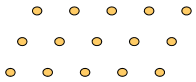
1. Kristályrács definíciója. Reciprok-rács, kristálysíkok, Miller-index. Szimmetriaműveletek, kristályrendszerek, Bravais-rácsok.

$$\boxed{\text{Kristály} = \text{rács} + \text{bázis}}$$

$$\mathbf{R_n} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

Kristály: diszkrét transzlációs szimmetriát mutató szilárd test

Kristályrács: a tér egy pontjából a szimmetriaműveletekkel generált pontok halmaza (matematikai absztrakció)

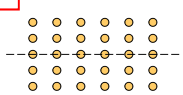


$$\underline{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{pmatrix}$$

Bázis: a legkisebb atomcsoport, amin a szimmetria-műveletek végrehajtásával a kristály előállítható

$$\boxed{\text{Kristályszerkezet} = \text{Bravais rács szimmetriák} \otimes \text{bázis szimmetriák}}$$

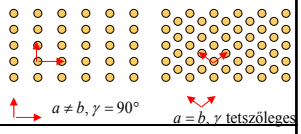
Kristályrendszer: eltolás + 1 definiáló szimmetria (számuk megegyezik a lehetséges pontcsoportok számával)



tükrözés

derékszögű kristályrendszer

Bravais rácsok: a kristályrendszer elemei – osztályzás szögek és élhosszak szerint (azonos kristályrendszerben is lehetnek eltérő Bravais rácsok)
A gömbszimmetrikus bázis tércsoport szimmetriái.



Tércsoport: az összes szimmetriműveletek halmaza (ennek része a pontcsoport)

73 szimmomorf tércsoport
+ 157 nem szimmomorf tércsoport
230
(3 dimenzióban)

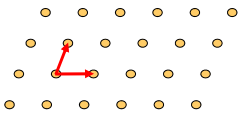
Rács: a bázisvektorok által definiált szerkezet

$$\mathbf{R_n} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

$$\underline{\mathbf{A}} = (\mathbf{a}_1\ \mathbf{a}_2\ \mathbf{a}_3) = \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{pmatrix}$$

az elemi cella térfogata

$$\det \underline{\mathbf{A}} = \Delta$$



bázisvektorok komponenseiből képzett mátrix

Rácsvektorok:

$$\mathbf{R_n} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 = \sum_{i=1}^{3} n_i\mathbf{a}_i = \underline{\mathbf{A}}\mathbf{n}$$

ahol $\mathbf{n} = \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix}$ egész számokból képzett vektor

Reciprok rács: az $\underline{\mathbf{A}}$ inverze által definiált rács

$$\underline{\mathbf{B}} = 2\pi\underline{\mathbf{A}}^{-1} \rightarrow \underline{\mathbf{A}}\underline{\mathbf{B}} = \underline{\mathbf{B}}\underline{\mathbf{A}} = 2\pi\underline{\mathbf{I}}$$

$$\underline{\mathbf{B}} = 2\pi\underline{\mathbf{A}}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{1x} & b_{1y} & b_{1z} \\ b_{2x} & b_{2y} & b_{2z} \\ b_{3x} & b_{3y} & b_{3z} \end{pmatrix}$$

a reciprok rács bázisvektorai

a reciprok rács elemi cellájának térfogata

$$\det \underline{\mathbf{B}} = \frac{(2\pi)^3}{\det \underline{\mathbf{A}}} = \frac{(2\pi)^3}{\Delta} = \Delta_r$$

A reciprok rács rácsvektorai:

$$\mathbf{G_h} = h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3 = \sum_{i=1}^{3} h_i\mathbf{b}_i = \mathbf{h}\underline{\mathbf{B}}$$

ahol $\mathbf{h} = (h_1\ h_2\ h_3)$

Tulajdonságok

$$b_{ix}a_{jx} + b_{iy}a_{jy} + b_{iz}a_{jz} = 2\pi\delta_{ij}$$

$$\mathbf{b}_i\mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

$\mathbf{b}_1$ merőleges $\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ síkjára
$\mathbf{b}_2$ merőleges $\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1$ síkjára
$\mathbf{b}_3$ merőleges $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ síkjára

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\det \underline{\mathbf{A}}}$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\Delta}$$

$$\boxed{e^{i\underline{\mathbf{G}}_\mathbf{h}\underline{\mathbf{R}}_\mathbf{n}} = 1}$$

ugyanis tetszőleges h és n számhármasra

$$e^{i2\pi(n_1h_1+0+0\ \ +0+n_2h_2+0\ \ +0+0+n_3h_3)} = e^{i2\pi m}$$

egész szám

Kristályok szimmetriái

Szimmetriaoperációk: pontcsoport, tércsoport
- pont → pont transzformáció
- távolságok, szögek nem változnak (merev)

Schoenflies jelölés	Nemzetközi jelölés	Szimmetriaművelet	
C_n	n	$\frac{2\pi}{n}$ forgatás	C_3, C_3^2, C_2' $\quad 3$
σ_h $\quad \sigma_{nh} = C_n\sigma_h$	n/m	főtengelyre merőleges síkra tükrözés	σ_h $\quad 3/m$
σ_v $\quad \sigma_{nv} = C_n\sigma_v$	nm	főtengelyt tartalmazó síkra tükrözés	$3m$
$S_n = \sigma_{nv} = \sigma_h C_n$	$\bar{n}$	forgatva tükrözés	S_3 $\quad \bar{3}$

pontcsoport műveletek

legalább egy pont helyben marad (nincs transzlációs szimmetria felhasználva)

szimmomorf műveletek

tércsoport műveletek

a kristály összes szimmetria-műveletei (tartalmazzák a pontcsoport elemeit is)

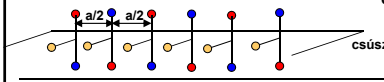
nem szimmomorf műveletek

olyan szimmetriaműveletek, melyek a rácsnak nem szimmetriái, de a végtelen kristálynak már igen (a transzformált bázis részben átfed önmagával)

Kristály – diszkrét transzlációs szimmetria

(A diszkrét transzlációs szimmetria csak n=2,3,4 és 6 fogású forgási szimmetriát enged meg)

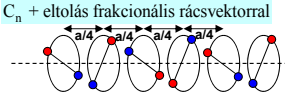
σ + eltolás frakcionális rácsvektorral



csúszósík

csúszva tükrözés $\sigma + T_{a/2}$

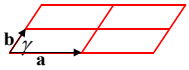
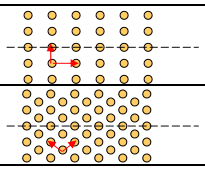
C_n + eltolás frakcionális rácsvektorral



forgástengely

csavarva forgatás $C_4 + T_{a/4}$

Kétdimenziós kristályrendszerek

Definiáló szimmetria		Kristályrendszer (4 db)		Bravai rács (5 db)	
C_2	Nem jelent megszorítást	ferdeszögű		$\lvert\mathbf{a}\rvert \neq \lvert\mathbf{b}\rvert$ $\gamma = tetszőleges$	
C_3	$C_3\mathbf{a} = \mathbf{b}$ Két-dimenzióban $C_3 = C_6$ mivel a + b is rácsvektor	hexagonális		$\lvert\mathbf{a}\rvert = \lvert\mathbf{b}\rvert$ $\gamma = 120°$ (60°)	
C_4	$C_4\mathbf{a} = \mathbf{b}$	négyzetes		$\lvert\mathbf{a}\rvert = \lvert\mathbf{b}\rvert$ $\gamma = 90°$	
σ	tükörsík	derékszögű		$\lvert\mathbf{a}\rvert \neq \lvert\mathbf{b}\rvert$ $\gamma = 90°$	primitív
				$\lvert\mathbf{a}\rvert = \lvert\mathbf{b}\rvert$ $\gamma = tetszőleges$	centrált

