**Part I**

1. Find all point symmetry operations of a cubic primitive lattice Krikl ano

2. Cuprate planes occurring in HTC superconductors are composed of Cu atoms (full circles) and O atoms (empty circles). Determine the primitive unit cell and the base from the left panel. In a more exact model, the O atoms lie above (+) and below(-) the cuprate plane (the right panel). Determine the primitive unit cell and the base in this model, too.

Skorvankova ano

3. Find all symmetry operations of the lattices in the figure and compare with the symmetry operations of the corresponding primitive lattice

Pittnerova ano

4. Calculate the packing coefficients for simple cubic, fcc, bcc and hcp structures. What is the ratio *c/a* in an ideal hcp structure? Krikl ano

5. Why a tetragonal base-centered lattice does not exist?

6. Calculate the basis vectors of the lattice reciprocal to orthorhombic, hexagonal and trigonal lattices Skorvankova ano

7. Derive expression for net-plane distances and angles between the crystallographic planes for orthorhombic and hexagonal crystals Pittnerova ano

8. Sketch first 4 Brillouin zones of a two-dimensional orthogonal lattice, *a*2 = 3*a*1 Krikl ano

9. Calculate the coordinates of points G, X, L, K, W in the 1st Brillouin zone of a fcc crystal. What are the point-symmetry operations in these points? Skorvankova

10. Derive the selection rules for diffraction from fcc, bcc, zinc-blende a diamond crystal lattices Pittnerova ano

11. It has been stated experimentally that the 200 diffraction peak of a fullerene lattice of C60 buckyballs (fcc lattice, a=1.411 nm) is very weak. Assuming that the electron density in a buckyball is homogeneously distributed on a spherical surface with radius 0.35 nm, explain this finding. Krikl

12. Prove that three-dimensional periodical lattices could possess only 2-, 3-, 4- and 6-fold rotation axes. Skorvankova ano

**Part II**

1. Polarizability of a hydrogen atom

a) consider a classical model of a ground state of hydrogen atom in an electric field perpendicular to the plane of the orbit. Show that the atomic polarizability is *a*03 in CGS units(*a*0 is the Bohr radius)

b) Consider a ground state of a hydrogen atom with the wave function The external electric field is oriented along the z-axis. Assume the disturbed wave function in the form and determine g from the condition of the energy minimum. From the value of g determine the dipole moment of the hydrogen atom, using the expression and show that the polarizability of the hydrogen atom in CGS units is 4*a*03

2. Ferroelectric ordering of a linear chain

A dipole generates an electric field according to

a) Consider a system consisting of two atoms with a separation *a*; a is the polarizability of the atoms. Under what condition for a and *a* is the ferroelectric?

b) Can the system be also anti-ferroelectric?

c) Generalize the case in a) to a linear chain. Show that a spontaneous polarization can arise in this case when . The sum runs over all natural numbers and

**Part III**

1. Derive the expression for the Landé g-factor calculating the component of ***m*** parallel to ***J***.

2. The most important contribution to the paramagnetism of CuSO4 comes from the Cu2+ ions, the magnetic moments of which is due to a single unpaired spin (L=0,J=S=1/2, g=2). Derive the probabilities that the moment lies parallel and antiparallel to the field. Derive the expression for the magnetization and the magnetic heat capacity

3. In benzene the carbon atoms form a regular hexagon of side 1.4 Å. One outer electron from each atom has a wave function that extends round the whole ring of atoms (the other 3 electrons from each atoms are in sp2 atomic orbitals). Estimate roughly the contribution of these electrons to the diamagnetic susceptibility of liquid benzene (density = 880 kg/m3, molecular weight = 78).

**Part IV**

1. Develop a Néel theory for a case where a spin has a za antiparallel nearest neighbors and zb parallel neighbors

2. Derive the expression for the temperature dependence of spontaneous magnetization of a ferromagnet close to Tc using the mean field approach

3. Show that when T is far below Tc, the mean field theory of a ferromagnet predicts a spontaneous magnetization that differs from its value at T = 0 exponentially in –1/T

**Part V**

1. V Drudeho modelu je pravděpodobnost, že se elektron srazí za elementární časový úsek dt, rovna dt/.

a) Dokažte, že elektron libovolně vybraný v daný časový okamžik se nesrazil v předchozích t sekundách s pravděpodobností exp(-t/).

b) Dokažte, že pravděpodobnost toho, že doba mezi dvěma následujícími srážkami je v intervalu (t,t+dt), je dt/ .exp(-t/ ).

c) Dokažte, že doba od poslední srážky vystředovaná přes všechny elektrony je .

d) Dokažte, že střední doba mezi dvěma srážkami pro libovolně vybraný elektron je .

