Szilárdtestfizika II.

1.Zh.

1.feladat [1]

Egydimenziós elektronok a rácsállandójú gyenge periódikus potenciálban mozognak, $V(x+na) = V(x)$ minden n egész számra. A potenciál egy perióduson belül:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{4V_0}{a}x - V_0 & \text{ha } x \in [0, a/2], \\ -\frac{4V_0}{a}x + 3V_0 & \text{ha } x \in [a/2, a]. \end{cases}$$

Rajzolja fel a potenciált egy periódusra. Ábrázolja vázlatosan a sávszerkezetet az első Brillouin zónára, és határozza meg a szomszédos sávok között kialakuló tiltott sáv szélességét *kváziszabad* elektron közelítésben. Mi a közelítés alkalmazhatóságának feltétele? (10 pt)

2.feladat

Egy kétdimenziós, elemi cellánként egy atomot tartalmazó fémben a vezetési elektronok diszperziós relációját közelítsük a *tight-binding* diszperziós relációval:

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)).$$

a. Rajzolja fel a valós térbeli elemi cellát, az első Brillouin zónát és benne a spektrumra jellemző Fermi-felületeket az n rácshelyenkénti betöltés függvényében, $0 \le n \le 2$. (2 pt)

b. Sorfejtéssel adja meg a tömegtenzort a Fermi-felület közelében lévő elektronokra a dupla betöltés közelében, azaz ha a sáv majdnem teljesen betöltött. (3 pt)

c. Számítsa ki a $\sigma_{ij}(\omega)$ vezetőképességtenzort a dupla betöltés közelében, ha a relaxációs idő $\mathbf{k}$-független és $T \ll T_F$. (5 pt)

d. Diszkutálja, hogy mi történik a vezetőképességgel, ha $n \to 2$. (2 pt)

3.feladat

Tekintsünk egy anizotróp, egyatomos elemi cellájú tetragonális rácsot, ahol a rácsállandó az x és y irányokban a, a z irányban pedig c. Az elektronok diszperziós relációja legyen:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z},$$

ahol $m_z \gg m$.

a. Rajzolja fel az első Brillouin zónát, adja meg méreteit. (2 pt)

b. Ábrázolja a Fermi-felületeket a $k_x - k_y$ és $k_x - k_z$ metszetekben különböző betöltésekre. Nyílt Fermi-felületek esetén lehetőleg vegye figyelembe a gyenge periódikus potenciál hatását a zónahatáron. (3 pt)

c. Milyen betöltés mellett kerülnek elektronok a második sávba? (5 pt)

---

[1] $\int xe^{i\alpha x}dx = -i\frac{d}{d\alpha}\int e^{i\alpha x}dx$

Szilárdtestfizika II. gyakorlat, 1.zh
2004. március 22.

1.feladat
Egydimenziós elektronok a rácsállandójú gyenge periódikus potenciálban mozognak, $V(x+na) = V(x)$ minden n egész számra. A potenciál egy perióduson belül:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{ha } |x| < a/4, \\ -V_0 & \text{ha } a/4 < |x| < a/2. \end{cases}$$

Rajzold fel a potenciált egy periódusra! Ábrázold vázlatosan a sávszerkezetet az első Brillouin zónára, és határozd meg a szomszédos sávok között kialakuló tiltott sáv szélességét *kváziszabad* elektron közelítésben! Mi a közelítés alkalmazhatóságának feltétele? (12 pont)

2.feladat
Egy s atomi pályákból felépülő kétdimenziós négyzetrácsban az átfedési integrál értéke az él-szomszédok között t_1, az átló-szomszédok között t_2 $(t_1, t_2 < 0)$.

a. Írd fel a diszperziós relációt *tight binding* közelítésben! (6 pont)

b. Ábrázold vázlatosan a diszperziós relációt az első Brillouin-zóna nevezetes pontjait összekötő $\Gamma - X - M - Y - \Gamma$ egyenesek mentén! Mekkora a sávszélesség? (6 pont)

c. Számítsd ki az m_{ij}^{-1} effektív tömeg tenzort kis betöltés esetén! (4 pont)

\+ Számold ki az m_{ij}^{-1} effektív tömeg tenzort és a σ_{ij} vezetőképesség tenzort a $|t_1| \gg |t_2|$, $n \to 2$ határesetben (4 pont)

3.feladat
A Na egy vegyérték-elektronnal rendelkezik, és tércentrált köbös rácsban kristályosodik. A köbös Bravais-cella oldaléle $a = 0.42$nm. A kísérletileg meghatározott fajhő együttható értéke $\gamma = 1.46$mJ/mol·K^2. ($k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$J/K, $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}$kg, $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ Js)

a. Mekkora az elektronsűrűség a kristályban? (3 pont)

b. Számold ki a Fermi-hullámszám értékét szabad elektron közelítésben! (2 pont)

c. Add meg az állapotszámot és az állapotsűrűséget szabad elektron közelítésben! (3 pont)

d. Mekkora a vegyérték-elektronok effektív tömege szabad elektron egységekben? (4 pont)

Szilárdtestfizika II. gyakorlat, 1.pótzh
2004. április 13.