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_x \\ b_y \end{pmatrix}$$

$$\sigma\mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_x \\ -b_y \end{pmatrix} = n\mathbf{a} + m\mathbf{b} = \begin{pmatrix} na_x + mb_x \\ mb_y \end{pmatrix} \longrightarrow m = -1$$

$$b_x = na_x - b_x \qquad b_x = \frac{n}{2}a$$

n páros → primitív

n páratlan → centrált

Bravais cella

nem elemi cella, de tükrözi a kristály szimmetriáját

Kétdimenziós tércsoportok

Bázis szimmetriái

	C_1	C_2	C_3	C_4	C_6	
$\varnothing$	1	2	3	4	6	nincs tükörszimmetria
σ	1m	2m 2mm	3m	4m 4mm	6m 6mm	van tükörszimmetria

2 dimenziós kristály szimmetriái

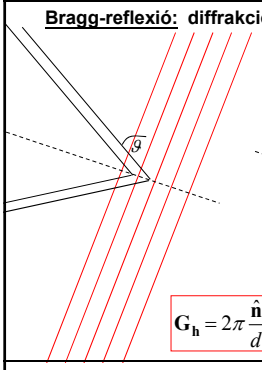
	Bravais rács	bázis pontcsoport	tércsoport (nem 5x10, hanem csak 17)	
ferdeszögű		1	P1	csak transzlációs
		2	P2	C_2 szimmetria
derékszögű		1	P1	a bázis elrontja a rács szimmetriáját
		1m	P1m	primitív + 1 tükörszimmetria
			C1m	centrált + 1 tükörszimmetria
		2m	P2mm	primitív + 2 tükörszimmetria
			C2mm	centrált + 2 tükörszimmetria

derékszögű → primitív → 1 tükörsík, 2 tükörsík; centrált → 1 tükörsík, 2 tükörsík

rács pontcsoport 4db — Bravais rács 5 db — tércsoport 17 db

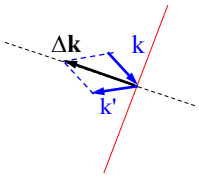
2. Diffrakció elmélete. Szerkezeti tényező, atomi szórási tényező. Röntgen-, elektron- és neutron-szórási kísérletek.

Bragg-reflexió: diffrakció kristálysíkokon



$$\mathbf{G_h} = 2\pi \frac{\hat{\mathbf{n}}}{d}$$

rugalmas szórás



$$\Delta\vec{\mathbf{k}} = \vec{\mathbf{k}}' - \vec{\mathbf{k}}$$

$$\Delta\vec{\mathbf{k}} \parallel \hat{\mathbf{n}}$$

merőleges a kristálysíkra

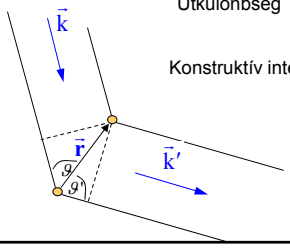
$$|\Delta\vec{\mathbf{k}}| = 2|\vec{\mathbf{k}}|\sin\vartheta \qquad \lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|}$$

$$|\Delta\mathbf{k}| = 2\frac{2\pi}{\lambda}\frac{\lambda}{2d} = \frac{2\pi}{d}$$

$$\Delta\vec{\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{d}\hat{\mathbf{n}} = \boxed{\vec{\mathbf{G}}}$$ reciprok rácsvektor

A rugalmas szórás a rácsot a reciprok rácsra képezi le

Laue-féle leírás:
szórás rácspontokon



Útkülönbség $|\vec{\mathbf{r}}|\cos\vartheta + |\vec{\mathbf{r}}|\cos\vartheta' = -\frac{\vec{\mathbf{r}}\vec{\mathbf{k}}}{|\vec{\mathbf{k}}|} + \frac{\vec{\mathbf{r}}\vec{\mathbf{k}}'}{|\vec{\mathbf{k}}'|} = \frac{\lambda}{2\pi}\vec{\mathbf{r}}\Delta\vec{\mathbf{k}}$

Konstruktív interferencia, ha $\frac{\lambda}{2\pi}\vec{\mathbf{r}}\Delta\vec{\mathbf{k}} = m\lambda$ azaz, ha a fáziskülönbség $\vec{\mathbf{r}}\Delta\vec{\mathbf{k}} = 2\pi\, m$

A szórócentrumok a rácspontok, ha tehát az $\vec{\mathbf{R}}$ rácsvektorok halmazára teljesül, hogy $\vec{\mathbf{R}}\Delta\vec{\mathbf{k}} = 2\pi\, m$, akkor erősítés lép fel

$$e^{i\vec{\mathbf{R}}\vec{\mathbf{G}}} \equiv 1$$

tetszőleges reciprok rácsvektor kielégíti a feltételt

Hullámok szuperpozíciója a kristály elektronjain történő szóráskor (Röntgen- és elektron-diffrakció)

$$A(\Delta\mathbf{k}) = \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i(\Delta\mathbf{k})\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}$$

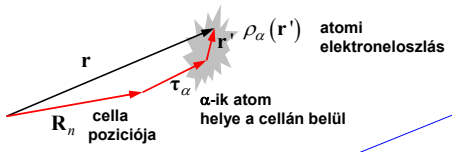
elektronsűrűség

Szórás a bázisokat alkotó atomokon

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_n,\alpha} \rho_\alpha(\mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{R}_n,\alpha} \rho_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \tau_\alpha)$$

Kihasználva a kristály periódikus szerkezetét elegendő az elemi cella töltéseloszlását ismerni

$$A(\Delta\mathbf{k}) = \int_V \sum_{\mathbf{R}_n,\alpha} \rho_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \tau_\alpha) e^{i(\Delta\mathbf{k})\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}$$



helyettesítés $\mathbf{r} \to \mathbf{r}' + \mathbf{R}_n + \tau_\alpha$

$$A(\Delta\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}_n,\alpha} \int \rho_\alpha(\mathbf{r}') e^{i(\Delta\mathbf{k})(\mathbf{r}'+\mathbf{R}_n+\tau_\alpha)} d^3\mathbf{r}' = \underbrace{\sum_{\mathbf{R}_n} e^{i(\Delta\mathbf{k})\mathbf{R}_n}}_{N\sum_{\mathbf{G}} \delta_{\Delta\mathbf{k},\mathbf{G}}} \underbrace{\sum_\alpha e^{i(\Delta\mathbf{k})\tau_\alpha} \underbrace{\int \rho_\alpha(\mathbf{r}') e^{i(\Delta\mathbf{k})\mathbf{r}'} d^3\mathbf{r}'}_{\text{atomi szórási tényező: } f_\alpha(\Delta\mathbf{k})}}_{\text{szerkezeti tényező: } S(\Delta\mathbf{k}) = \sum_\alpha e^{i(\Delta\mathbf{k})\tau_\alpha} f_\alpha(\Delta\mathbf{k})}$$

rácsösszeg (Bragg-törvény)

$$A(\Delta\mathbf{k}) = N \sum_{\mathbf{G}} S(\Delta\mathbf{k}) \delta_{\Delta\mathbf{k},\mathbf{G}}$$

$$\boxed{I(\Delta\mathbf{k}) = N^2 \sum_{\mathbf{G}} |S(\Delta\mathbf{k})|^2 \delta_{\Delta\mathbf{k},\mathbf{G}}}$$

