$, n: $\langle f|\langle k'|H_n|k\rangle|i\rangle$

$$\langle k|H|k'\rangle = \sum_m e^{-ikT_m}H_k^{(a)}e^{-iku_m} \qquad \langle k'|H|k\rangle = \sum_n e^{-ikT_n}H_k^{(a)}e^{-iku_n}$$

m, n .. KOMP. SDRUŽ.

MUSÍME ROZEP. ČLENY

$$w^{emit}_{k\to k'} = \frac{2\pi}{\hbar}\,\delta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\frac{\hbar^2k'^2}{2m}-\hbar\omega_{\tau q}\right)|H_k^{(a)}|^2\left|\sum_m e^{ikT_m+iT_m q}\right|^2|(K\cdot\bar e_{\tau q})|^2\,\frac{\hbar^2}{2NM\omega_{\tau q}}\,\underbrace{e^{-2W}}_{\text{DIAG. PŘÍSP.}}\,\mathrm{Tr}(\hat\varrho\, a_{\tau q}a^+_{\tau q})$$

→ $n_{\tau q}+1$

STIMULOVANÁ

SPONTÁNNÍ EMISE

POUŽITY

$$e^{-iku} = \prod_{\tau q}\left(\left(1 - i\sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\tau q}}}\,(K\cdot\bar e_{\tau q})e^{iT_m q}a_{\tau q} + (K\cdot e_{\tau q})e^{iT_m q}a^+_{\tau q}\right) + \frac{\hbar}{4NM\omega_{\tau q}}|K e_{\tau q}|^2(a^+_{\tau q}a_{\tau q} + a_{\tau q}a^+_{\tau q})\right)$$

DIAG PŘÍSP. (VIZ MINULE)

Trace ($\hat\varrho\, a_{\tau q}a^+_{\tau q}$)

- DÍKY SEPARABILNÍMU HAMILTONIÁNU (JSOU NEZÁV.) MOHU STŘEDOVAT KAŽDÝ ZVLÁŠŤ
- PROTO HLEDÍ VEDLE SEBE TRACE NEDIAG. SLOŽKY A e^{2W} Z DIAG.

W ... VIZ MINULE ; Z DIAG.

$$\boxed{e^{-2W} = \exp\left[-\sum_{\varkappa}\sum_{k}\frac{\hbar|(K e_{\varkappa k})|^2}{2NM\omega_{\varkappa k}}\underbrace{\coth\left(\frac{\hbar\omega_{\varkappa k}}{2k_BT}\right)}_{2n_{\varkappa k}+1}\right]}$$

$\varkappa$ ↓ PŘES VĚTVE, k ↓ PŘES BZ

← SPRÁVNÝ VÝPOČET

↓ DEBYE MODEL

→ V DEBYEOVĚ MODELU $e^{-2W} = e^{-\frac{1}{3}\langle uu\rangle\cdot K^2}$

DO 1 SMĚRU ZE 3

VÝCHYLKA DO JEDNOHO SMĚRU

⇒ MOHU VYJÁDŘIT POMOCÍ STŘ. KVADR. VÝCHYLKY

→ POPIS: POKUD ∀ MODY (1,2,3) MAJÍ STEJNOU RYCHL. ZVUKU

PAK $\sum\sum|Ke| \to K^2$

A ZBYTEK $\frac{1}{3}\langle uu\rangle$

} SHRNUTÍ DEBYE

STIMUL. EMISE

SPONT.

$n_{\tau q}+1$

$$w^{emit}_{k\to k'} = \frac{2\pi}{\hbar}\,\delta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\frac{\hbar^2k'^2}{2m}-\hbar\omega_{\tau q}\right)|H_k^{(a)}|^2\left|\overbrace{\sum_m e^{ikT_m+iT_m q}}^{N^2\delta_{Kq}}\right|^2|(K\cdot e_{\tau q})|^2\,\frac{\hbar^2}{2NM\omega_{\tau q}}\,e^{-2W}\,\mathrm{Tr}(\hat\varrho\, a_{\tau q}a^+_{\tau q})$$

POKUD PROCES
- EMISE $\mathrm{Tr}(\hat\varrho\, a_{\tau q}a^+_{\tau q}) \Rightarrow n_{\tau q}+1$
- ABSORPCE $\mathrm{Tr}(\hat\varrho\, a^+_{\tau q}a_{\tau q}) \Rightarrow n_{\tau q}$ + OBRÁC. ZNAM.
  - → NEUTRON BY VYLÉTAL RYCHLEJŠÍ (ABS. NA NEUTRONU Z FONONU)

POSTŘEHY: ① ZÁK. ZACH. HYBNOSTI → DŮSL. PERIOD. PROSTŘ. V KRYSTALU

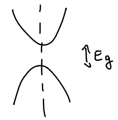
$k' - k + q = K_m$ ⇒ NEZACHOVÁVÁ SE HYBNOST, ALE V PERIOD. PROSTŘ. KRYSTALU SE ZACHOVÁVÁ AŽ NA BRAGGŮV VEKTOR

q ↓ HYBNOST FONONU

② $H_k^{(a)} \to H_{ef}^{(a)}$

KDE $H_{ef}^{(a)} = H_k^{(a)}e^{-W}$

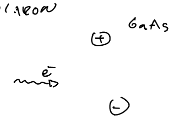
- OSLABENÍ INTERAKCE ; PROJEVÍ SE V ZÁVISLOSTI GAPU NT (E_g)
- GAP BUĎ ↗ ↘ S TEPLOTOU



- E_g JE ZÁVISLÝ NA MÍSTNÍM POTENCIÁLU
- POKUD TEN OSLABÍ → E_g SE ZMENŠÍ

⇒ D-W FAKTOREM SE GAPY ZMENŠUJÍ

POLARON

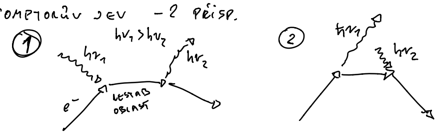


- POHYB e^- JE DOPROVÁZEN DEFORM. MŘÍŽKY
- e^- SE JEVÍ JAKO TĚŽŠÍ
- ROZŠIŘUJE GAPY

- S TEPLOTOU SE DÁLE ROZŠIŘUJE (DÍKY INTEP. KMITŮ)

⇒ KOMPETICE POLARON JEV vs DW FAKTOR
↳ NĚKTERÉ MAT. TAK A JINÉ OPAK → NENÍ JASNÉ PRAV.