1.feladat
Vizsgáljuk meg a háromdimenziós szabad elektrongáz transzport tulajdonságait a következő lépések alapján:

a. Vezesd le a Fermi-hullámszám értékét az elektron állapotszám definíciójából kiindulva! (2 pont)

b. Írd fel a Boltzmann-féle transzportegyenlet megoldásaként ismert, az elektromos vezetőképesség számítására vonatkozó általános kifejezést! (2 pont)

c. A (b) pontbeli kifejezést felhasználva határozd meg a háromdimenziós szabad elektrongáz elektromos vezetőképességét konstans τ relaxációs időt feltételezve! (6 pont)

d. Helyettesítsd be a Fermi-hullámszám értékét az elektromos vezetőképesség előbb meghatározott kifejezésébe! Mit tapasztalsz? (2 pont)

2.feladat
Egy s atomi pályákból felépülő háromdimenziós lapcentrált köbös rácson az elsőszomszédok közötti átfedési integrál t_1, a második legközelebbi atomok közötti pedig t_2. A Bravais-cella éle legyen a.

a. Adj meg egy lehetséges elemi bázisvektorrendszert! (3 pont)

b. Add meg a elektron sávszerkezetet tight-binding - azaz szoros-kötésű - közelítésben másodszomszédig bezárólag! (4 pont)

c. Határozd meg az elemi reciprokrácsvektorokat! Milyen rácsot definiálnak? (3 pont)

d. Add meg a Brillouin-zóna nevezetes $\Gamma(0,0,0)$, $Z(0,0,2\pi/a)$, $M(0,\pi/a,2\pi/a)$ pontjaiban az elektronenergiákat, majd ábrázold vázlatosan a diszperziót a megadott pontok mentén! Mekkora a sávszélesség? (3 pont)

e. Add meg a tömegtenzort kis betöltésre! (3 pont)

3.feladat
Tekintsünk egy háromdimenziós egyszerű köbös rácsot s-típusú atomi nívókkal, ahol az elektron sávszerkezet kis betöltésre a Γ pont közelében $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0 - 6|t| + |t|(ak)^2$; t az elsőszomszéd átfedési integrál, a a rácsállandó, valamint ϵ_0 az s-nívó energiája. A p hidrosztatikai nyomás függvényében a t átfedési integrál $t = t_0 + \alpha p$ alakú. Számold ki a vezetési elektronok fajhőjárulékának nyomásfüggését! (12 pont)

Szilárdtestfizika II. gyakorlat, GyakIV.
2004. május 24.

1.feladat
Egy kétdimenziós, elemi cellánként egy atomot tartalmazó fémben a vezetési elektronok diszperzióját közelítsük a szoros kötésű diszperziós relációval:

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - 2t\left[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)\right].$$

a. Rajzold fel a valós térbeli elemi cellát és az első Brillouin-zónát, benne a spektrumra jellemző Fermi-felületekkel az n rácshelyenkénti betöltés függvényében ($0\leq n \leq 2$)! (3 pont)

b. Sorfejtéssel add meg az effektív tömeg tenzort a Fermi-felület közelében lévő elektronokra $n \to 2$ esetén, azaz ha a sáv majdnem teljesen betöltött! (6 pont)

c. Számítsd ki a $\sigma_{ij}(\omega)$ vezetőképesség tenzort a dupla betöltés közelében, ha a relaxációs idő $\mathbf{k}$-független és $T \ll T_F$! (11 pont)

d. Diszkutáld, hogy mi történik a vezetőképességgel, ha $n \to 2$! (5 pont)

2.feladat
Tekintsünk egy anizotróp, egyatomos elemi cellájú tetragonális rácsot, ahol a rácsállandó az x és y irányokban a, a z irányban pedig c. Az elektronok diszperziós relációja legyen

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z},$$

ahol $m_z \gg m$.

a. Rajzold fel az első Brillouin-zónát és add meg a méreteit! (3 pont)

b. Ábrázold vázlatosan a Fermi-felületet a $k_x - k_y$ és $k_x - k_z$ metszetekben különböző betöltésekre! Nyílt Fermi-felületek esetén a zónahatáron vedd figyelembe a gyenge periodikus potenciál hatását! (8 pont)

c. Milyen betöltés felett kerülnek elektronok a második sávba? (14 pont)

Szilárdtestfizika II.
1.Zh.

1.feladat [2]

Egydimenziós elektronok a rácsállandójú gyenge periódikus potenciálban mozognak, $V(x+na) = V(x)$ minden n egész számra. A potenciál egy perióduson belül:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{4V_0}{a}x - V_0 & \text{ha } x \in [0, a/2], \\ -\frac{4V_0}{a}x + 3V_0 & \text{ha } x \in [a/2, a]. \end{cases}$$

Rajzolja fel a potenciált egy periódusra. Ábrázolja vázlatosan a sávszerkezetet az első Brillouin zónára, és határozza meg a szomszédos sávok között kialakuló tiltott sáv szélességét *kváziszabad* elektron közelítésben. Mi a közelítés alkalmazhatóságának feltétele? (10 pont)

2.feladat

Egy kétdimenziós, elemi cellánként egy atomot tartalmazó fémben a vezetési elektronok diszperziós relációját
közelítsük a *tight-binding* diszperziós relációval:

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)).$$

a. Rajzolja fel a valós térbeli elemi cellát, az első Brillouin zónát és benne a spektrumra jellemző Fermi-felületeket az n rácshelyenkénti betöltés függvényében, $0 \leq n \leq 2$. (3 pont)

b. Sorfejtéssel adja meg a tömegtenzort a Fermi-felület közelében lévő elektronokra a dupla betöltés közelében, azaz ha a sáv majdnem teljesen betöltött. (4 pont)

c. Számítsa ki a $\sigma_{ij}(\omega)$ vezetőképességtenzort a dupla betöltés közelében, ha a relaxációs idő $\mathbf{k}$-független és $T \ll T_F$. (6 pont)

d. Diszkutálja, hogy mi történik a vezetőképességgel, ha $n \to 2$. (3 pont)

3.feladat

Tekintsünk egy anizotróp, egyatomos elemi cellájú tetragonális rácsot, ahol a rácsállandó az x és y irányokban a, a z irányban pedig c. Az elektronok diszperziós relációja legyen:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z},$$

ahol $m_z \gg m$.

a. Rajzolja fel az első Brillouin zónát, adja meg méreteit. (3 pont)

b. Ábrázolja a Fermi-felületeket a $k_x - k_y$ és $k_x - k_z$ metszetekben különböző betöltésekre. Nyílt Fermi-felületek esetén lehetőleg vegye figyelembe a gyenge periódikus potenciál hatását a zónahatáron. (5 pont)

c. Milyen betöltés mellett kerülnek elektronok a második sávba? (6 pont)

---

[2] $\int x e^{i\alpha x} dx = -i \frac{d}{d\alpha} \int e^{i\alpha x} dx$

Szilárdtestfizika II. gyakorlat, PótZH 1. példasor
2007. május 21.