Atomi szórási tényező, $f_\alpha(\Delta\mathbf{k})$

$$I(\Delta\mathbf{k}) = N^2 \sum_{\mathbf{G}} |S(\Delta\mathbf{k})|^2 \delta_{\Delta\mathbf{k},\mathbf{G}}$$

$$S(\mathbf{G}) = \sum_\alpha e^{i\mathbf{G}\tau_\alpha} f_\alpha(\mathbf{G})$$

Röntgen-diffrakció:

$$\left.\begin{array}{l} \lambda \approx a \\ E = h\nu = h\dfrac{c}{\lambda} \end{array}\right\} \lambda(A) = \frac{12.4}{E(keV)}$$

$f \propto Z$

szórás elektronfelhőn, magas rendszámú elemek látszanak

Neutron-diffrakció:

termikus neutronok (25 meV)

$$E = \frac{p^2}{2M_n}, \quad |\mathbf{p}| = \hbar|\mathbf{k}| = \frac{h}{\lambda}$$

$$\lambda(A) = \frac{0.28}{\sqrt{E(eV)}}$$

szórás magon
nincs szisztematikus Z-függés

$f(\Delta\mathbf{k}) = f$ lehet negatív is - kontrasztképzés

$$\langle p_A f_A + p_B f_B \rangle = \langle f \rangle$$

neutron spin – mágneses szerkezetmeghatározás

Elektron-diffrakció:

$$E = \frac{p^2}{2m_e}, \quad |\mathbf{p}| = \hbar|\mathbf{k}| = \frac{h}{\lambda}$$

$$\lambda(A) = \frac{12}{\sqrt{E(eV)}}$$

erős kölcsönhatás – felületi szórás

FELÜLETFIZIKA

150 eV

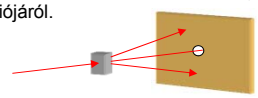
helyette tipikusan 10– 100 keV

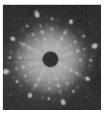
elektromos és mágneses lencsék

Laue-módszer:

A konstruktív interferencia feltétele: $\Delta k' = k' - k = G_{hkl}$

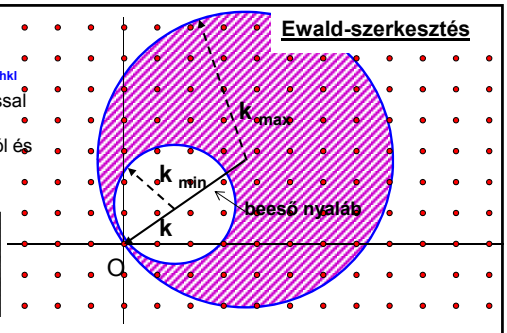
A Laue módszer széles hullámszám-tartományú forrással egykristályon végzett szóráskísérlet, mely közvetlen információt ad a kristály szimmetriájáról és orientációjáról.





A „fehér" (nem monokromatikus) nyaláb hullámszáma a $|k_{min}| = 2\pi/\lambda_{max}$ és a $|k_{max}| = 2\pi/\lambda_{min}$ tartományban változik, a kristályhoz viszonyított iránya k.

Ewald-szerkesztés

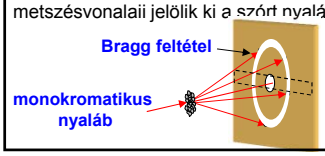


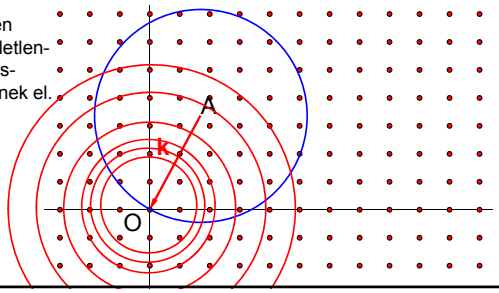
A lilával vonalkázott tartományban elhelyezkedő valamennyi reciprokrács pontra található olyan $|k|=2\pi/\lambda$ hullámszámú beeső nyaláb, hogy az adott irányban teljesüljön a diffrakció feltétele.

Debye-Scherrer módszer

Pormintában (vagy polikristályos mintában) minden kristálytani irány előfordul. Az egyes szemcsék véletlenszerű orientációjának megfelelően az reciprok rácspontok az origó körüli gömbfelületeken helyezkednek el.

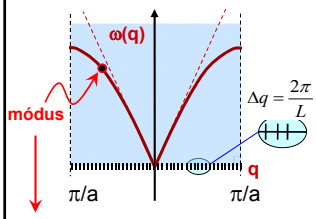
A piros **gömbfelületek** és az Ewald **gömb** metszésvonalai jelölik ki a szórt nyaláb irányát.





3. Rácsrezgések diszperziós relációja. A dinamikus mátrix sajátérték-egyenlete. Akusztikus és optikai ágak. A diszperziós reláció kísérleti meghatározása.

Diszperziós reláció



rezgési állapot, melyet a q hullámhossz és az ω frekvencia jellemez

Fononok

$\vec{q}$ **hullámszámú,** $\hbar\vec{q}$ **impulzusú,** $\hbar\omega(\vec{q})$ **energiájú kvázirészecskék**

Fononok detektálása, $\omega(\vec{q})$ **mérése: rugalmatlan neutronszórás**

$\vec{p}$ **impulzusú neutron bejön, felvesz** $\hbar\omega(\vec{q})$ **energiát, majd** $\vec{p}'$ **impulzussal kimegy. Energia+(kvázi)impulzusmegmaradás:**

$$\frac{p'^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \pm \hbar\omega\left(\vec{p}' - \vec{p} \pm \hbar\vec{G}\right)$$

Állapotsűrűség

N(q) és g(ω) definiciója:
a lehetséges módusok száma a q és q+dq illetve az ω és ω+dω tartományban.

Born-Kármán periódikus határfeltétel

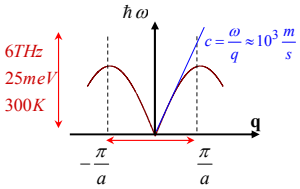
$$u(x,t) = u(x+L,t) \longrightarrow \Delta q = \frac{2\pi}{L}$$

3 dimenzió: $N(q) = \frac{V}{(2\pi)^3}$

1 dimenzió: $N(q) = \frac{L}{2\pi}$

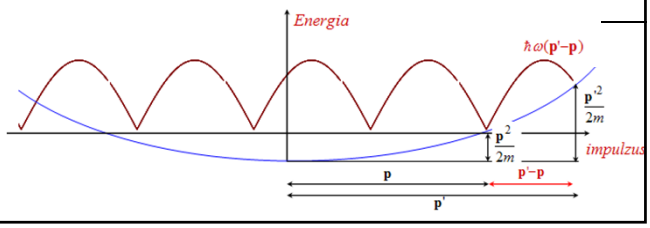
$$g(\omega) = N(q)\left(\frac{d\omega}{dq}\right)^{-1}$$

energia- és hullámszám-skála



$$(1A)^{-1} = \left(10^{-10} m\right)^{-1} = 10^8 cm^{-1}$$

grafikus megoldás



3-dimenziós, egyatomos kristály

$$E_{harm} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \mathbf{u}(\mathbf{R})\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')\mathbf{u}(\mathbf{R}')$$

