

## Szilárdtest-fizika gyakorlat, házi feladatok, 2014. ősz

### 1. házi feladat, 2. gyakorlat

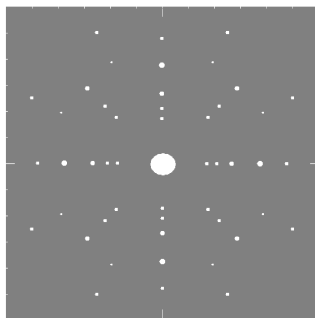
Szabályos háromszögrács esetén add meg az elemi rácsvektorokat, az általuk meghatározott elemi cellát és a Wigner-Seitz cellát! Add meg a reciprok rács elemi rácsvektorait és mondd meg, milyen rácsot határoznak meg! Számold ki a direkt rács és a reciprok rács Wigner-Seitz cellájának területét! Megoldásodat grafikusán is szemléltesd!

### 2. házi feladat, 3. gyakorlat

Tekintsünk egy tetragonális rácsot, ahol  $\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_3$  és  $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| \neq |\mathbf{a}_3|$ . A rács bázisa legyen egyatomos. A Neumann-elv segítségével és a kristály szimmetriáinak ismeretében határozzuk meg, hogy hány független eleme van a vezetőképesség tenzornak!

### 3. házi feladat, 3. gyakorlat

Az ábrán egy egyatomos bázisú kristály Laue szórási képét látjuk. Ezen kívül tudjuk, hogy van még két merőleges irány, melyből felvéve a szórási kép ezzel megegyezik. Ezen szimmetriák alapján add meg milyen rácsról van szó! Sorold föl a kristály összes térbeli szimmetriáját! A Neumann-elv segítségével mutasd meg, hogy a dielektromos tenzor az egységtenzor skalárszorosa!



1. ábra. Laue szórási kép

### 4. házi feladat, 3. gyakorlat

Soroljuk be a 10 kétdimenziós pontcsoportot az 5 kristályosztályba!

### 5. házi feladat, 4. gyakorlat

Tekintsük azt a lapcentrálalt köbös rácsot, melynek minden rácspontjában egy  $C_{60}$  (fullerén) molekula helyezkedik el.

- Számítsd ki a  $C_{60}$  molekula atomi szórási tényezőjét ( $f(\Delta\mathbf{k})$ ), feltételezve, hogy a fullerén teljesen gömb alakú és az elektronok a fullerén labda felületén egyenletes töltéssűrűséggel helyezkednek el. (Minden szénatomnak 6 elektronja van, a fullerén labda sugara 0,35 nm.)
- Határozd meg a reciprok rácsot! Becsüld meg, hogy hány Bragg-csúcsot láthatunk a szórási képen, ha figyelembe vesszük az atomi szórási tényezőt is és a rácsállandó 1,4 nm?

### 6. házi feladat, 4. gyakorlat

Tekintsük a 2.b) ábrán látható kagome-rácsot! Mi a Bravais rács és hány atomból áll a bázis? Számold ki a rugalmas röntgenszórás szerkezeti tényezőjét, ha az atomi szórási tényező  $f$ . Okoz-e a szerkezeti tényező kioltást, azaz tiltott reflexiót valamely reciprokrács-vektor esetén!

### 7. házi feladat, 4. gyakorlat

Az  $A$  típusú atomokból álló négyzetrács esetén a négyzetek középpontjába helyezzünk  $B$  típusú atomokat. (Ekkor az  $A$  és  $B$  atomok külön-külön egymáshoz képest eltolt négyzetrácsot alkotnak.  $A = B$  esetén centrált négyzetrácsot jutunk.) Hány atomból áll a bázis? Számold ki a rugalmas röntgenszórás szerkezeti tényezőjét, ha az atomi szórási tényező a kétféle atomra  $f_A$  és  $f_B$ . Határozd meg, hogy milyen  $f_A/f_B$  aránynál okoz a szerkezeti tényező kioltást, azaz tiltott reflexiót valamely reciprokrács-vektor esetén! Mi ennek a magyarázata?