1. feladat
Egydimenziós elektronok a rácsállandójú gyenge periódikus potenciálban mozognak, $V(x+na) = V(x)$ minden n egész számra. A potenciál egy perióduson belül:

$$V(x) = \sin\left(\frac{4\pi}{a}x\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$$

a) Rajzold fel vázlatosan a potenciált egy periódusra! (2 pont)

b) Ábrázold vázlatosan a sávszerkezetet az első három sávra a redukált zónaképben! (3 pont)

c) Határozd meg a szomszédos sávok között kialakuló tiltott sáv szélességét *kváziszabad* elektron közelítésben! (4 pont)

d) Mi a közelítés alkalmazhatóságának feltétele? (3 pont)

2.feladat
Egy p atomi pályákból felépülő háromdimenziós tércentrált köbös rácson az elsőszomszédok közötti átfedési integrál t_1, a második legközelebbi atomok között pedig t_2. A Bravais-cella éle legyen a.

a) Adj meg egy lehetséges elemi bázisvektorrendszert! (3 pont)

b) Add meg a elektron sávszerkezetet tight-binding – azaz szoros-kötésű – közelítésben másodszomszédig bezárólag! (3 pont)

c) Határozd meg az elemi reciprokrácsvektorokat! Milyen rácsot definiálnak? (3 pont)

d) Add meg a Brillouin-zóna nevezetes $\Gamma(0,0,0)$, $Z(0,0,2\pi/a)$, $M(0,\pi/a,2\pi/a)$ pontjaiban az elektron-energiákat, majd ábrázold vázlatosan a diszperziót a $\Gamma - Z - M - \Gamma$ pontok mentén! Mekkora a sávszélesség? (3 pont)

e) Számítsd ki az m_{ij}^{-1} effektív tömeg tenzort kis betöltés esetén! (4 pont)

3.feladat
Kétdimenziós elektronok a rácsállandójú háromszögrács gyenge periódikus potenciáljában mozognak.

a) Add meg az első és második Brillouin zóna alakját és méretét! (6 pont)

b) Számítsd ki a Fermi hullámszám értékét abban az esetben, amikor minden rácspontra 2 elektron jut! (3 pont)

c) Milyen betöltés (elektron/rácshely) mellett kerülnek elektronok a második sávba? (3 pont)

Szilárdtestfizika II. gyakorlat, pótzh
2007. május 21.

1. feladat

Egy 1 dimenziós szabad elektron gázt a következő gyenge perturbáló potenciálba helyezzük:

$$V(X) = 8V_0 \left\{ cos^4(\frac{2\pi}{a}x) + cos^2(\frac{2\pi}{a}x) \right\}$$

a) Mi a kialakuló 1 dimenziós kristályrácsnak a rácsállandója? Add meg a reciprokrács vektorokat! (3 pont)

b) Kváziszabad elektron közelítésben rajzold fel a diszperziós relációt a redukált zóna képben (az első három sávot)! Jelezd, hogy a degenerációs pontokban mekkora felhasadást okoz a potenciál! (6 pont)

b) Hogyan változtatja meg a diszperziós relációt a potenciál a degenerációs pontoktól távol, a perturbációs potenciál első rendjéig! (4 pont)

2. feladat

Egy kétdimenziós a rácsállandójú háromszög rácson a diszperziós reláció a következő alakú:

$$\epsilon(k) = \epsilon_0 + \epsilon_1 |k|$$

.

a) 1 e^-/ rácshely esetén számold ki a Fermi hullámszámot, és rajzold fel a Fermi felületet, feltüntetve a Brillouin zóna határát! Add meg a Brillouin zóna magas szimmetriájú pontjainak koordinátáit. (6 pont)

b) Add meg és rajzold fel az állapotsűrűséget az energia függvényében! (5 pont)

c) Számold ki az elektronok fajhőjét Sommerfeld közelítésben!
(4 pont)

d) * Számold ki az effektív tömeg tenzor komponenseinek Fermi felületre vett átlagát! Mit tapasztalsz $k_f \to 0$ esetén?
(4 pont)

3.feladat

Köbös kristályban, a rácsállandójú s típusú e^--okra számoljuk ki a diszperziós relációt szoros kötésű közelítésben, első szomszéd átfedési integrálok figyelembe vételével!

a) Írd fel a diszperziós relációt! Mekkora a sávszélesség? (4pont)

b) Mi a fermi felület nagy betöltés, közel két elektron/rácshely esetén? Rajzoljátok fel a Brillouin zónába! (4pont)

c) Határozd meg az állapotsűrűséget nagy betöltés esetén! Hogyan viszonyul a sávszélességhez? (4pont)

Szilárdtestfizika II. gyakorlat, 1. pótzh
2008. május 13.

1.feladat

Egydimenziós elektronok a rácsállandójú gyenge periódikus potenciálban mozognak, $V(x+na) = V(x)$ minden n egész számra. A potenciál egy perióduson belül:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{ha } |x| < a/4, \\ -V_0 & \text{ha } a/4 < |x| < a/2. \end{cases}$$

a. Rajzold fel a potenciált egy periódusra! (2 pont)

b. Ábrázold vázlatosan a sávszerkezetet az első Brillouin zónára, és határozd meg a szomszédos sávok között kialakuló tiltott sáv szélességét *kváziszabad* elektron közelítésben! (9 pont)

c. Mi a közelítés alkalmazhatóságának feltétele? (2 pont)

2.feladat

Tekintsünk egy egyatomos elemi cellájú, a rácsállandójú kétdimenziós négyzetrácsot s elektronokkal, *szoros kötésű közelítésben.* Az első- és másodszomszéd átfedési integrál is számít, melynek értéke t_1 illetve t_2.