Mozgásegyenlet

$$M\frac{d^2u_\mu(\mathbf{R})}{dt^2} = -\frac{\partial E_{harm}}{\partial u_\mu(\mathbf{R})} = -\sum_{\mathbf{R}',\nu} D_{\mu,\nu}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')u_\nu(\mathbf{R}')$$

$$\boxed{M\frac{d^2\mathbf{u}(\mathbf{R})}{dt^2} = -\sum_{\mathbf{R}'}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')\mathbf{u}(\mathbf{R}')}$$

Síkhullám próbafüggvény

$$\mathbf{u}(\mathbf{R},t) = \underline{\boldsymbol{\varepsilon}}\, e^{i(\mathbf{qR}-\omega t)}$$

$$\sum_{\mathbf{R}'}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')\mathbf{u}(\mathbf{R}') = \sum_{\mathbf{R}''}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}'')\mathbf{u}(\mathbf{R}-\mathbf{R}'') = e^{i(\mathbf{qR}-\omega t)}\underbrace{\sum_{\mathbf{R}''}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}'')e^{-i\mathbf{qR}''}}_{\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{q})}\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

$$\boxed{M\omega^2\underline{\boldsymbol{\varepsilon}} = \underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{q})\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}$$

$$\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{R}}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R})e^{-i\mathbf{qR}} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{R}}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R})\left[e^{-i\mathbf{qR}} + e^{i\mathbf{qR}} - 2\right] = 2\sum_{\mathbf{R}}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R})\sin^2\left(\frac{1}{2}\mathbf{qR}\right)$$

felhasználtuk hogy: $\boxed{\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}) = \underline{\underline{\mathbf{D}}}(-\mathbf{R})}$ $\boxed{\sum_{\mathbf{R}}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}) = 0}$

Mivel $\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{q})$ **szimmetrikus és valós**

$$\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{q})\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_s(\mathbf{q}) = \lambda_s(\mathbf{q})\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_s(\mathbf{q})$$

$\boxed{\mathbf{q}}$ **terjedési irány,** $\boxed{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_s}$ **polarizáció**

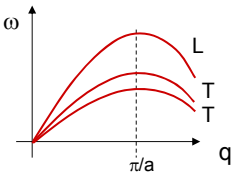
$$\boxed{\omega_s(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{\lambda_s(\mathbf{q})}{M}}}$$

$$\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_s(\mathbf{q})\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_{s'}(\mathbf{q}) = \delta_{s,s'}$$

Izotróp anyagban minden $\boxed{\mathbf{q}}$ **-hoz lehet olyan polarizációt választani, hogy**

$\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_1$ **párhuzamos legyen q-val (longitudinális hullám)**

$\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_2, \underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_3$ **merőleges legyen q-ra (transzverzális hullám)**



3N csatolt oszcillátor (kvantummechanika)

$$\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{R}}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R})e^{-i\mathbf{qR}}$$

$$\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{q})\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_s(\mathbf{q}) = \lambda_s(\mathbf{q})\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_s(\mathbf{q})$$

$$\boxed{\omega_s(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{\lambda_s(\mathbf{q})}{M}}}$$

terjedési irány $\boxed{\mathbf{q}}$

$N = N_x N_y N_z$ **db. q érték**

polarizáció $\boxed{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_s}$

$$\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_s(\mathbf{q})\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_{s'}(\mathbf{q}) = \delta_{s,s'} \quad , s = 1, 2, 3$$

Hamilton operátor

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2M}\sum_{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{R})^2 + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{R})\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{R}')}$$

Normál koordináták

$$\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{R})e^{-i\mathbf{qR}}$$

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{R})e^{-i\mathbf{qR}}$$

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2M}\sum_{\mathbf{q}}\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{q})\hat{\mathbf{P}}(-\mathbf{q}) + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q})\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{q})\hat{\mathbf{u}}(-\mathbf{q})}$$

$$\frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}\left(\sum_{\mathbf{q}}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q})e^{i\mathbf{qR}}\right)\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')\left(\sum_{\mathbf{q}'}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q}')e^{i\mathbf{q}'\mathbf{R}'}\right) = \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}\sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\mathbf{R}}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q})\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')e^{i\mathbf{q}'(\mathbf{R}'-\mathbf{R})}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q}') =$$

$$\frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}\sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}''}e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\mathbf{R}}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q})\underline{\underline{\mathbf{D}}}(-\mathbf{R}'')e^{i\mathbf{q}'\mathbf{R}''}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q}') = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}\sum_{\mathbf{R}''}\delta_{G-\mathbf{q},\mathbf{q}'}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q})\underline{\underline{\mathbf{D}}}(-\mathbf{R}'')e^{i\mathbf{q}'\mathbf{R}''}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q}') = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q})\left(\sum_{\mathbf{R}''}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(-\mathbf{R}'')e^{-i\mathbf{qR}''}\right)\hat{\mathbf{u}}(-\mathbf{q})$$

A $\boxed{\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{q})\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_s(\mathbf{q}) = \lambda_s(\mathbf{q})\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_s(\mathbf{q})}$ **sajátérték egyenlet megoldásának ismeretében:**

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2M}\sum_{\mathbf{q}}\left|\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{q})\right|^2 + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}}\lambda_s(\mathbf{q})\left|\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q})\right|^2}$$

3N független oszcillátor (kvantummechanika)

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\sum_{\mathbf{q}}\left|\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{q})\right|^2 + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}}\lambda_s(\mathbf{q})\left|\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q})\right|^2$$

$$\hat{a}_{\mathbf{q},s}^{\ +} = \boldsymbol{\varepsilon}_s\sqrt{\frac{M\omega(\mathbf{q})}{2\hbar}}\left(\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q}) - i\frac{\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{q})}{M\omega_s(\mathbf{q})}\right)$$

$$\hat{a}_{\mathbf{q},s} = \boldsymbol{\varepsilon}_s\sqrt{\frac{M\omega(\mathbf{q})}{2\hbar}}\left(\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q}) + i\frac{\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{q})}{M\omega_s(\mathbf{q})}\right)$$

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{q},s}\hbar\omega_s(\mathbf{q})\left(\hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{q},s}^{+}\mathbf{a}_{\mathbf{q},s} + \frac{1}{2}\right)$$

1 db. oszcillátor

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2$$

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^{+}a + \frac{1}{2}\right)$$

$$\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

keltő- és eltüntető operátorok

$$\hat{a}^{+} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)$$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)$$

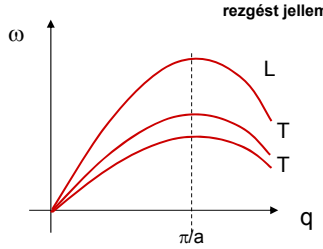
$\hat{\mathbf{N}}_{\mathbf{q},s} = \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{q},s}^{+}\mathbf{a}_{\mathbf{q},s}$ **jelentése:** $\mathbf{q}$ **hullámszámú,**

$\boldsymbol{\varepsilon}_s$ **polarizációjú fonon kvantumszám operátora**

$\hat{\mathbf{N}}_{\mathbf{q},s}$ **sajátértékei az** $n_{\mathbf{q},s}$ **egész számok,**
értéke az adott frekvenciájú és hullámhosszú rezgést jellemzi

$\hbar\mathbf{q}$ **impulzus**

$\hbar\omega_{\mathbf{q},s}$ **energia**

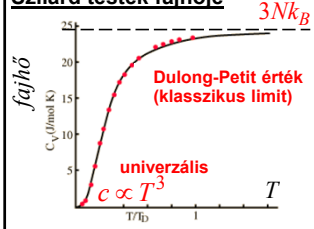


$$\left\langle x^2\right\rangle\Big|_{\mathbf{q},s} = \frac{\hbar}{m\omega_{\mathbf{q},s}}\left(n_{\mathbf{q},s} + \frac{1}{2}\right)$$

Nagy amplitúdójú rezgés:
a gerjesztésben az adott fonon-módus magas részecskeszám sajátértékkel fordul elő

4. Szilárd testek fajhőjének kvantummechanikai leírása. Bose-Einstein eloszlás. Az állapotsűrűség számolása. Debye-modell.