Pittnerova

2. Kus kovu se nachází v homogenním elektrostatickém poli **E**, teplota kovu je konstantní. Vyberme libovolný elektron z elektronového plynu a předpokládejme, že tento elektron vykonal srážku v čase t=0 a další srážku v čase t.

a) Dokažte, že střední energie předaná iontům při druhé uvažované srážce elektronu je (eEt)2/(2m).

b) Dokažte, že střední energie předaná elektronem při libovolné srážce je (eE )2/m.

c) Nechť má kus kovu tvar válce s plochou podstavy S a výškou L a nechť intensita elektrického pole **E** je rovnoběžná s výškou válce. Z výsledku úlohy b) odvoďte vztah pro elektrický odpor válce.

Krutel

3. Elektrická vodivost kovů

a) Vypočtěte hustotu volných elektronů v mědi s hustotou 8960 kg m-3 a relativní atomovou hmotností 63.5.

b) Měděným vodičem s průřezem 0.2 cm2  prochází proud 1 A. Jaká je driftová rychlost elektronů?

c) Vypočtěte pohyblivost elektronů v sodíku, je-li jeho specifická vodivost a koncentrace nositelů

d) Specifická elektrická vodivost Cu je . Určete relaxační dobu elektronů.

Krikl

**Part VI**

1. Jaký je vztah mezi *n* a *kF* a mezi *kF* a *rs* v případě dvourozměrného elektronového plynu? Jaký je vztah mezi *n* a *kF* a mezi *kF* a *rs* v případě jednorozměrného elektronového plynu? Najděte vztah pro energiovou hustotu stavů *g(E)* pro dvourozměrný a jednorozměrný elektronový plyn. Najděte vztah mezi Fermiho energií *EF* a chemickým potenciálem m pro dvourozměrný a jednorozměrný elektronový plyn. Stegner

2. Odvoďte vztahy pro teplotní závislost chemického potenciálu a energiové hustoty, omezte se na nepříliš vysoké teploty Bartova

3. Určete počet elektronových stavů v objemové jednotce kovu při T=0K s energií v intervalu od 0.3 do 0.4 eV. Určete střední hodnotu hustoty energie elektronového plynu v Ag při T=50K, víte-li, že hustota elektronů je 5.85x1028 m-3 a Fermiho energie je *EF* = 5.48 eV. Vypočtěte rozdíl mezi chemickým potenciálem m a Fermiho energií *EF* pro Ag při pokojové teplotě. Cervinka

**Part VII**

1. Kroning-Penneyův model

Vyřešte Schroedingerovu rovnici pro elektron v jednorozměrném periodickém poli, které má tvar

*U(x)*

*x*

*a*

*a+b*

*2a+b*

*U0*

Vyřešte problém numericky pro vhodně zvolené hodnoty konstant Pavelka!!!!!

2. Uvažte dvourozměrnou čtvercovou mřížku s potenciálem

Najděte přibližnou šířku zakázaného pásu v bodě , tj. v rohu 1. Brillouinovy zóny. Revenda

**Part VIII**

1. Metodou LCAO vypočtěte pásovou strukturu jednorozměrného řetízku dvouatomových molekul. Zažímal

2. Metoda těsné vazby pro s--pás v fcc mřížce Odvoďte disperzní relace pásu vycházejícího z s-stavů atomů umístěných vuzlech kubické plošně centrované mřížky. Uvaľujte pouze maticové elementy mezi nejbližšími sousedy, překryv s-orbitalů na sousedních atomech zanedbejte. Výsledek znázorněte graficky obvyklým způsobem, tj. podél lomené čáry LXK Matej

3. Metoda těsné vazby pro p--pásy ve čtvercové mřížce Uvažujme o dvourozměrné čtvercové mřížce s jednoatomovou bází. Najděte disperzní relace pásů odvozených z dvakrát degenerovaných p-orbitalů px a py. Vlnové funkce těchto orbitalů mají tvar . Při výpočtu se omezte pouze na maticové elementy mezi nejbližšími sousedy a matici překryvových integrálů aproximujte jednotkovou maticí. Pásové schéma zobrazte podél lomené čáry MX Valach

4. Metodou LCAO vyšetřete Diracovy kužele (Dirac cones) v pásové struktuře graphenu. Fiebig

**Part IX**

1. Elektrony v okolí minima pásu.

Pro elektrony v okolí minima pásu platí

kde *mT* a *mL* jsou transversální a longitudinální efektivní hmotnosti. Vypočtěte elektronovou tepelnou kapacitu a cyklotronovou frekvenci, leží-li homogenní magnetické pole v rovině *xy.*