COMPTONŮV JEV – 2 PŘÍSP.

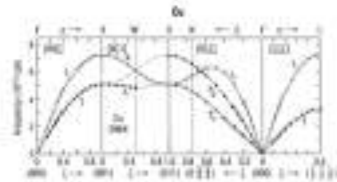


- MUSÍ BÝT SPL. ZÁK ZACH E A HYBN
- POHLTÍ → VYZV.

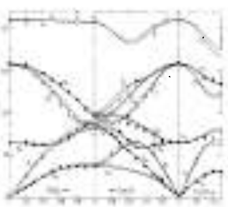
VYZV. → POHLTÍ

- MUSÍM ZOHL. OBA → ANALOGIE S TÍM GAPEM VÝŠE

→ DW FAKTOR SE KOMPENZUJE S POLARON EFEKTAMA

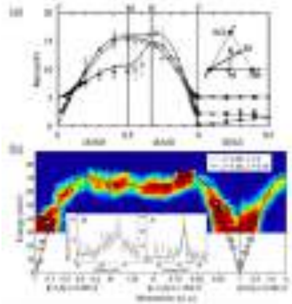


- FONONOVÁ DISP. MĚŘ n^0 DIFR

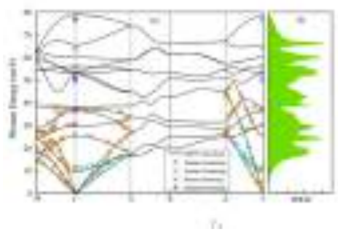


PbF_2

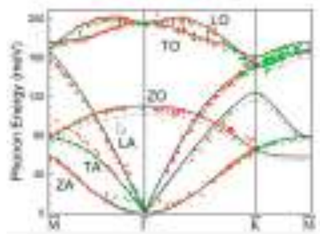
- 9 VĚTVÍ
- 7 MALÉ – TRANSV.
- BÍLÉ LONGIT.



- DISP. SPINOVÝCH FONONŮ



POROVNÁNÍ METOD
- RAMAN, FTIR
  - SVĚTLO NESE MALOU HYBNOST
    ↓
    MĚŘ. JEN V OKOLÍ POČ
- FTIR VÁŽE DIPOLY
- RAMAN – BEZ DIP



- ELEKTR. DIFR HEEDS
- GRAFIT

PŘÍPRAVA NEUTRONŮ

- Z JAD. ZDROJE JSOU PŘÍLIŠ RYCHLÉ
- POTŘEB POKOJ TEPL. $25\,meV = 25 \cdot 10^{-3} \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}$
  $= 4 \cdot 10^{-21}\,J$ (E_{POKOJ})

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 4 \cdot 10^{-21} \Rightarrow$$

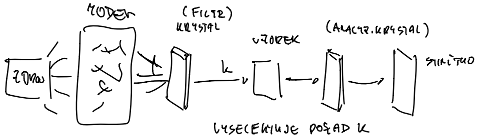
$$k^2 = 8 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-27} \cdot 10^{-21} \cdot 10^{68} \doteq 4 \cdot 10^{20}$$

$$\boxed{k \sim 2 \cdot 10^{10}}$$

- POTŘEBUJI TEDY PŘÍBL. k PŘI POK. TEPL.

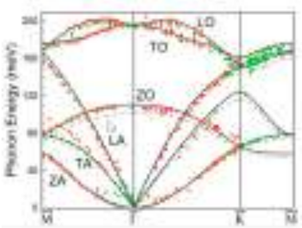
↓

MODERÁTOR (VODA)



E(LAST). ROZPTYL ; $k' - k = K_m$

$k^2 = k'^2$



e^- s hybn. k

$k \to K_m$

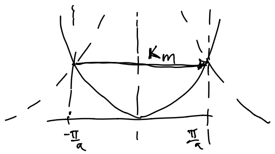
PERIOD POTENCIÁL

- ALE POTENCIÁL VIBRUJE
- POTOM BY ALE NEŠL. BLOCH

?

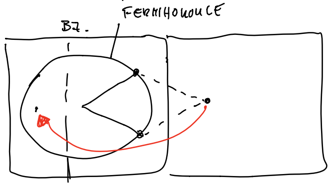
VYSTŘEDUJEME POSTŘEDNÍ POTENCIÁL

$H_k^{(a)} e^{-W}$ ←



UMKLAPP PROCESY: $k' - k + q = K_m$ ZÁK. ZACH. HYBN ; AŽ NA BRAGG. VEKTOR

- $K_m \neq 0$

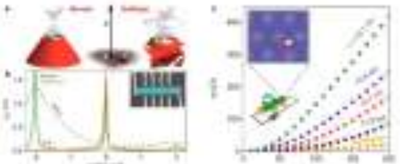


① SRÁŽKA 2 e^- → MĚNÍ SE (proud)
② VÝSLED. DO VEDL. BZ.

NERTEN. BRAGGŮV VEKTOR

CELK. HYBN. PŘESUNUŤ O BRAGGŮV VEKTOR → VYTVOŘ. ODPOR

- UMKLAPP PROCES → ELEKTR. SRÁŽKA → SNÍŽÍ PROUD



GRAPHENE

- PŘI DĚJÍCH V MŘÍŽCE VŽDY MŮŽE VSTOUPIT BRAGGŮV VEKTOR

PŘEDNÁŠKA 7

OPÁČKO: DIFRAKCE

- ČÁSTICE PROLÉT. KRYST. DETEKUJE POTENC. REDUKOVANÝ DW FAKTOREM
= POTENCIÁL ROZMAZANÝ, ATOMY OSCILUJÍ

MÖSSBAUERŮV JEV ≈ JADERNÁ LUMINISCENCE

- VYZÁŘÍ γ KVANTA BEZ ZPĚT. RÁZU

- DĚLALO SE NA Fe

$^{57}Co + e^- \xrightarrow{e^- + p^+ \to n^0} {}^{57}Fe^{**} + \text{vyz. neutrino}$ ↗ $5/2$

↑ NESTAB. IZOTOP ; $7/2$ SPIN ; INVERZNÍ β ROZPAD (ZACHYTÍ e^-)

Fe^{**} … 136 keV NAD ZÁKL. STAVEM → VYZÁŘÍ γ_1 + Fe^* ($\frac{3}{2}$ SPIN ; 13.4 keV NAD ZÁKL)