Szilárd testek fajhője



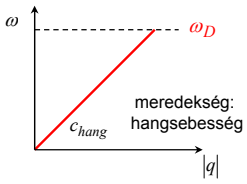
A klasszikus leírásmód alapjaiban hibás. Az alacsony hőmérsékletű univerzális viselkedés megértéséhez kvantummechnaikai tárgyalásmód kell.

Debye-modell

izotróp anyag

lineáris diszperziós reláció ω_D -ig

módusok száma: $3N = 3\int_0^{\omega_D} g(\omega)\,d\omega$



Belső energia

Bose-Einstein eloszlás

fonon energia

$$U = 3\int_0^{\omega_D} g(\omega)\,\hbar\omega\,\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\,d\omega + U_0$$

állapotsűrűség egy fonon ágra

fonon ágak száma

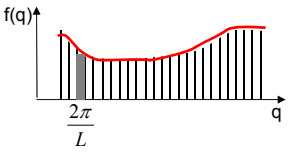
$$\frac{V}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{c_h^{\ 3}}$$

c_{hang}

Fajhő

$$c_{hő} = \frac{dU}{dT}$$

Összegzésből integrálásra való áttérés tetszőleges f(q) függvényre



$$\sum_q f(q) = \frac{L}{2\pi}\int f(q)\,dq = N(q)\int f(q)\,dq$$

Állapotsűrűség számolása

$$N_{TOT} = \sum_{s=1}^{3}\sum_{\mathbf{q}=1}^{N}\Theta(\omega - \omega_s(\mathbf{q}))$$

$$= \sum_{s=1}^{3}\int d^3\mathbf{q}\,\frac{V}{(2\pi)^3}\Theta(\omega - \omega_s(\mathbf{q}))$$

$$= \sum_{s=1}^{3}\int d\omega\, g_s(\omega)$$

$$\frac{dN_{TOT}}{d\omega} = \sum_{s=1}^{3}\int d^3\mathbf{q}\,\frac{V}{(2\pi)^3}\delta(\omega - \omega_s(\mathbf{q}))$$

$$= \sum_{s=1}^{3} g_s(\omega) = g(\omega)$$

Statisztikus fizikai megfontolások

normálás: $\sum_n f_n = 1$

Legyen az ε_n energiájú állapot valószínűsége $f_n = f(\varepsilon_n)$

független alrendszerek

ε_1 ε_2 $\xrightarrow{\text{együttes rendszer}}$ $\boxed{\varepsilon_1 \quad \varepsilon_2}$

f_1 f_2 $\qquad$ f_1 f_2

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$$

$$f = f_1 f_2$$

$$\boxed{f(\varepsilon) = \frac{e^{-\beta\varepsilon}}{Z}}$$

β és Z a függvény két paramétere

Az n-edik állapot valószínűség $f_n = f(\varepsilon_n) = \dfrac{e^{-\beta\varepsilon_n}}{Z} = \dfrac{e^{-\beta\varepsilon_n}}{\sum_n e^{-\beta\varepsilon_n}}$

Az energia várható értéke: $\langle\varepsilon\rangle = \sum_n \varepsilon_n f_n$

Harmonikus oszcillátor (kvantummechanika): $\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ $\quad \langle\varepsilon\rangle = \sum_n \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) f_n$ ahol $f_n = \dfrac{e^{-\beta\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)}}{\sum_n e^{-\beta\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)}} = \dfrac{e^{-\beta\hbar\omega n}}{\sum_n e^{-\beta\hbar\omega n}}$

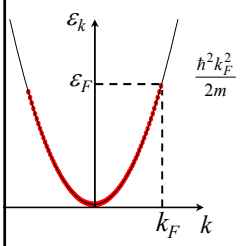
$$\langle n\rangle = \sum_n n f_n = \frac{\sum_n n e^{-\beta\hbar\omega n}}{\sum_n e^{-\beta\hbar\omega n}} = \frac{-\frac{\partial}{\partial s}\sum_n e^{-sn}}{\sum_n e^{-sn}} = -\frac{\partial}{\partial s}\ln\sum_n \left(e^{-s}\right)^n = \frac{\partial}{\partial s}\ln\left(1-e^{-s}\right) = \frac{e^{-s}}{1-e^{-s}} = \frac{1}{e^s - 1}$$

$s = \beta\hbar\omega$ segédváltozó

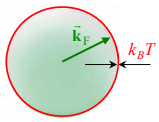
Bose-Einstein eloszlásfüggvény $\boxed{\langle n\rangle = \dfrac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}}$

5. Szabad elektrongáz kvantummechanikai leírása. Fermi-Dirac eloszlás. Elektron-fajhő, fémek mágneses szuszceptibilitása (Sommerfeld-sorfejtés).

Szabad-elektronok



Nívók betöltése:
Pauli-elv → Fermi-Dirac statisztika

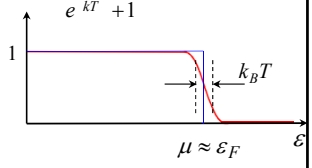


betöltött és üres állapotok ε_F körül $k_B T$ tartományban

a Fermi-tenger felülete párolog: elektron-fajhő, szuszceptibiliás kicsi

μ ~ ε_F tipikus értéke: 5-8 eV

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} + 1}$$



$k_B T \approx 25$ meV << ε_F

Szabad elektrongáz mágneses szuszceptibilitása: Pauli-szuszceptibilitás

A tér irányába forduló spin $\mu_B B$ energiát nyer, az ezzel ellentétes spin $\mu_B B$ energiát veszít

$$N_\uparrow = \int \frac{1}{2} f(\varepsilon - \mu_B B) D(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$N_\downarrow = \int \frac{1}{2} f(\varepsilon + \mu_B B) D(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$M = \mu_B \int \frac{1}{2}\left[f(\varepsilon - \mu_B B) - f(\varepsilon + \mu_B B)\right] D(\varepsilon) d\varepsilon =$$

$$= \mu_B^2 B \int D(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) d\varepsilon \longrightarrow \boxed{\chi = \mu_B^2 D(\varepsilon_F)}$$

általánosan igaz

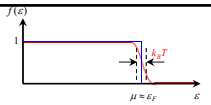
Dirac-delta

$$\boxed{\chi = \frac{3}{2}\frac{\mu_B^2 N}{k_B T_F}}$$

szabad elektrongáz

Sommerfeld-sorfejtés

$$f(\varepsilon)=\frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}+1}$$



$\frac{k_BT}{\varepsilon_F}$ szerinti integrál-sorfejtés

Tétel: tetszőleges H függvényre

$$\int_{-\infty}^{\infty}H(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon=\int_{-\infty}^{\mu}H(\varepsilon)d\varepsilon+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\frac{dH(\varepsilon)}{d\varepsilon}\bigg|_{\mu}+\ldots$$