a. Írd fel a diszperziós relációt! Ábrázold a Brillouin-zóna nevezetes vonalai mentén ($\Gamma - M, M - X, X - \Gamma$)! Add meg a sávszélességet! (6 pont)

b. Add meg az effektív tömegtenzort kis betöltés esetén! Elektron vagy lyukszerűek az állapotok? (4 pont)

c. Add meg az állapotsűrűséget kis betöltés esetén! (3 pont)

+. Számoldi ki a vezetőképességtenzort kis betöltés esetén! Teljesül-e a Drude formula? (2 pont)

3.feladat

Tekitsünk egy a rácsállandójú egydimenziós láncot *kvázi-szabad elektron közelítésben*, 1 e^- rácshely betöltéssel.

a. Ábrázold a diszperziós relációt a Brillouin zónában (az első két sávot)! (4 pont)

b. Rajzold be a Fermi energiát, azaz $T = 0$ esetén a legmagasabb energiájú betöltött állapotot! (3 pont)

c. Számold ki a vezetőképességet alacsony hőmérsékleten feltételezve, hogy az elektronállapotok (transzport) élettartama τ ! Fémes, vagy szigetelő a rendszer? (4 pont)

d. Mi történik ha minden második atomot közelebb kerül egymáshoz, azaz a periodikus potenciálban megjelenik egy $2a$ periódusú Fourier komponens is. Hogyan változik meg az elemi cella és a Brillouin zóna? Ebben az esetben is ábrázold a spektrumot! (3 pont)

+. Mi történik a vezetőképességel? (3 pont)

Szilárdtestfizika II. gyakorlat, gyakIV 1. zh témaköre
2008. május 28.

1. feladat
Egy 1 dimenziós szabad elektron gázt a következő gyenge perturbáló potenciálba helyezzük:

$$V(x) = 8V_0 \cdot sin^4(\frac{2\pi}{a}x)$$

a) Mi a kialakuló 1 dimenziós kristályrácsnak a rácsállandója? Add meg a reciprokrács vektorokat! (3 pont)

b) Kváziszabad elektron közelítésben rajzold fel a diszperziós relációt a redukált zóna képben (az első három sávot)! Jelezd, hogy a degenerációs pontokban mekkora felhasadást okoz a $V(x)$ potenciál! (6 pont)

b) Hogyan változtatja meg a diszperziós relációt a $V(x)$ potenciál a degenerációs pontoktól távol, a perturbációszámítás első rendjéig! (4 pont)

2.feladat
Egy kétdimenziós, elemi cellánként egy atomot tartalmazó fémben a vezetési elektronok diszperziós relációját közelítsük az alábbi szoros kötésű diszperziós relációval:

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)).$$

a. Rajzoljd fel a valós térbeli elemi cellát, az első Brillouin zónát és benne a spektrumra jellemző Fermi-felületeket az n rácshelyenkénti betöltés függvényében, $0 \leq n \leq 2$. (4 pont)

b. Sorfejtéssel add meg a tömegtenzort a Fermi-felület közelében lévő elektronokra a dupla betöltés (2 elektron/rácshely) közelében, azaz ha a sáv majdnem teljesen betöltött. (3 pont)

c. Számítsd ki a $\sigma_{ij}(\omega)$ vezetőképességtenzort a dupla betöltés közelében, ha a relaxációs idő $\mathbf{k}$-független és $T \ll T_F$. (5 pont)

d. Mi történik a vezetőképességgel, ha $n \to 2$. (2 pont)

3.feladat
Tekintsünk egy anizotróp, egyatomos elemi cellájú tetragonális rácsot, ahol a rácsállandó az x és y irányokban a, a z irányban pedig $c(= 2a)$. Az elektronok diszperziós relációja legyen:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z},$$

ahol $m_z \gg m$.

a. Rajzold fel az első Brillouin zónát, add meg méreteit. (4 pont)

b. Ábrázold a Fermi-felületeket a $k_x - k_y$ és $k_x - k_z$ metszetekben különböző betöltésekre. Nyílt Fermi-felületek esetén lehetőleg vegye figyelembe a gyenge periódikus potenciál hatását a zónahatáron. (4 pont)

c. Milyen betöltés mellett kerülnek elektronok a második sávba? (5 pont)

Szilárdtestfizika gyakorlat, 2. zh
2008. december 11.

1.feladat
Tekintsük az a rácsallandójú szabályos négyzetrácsot!

a. Rajzold fel az elektronok sávszerkezetét a $\Gamma(0,0) - X(\pi/a,0) - M(\pi/a,\pi/a) - \Gamma(0,0)$ vonal mentén a $0 \leqq \varepsilon \leqq 7\hbar^2\pi^2/2ma^2$ energia tartományban! Ezen a ponton tekints el attól, hogy a rácsszerkezetért felelős periodikus potenciál feloldhatja a sávok közötti degenerációkat. Tüntesd föl, hogy az egyes hullámszám térbeli pontokban/vonalakon hányszorosan degeneráltak a megvalósuló energiaértékek és indexeld az egyes sávokat a hozzájuk tartozó reciprok rácsvektorokkal! (8 pont)

b. Vizsgáld meg, hogy a Γ pontban $\varepsilon = 4\hbar^2\pi^2/2ma^2$-nál kialakuló degeneráció hogyan hasad fel, ha a periodikus potenciálnak csak az $U(2\pi/a,0) = U(-2\pi/a,0) = U(0,2\pi/a) = U(0,-2\pi/a) \triangleq U_1$ és a $U(4\pi/a,0) = U(-4\pi/a,0) = U(0,4\pi/a) = U(0,-4\pi/a) \triangleq U_2$ Fourier komponensei nem zérusok! Számold ki az energia felhasadások nagyságát és határozd meg a sajátállapotokat is! (8 pont)

\+ Vizsgáld meg a felhasadásokat a $\Gamma - X - M - \Gamma$ vonal mentén, ha továbbra is csak a fönti U_1 és U_2 Fourier együtthatók különböznek nullától! (4 pont)