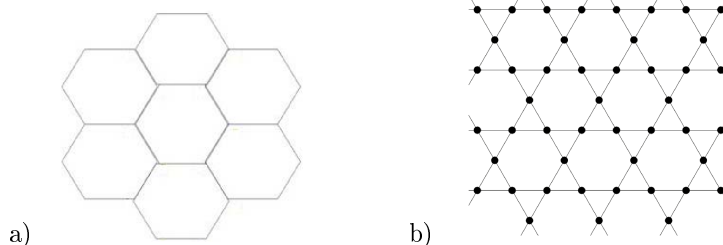
### 8. házi feladat, 4. gyakorlat

A  $\text{CuO}_2$  sík olyan szerkezet, ahol a Cu atomok egyszerű négyzetrácsot alkotnak és az O atomok a szomszédos Cu atomokat összekötő szakaszok felezőpontjában találhatók. Hány atomból áll a bázis? Számold ki a rugalmas röntgenszórás szerkezeti tényezőjét, ha az atomi szórási tényező a kétféle atomra  $f_{\text{Cu}}$  és  $f_{\text{O}}$ . Határozd meg, hogy milyen  $f_{\text{Cu}}/f_{\text{O}}$  aránynál okoz a szerkezeti tényező kioltást, azaz tiltott reflexiót valamely reciprokrács-vektor esetén!

### 9. házi feladat, 6. gyakorlat

Vizsgáljuk a hatszöges grafit síkra merőleges kitéréseihez tartozó fononmódusait a megfeszített rugós modellben.

- Határozd meg a bázist és az elemi rácsvektorokat! Hány atomból áll az elemi cella? Számítsd ki a reciprokrács elemi rácsvektorait! Hány darab és milyen fononmódus(ok) van(nak) a rendszerben?
- Írd fel a bázisatomok mozgásegyenletét Fourier-térben általános  $\mathbf{q}$  hullámszámvektorra!
- Határozd meg a fononmódusok frekvenciáit és a hozzájuk tartozó atomi elmozdulás vektorokat  $\mathbf{q} = 0$ -ra!
- Mutasd meg, hogy létezik olyan fononmódus, ahol csak az atomok fele végez rezgést! Mekkora az ehhez tartozó fononfrekvencia és mekkorák az egyes atomok elmozdulásvektorai?



2. ábra. Grafit sík és kagome-rács.

### 10. házi feladat, 6. gyakorlat

Adott egy szabályos háromszög csúcsain három egyforma  $m$  tömegű atom, melyeket  $k$  rugóállandójú,  $F_0$  előfeszítettségű rugók kötnek össze. Számold ki a síkra merőleges rezgések sajátfrekvenciáját! Ezek után tekintsd a fenti ábrán látható Kagome rácsot, síkra merőleges kitérések esetén számítsd ki a fonon spektrumot  $q \rightarrow 0$  esetben! Milyen hasonlóságot veszel észre a háromszög és a Kagome rács rezgései között?

### 11. házi feladat, 6. gyakorlat

Egy egydimenziós lánc felváltva elhelyezkedő A és B típusú atomokból áll, melyeket  $k_1$  rugóállandójú,  $F_0$  előfeszítésű rugó köt össze. Ezen kívül minden legközelebbi B típusú atom pár másodsomszéd  $k_2$  rugóállandójú rugóval van összecsatolva.

- Írd fel a mozgásegyenleteket, a láncirányba, illetve az arra merőleges irányban.
- Határozd meg a diszperziós relációt  $k_2 = k_1/2$  esetén. Hogyan értelmezhető egyszerűen a láncra merőleges esetben kapott eredmény?