Kémiai potenciál hőmérsékletfüggése

$$N=\int_{-\infty}^{\infty}D(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon=\int_{-\infty}^{\mu}D(\varepsilon)d\varepsilon+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\bigg|_{\varepsilon_F}=\int_{0}^{\varepsilon_F}D(\varepsilon)d\varepsilon+(\mu-\varepsilon_F)D(\varepsilon_F)+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\bigg|_{\varepsilon_F}$$

általánosan igaz

$$\mu=\varepsilon_F-\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\frac{1}{D(\varepsilon_F)}\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\bigg|_{\varepsilon_F}$$

$$\mu=\varepsilon_F-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^2$$

szabad elektrongáz

Fajhő

$$U=\int_{-\infty}^{\infty}\varepsilon D(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon=\int_{-\infty}^{\mu}\varepsilon D(\varepsilon)d\varepsilon+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\left[D(\varepsilon)+\varepsilon\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]\bigg|_{\mu}=$$

$$\int_{0}^{\varepsilon_F}\varepsilon D(\varepsilon)d\varepsilon+(\mu-\varepsilon_F)\varepsilon_F D(\varepsilon_F)+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\varepsilon_F\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\bigg|_{\varepsilon_F}+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2D(\varepsilon_F)=U_0+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2D(\varepsilon_F)$$

általánosan igaz

$$c=\frac{\pi^2}{3}k_B^2TD(\varepsilon_F)$$

$$c=\frac{\pi^2}{2}N\frac{k_B^2T}{\varepsilon_F}$$

szabad elektrongáz

T ≠ 0, statisztikus fizika

Egy adott állapot valószínűsége megmaradó mennyiségek függvénye

$$f_{i,k}=f(\varepsilon_i,n_k)\qquad\sum_{i,k}f_{i,k}=1$$

energia, részecskeszám

független alrendszerek

ε_1,n_1 ε_2,n_2

f_1 f_2

együttes rendszer →

ε_1,n_1 ε_2,n_2

f_1 f_2

$$\varepsilon_1+\varepsilon_2=\varepsilon$$
$$n_1+n_2=n$$
$$f_1*f_2=f$$

$$f(\varepsilon)=\frac{e^{-\beta\varepsilon-\alpha n}}{Z}$$

Egyetlen olyan függvényalak van, amely az argumentumok összeadásakor a függvények szorzatát adja

α szokásos választása: α = - βμ (jelölés)

$$f_{i,k}=\frac{e^{-\beta(\varepsilon_{i,k}-\mu n_{i,k})}}{Z}$$

i-edik nívó

k-adik elektron

Állapotösszeg:

$$Z=\sum_{i,k}e^{-\beta(\varepsilon_{i,k}-\mu n_{i,k})}$$

Energia: $\langle U\rangle-\mu\langle N\rangle=$

$$=\frac{\sum_{i,k}(\varepsilon_{i,k}-\mu n_{i,k})e^{-\beta(\varepsilon_{i,k}-\mu n_{i,k})}}{\sum_{i,k}e^{-\beta(\varepsilon_{i,k}-\mu n_{i,k})}}=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z$$

Részecskeszám:

$$\langle N\rangle=\sum_{i,k}n_{i,k}f_{i,k}=\frac{\sum_{i,k}n_{i,k}e^{-\beta(\varepsilon_{i,k}-\mu n_{i,k})}}{\sum_{i,k}e^{-\beta(\varepsilon_{i,k}-\mu n_{i,k})}}=\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\ln Z$$

Az i-edik nívón lévő, σ spinű elektronra alkalmazva:

$$Z_{i,\sigma}=\sum_{k}e^{-\beta(\varepsilon_{i,k,\sigma}-\mu n_{i,k,\sigma})}$$

Pauli-elv

$$Z_{i,\sigma}=\sum_{k=0}^{1}e^{-\beta(\varepsilon_{i,k,\sigma}-\mu n_{i,k,\sigma})}=1+e^{-\beta(\varepsilon_{i,\sigma}-\mu)}$$

azért mert

$$n_{i,\sigma}=\begin{cases}0\\1\end{cases}\qquad\varepsilon_{i,k,\sigma}=\begin{cases}0\\\varepsilon_{i,\sigma}\end{cases}$$

$$\langle n_{i,\sigma}\rangle=\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\ln Z_{i,\sigma}=\frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_{i,\sigma}-\mu}{kT}}+1}$$

Fermi-Dirac eloszlásfüggvény

6. Bloch-tétel. Közel szabad elektron modell. Sávszerkezet. Fermi-felület kísérleti meghatározása.

Bloch-tétel $\hat{H}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + U(\mathbf{r})$

rácsperiódikus potenciál esetén a Hamilton-operátor sajátfüggvénye az alábbi alakban írható fel:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{kR}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

helyvektor

rácsvektor

az elektronállapotok a hullámszám-vektorok (impulzus) szerint vannak megkülönböztetve

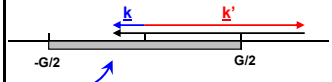
Ekvivalens megfogalmazás

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{kr}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

ahol $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R})$

Redukált-zóna ábrázolás

$\hbar\vec{\mathbf{k}}' = \hbar\vec{\mathbf{k}} + \hbar\vec{\mathbf{G}}$ kvázi-impulzus



az azonos impulzushoz tartozó állapotok betolása az első Brillouin-zónába

A Bloch-tétel bizonyítása

Transzlációs operátor

$$\hat{\mathbf{T}}(\mathbf{R})\psi = c(\mathbf{R})\psi \longrightarrow c(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{kR}}$$

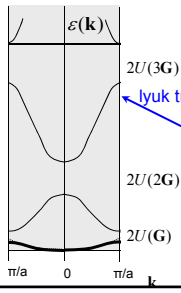
$$\left[\hat{\mathbf{T}}(\mathbf{R}), \hat{\mathbf{H}}\right] = 0$$

Közös sajátfüggvény-rendszer:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{kR}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

az argumentum rácsvektorral történő eltolása a hullámfüggvényt csak egy fázisfaktorral változtatja meg

Közel szabad-elektron közelítés

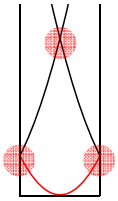


lyuk típusú állapot $m^* < 0$

A kristály potenciáltere hatására módosul a szabad elektronok diszperziós relációja: a degenerált pontok felhasadnak,

a **tiltott sáv** értéke a periódikus potenciál Fourier-komponense

az **effektív tömeg** akár negatív is lehet



Zónahatár: degenerált perturbációszámítás

$$\hat{H} = \hat{H}^o + U(\mathbf{r})$$

perturbáció-számítás

szabad elektron

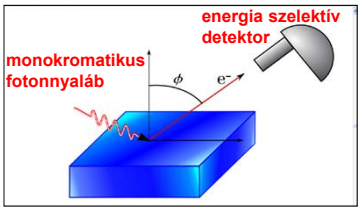
$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon^o_{\mathbf{k}} + \langle\mathbf{k}|U|\mathbf{k}\rangle + \sum_{\mathbf{k}\neq\mathbf{k}'} \frac{|\langle\mathbf{k}|U|\mathbf{k}'\rangle|^2}{\varepsilon^o_{\mathbf{k}} - \varepsilon^o_{\mathbf{k}'}}$$

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon^o_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} \frac{|U(\mathbf{G})|^2}{\varepsilon^o_{\mathbf{k}} - \varepsilon^o_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}}$$