2.feladat
Tekintsük egy egyszerű tetragonális rácsot, ahol a rácsállandók $a = b < c$ és egy atomos a bázis! Határozzuk meg ezen rácsra az elektronok diszperziós relációját szoros kötésű közelítésben s-pályák esetén. Csak az első szomszéd átedési integrálok számítanak, melyekről tudjuk: $t_a = t_b = 2t_c$.

a. Számold ki a diszperziós relációt és ábrázold a $\Gamma(0,0,0) - X(\pi/a,0,0) - A(\pi/a,0,\pi/c) - \Gamma(0,0,0)$ vonal mentén! (8 pont)

b. Kis betöltésekre, azaz a betöltött állapotok hullámszámára $|\mathbf{k}| \approx 0$ teljesül, add meg a diszperziós reláció sorfejtését másod rendig! Milyen alakú ekkor a Fermi felület? Rajzold fel! (4 pont)

c. Kis betöltésekre add meg az effektív tömeg tenzor komponenseit a rácsállandókkal és az átfedési integrálokkal kifejezve! (4 pont)

3.feladat
Grafénban (egyetlen két dimenziós grafit sík) az elektronok diszperziós relációja a következő alakú: $\varepsilon(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|$.

a. Számítsd ki az elektronok állapotsűrűségét! (5 pont)

b. Hány dimenziós rács esetén kapunk ugyanilyen alakú állapotsűrűséget ($g(\varepsilon) \propto \varepsilon^\alpha$ azonos α kitevővel) az akusztikus fononokra kis hullámszámok esetén! (3 pont)

Szilárdtestfizika gyakorlat, 2. pótzh
2008. december 18.

1.feladat
Tekintsük az a rácsallandójú szabályos négyzetrácsot!

a. Rajzold fel az elektronok sávszerkezetét a $\Gamma(0,0) - X(\pi/a,0) - M(\pi/a,\pi/a) - \Gamma(0,0)$ vonal mentén a $0 \leqq \varepsilon \leqq 7\hbar^2\pi^2/2ma^2$ energia tartományban! Ezen a ponton tekints el attól, hogy a rácsszerkezetért felelős periodikus potenciál feloldhatja a sávok közötti degenerációkat. Tüntesd föl, hogy az egyes hullámszám térbeli pontokban/vonalakon hányszorosan degeneráltak a megvalósuló energiaértékek és indexeld az egyes sávokat a hozzájuk tartozó reciprok rácsvektorokkal! (7 pont)

b. Írd fel az X pontban kialakuló legalsó két degenerációs pontban a degenerált állapotok alterén az energia sajátérték egyenleteket, ha a periodikus potenciálnak csak az $U(0,0) = U_{00}$, $U(2\pi/a,0) = U(-2\pi/a,0) = U(0,2\pi/a) = U(0,-2\pi/a) \triangleq U_{10}$, $U(2\pi/a,4\pi/a) = U(-2\pi/a,4\pi/a) = U(-2\pi/a,4\pi/a) = U(-2\pi/a,-4\pi/a) \triangleq U_{12}$ és a $U(4\pi/a,0) = U(-4\pi/a,0) = U(0,4\pi/a) = U(0,-4\pi/a) \triangleq U_{20}$ Fourier komponensei nem zérusok! $U_{12} = U_{20} = 0$ esetén számold ki az energia felhasadások nagyságát és határozd meg a sajátállapotokat is! (8 pont)

2.feladat
Tekintsük egy lapcentrált köbös rácsot, ahol a a Bravais-cella (kocka) élhosszúsága! Határozzuk meg ezen rácsra az elektronok diszperziós relációját szoros kötésű közelítésben s-pályák esetén t elsőszomszéd átfedési integrállal.

a. Számold ki a diszperziós relációt! (4 pont)

b. Ábrázold, a $\Gamma(0,0,0)$ - $X(0,0,2\pi/a)$ - $L(\pi/a,\pi/a,\pi/a)$ vonal mentén! (4 pont)

c. Kis betöltésekre, azaz a betöltött állapotok hullámszámára $|\mathbf{k}| \approx 0$ teljesül, add meg a diszperziós reláció sorfejtését másod rendig! Milyen alakú ekkor a Fermi felület? Rajzold fel! (3 pont)

d. Kis betöltésekre add meg az effektív tömeg tenzor komponenseit a rácsállandóval és az átfedési integrállal kifejezve! (3 pont)

e. Értelmezd az effektív tömeg átfedési integráltól való függését! Írd fel kis betöltésekre a diszperziós relációt az effektív tömeg segítségével! (1 pont)

3.feladat
Tekintsük a következő három dimenziós szoros kötésű közelítés álta leírt diszperziós relációt: $\varepsilon(\mathbf{k}) = 2t_a cos(k_x a) + 2t_a cos(k_y a) + 2t_c cos(k_z c)$.

a. Kis betöltésekre ($|\mathbf{k}| \approx 0$) határozd meg a diszperziós reláció másodrendig sorfejtett alakját! (2 pont)

   item[b.] Ebben az esetben számold ki az elektronok állapotszámát, majd az állapotsűrűségét az energia függvényében! (6 pont)

c. Hány dimenziós szabad elektrongáz modell esetén kapunk ugyanilyen alakú állapotsűrűséget ($g(\varepsilon) \propto \varepsilon^{\alpha}$ azonos α kitevővel)? Indokold válaszodat! (2 pont)

Szilárdtestfizika gyakorlat, 2. zh
2010. december 9.

1.feladat
Atomok egydimenziós láncának elektrondiszperzióját kváziszabad elektron közelítésben számoljuk. Az atomi potenciál $V_a = \frac{V_0}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$ (Gauss-görbe) alakú, ahol $V_0 < 0$, $\sigma \lesssim \frac{a}{2}$, és a a rácsállandó. Határozd meg, hogy mekkora lesz a felhasadás a degenerációs pontokban, és rajzold fel az elektron diszperziót a második degenerációs pontig. (10 pont)
(Segítség: $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \exp\left(-ikx\right) = \sqrt{\frac{\sigma^2}{2\pi}} \exp\left(-\frac{k^2\sigma^2}{2}\right)$.)