Fe^{**} (136 keV) → γ_1 + Fe^* (13.4 keV) $\frac{3}{2}$ SPIN

Fe^* (13.4 keV) → γ_2 + Fe^* (ZÁKL. STAV) $\frac{1}{2}$ SPIN

14.4 keV: $E = 14.4 \cdot 10^3 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19} = 2.3 \cdot 10^{-15}$ J
↑ eV

$\omega = 2.3 \cdot 10^{+19}$ /s ; ŠÍŘKA ČÁRY 10^7

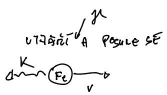
	SPI	+E (NAD ZÁKL)		
^{57}Co	(7/2)		$+ e^- \to {}^{57}Fe^{**}$	
$^{57}Fe^{**}$	(5/2)	136 keV	$\to {}^{57}F^*$	$+ \gamma_1$
$^{57}Fe^*$	(3/2)	13.4 keV	$\to {}^{57}F$	$+ \gamma_2$

= ABYCHOM SE TREFILI, TAK MUSÍME MÍT
ω S PŘES. NA 12 DES. MÍST
⇒ 4 PŘESNOST

↓ DETEKUJEME ODEZVU

$\omega = 2{,}3 \cdot 10^{19}\ s^{-1}$ $T = 10^{-9}$ s (LIFETIME POSL. VYZÁŘENÍ)

1. PŘEDSTAVA: Fe JAKO PLYNNÁ FÁZE



$Mv + \hbar K = 0$
(HYBNOST; ↑ RYCHLOST, HMOTA JÁDRA)

$v = \frac{\hbar K}{M} = \frac{\hbar \omega}{Mc}$

E_R: ENERGIE KTEROU SI ATOM ODNESE BĚHEM ODRAZU (ZPĚTNÝ RÁZ)

$E_r = \frac{1}{2} M v^2 = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \omega^2}{M c^2} = \frac{(2{,}3 \cdot 10^{-15})^2}{2 \cdot 57 \cdot 1{,}66 \cdot 10^{-27} \cdot 9 \cdot 10^{16}} = 7{,}5 \cdot 10^{-23}$ J $= 0.47$ meV

↓ $\cdot 10^{-34}$

↓ JE MALÁ, ALE LZE SROVNÁVAT SE ŠÍŘKOU ČÁRY VE $\boxed{\Delta\omega = 7{,}5 \cdot 10^{11}\ s^{-1}}$

↓ ZPĚTNÝ RÁZ

ŠÍŘKA $10^7 = \omega$

PODÉLNÝ DOPPL. JEV $\omega' = \omega \cdot (1 - \frac{v}{c})$

$\Delta\omega^2 = \omega^2 \frac{1}{c^2} \langle v^2 \rangle$ — TEPL. STŘEDOVÁNÍ

VÍME $\langle \frac{1}{2} M v^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$ EKVIPAR. THEORÉM

$= \omega^2 k_B T \cdot \frac{1}{Mc^2}$

POKUD BYCHOM CHTĚLI ÚZKOU ČÁRU → MUSELI BYCHOM DO ↓T (0.5 meV ≈ 5K) $\longrightarrow$ $\boxed{\Delta\omega^2 = \frac{2 E_R k_B T}{\hbar^2}}$

→ OČIŠNÁ BY I TAK BYLA $7{,}5 \cdot 10^{11}\ s^{-1}$ → ZTRATILI BYCHOM 4 ŘÁDY

– V PLYNU MŮŽEME, ALE PŘI ↓T A ZA CENU ZTRÁTY POZLIŠENÍ

MÖSBAUER: – PŘI VYZAŘ. γ V PEV. L. → ∃ NENUL. PRAVDĚP., ŽE PROCES BUDE ELASTICKÝ (BEZ ZPĚT. RÁZU)

⇒ VYZÁŘÍ SE TEDY γ_2 V PŮV. VELIKOSTI (NEODEČTU V)

A TATO E SE ZACHYTÍ NA JINÉM ATOMU (OPĚT BEZ ODSKOKU)

⇒ PROCES ELAST. ZÁCHYTU A VYZAŘENÍ ⇒ MÖSBAUERŮV JEV MÖJ

CO MĚŘÍME?

CITLIVÝ NA RYCHLOST ZDROJE $\omega' = \omega(1 - \frac{v}{c})$

$\Delta\omega = \omega \cdot \frac{v}{c} < \frac{1}{\tau}$ (ABY BYLO SOUMĚŘ. S VELIKOSTÍ ČÁRY)

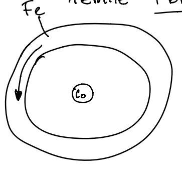
$\Rightarrow v < c/(\omega\tau)$ $\omega\tau$ ... PARAMETR PŘESN. MĚŘ. S MÖJ

$\omega = 2{,}3 \cdot 10^{19}$

$\tau = 10^{-7}\ s$ $\omega\tau = 2{,}3 \cdot 10^{12}$

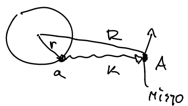
$\Rightarrow v < 1{,}3 \cdot 10^{-4}\ m/s \approx 0{,}5\ m/h$

MĚŘÍME PŘÍČNÝ DOPPLERŮV JEV



RADIOAKT. Co VE STŘEDU Co → Fe

DETEKTOR



MÍSTO KDE Z. ZÁCHYTU

PODÉLNÝ $\omega' = \omega(1 - \frac{v}{c})$

$\frac{\vec{K}}{|K|} = \frac{R - r}{|R - r|}$

BOD a: $v = \Omega \times r$ (VEKTOR ROTACE)

BOD A: $V = \Omega \times R$

– SLEDUJI: POLOHU VE CHVÍLI VYZÁŘENÍ (a) A POLOHU V OKAMŽIKU ZÁCHYTU (A)

$\Delta\omega = \frac{\Omega \times r}{c} \cdot \frac{K}{|K|} \cdot \omega$ $\Delta\omega = \frac{\Omega \times R}{c} \cdot \frac{K}{|K|}\omega$

$\Omega \times R \cdot R = 0$

$\Delta\omega = \frac{\Omega \times r \cdot R}{c}$ $\Delta\omega = \frac{\Omega \times R \cdot r}{c}$