A metszéspontok közelében a sávok „taszítják egymást”

$$\begin{vmatrix} \varepsilon^o_{\mathbf{k}} - \varepsilon & U(\mathbf{G}) \\ U^*(\mathbf{G}) & \varepsilon^o_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

Fotoemissziós spektroszkópia



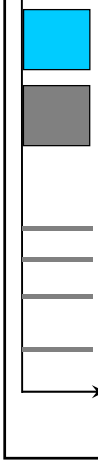
energiamegmaradás

$$E_{kin} = h\nu - W_{kilépési}$$

impulzusmegmaradás (a minta síkjában)

$$\hbar k'_{\parallel} = \hbar k_{\parallel} \pm \hbar G_{\parallel}$$

$$k'_{\parallel} = \frac{\sqrt{2m_e E_{kin}}}{\hbar}\sin\varphi$$

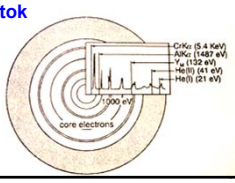


UPS : UV foton – valencia sávból (Fermi energia közeli) gerjesztések

kiterjedt sávállapotok

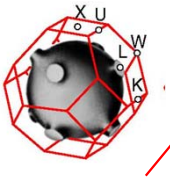
XPS: X-ray Photoelectron Spectroscopy

mélyen fekvő kötött állapotok



2 dimenziós metszetek

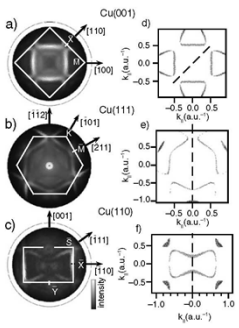
$$\varepsilon(k_{\parallel})$$



(001) Γ-X

(111) Γ-L

(110) Γ-U



Ciklotron frekvencia

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{\mathrm{H}}\psi \qquad \hat{\mathrm{H}}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = \varepsilon\psi \qquad \hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla \qquad \psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\left(\mathbf{kr}-\frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{\hbar}t\right)}$$

Schrödinger-egyenlet

energia $\boxed{\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}}$

impulzus $\boxed{\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}}$ $\xrightarrow{\text{mozgásegyenlet}}$ $\mathbf{F} = \frac{d}{dt}\hbar\mathbf{k}$

Mozgás külső mágneses térben

$$\mathbf{F} = -e\mathbf{v}\times\mathbf{B}$$

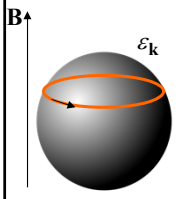
$$\frac{d\mathrm{k}}{dt} = \frac{e\mathrm{B}}{\hbar}\mathrm{v}_\perp$$

$$\frac{d\mathrm{k}}{dt} = \frac{e\mathrm{B}}{m}\mathrm{k}$$

$$e\mathrm{B}\frac{d\mathbf{r}}{dt} = m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}$$

$$e\mathrm{B}\,\mathrm{r}\omega = \mathrm{m}\mathrm{r}\omega^2$$

$$\omega = \frac{e\mathrm{B}}{m}$$

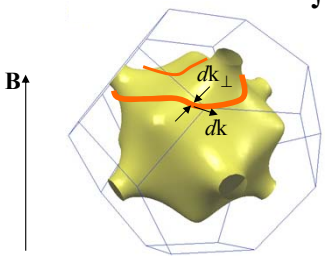


A periódusidő független k_z-től

A periódusidő

$$dt = \frac{\hbar}{e\mathrm{B}}\frac{d\mathrm{k}}{\mathrm{v}_\perp} \qquad T = \frac{\hbar^2}{e\mathrm{B}}\oint\frac{d\mathrm{k}}{\hbar\mathrm{v}_\perp}$$

$$d\mathrm{A} = \oint d\mathrm{k}\,d\mathrm{k}_\perp = \oint d\mathrm{k}\frac{d\varepsilon}{\hbar\mathrm{v}_\perp}$$



$$T = \frac{\hbar^2}{e\mathrm{B}}\frac{\partial\mathrm{A}}{\partial\varepsilon}$$

$$\omega_C = \frac{e\mathrm{B}}{\hbar^2}2\pi\left(\frac{\partial\mathrm{A}}{\partial\varepsilon}\right)^{-1}$$

$$m_C = \frac{\hbar^2}{2\pi}\frac{\partial\mathrm{A}}{\partial\varepsilon}\bigg|_{\mathrm{k}_z}$$

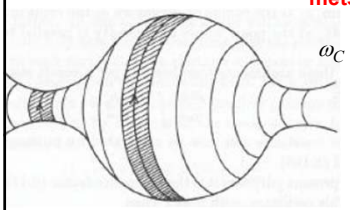
Sáv elektron

$$\mathbf{F} = -e\mathbf{v}_{\mathbf{k}}\times\mathbf{B}$$

$$\left.\begin{aligned}\mathbf{F} &= \hbar\frac{d\mathbf{k}}{dt}\\ \mathbf{v} &= \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial\mathbf{k}}\end{aligned}\right\} \quad \frac{d\varepsilon_{\mathbf{k}}}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial\mathbf{k}}\hbar\frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e\,\mathbf{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{v}_{\mathbf{k}}\times\mathbf{B}) = 0$$

A mágneses térben a Bloch-elektron is állandó energiájú állapotban marad

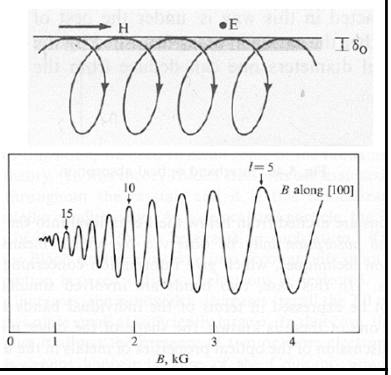
Ciklotronrezonancia



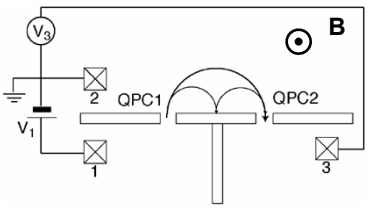
Exrémális Fermi-felület metszetek mérése

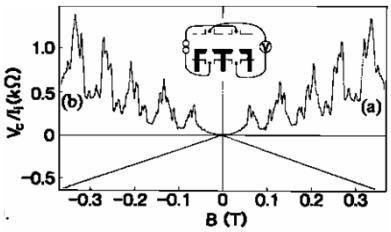
$$\omega_C = \frac{e\mathrm{B}}{\hbar^2}2\pi\left(\frac{\partial\mathrm{A}}{\partial\varepsilon}\right)^{-1}\bigg|_{\mathrm{k}_z}$$

Azbel-Kaner rezonancia (fémek)



Ciklotronpálya közvetlen kimutatása 2dimenziós elektronrendszerben





H.Van Houten *et al.*, Phys. Rev. B **39,** 8556 (1989)

7. Wannier-függvények. Szoros kötésű közelítés. Lokalizált és kiterjedt elektronállapotok.

Wannier-függvény

A Bloch-függvényt írjuk fel az alábbi alakban: $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R_n}} e^{i\mathbf{kR_n}} w(\mathbf{r}-\mathbf{R_n})$