### 12. házi feladat, 6. gyakorlat

Határozzuk meg, hogy az alábbi integrálok közül melyek divergensnek a  $d = 1, 2, 3$  esetekben. A képletben  $\beta > 0$ .

$$\int_0^{\omega_D} \omega^{d-2} d\omega \quad \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^{d-2}}{e^{\beta\omega} - 1} d\omega.$$

### 13. házi feladat, 7. gyakorlat

Mutasd meg, hogy egy 2-dimenziós izotróp rendszerben az alacsony hőmérsékletű fonon fajhő  $T^2$  szerint változik!

### 14. házi feladat, 9. gyakorlat

Tekintsünk egy  $L$  hosszúságú, egydimenziós rácsban lévő elektronokat kvázi-szabad elektron közelítésben. Az atomi potenciált közelítsük egy négyszögjel alakú potenciállal. Határozzuk meg a sávok között kialakuló tiltott sávok szélességét!

### 15. házi feladat, 9. gyakorlat

Tekintsünk egy  $L$  hosszúságú, egydimenziós rácsban lévő elektronokat kvázi-szabad elektron közelítésben. A rácsatomok hatását közelítsük a következő periodikus potenciállal.

$$V(x) = V_0 \cdot \cos^3\left(4\pi \frac{x}{a}\right)$$

- Mekkora a rácsállandó?
- Határozzuk meg a sávok között kialakuló tilos sávok szélességét!
- Mennyivel változik meg az alapállapot energiája ezen potenciál hatására?

### 16. házi feladat, 10. gyakorlat

Tekintsük az  $a$  rácsállandójú szabályos négyzetrácsot!

- Rajzold fel a szabad elektronok sáv szerkezetét a  $\Gamma(0,0) - X(\pi/a,0) - M(\pi/a,\pi/a) - \Gamma(0,0)$  vonal mentén a  $0 \leq \varepsilon \leq 7\hbar^2\pi^2/2ma^2$  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 reciprokrácsvektorokkal!
  - Vizsgáld meg, hogy a  $\Gamma$  pontban  $\varepsilon = 4\hbar^2\pi^2/2ma^2$ -nél kialakuló degeneráció hogyan hasad fel, ha a periodikus potenciálnak csak az  $\tilde{U}(2\pi/a,0) = \tilde{U}(-2\pi/a,0) = \tilde{U}(0,2\pi/a) = \tilde{U}(0,-2\pi/a) \triangleq U_1$  és a  $\tilde{U}(4\pi/a,0) = \tilde{U}(-4\pi/a,0) = \tilde{U}(0,4\pi/a) = \tilde{U}(0,-4\pi/a) \triangleq U_2$  Fourier komponensei nem zérusok! Számold ki az energia felhasadások nagyságát és határozd meg a sajátállapotokat is!
- + Vizsgáld meg a felhasadásokat a  $\Gamma - X - M - \Gamma$  vonal mentén, ha továbbra is csak a fenti  $U_1$  és  $U_2$  Fourier együtthatók különböznek nullától!

**17. házi feladat, 11. gyakorlat**

Tekintsünk egy egydimenziós rácsot szoros kötésű közelítésben. Az atomok potenciálját közelítsük Dirac-delta potenciállal.

- a) Határozzuk meg az atomi hullámfüggvény alakját!
- b) Határozzuk meg az elektronok diszperziós relációját!

**18. házi feladat, 11. gyakorlat**

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! Add meg a elektron sáv szerkezetet tight-binding - azaz szoros-kötésű - közelítésben másodsomszédig bezárólag!
- b) Határozd meg az elemi reciprokrácsvektorokat! Milyen rácsot definiálnak? 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 sáv szélesség?

**19. házi feladat, 12. gyakorlat**

Tekintsünk egy háromdimenziós egyszerű köbös rácsot  $s$  atomi nívókkal, ahol az elektron sáv szerkezet kis betöltésre a  $\Gamma$  pont közelében  $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 - 6|t| + |t|(ak)^2$ ;  $t$  az elsőszomszéd átfedési integrál,  $a$  a rácsállandó, valamint  $\varepsilon_0$  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!