⇒ PODÉL. DOP. JEV NEPŘISPÍVÁ — OBA FREKV. POSUVY JSOU IDENTICKÉ

↓ PŘI MEZNÍ RYCHLOSTI OTÁČENÍ PAK BUDE Fe KOTOUČ TRANSPARENTNÍ

↓ DÁNO PŘÍČNÝM DOPL. JEVEM

⊕ MĚŘÍM RELATIVIST. CHOVÁNÍ NA MAKROSKOP. OBJEKTU (KRUH ~ 10 cm)

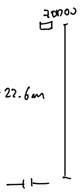
INTERAKCE ELMAG ZÁŘENÍ S GRAVITACÍ

– V MAXW. ROVNICÍCH GRAV. POLE NENÍ

– ALE ZAKŘIV. PROSTORU VEDE K TOMU ŽE ω SE MĚNÍ

$\omega = 2{,}3 \cdot 10^{19}$ $\tau = 10^{-7}\ s$

↓ A TEDY E $E = 2{,}2 \cdot 10^{-15}\ J$ ⇒ HMOTA KVANTA $m = \frac{E}{c^2} =$



↓ PO ABS. PŘICH. γ ZAS OPĚT VYZÁŘÍ A TO DETEKUJEME

$\Delta E = mhg$ $\Rightarrow \Delta\omega = \frac{\Delta E}{\hbar}$

$\Delta\omega = \frac{gh\frac{E}{c^2}}{\hbar} = \frac{gh\frac{\hbar\omega}{c^2}}{\hbar} = gh\omega \cdot \frac{1}{c^2} = \omega\left(\frac{gh}{c^2}\right) = 5{,}66 \cdot 10^{4}\ s^{-1}$

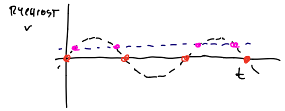
$10 \cdot 22 \cdot 9 \cdot 10^{16}$ $2{,}3 \cdot 10^{19}$

FAKTOR $\frac{10 \cdot 22}{9 \cdot 10^{16}}$ ≈

$\Delta\omega = 5{,}66 \cdot 10^{4}\ s^{-1}$

VS

ŠÍŘKA ČÁRY $\tau = 10^{-7}\ s$; $\frac{1}{\tau}$ = ŠÍŘKA ČÁRY $\frac{1}{\tau} = 10^{7}$



– ZDROJ SE HÝBE

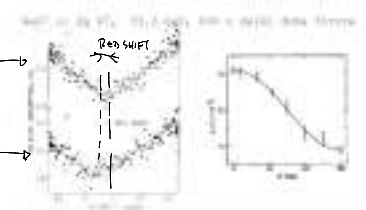
– POKUD BY NEBYL POSUV → TAK V • BUDE NEJSIL. ZÁŘENÍ

• POSUV NAHORU ZDROJE

MĚŘENÍ NA ZINKU $^{67}Ga \rightarrow {}^{67}Zn$

1 m OD SEBE

DET A ZDROJ TĚSNĚ U SEBE → NENÍ POSUV



– MĚŘIL ÚHEL DET-ZDROJ PROTI GRAVIT. ZDROJI

VÝPOČET MÖS

1 FOTON VE STAVU K; VYZÁŘ. ATOM; $c_j a^+_k e^{iRk}$; KRYSTAL V POČ. STAVU; NA POČ. VAKUUM

$$\langle k|\langle 1|\langle Fe|\,H_{int}\,|Fe^*\rangle|i\rangle|vac\rangle \Longrightarrow |\langle \quad \rangle|^2 \frac{2\pi}{\hbar}\delta(\hbar kc - E_0) = w$$

E SVĚTLA; ENERGIE ATOMU; PRAVDĚP. MÖS JEVU

ELAST. PROCES ⇒ JSME ZPĚT V PŮV. STAVU

JÁDRO VE VYBUZ. STAVU

INTER. HAMILT. ≈ * PROUD UVNITŘ JÁDRA

$H_{int} = \bar{A}\cdot j$ – PROUD

VEKTOR. POTENC.

PRO NEELAST. PROCES

EXC. STAV

$$|\langle k|\langle f|\ \cdots\ \rangle|^2 \frac{2\pi}{\hbar}\delta(\hbar kc - E_0 - \hbar\omega$$

(E UVOL. JÁDREM + E$_f$(KONC. E KRYST.))

JÁDRO V BODĚ R_j

$R_j = R_j^0 + u_j$

VÝCH.; ↑ ROVNOVÁŽ. POL

$\bar{A} = c\,a_k^+\,e^{iR\cdot k}$

KREAČ. OPER.

TEPEL. VÝCHYLKA

$$\langle Fe|H_{int}|Fe^*\rangle = \text{KONST} = a\,e^{ikR_0}e^{iku}$$

$\langle k|a^+|vac\rangle = 1$

– POČ. STAVY PŮSOBÍ POUZE NA VÝCHYLKU

$$\sum_i \varrho_i \left|\langle i|\,a\,\underbrace{e^{ikR_0}}\,e^{iku}\,|i\rangle\right|^2 \frac{2\pi}{\hbar}\delta(\hbar kc - E_0) = w$$

FÁZ. FAKTOR $e\cdot e^* = 1$

DEB.–W. FAKTOR e^{-2w} ✓

$$w = a^2\,\delta(\hbar kc - E_0)\frac{2\pi}{\hbar}\overbrace{\sum_i \varrho_i|\langle i|e^{iku}|i\rangle|^2}$$

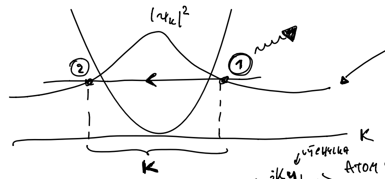
⇒ DOSTANU $w_{elast} = a^2 e^{-2w}\frac{2\pi}{\hbar}\underbrace{(\hbar kc - E_0)}_{\text{ZAK. ZACH. E}}$ –

PRO ↑ K: e^{-2w} JE MALÝ → ŠPATNĚ MĚŘITELNÉ

- POKUD V TOM ÚVAZU NEBUDU UVAŽ. ELAST. ⟨ $\langle i| \to \langle f|$ DO f SE DOST. DALŠÍ ČLENY

⇒ DOSTANEME MÖS JEV PŘI KTERÝCH SE VYZÁŘÍ FONONY ODDLÁŠÍ E

– VYSTŘEDOVÁNÍ FONONŮ ⇒ DOSTANU „RECOIL ENERGII"