Rostek

2. Oscilace v homogenním elektrostatickém poli

Elektrony ve vodivostním pásu odvozeném od s-orbitalů mají podle metody LCAO dispersní relaci (prostá kubická mřížka)

Najděte časový průběh rychlosti a polohy elektronu v homogenním elektrickém poli *E* = (*Ex*; 0; 0), je-li toto pole zapnuto v čase t = 0, kdy se elektron nachází ve stavu s ***k*** = (0; 0; 0). Jaký je příspěvek elektronu do elektrické vodivosti materiálu? Fleischer

**Part X**

1. Polovodič InSb má zakázaný pás o šířce Eg = 0.23 eV, statickou permitivitu =18 a efektivní hmotnost elektronů m\* = 0.15 m. Vypočtěte ionizační energii donoru, poloměr dráhy odpovídající základnímu stavu a minimální koncentraci donorů, při níž se začíná projevovat překrývání elektronových drah sousedních příměsových atomů (vzniká příměsový pás). Cipciar

2. V polovodiči je 1013 donorů v cm3, které mají ionizační energii ED=1 meV a efektivní hmotnost m\* = 0.01 m. Žádné akceptorové atomy nejsou přítomny a polovodič je nedegenerovaný, tj. Eg>>kBT. Odhadněte koncentraci vodivostních elektronů při T=4 K a hodnotu Hallovy konstanty. Malek

3. Předpokládejte, že koncentrace vodivostních elektronů a děr v polovodiči jsou n a p, relaxační doby te a th a efektivni hmotnosti me a mh. Ukažte, že Hallův koeficient je

e a h jsou odpovídajícím pohyblivosti. Při výpočtu zanedbejte členy s B2. Petrak!!!!!

4. Ge má nepřímý zakázaný pás o šířce 0.67eV. Ve vodivostním pásu je osm L minim ve tvaru rotačních elipsoidů s efektivními hmotnostmi mT=1.6 m a mL = 0.08m. Maximum valenčního pásu se nachází v bodě  a vybíhají z něj dvakrát degenerovaný pás těžkých děr s izotropní efektivní hmotností 0.28m a dvakrát degenerovaný pás lehkých děr s izotropní efektivní hmotností 0.044m. Vypočtěte intrinsickou koncentraci nositelů náboje při teplotě 300K. Jilek

**Part XI**

1. Consider a one-dimensional chain of identical atoms of mass M. The springs are not only between nearest neighbors but between all pairs of atoms. Thus, the elastic energy reads

where is the displacement of atom n.

a) Find the dispersion relation, i.e., the vibrational frequency ω as a function of wave number q.

b) Assume with p > 1 a parameter controlling how rapidly the interaction drops of

with distance. Study the long-wavelength limit of the dispersion relation for p > 3. Determine

the sound velocity.

c) Investigate the long-wavelength limit of the dispersion relation for 1 < p < 3. Show that one

gets anomalous sound, i.e., the frequency is not proportional to the wavenumber. (Hint: You

may want to approximate the m-sum by an integral.) Masničák

2. Consider a material consisting of two types of ions with charges +e and −e, respectively. In addition to the Coulomb interaction, they have a short-range repulsive potential of the type .

a) Assume the substance crystalizes in the NaCl structure. Find the lattice constant by minimizing the cohesive energy. The Madelung constant for the NaCl structure is α = 1.7476. (You can restrict the repulsive interaction to the nearest neighbor sites on the lattice.)

b) Do the same for the CsCl structure with a Madelung constant of α = 1.7627.

c) Which structure will the material choose? Masničák

3. Consider a two-dimensional solid of identical atoms of mass M on a square lattice of lattice constant a. In this problem, we investigate vibrations perpendicular to the lattice plane. The equations of motion for the displacements read

Here, j and k index the atom position in the x and y directions, respectively.

a) Determine the dispersion relation (ω as a function of ) ) of the phonons for a wave with a wave vector

b) Calculate the speed of sound in terms of K and M. Does it depend on the direction of ?

c) Calculate the density of phonon states

d) Calculate the specific heat of the lattice Suk

4. One-dimensional Morse solid: Consider N identical atoms of mass M whose motion is restricted to the x-axis. Nearest-neighbor atoms are coupled by the so-called Morse potential

where is the atom distance, are positive constants

a) Find the equilibrium atom distance

b) Express the total potential energy of the chain in the harmonic approximation

c) Calculate the phonon dispersion relation assuming periodic boundary condition

d) Calculate the speed of sound, the density of phonon states and the specific heat of the chain. Suk