2.feladat
Tércentrált köbös rácsban (*bcc*-rács) egyforma atomok ülnek. A sávszerkezet szoros kötésű közelítésű leírása során csak az s pályákat vesszük figyelembe, az atomi energianívót ε_s jelöli. Az elsőszomszéd átfedési integrált t-vel jelöljük, ez az egyetlen paraméter, amit a szoros kötésű modellből figyelembe kell venni. Vezessük le ezen feltételek mellett az elektronok diszperziós relációját. Mi lesz kis betöltés (kis $|k|$) esetén az effektív tömeg? (12 pont)

3.feladat
Egydimenziós rácsban az elektronok diszperziós relációja $\varepsilon(k) = -2|t| \cos(ka)$.

a. Hogyan függ az energiától az állapotsűrűség kis betöltés esetén? (4 pont)

b. Adjuk meg az egzakt (közelítések használata nélkül levezetett) energiafüggő állapotsűrűséget a teljes sávban! (4 pont)

c. Számoljuk ki a rács teljes energiájának (U) az ε_F Fermi-energiától való függését $T = 0$ hőmérsékleten! (Az integrálási tartomány a sáv aljától, $-2|t|$, a Fermi-energiáig tart.) (4 pont)

4.feladat
Egy kétdimenziós, cellánként egy atommal rendelkező szabályos négyzetrács elektrondiszperzióját szoros kötésű közelítésben számoljuk. Az atomoknak csak az s pályáját vesszük figyelembe, és csak az első szomszéd hoppingot tartjuk meg. Számold ki az elektrondiszperziót, és rajzold fel, hogy a Briollin-zónában mely hullámszámokhoz tartozó állapotok vannak betöltve, hogyha a Fermi-energia a sáv felénél van, vagyis rajzold be a megfelelő Fermi-felületet. A rajzot számolással is indokold! (6 pont)
Plusz 3-3 pontért rajzold fel sematikusan a Fermi-felületet, amikor a Fermi-energia a sáv $\frac{1}{4}$ illetve $\frac{3}{4}$ részénél van!

Szilárdtestfizika gyakorlat, pótzh
2010. december 14.

1.feladat
Egy kétdimenziós négyzetrácson a potenciál legyen $V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} V_0 a^2 \delta^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$, ahol a a rácsállandó.

a. Rajzold fel a Brillouin zónát, jelölve a nevezetes pontokat $\Gamma = (0, 0)$, $X = (\frac{\pi}{a}, 0)$ és $M = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$. (3 pont)

b. Add meg a ΓX pontokat összekötő vonal mentén a szabadelektron diszperziós relációt $E \leq 5\varepsilon_0$ esetben, ahol $\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$. A Γ és X pontok esetén pontosan add meg a lehetséges energiaértékeket és azok degenerációs fokát is. (6 pont)

c. Számold ki az X pontban az ε_0 energiánál a felhasadás mértékét kváziszabelektron közelítésben. (3 pont)

d. Sematikusan ábrázold a ΓX vonal mentén a perturbáló potenciál hatására kialakuló elektrondiszperziót! (2 pont)

2.feladat
Köbös rácsban egyforma atomok ülnek. A sávszerkezet szoros kötésű közelítésű leírása során csak az s pályákat vesszük figyelembe, az atomi energianívót ε_s jelöli. Az elsőszomszéd átfedési integrált t_1-gyel, a másodszomszéd hoppingot pedig t_2-vel jelöljük, a további kölcsönhatásokat elhanyagoljuk. Vezessük le ezen feltételek mellett az elektronok diszperziós relációját. Mi lesz kis betöltés (kis $|k|$) esetén az effektív tömeg, ha az első és másodszomszéd átfedéseket is figyelembe vesszük? (14 pont)

3.feladat
Vezesd le egy-, két- illetve háromdimenziós szabadelektrongáz esetén, hogy az egy részecskére jutó energia hányszorosa a Fermi-energiának zérus hőmérsékleten. (12 pont)

Szilárdtestfizika gyakorlat, pótzh 2.
2010. december 16.

1.feladat
Egy dimenziós szabad elektrongázt helyezzünk $V(x) = V_0(4cos^4(x\pi/a) + sin^2(x2\pi/a))$ alakú gyenge periodikus potenciálba.

a. Mekkora rácsperiodicitás? (3 pont)

b. Mekkorák lesznek a felhasadások a degenerációs pontokban? (7 pont)

c. Rajzold fel a diszperziós relációt a második degenerációs pontig! (4 pont)

d. (+3 pont) Mekkora lesz az effektív tömeg az első degenerációs pontban?

2.feladat
Cellánként egy atomot tartalmazó köbös rácsban, amiben minden atomnak csak egy s külső pályája van, vegyük figyelembe az első és másodszomszéd hoppingot, ami t_1 illetve t_2, ahol $|t_1| \gg |t_2|$.

a. Írd fel az elektronok diszperziós relációját! (5 pont)

b. Határozd meg az állapotsűrűség közelítő alakját a sáv tetejének a közelében? (5 pont)

c. Milyen lesz a Fermi felület majdnem teljesen betöltött sáv esetén? (4 pont)

d. (+3 pont) Milyen lesz a Fermi felület majdnem teljesen betöltött sáv esetén, ha $|t_1| = |t_2|$?

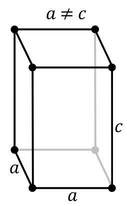
3.feladat
Három dimenziós szabad elektrongáz esetén add meg a Fermi hullámszám értékét az elektronok valós térbeli sűrűségének függvényében! (12 pont)

Szilárdtestfizika gyakorlat, 2. zh

2012. december 7.