KVADRATICK. FCE $|\psi|^2$

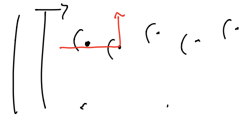
① ATOM LETÍ SMĚREM KE MNĚ + RYCHLOSTÍ
② MŮŽE VYZÁŘIT A SKOČIT Z ① → ②
③ ROZDÍL K

- PŘESKAKUJE ZE STEJN. STAVU NA STEJNÝ STAV
- VYDÁ K ALE JE PODRŽEN POTENC.
- ZŮSTANE UVNITŘ. STEJNÉ VLN. FCE
- POKUD BY PŘESKOČIL SE ZPĚT. RÁZEM → MUSEL BY ZMĚNIT HLADINU

TO JE ON → $\langle\psi|e^{iku}|\psi\rangle$ (VÝCHYLKA; VYZÁŘ. KAČKA) ATOM ZŮSTANE VE STEJNÉM STAVU

D–W FAKTOR:

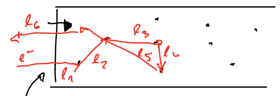
- POKUD PŘEDÁVÁME HYBNOST POZADÍ TAK MUSÍ BÝT SLUČITELNÉ S VIBRAČ. SPEKTREM
- → VZNIKAJÍ NA MIKROSKOP ÚROVNI NA INTERAKCI S KAŽDÝM ATOMEM
- → LZE CHÁPAT JAKO DEFÁZOVÁNÍ PŘI ODRAZU VLNY Z MNOHA NAHODILÝCH BODŮ



- VYCHÝLENÉ ATOMY OSCILUJÍ * INTERF. → DEFÁZUJÍ
- DW ŘÍKÁ, S JAKOU PRAVDĚP. ČÁSTICE DEPONUJE (PŘEDÁ IMPULS) HYBNOST NA ATOMY; RESP. S JAKOU PRAV. PROLETÍ ANIŽ BY PŘEDAL IMPULS

MÖS JEV

- UKAZUJE I CHÁPÁNÍ ROZPT. NA PŘÍMĚSÍCH
- REŽIM SLABÉ LOKALIZACE



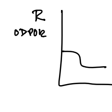
• PŘÍMĚS V PÁSKU

- FÁZE FCE, CO PROBĚHNE $\ell_1 \to \ell_6$ NEBO OPAČ. $\ell_6 \to \ell_1$ JE STEJNÁ

$$|\psi_1 + \psi_2|^2 = 4|\psi_1|^2 \quad \text{KOHER.}$$

$$\to |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 = 2|\psi_1|^2$$

- POKUD TEDY SRÁŽKY PŘÍSNĚ ELAST. ⇒ 2× ↑ PRAVDĚP. ROZPTYLU O 180°
- PŘÍTOMNOST NEEL. → POUZE $2|\psi_1|^2$
  - → OHŘEVEM ZAHUBÍME ELAST. CHOVÁNÍ $4|\psi_1|^2 \to 2|\psi_1|^2$
- LZE PORUŠIT EXT. MAG. POLEM → OPĚT ZAHUBÍME
  - VEKTOR B MÁ VLIV NA POHYB ℓ_5 ℓ_2 JINÝ NA KAŽDÝ
  - ⇒ SRÁŽKY JSOU STRIKTNĚ ELASTICKÉ



- NEGATIVNÍ MAG. REZISTENCE

→ POKUD BY BYLY JEN PŘIBLIŽNĚ TAK BY VŮBEC NEINTER. A ROVNOU BY BYLO $2|\psi_i|^2$

8. PŘEDNÁŠKA

RELATIVISTICKÉ OPRAVY SCHR. ROVNICE

- SCHR. ROVNICE → POPIS POHYBU e^- (OBEC. NABITÉ ČÁSTICE) V ELEKTROSTAT. POTENCIÁLU
- I V PEV. L., KDE JSOU RYCHL. $\bar{e}$ ~~RR~~ ZLATECNÉ MENŠÍ SE PROJEVÍ REL. KOREK.

DIRACOVA ROVNICE $\underbrace{(\varepsilon}_{\text{ENERGIE}} - \overbrace{V}^{\text{POTENC.}}) \underbrace{\Psi}_{\text{DIRAC. VLN. FCE}} = c\alpha_i$

8. PŘEDNÁŠKA

RELATIVISTICKÉ OPRAVY SCHR. ROVNICE

- SCHR. ROVNICE → POPIS POHYBU e^- (OBEC. NABITÉ ČÁSTICE) V ELEKTROSTAT. POTENCIÁLU
- I V PEV. L., KDE JSOU RYCHL. e^- ZLATECKÉ MENŠÍ SE PROJEVÍ REL. KOREK.

DIRACOVA ROVNICE

$$\underbrace{\varepsilon}_{\text{ENERGIE}} - \overset{\text{POTENC.}}{V})\underbrace{\psi}_{\text{DIRAC. VLN. FCE}} = \sum_{i=1}^{3 \text{ (3 SMĚRY)}} c\,\alpha_i (p_i - eA_i)\psi + m_0 c^2 \beta \psi$$

V … POTENCIÁL ; A … VEKT. POTENCIÁL , $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$

DIRACŮV VEKTOR ψ_1, ψ_2 … ELEKTR. ČÁST , ψ_3, ψ_4 … POZITRONOVÁ ; MODRÉ MALÝ PODÍL

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \qquad \varphi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \qquad \chi = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

MATICE $\hat{\alpha}_{4\times4}$

$$\hat{\alpha}_i = \begin{pmatrix} & \sigma_{1(2\times2)} \\ \sigma_{1(2\times2)} & \end{pmatrix} \qquad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \} \; E \text{ s } (+) \\ \} \; \text{DÁVÁ ENERG. s } (-) \end{matrix}$$

MATICE $\hat{\beta}_{4\times4}$

- POZN. JE α BEZ SUMOVÁNÍ ; $\sigma_{1(2\times2)}$ JE POTOM SKAL. SOUČIN DÍLČÍCH PŘÍSP.

