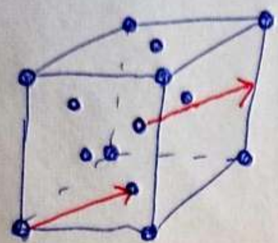
1) a) Ni Bravaisova mreža, saj razporeditev sosednjih točk ni enaka okoli vseh točk mreže: vektor, ki iz oglišča vodi v središče spodnje stranske ploskve, iz središča kocke vodi v središče roba, kjer ni točke mreže.



b)
$$\vec{a}_1 = a(1,0,0) \quad \vec{A}_1 = \frac{2\pi}{a}(1,0,0)$$
$$\vec{a}_2 = a(0,1,0) \quad \vec{A}_2 = \frac{2\pi}{a}(0,1,0) \quad \vec{K} = \frac{2\pi}{a}(m_1, m_2, m_3)$$
$$\vec{a}_3 = a(0,0,1) \quad \vec{A}_3 = \frac{2\pi}{a}(0,0,1)$$

$$\vec{r}_1 = 0$$
$$\vec{r}_2 = \frac{a}{2}(0,1,1)$$
$$\vec{r}_3 = \frac{a}{2}(1,0,1)$$
$$\vec{r}_4 = \frac{a}{2}(1,1,0)$$
$$\vec{r}_5 = \frac{a}{2}(1,1,1)$$

$$S_{\vec{K}} = \sum_n e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_n} = 1 + e^{-i\pi(m_2+m_3)} + e^{-i\pi(m_1+m_3)} + e^{-i\pi(m_1+m_2)} + e^{-i\pi(m_1+m_2+m_3)}$$
$$= 1 + (-1)^{m_2+m_3} + (-1)^{m_1+m_3} + (-1)^{m_1+m_2} + (-1)^{m_1+m_2+m_3}$$

$S_{\vec{K}} \neq 0$ za vse kombinacije Millerjevih indeksov, saj vsota petih števil ± 1 ne more biti enaka nič.

c) $2d \sin \vartheta/2 = \lambda$

$$d = \frac{2\pi}{|\vec{K}|} = \frac{a}{\sqrt{m_1^2+m_2^2+m_3^2}}$$

$$\sin\frac{\vartheta}{2} = \frac{\lambda}{2d} = \sqrt{\frac{m_1^2+m_2^2+m_3^2}{7}} \Rightarrow m_1^2+m_2^2+m_3^2 \leq 7$$

$\{100\}$ $\vartheta = 44.4°$ $\quad$ $\{200\}$ $\vartheta = 98.2°$
$\{110\}$ $\vartheta = 64.6°$ $\quad$ $\{210\}$ $\vartheta = 115.2°$
$\{111\}$ $\vartheta = 81.8°$ $\quad$ $\{211\}$ $\vartheta = 135.6°$

d) Pri FCC je $S_{\vec{K}} \neq 0$ samo za $\{111\}$ in $\{200\}$.
Če opazimo en sam kolobar pri kotu ϑ_1, gre lahko za FCC z $a = \frac{\lambda\sqrt{3}}{2\sin\vartheta_1/2}$ ali pa za obravnavano strukturo z $a = \frac{\lambda\sqrt{1}}{2\sin\vartheta_1/2}$. Če opazimo dva kolobarja, strukturi lahko ločimo, saj je pri FCC $\frac{\sin\vartheta_1/2}{\sin\vartheta_2/2} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{4}}$, pri obravnavani strukturi pa $\frac{\sqrt{1}}{\sqrt{2}}$.

② a) Lastne energije nastopajo v parih $\pm E$, zato je gostota stanj soda funkcija: $g(-E) = g(E)$. Dovolj je, da obravnavamo $E \geq 0$:

Energija je odvisna samo od velikosti $\vec{k}$, ploskve konst. energije so torej sfere. Izračun $g(E)$ gre zato po enaki poti kot pri disperziji $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, ki smo jo obravnavali na vajah:

$$g(E) = \frac{dN(E, E+dE)}{V\,dE} = 2 \cdot \frac{4\pi k^2\, dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \cdot V\,dE} = \frac{1}{\pi^2} \frac{k^2 dk}{dE} \overset{k = \frac{E}{\lambda}}{=} \frac{E^2}{\pi^2 \lambda^3}$$

b) Ker je spodnji pas pri $T = 0K$ zapolnjen, zgornji pa prazen, je $\mu(T=0K) = 0$. Ker je $g(E)$ soda, se μ s temperaturo ne spreminja, saj je samo pri $\mu(T) = 0$ št. elektronov v zgornjem pasu enako številu vrzeli v spodnjem pasu. To pokaže tudi naslednja izpeljava

$$N(T) - N(T=0K) = V \int_{-\infty}^{\infty} dE \underbrace{g(E)}_{\text{soda}} \underbrace{\left[f(E) - f_0(E)\right]}_{\text{liha}} = 0$$

$f(E)$: Fermi-Diracova porazdelitev pri $T > 0K$, $\mu = 0$

$f_0(E)$: Fermi-Diracova porazdelitev pri $T = 0K$, $\mu = 0$

c) $c = \frac{1}{V} \frac{dE(T)}{dT}$

$$\frac{E(T)}{V} = \int_{-\infty}^{\infty} dE\, E\, g(E) f(E) = \overbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dE\, E\, g(E) f_0(E)}^{E(T=0K)} +$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} dE\, E\, g(E) \left[f(E) - f_0(E)\right] =$$

$$= \frac{E(T=0K)}{V} + \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{E^3}{\pi^2 \lambda^3} \left[f(E) - f_0(E)\right] =$$

per partes:

$u = f(E) - f_0(E)$

$du = f'(E)\, dE$

$dv = \frac{E^3}{\pi^2 \lambda^3} dE$

$v = \frac{E^4}{4\pi^2 \lambda^3}$

$$= \frac{E(T=0K)}{V} + \cancel{\frac{E^4}{4\pi^2 \lambda^3} \left[f(E) - f_0(E)\right] \Big|_{-\infty}^{\infty}} +$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{E^4}{4\pi^2 \lambda^3} \left[-f'(E)\right] = \frac{E(T=0K)}{V} +$$

$s = \beta E$

$$+ \frac{1}{4\pi^2 \lambda^3 \beta^4} \int_{-\infty}^{\infty} ds \frac{s^4}{4 \operatorname{ch}^2 \frac{s}{2}} = \frac{7\pi^2}{60 \lambda^3} (k_B T)^4 + \frac{E(T=0K)}{V} \Rightarrow c = \frac{7\pi^2}{15} \left(\frac{k_B T}{\lambda}\right)^3 k_B$$