1. feladat

Tekintsük egy háromdimenziós tetragonális rács elektron spektrumát közel szabad elektron közelítésben. A rácsállandókra $a < c$ teljesül.



a) Határozd meg az elemi rácsvektorokat és a reciprok rácsot! (3 pont)

b) A hullámszámtér origójában található rácspontot Γ-val jelöljük. Melyek a Γ-hoz legközelebb eső reciprok rácspontok a hullámszám térben? (2 pont)

c) Redukált zónaképben milyen energián találhatjuk meg a Γ ponthoz tartozó legalacsonyabb energiájú degenerált állapotokat? Hányszoros a degeneráció? (3 pont)

d) Mekkora a felhasadás ebben a pontban, ha bekapcsolunk egy gyenge rácsperiodikus potenciált, melynek helyfüggése az alábbiak szerint írható? (5 pont)

$$V(x, y, z) = V_a \left[1 + \cos\left(2\pi\frac{x}{a}\right) + \cos\left(2\pi\frac{y}{a}\right)\right]^2 + V_c \left[1 + \cos\left(2\pi\frac{z}{c}\right)\right]^2$$

Segítség: $\cos^2\alpha = (1 + \cos(2\alpha))/2$

2. feladat

Tekintsünk egy kétdimenziós szabályos háromszögrácsot, amelyben az elemi cella egyetlen atomot tartalmaz!

a) Határozd meg az elemi rácsvektorokat, a reciprok rácsot és az első Brillouin-zónát! (4 pont)

b) Számold ki a Brillouin-zóna két nem ekvivalens sarkának koordinátáit! (Két hullámszám akkor ekvivalens, ha különbségük egy reciprok rácsvektor.) (3 pont)

c) Számold ki az elektronok diszperziós relációját szoros kötésű közelítésben úgy, hogy csak első szomszéd átfedési integrálokat veszel figyelembe! (3 pont)

d) Ha a csatolás pozitív $t > 0$, akkor a sáv teteje a $\mathbf{k} = 0$ hullámszámnál van. Határozd meg az effektív tömegtenzort majdnem teljesen töltött sáv esetére! (3 pont)

Segítség: $\cos x \approx 1 - x^2/2$, ha x kicsi.

3. feladat

Adott egy kétdimenziós elektronrendszer, melyben a diszperziós reláció $\varepsilon(\mathbf{k}) = C|\mathbf{k}|^\gamma$, ahol $C > 0$ és $\gamma > 0$ hullámszámtól független paraméterek, valamint $|\mathbf{k}|$ a $\mathbf{k}$ vektor nagysága.

a) Határozd meg az energiafüggő állapotsűrűséget! (5 pont)

b) Számold ki, hogy hogyan függ a Fermi-energia az elektronok sűrűségétől! (5 pont)

c) Határozd meg az alacsony hőmérsékleti elektron fajhő sűrűségfüggését! (4 pont)

+) Hányszorosa a Fermi-energiának az egy részecskére jutó energia? (3 pont)

Szilárdtestfizika gyakorlat, 2. zh
2013. december 13.

1. feladat
Tekintsük egy kétdimenziós szabályos háromszögrács elektronjainak diszperziós relációját közel szabad elektron közelítésben! A rács rácsállandója a, így az elemi rácsvektorok $\mathbf{a_1} = a(1/2;\sqrt{3}/2)$ és $\mathbf{a_2} = a(-1/2;\sqrt{3}/2)$ szerint írhatók fel, az elemi reciprok rácsvektorok pedig $\mathbf{b}_1 = 2\pi/a(1;1/\sqrt{3})$ és $\mathbf{b}_2 = 2\pi/a(-1;1/\sqrt{3})$.

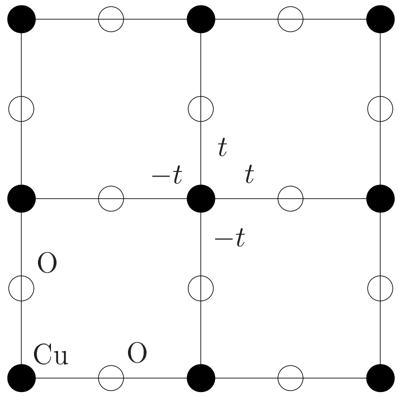
a) Ábrázold a reciprokrácsot és határozd meg az első Brillouin-zónát! A Brillouin-zóna közepét Γ-val, valamely sarkát K-val jelöljük. Határozd meg ezek Descartes koordinátáit! (3 pont)

b) Tekintsük először a szabad elektron spektrumot redukált zónaképben! Add meg a K pontban a legalacsonyabb energiájú nívó energiáját és degenerációjának fokát! (3 pont)

c) Milyen összefüggést tudsz felírni a gyenge rácsperiodikus potenciál Fourier komponenseire kihasználva a potenciál hatfogású forgatási és inverziós szimmetriáját? (4 pont)

d) Írd fel a K pontban a legalacsonyabb energiájú nívó felhasadását megadó mátrixot! (4 pont)

\+ Hogyan hasad fel ez a nívó? (3 pont)



2. feladat
A réz-oxid sík atomjai közti elsőszomszéd hopping integrál t és $-t$ az ábrán látható elrendezésben. Az oxigén atomok site energiáját tekinthetjük zérusnak, $\varepsilon_{\mathrm{O}} = 0$, míg a réz atomok site energiája $\varepsilon_{\mathrm{Cu}} > 0$. A rács rácsállandója a.

a) Mik az elemi rácsvektorok? Hány atomos az elemi cella? (2 pont)

b) Határozd meg az elektronok diszperziós relációját szoros kötésű közelítésben! Hány sávot kaptál? (6 pont)

c) Vázlatosan ábrázold a legalacsonyabb energiájú sávot a $k_y = 0$ és $k_x \in [-\pi/a;\pi/a]$ vonalon! (2 pont)

d) Határozd meg az effektív tömegtenzort a majdnem teljesen betöltött legalsó sávban! (3 pont)

Segítség: $\cos x \approx 1 - \frac{x^2}{2}$, ha x kicsi.