$\boxed{\text{POZN:}}$ $(\sigma_i)^2 = 1$ $\quad \sigma_1\sigma_2\sigma_3 = i$ $\quad \sigma_i\sigma_j \big|_{i\neq j} = i\sum_k \varepsilon_{ijk}\sigma_k$

$$(\underline{\varepsilon - V} - m_0c^2)\varphi = c\sum_i \sigma_i (p_i - eA_i)\chi \qquad \leftarrow \text{„VELKÁ FCE“}$$
$$(\underline{\varepsilon - V} + m_0c^2)\chi = c\sum_i \sigma_i (p_i - eA_i)\varphi \qquad \leftarrow \text{„MALÁ FCE“}$$

PŘEDPOKLADY :

1, ENERG. e^- JSOU BLÍZKÉ KLIDOVÉ HMOTNOSTI
0.5 eV 5 MeV

$$\varepsilon = m_0c^2 + E \;;\quad |E| \ll m_0c^2$$

2, POTENC. KRYSTALU JE SLABÝ $\quad |V| \ll m_0c^2$
– PROBLÉM U BLÍZK. JADER , TAM JE ↑

⇒ ε a V JSOU PODST. MENŠÍ JAK m_0c^2

$$(E - V)\varphi = c\sum_i \sigma_i (p_i - eA_i)\chi$$
$$\underbrace{(E - V + 2m_0c^2)}_{\forall \text{ čísla} \Rightarrow \text{ mohu dělit}}\chi = c\sum_j \sigma_j (p_j - eA_j)\varphi \quad \Rightarrow \chi = \frac{c\sigma(p - eA)}{(E - V + 2m_0c^2)}\varphi \approx \frac{1}{2mc}\sigma(p - eA)\varphi$$

→ BUDU PRO PŘEHL. PSÁT BEZ Σ

(#) $\quad (E - V)\varphi = \sum_i c\sigma_i(p - eA)\cdot \frac{c\sum_j \sigma_j (p_j - eA)}{(E - V + 2m_0c^2)}\varphi$ $\quad$ ← ZJEDNOD.

PAULIHO MATICE : (P1) $(\sigma_i^2) = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$ $\quad$ (P2) $\sigma_1\sigma_2\sigma_3 = i\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$

PŘ. | # $\;(\sigma_1 \cdot \sigma_1)\sigma_2\sigma_3 = i\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}\sigma_1 \Rightarrow \sigma_2\sigma_3 = i\sigma_1$
$\sigma_1^2 = 1$

$\;\sigma_2\sigma_3 = i\sigma_1 \qquad \sigma_2\sigma_3\sigma_1 = i\sigma_1^2 \qquad \Rightarrow \forall$ CYKL. PERMUTACE DAJÍ STEJ. VZTAHY

$\;\sigma_1\sigma_2\sigma_3 = i\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix} \;/\cdot\sigma_3\sigma_2\sigma_1 \Rightarrow 1 = i\sigma_3\sigma_2\sigma_1 \;/\cdot i$

(P3) $\boxed{\sigma_i\sigma_j\big|_{i\neq j} = \delta_{ij} + i\sum_k \varepsilon_{ijk}\sigma_k}$

↳ POKUD $i=j \Rightarrow 1$ ALE $\Sigma = 0$;

(#) $\quad (E - V)\varphi = \sum_i c\sigma_i(p - eA)\cdot \frac{c\sum_j \sigma_j (p - eA)}{(E - V + 2m_0c^2)}\varphi \quad$ ⇒ BUDEME ROZVÍJET

0. ŘÁD – RYCHL. SVĚTLA NEFIGURUJE

$$(E - V)\varphi = \frac{1}{2m_0}\sum_i \sigma_i (p_i - eA_i)\cdot\sum_j \sigma_j (p_j - eA_j)\,\varphi \qquad \to \text{IDENTICKÁ PAUL. ROVNICI}$$

$\boxed{i=j}$ $\delta_{ij} = 1$: $\quad \frac{1}{2m_0}(p - eA)^2\varphi + \frac{1}{2m_0}\sum_k \varepsilon_{kij}\sigma_k (p_i - \underbrace{eA_i)(p_j}_{} - eA_j)\varphi = (E - V)\varphi$

$\delta_{ij} \; + \; i\sum_k \varepsilon_{ijk}\sigma_k$

– VEKTOR. SOUČIN DVOU STEJNÝCH OPERÁTORŮ
– p a A NEKOMUTUJÍ

$$\sum_{ij}\varepsilon_{kij}\underbrace{(-i\hbar\overset{p_i}{\nabla_i} - eA_i)(-i\hbar\overset{p_j}{\nabla_j} - eA_j)}_{\text{PŮS. i NA } A \Rightarrow \text{ MUSÍME TEDY } \nabla \text{ ROZEPSAT}} = \sum_{ij}\varepsilon_{kij}\Big[\cancel{(-i\hbar)^2\nabla_i\nabla_j} + \cancel{e^2A_iA_j} + ie\hbar(\nabla_iA_j) + \underbrace{\cancel{ie\hbar(A_j\nabla_i)} + \cancel{ie\hbar A_i\nabla_j}}_{\text{VYRUŠÍ SE}}\Big]$$

ANTI SYM ČÁST $\quad$ SYM $\quad$ SYM $\quad$ (VYSČÍTÁNÍM VYPADNOU)

$\varepsilon_{312} = 1$
$\varepsilon_{321} = -1$

ODPOVÍDÁ ROTACI

$$= ie\hbar[\nabla\times A]_k$$

$$\Rightarrow (E - V)\varphi = \frac{(p - eA)^2}{2m_0}\varphi + \frac{1}{2m_0}i\sum_k \sigma_k \overset{B_k}{[\nabla\times A]_k}\, ie\hbar\,\varphi$$

$$\boxed{(E - V)\varphi = \frac{(p - eA)^2}{2m_0}\varphi - \frac{e\hbar}{2m_0}(\sigma\cdot B)\varphi} \qquad \text{0. ŘÁD}$$

OPĚT PŮVODNÍ

(#) $\quad (E - V)\varphi = \sum_i c\sigma_i(p - eA)\cdot \frac{c\sum_j \sigma_j (p - eA)}{(E - V + 2m_0c^2)}\varphi \quad$ ⇒ BUDEME ROZVÍJET

1. ŘÁD ZJEDNODUŠENÍ $A=0$ (BEZ MAGN. POLE)

$$(E-V)\varphi = \frac{1}{2m_0}\sum_{ij}\sigma_i p_i\left(1+\frac{V-E}{2m_0c^2}\right)\sigma_j p_j\varphi$$

$$(E-V)\varphi = \frac{p^2}{2m_0}\varphi + \frac{1}{4m_0^2c^2}\underbrace{\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j p_i (V-E) p_j}_{\text{ŘEŠENÍ TOHOTO ČLENU BUDEME HLEDAT}}\varphi$$