3. feladat

Egy tércentrált köbös rácsban az s pályán lévő elektronok diszperziós relációját szoros kötésű közelítésben számoljuk ki.

a) Határozd meg az elemi rácsvektorok Descartes koordinátáit! Hány atomos az elemi cella? (2 pont)

b) Számold ki az elektronok diszperziós relációját szoros kötésű közelítésben! Hány sávot kaptál? (4 pont)

c) Hogyan közelíthetjük a spektrumot alacsony energiákon? Izotróp-e a spektrum ebben a tartományban? (3 pont)

d) Hogyan függ az energiától az állapotsűrűség ebben az alacsony energiás tartományban? (4 pont)

\+ Hogyan függ a Fermi-energiától az elektronok fajhője kis betöltések esetén? (2 pont)

Szilárdtestfizika 2. pótzh. (2014. december 16.)

A zh összpontszáma 48 pont, de a maximálisan szerezhető pontszám 40. Minden feladatot be lehet adni.

Név: NEPTUN:

Pontszám: 1. 2. 3. 4. 5. Σ

1. Tekintsünk egy egydimenziós, L hosszúságú atomi láncot, melyben azonos atomok követik egymást a távolságra, $L \gg a$. Egyetlen atom potenciálja a Dirac-delta disztribúcióval jellemezhető:

$$V_{\text{atom}}(x) = -aV_0\delta(x).$$

a) Mi a feltétele annak, hogy ezen egydimenziós kristály elektronjait közel szabad elektron közelítésben illetve szoros kötésű közelítésben vizsgálhassuk? (2p)
b) Mi V_0 előjele és mértékegysége? Írjuk fel a kristály rácspotenciálját az atomi potenciál felhasználásával! (2p)

2. Tekintsük az 1.) feladatban szereplő kristályt *szoros kötésű* közelítésben. Az atomi hullámfüggvény $\varphi_{\text{atom}}(x) = Ae^{-\kappa|x|}$ alakú, melyhez $E_{\text{atom}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2$ energia tartozik.
a) Ha a szoros kötésű közelítés érvényes, mit mondhatunk az $a\kappa$ mennyiség nagyságáról? (1p)
b) A hullámfüggvény normáltságát kihasználva fejezzük ki A-t κ segítségével. Határozzuk meg a $\beta(\mathbf{0})$, $\beta(\delta)$, és $\alpha(\delta)$ mennyiségeket, majd ezek segítségével fejezzük ki a diszperziós relációt. Az a) feladat eredménye alapján vezető rendben mely tago(ka)t kell megtartanunk a diszperziós reláció kifejezésében? (7p)
c) Hol van a diszperziós reláció minimuma? Határozzuk meg a sáv szélességét! (2p)
d) A rácspotenciál egzakt megoldásából adódó diszperziós relációt az

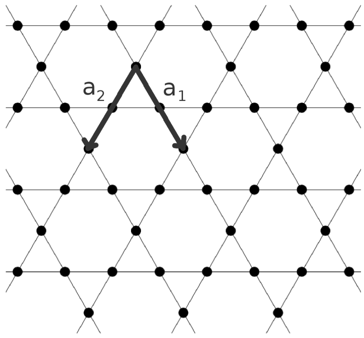
$$\epsilon(\Gamma) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Gamma^2,$$
$$\cos(ka) = \text{ch}(\Gamma a) - \frac{\kappa}{\Gamma}\text{sh}(\Gamma a)$$

egyenletek írják le kötött elektronállapot esetén. Feltételezzük, hogy a rácspotenciál elég erős, így az a) feladat eredménye továbbra is igaz. Ekkor $\Gamma a \gg 1$, amit kihasználva határozzuk meg a sáv szélességét és vessük össze a c) feladatban kapott eredménnyel! (4p)

3. Tekintsük az 1.) feladatban szereplő kristályt *közel szabad elektron* közelítésben.
a) Határozzuk meg a rácspotenciál Fourier-transzformáltját, számítsuk ki az összes nemnulla Fourier-komponenst! (3p)
b) Rajzoljuk fel a szabad elektron diszperziós relációját és jelöljük a legalacsonyabb energiájú degenerációs pontot a Brillouin-zóna szélén és közepén! (1p)
c) Mekkora lesz ezekben a pontokban a rácspotenciál miatt a diszperziós reláció felhasadása? Mekkora lesz a további, magasabb energiás degenerációs pontokban a felhasadás? (2p)

4. A Weyl-félfémek háromdimenziós anyagok, amelyekre az alacsony energiás gerjesztéseket leíró diszperziós reláció a grafénhez hasonlóan lineáris és izotróp, $\epsilon(\mathbf{k}) = \pm vk$ (ahol $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$). A továbbiakban csak a pozitív energiás ággal foglalkozunk.
a) Add meg az energiafüggő állapotsűrűséget ezekre a gerjesztésekre vonatkozóan! (4p)
b) Hogyan függ az elekronsűrűségtől a Fermi-energia? (3p)
c) Hogyan aránylik az egy elektronra jutó energia a Fermi-energiához? (3p)

d) Milyen lesz az alacsony energiás fajhő függése a hőmérséklettől és az elektronűrűségtől? (a prefaktor nem fontos) (2p)



5. Vizsgáld meg egy s atomi pályákból felépülő Kagome rács elektronszerkezetét szorosk\"otésű közelítésben, csak elsőszomszéd hopping tagokat (t) figyelembevéve!
a) Írd fel az elemi rácsvektorok Descartes koordinátáit, hány atomos az elemi cella? (1p)
b) Határozd meg az effektív Hamilton mátrixot szoroskötésű közelítésben! (5p)
c) Ha az on-site energiát 0-nak választjuk, a diszperziós reláció az alábbi alakú lesz:

$$\epsilon_1(k) = -2t$$
$$\epsilon_{2,3}(k) = t \pm t\sqrt{3 + 2\cos(k_x a) + 4\cos(\frac{1}{2}k_x a)\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a)}.$$

Add meg kvadratikus rendig a legalsó sáv diszperziós relációját alacsony energiákon! (3p)
d) Határozd meg az effektív tömeg tenzort alacsony energiákon! (3p)