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\sum_k \varepsilon_{ijk}\sigma_k$$

$$\sum_i \underbrace{p_i(V-E)p_i}_{\text{PROKOMUTOVALI JSME}}\varphi = \sum_i -i\hbar\nabla_i(V-E)p_i = -i\hbar\sum_i(\nabla V_i)p_i + (V-E)\overbrace{pp}^{p^2}$$

$$\sum_i \underbrace{p_i(V-E)p_i}_{\text{PROKOMUTUJI OBRÁCENĚ}} = \sum_i p_i(V-E)(-i\hbar\nabla_i) = p^2(V-E) + i\hbar\sum_i p_i(\nabla_i V)$$

MEZISOUHRN:

$$(E-V)\varphi = \frac{p^2}{2m_0}\varphi + \frac{1}{4m_0^2c^2}\frac{1}{2}p^2(V-E)\varphi + \frac{1}{8m_0^2c^2}(V-E)p^2\varphi - \sum_{ij}\frac{1}{8m_0^2c^2}\left[(-i\hbar)(\nabla_i V)p_j + (i\hbar)p_i\nabla_j V\right]\sigma_i\sigma_j$$

OPĚT K ŘEŠ. 2 KOMUTÁTORY

BUDE 2. DER.

$$\sum_{ij}\left((\nabla_i V)p_j - p_i(\nabla_j V)\right)\sigma_i\sigma_j = \sum_{ij}\left((\nabla_i V)(-i\hbar\nabla_j) - (-i\hbar\nabla_i)(\nabla_j V)\right)\left(\delta_{ij} + i\sum_k\varepsilon_{ijk}\sigma_k\right)$$

PUS. 1. ČLEN SE VYNÁSOBÍ

1. ČLEN (δ_{ij})

$$= \hbar i(\nabla^2 V) + \hbar\sum_{kij}\varepsilon_{kij}\sigma_k\left((\nabla_i V)\nabla_j - \nabla_i(\nabla_j V)\right)$$

$(\nabla_j V)\nabla_i$

ANTISYM.

SUM. FCE ij (2. DER.) $\Rightarrow$ VYPADNE $\to \nabla_j$ PŘESUNU ZA

$\Rightarrow * \ ((\nabla_i V)\nabla_j - (\nabla_j V)\nabla_i)$ – STEJNÝ AŽ NA KOEF.

SÍLA DO SMĚRU j KRÁT GRAD DO i

$$\Rightarrow \text{ROZNÁS.} \sum_{kij}\sigma_k\left(\varepsilon_{kij}(\nabla_i V)\nabla_j - \varepsilon_{kij}(\nabla_j V)\nabla_i\right)$$

$\left.\begin{array}{l}\varepsilon_{kij}(\nabla_i V)\nabla_j \\ -\varepsilon_{ijk}(\nabla_j V)\nabla_i\end{array}\right\}$ JSOU SYMETR.

$$\sum_{ij}\left((\nabla_i V)p_i - p_i(\nabla_j V)\right)\sigma_i\sigma_j = \hbar i(\nabla^2 V) + \hbar\sum_{kij}\varepsilon_{kij}\sigma_k\, 2\underbrace{(\nabla_i V)}_{\text{ELEKTR. SÍLA}}\nabla_j$$

$\to$ ZPĚTNĚ VŠE DOSADÍM

KINET. E

KONTAKTNÍ INTERAKCE

$$\boxed{(E-V-\frac{p^2}{2m_0})\varphi = \frac{p^2}{8m_0^2c^2}(V-E)\varphi + (V-E)\frac{p^2}{8m_0^2c^2}\varphi - \frac{i\hbar^2}{8m_0^2c^2}(\nabla^2 V)\varphi + \frac{i\hbar^2}{4m_0^2c^2}\sum\sigma_k\varepsilon_{kij}(\nabla_i V)\nabla_j\varphi}$$

MUSÍME SE JEŠTĚ ZBAVIT

\# DIR. FCE $\psi = \begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$ A JE NORMOVANÁ

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1$$
$$\langle\varphi|\varphi\rangle + \langle\chi|\chi\rangle = 1$$

\#NA POČ. $\chi = \frac{1}{\underbrace{E-V}+2m_0c^2}c\,\sigma p\,\varphi$ (VIZ ZAČÁTEK)

PŘI 1. PŘIBL. VYPADNE; JE ZANEDBAT.; MIMODIAG. ČLEN O ŘÁD JINDE

$$= \frac{\sigma p}{2m_0c}\varphi \quad ; \quad \langle\varphi|\varphi\rangle + \langle\varphi|\frac{\sigma p}{2m_0c}\frac{\sigma p}{2m_0c}|\varphi\rangle = 1$$

NORMOVANÁ DIR. FCE

$$\boxed{\langle\varphi|1 + \frac{(\sigma p)^2}{4m_0^2c^2}|\varphi\rangle = 1}$$

$$(1+x)^2\Big|_{x\text{ MALÉ}} \doteq 1 + 2x + \underset{\text{ZMĚSÍ ŘÁD}}{x^2}$$

$$\langle\varphi|1 + \frac{p^2}{4m_0^2c^2}|\varphi\rangle = 0$$

$$\langle\varphi|(1+\frac{p^2}{8m_0^2c^2})\underbrace{(1+\frac{p^2}{8m_0^2c^2})|\varphi\rangle}_{\text{SCHRÖDING. FCE NORM. NA 1}} = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi = \left(1+\frac{p^2}{8m_0^2c^2}\right)\varphi}$$

$$(E-V-\frac{p^2}{2m_0})\varphi = \frac{p^2}{8m_0^2c^2}(V-E)\varphi + (V-E)\frac{p^2}{8m_0^2c^2}\varphi - \frac{i\hbar^2}{8m_0^2c^2}(\nabla^2 V)\varphi + \underbrace{\frac{i\hbar^2}{4m_0^2c^2}\sum\sigma_k\varepsilon_{kij}(\nabla_i V)\nabla_j}_{\text{ZJEDNOD. A VRAŤ ZAPS.}}\varphi$$

SOUČIN $\frac{1}{c^4}$ $\to$ MALÉ, MŮŽEME VYPUSTIT

$$\left[\left(1+\frac{p^2}{8m_0^2c^2}\right)\left(E-V-\frac{p^2}{2m_0}\right)\left(1+\frac{p^2}{8m_0^2c^2}\right) + \underbrace{\frac{p^4}{8m_0^2c^2}}_{\text{VYRUŠENÍ SOUČINU}} + \frac{\hbar^2}{8m_0^2c^2}(\nabla^2 V) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\sigma[\nabla V\times p]\right]\varphi = 0$$

NEZANEDB. $\to$ MUSÍME ZRUŠIT

$$\underbrace{\left(1+\frac{p^2}{8m_0^2c^2}\right)}_{\text{VYDĚLÍME}}\left(E-V-\frac{p^2}{2m_0}-\frac{p^4}{8m_0^3c^2}+\frac{\hbar^2}{8m_0^2c^2}(\nabla^2 V)+\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\sigma\cdot[\nabla V\times p]\right)\underbrace{\left(1+\frac{p^2}{8m_0^2c^2}\right)\varphi}_{\text{PŘEPÍŠU NA }\psi} = 0$$

$$\boxed{\Big(\underset{\text{STAND. POTENCIÁL}}{E-V}\underbrace{-\frac{p^2}{2m_0}-\frac{p^4}{8m_0^3c^2}}_{\text{KIN. E}}+\frac{\hbar^2}{8m_0^2c^2}(\nabla^2 V)+\underbrace{\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\sigma[\nabla V\times p]}_{\text{SPIN-ORBITÁLNÍ INTERAKCE}}\Big)\psi = 0}$$

$\hbar\sigma$ ... SPIN ELEKTRONU

$\sigma\hbar$ ... SPIN e^- A UVAŽUJI RADIÁLNÍ POTENCIÁL $\nabla V = \frac{r_i}{r}\frac{\partial V}{\partial r}$ (SFÉR. SYM. POTENC.)

$\sigma\hbar = S$

$$= \frac{1}{r}\frac{\partial V}{\partial r}\,\bar{\sigma}\,\underbrace{[\bar{r} \times \bar{p}]}_{\mathbf{L}}$$

$\downarrow$ $\sigma\hbar$ $\qquad$ $\mathbf{L}$ ... OPERÁTOR ORBITÁL. MOMENTU

$\Rightarrow$ PROTO SPIN-ORB. INT.

ANALOGIE: – DIPÓL LETÍ V MAG. POLI

– LOR. SÍLA SE ROVNÁ DO SMĚRU $\perp$ NA B A $\perp$ NA SMĚR POHYBU

– TADY LETÍ MAG. DIPÓL V EL. POLI

KOLMO NA RYCH. (REPR. p : $V \times p$)

$\rightarrow$ KOLMO NA SÍLU (∇V

DŮSL: e^- V BLOCHOVI JE 2x DEG. (PŘES SPIN) $\rightarrow$ TEN ALE NENÍ ČISTĚ DEG.

A MÁ VELKOU A MALOU SLOŽKU

↳ PŘI INT. S FONONEM MŮŽE (S 4 PRAVD.) VYHODIT e^- DO VYŠŠÍHO STAVU SE STEJN. SPINEM (TJ. SLOŽK.) NEBO SPIN BĚHEM TOHO OTOČIT)

$\Downarrow$ TO JE REPR. PRÁVĚ TÍM POSL. ČLENEM

$V = e\phi$ ↙ EL. STAT. POTENC $\qquad \nabla^2\phi = \frac{\rho}{\varepsilon_i}$ ↙ HUST. NÁB, – DIEL. FCE $\qquad$ V JÁDRU: e^+

ZPĚTNÉ OPÁČKO

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \begin{matrix} \}\varphi \\ \}\chi \end{matrix} \qquad 1 = \langle\varphi|\varphi\rangle + \langle\chi|\chi\rangle \qquad \chi = \frac{1}{E - V - 2m_0c^2}\, c \sum_i \sigma_i p_i \varphi$$

$\downarrow$ MALÉ, MOHU ZANEDB. V ODÁDY

$$\chi = \frac{1}{2m_0c}\sum \sigma_i p_i \varphi$$

$$1 = \langle\varphi|\varphi\rangle + \langle\varphi|\frac{1}{2m_0c}\sum\sigma_i p_i \cdot \frac{1}{2m_0c}\sum_j \sigma_j p_j|\varphi\rangle$$

↳ VYMODE JEDEN δ ČLEN

$$1 = \langle\varphi|\varphi\rangle + \langle\varphi|\frac{1}{4m_0^2c^2}\sigma^2 p^2|\varphi\rangle$$

$\Downarrow$ 1

$$\langle\varphi|\left(1 + \frac{1}{8m_0^2c^2}p^2\right)\Big|\underbrace{\left(1 + \frac{1}{8m_0^2c^2}p^2\right)|\varphi\rangle}_{|\psi\rangle} = 1$$

$\rightarrow$ DOSTANEME SICE VYŠŠÍ ŘÁD c^4 (TEN ALE ZANEDBÁME)

$$\left(E - V - \frac{p^2}{2m_0}\right)\varphi = \frac{p^2}{8m_0^2c^2}(V - E)\varphi + (V - E)\frac{p^2}{8m_0^2c^2}\varphi - \frac{i\hbar^2}{8m_0^2c^2}(\nabla^2 V)\varphi + \frac{i\hbar^2}{4m_0^2c^2}\sum \sigma_k \varepsilon_{kij}(\nabla_i V)\nabla_j \varphi$$

↓ PŘEPIS ABYCHOM MOHLI VYTKNOUT $\left(1 + \frac{p^2}{8m_0^2c^2}\right) \rightarrow$

... $p^2(V - E)$ $\quad$ $+ (V - E)\,p^2$ ... $\Rightarrow$ SOUČIN S NORMOU TYPU; PROTO JSME JI VYTKLI, ABYCHOM POTOM DOSTALI $\underbrace{(\,)\varphi}_{\psi}$

$\rightarrow$ * KOMPENZ. ČLEN; ČLENY $\frac{1}{c^4}$ SE ZANEDBÁVAJÍ

$$\left[\left(1 + \frac{p^2}{8m_0^2c^2}\right)\left(E - V - \frac{p^2}{2m_0}\right)\left(1 + \frac{p^2}{8m_0^2c^2}\right) + \frac{p^4}{8m_0^2c^2} + \frac{\hbar^2}{8m_0^2c^2}(\nabla^2 V) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\bar{\sigma}[\nabla V \times p]\right]\varphi = 0$$

JINÝ POSTUP: ROVNOU ZASUBSTITUUJI $\psi = \left(1 + \frac{p^2}{8m_0c^2}\right)\varphi$ S $\ominus$ $\rightarrow$ UPRAVÍME