Ez automatikusan kielégíti a Bloch-tételt

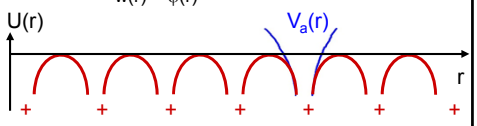
$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R_n}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R_n}-\mathbf{R})} e^{i\mathbf{kR}} w(\mathbf{r}-\mathbf{R_n}+\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R'}} e^{i\mathbf{kR'}} e^{i\mathbf{kR}} w(\mathbf{r}-\mathbf{R'}) = e^{i\mathbf{kR}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Intuíció: a periodikus potenciált éptsük fel az atomi potenciálokból és a Bloch-függvényt keverjük ki az atomi hullámfüggvényekből

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_a\right)\varphi(\mathbf{r}) = \varepsilon_n \varphi(\mathbf{r})$$

w(r) = φ(r)

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R_n}} e^{i\mathbf{kR_n}} \varphi(\mathbf{r}-\mathbf{R_n})$$



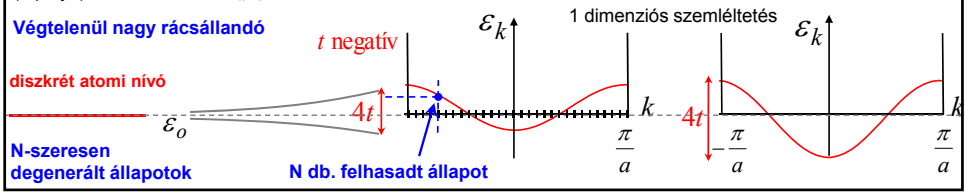
Hosszas számolás az energia várható értékére

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \langle \psi_{\mathbf{k}} | \hat{H} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{kR}} \int \varphi^*(\mathbf{r'}-\mathbf{R}) \hat{H} \varphi(\mathbf{r'}) d^3\mathbf{r'}$$

Közelítés (s-pálya) $= \varepsilon_n + t \sum_{\mathbf{a}>0} \left(e^{i\mathbf{ka}} + e^{-i\mathbf{ka}}\right)$ **atomi nívók kiszélesedése a távolság csökkentésével**

Végtelenül nagy rácsállandó

1 dimenziós szemléltetés



Sávszerkezet

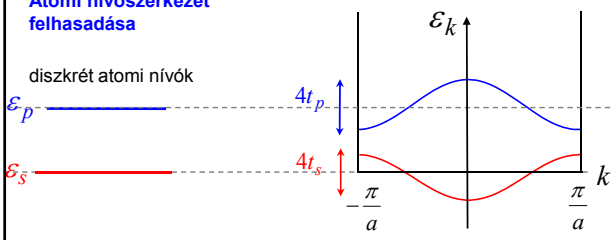
1 dimenziós szemléltetés

$\varepsilon_n + 2t\cos k_x a$

Atomi nívószerkezet felhasadása

az átfedési integrál előjele függ a pályák szimmetriájától

diszkrét atomi nívók



$\varphi_p(\mathbf{r}) = -\varphi_p(-\mathbf{r}) \rightarrow t(\mathbf{a}) = t_p > 0$

$\varphi_s(\mathbf{r}) = \varphi_s(-\mathbf{r}) \rightarrow t(\mathbf{a}) = t_s < 0$

Végtelenül nagy rácsállandó

atomi nívók kiszélesedése a távolság csökkentésével

A modell kiterjesztése:

$$\hat{H} = \varepsilon_n + t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_i^+ \hat{c}_j$$

atomi nívó

első-szomszéd

keltő-és eltüntető operátorok

amorf anyagok
rendezetlenség atomi nívókon, vagy az átfedésekben:

$$\hat{H} = \varepsilon_i + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} \hat{c}_i^+ \hat{c}_j$$

Coulomb-kölcsönhatás a rácspontokon:
Hubbard-modell

$$\hat{H} = \varepsilon_0 + t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_i^+ \hat{c}_j + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow}^+ \hat{n}_{i,\downarrow}$$

törzselektronok lokalizációjának, vegyértékelektronok kiterjedésének **értelmezése**

részecskeszám operátor

8. Hullámcsomag. Effektív tömeg, fémek-félvezetők
Drude-modell: Hall-állandó, ε(ω), σ(ω)

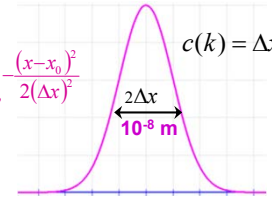
Hullámcsomag (1 dimenzió)

Szuperpozícióval előállított lokalizált állapot:

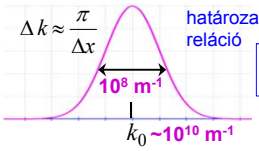
$$\psi(x)=\int c(k)e^{ikx}dk = e^{ik_0x}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2(\Delta x)^2}}$$

$$c(k)=\Delta x\, e^{i(k_0-k)x_0}e^{-\frac{1}{2}(\Delta x)^2(k-k_0)^2}$$

$$\Delta p \approx \frac{h}{\Delta x}$$



$$\Delta k \approx \frac{\pi}{\Delta x}$$



határozatlansági reláció

$$\boxed{\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Egyszerre nem lehet a helyet és az impulzust is pontosan mérni

Csoportsebesség

$$\psi(x,t)=\int c(k)e^{i\left(kx-\frac{\varepsilon}{\hbar}t\right)}dk = e^{i\left(k_0x-\frac{\varepsilon_0}{\hbar}t\right)}\int c(k)e^{i\left\{(k-k_0)x-\frac{\varepsilon-\varepsilon_0}{\hbar}t\right\}}dk$$

$$= e^{i\left(k_0x-\frac{\varepsilon_0}{\hbar}t\right)}\int c(k)e^{i(k-k_0)\left\{x-\frac{1}{\hbar}\frac{\varepsilon-\varepsilon_0}{k-k_0}t\right\}}dk = e^{i\left(k_0x-\frac{\varepsilon_0}{\hbar}t\right)}\int c(k)e^{i(k-k_0)(x-\mathrm{v}t)}dk$$

$$= e^{i\left(k_0\mathrm{v}t-\frac{\varepsilon_0}{\hbar}t\right)}\int c(k)e^{ik(x-\mathrm{v}t)}dk$$

csoportsebesség

$$\mathrm{v}_{cs}=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon}{\partial k}$$

Becslés az időbeli szétfolyásra

$$\Delta x(t)\approx \Delta\mathrm{v}\, t \approx \frac{1}{m}\hbar\Delta k\, t$$

$$10^{-4}\,\frac{m^2}{s}$$

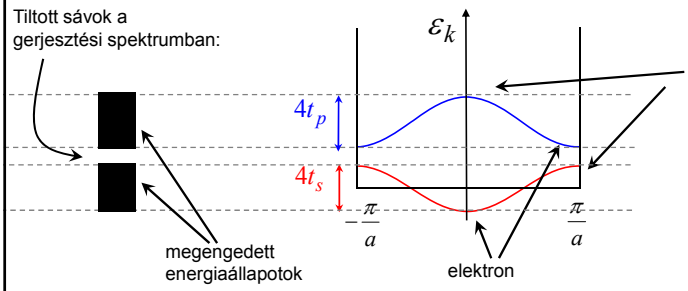
$$t=10^{-12}s$$

1. A hullámcsomag pozíciója időben eltolódik $\mathrm{v}t$ –vel
2. A hullámcsomag „szétfolyik” a fázissebesség és a csoportsebesség különbözősége miatt: $\mathrm{v}_{cs}\neq\frac{1}{\hbar}\frac{\varepsilon_0}{k_0}$

fázissebesség

Fémek-félvezetők

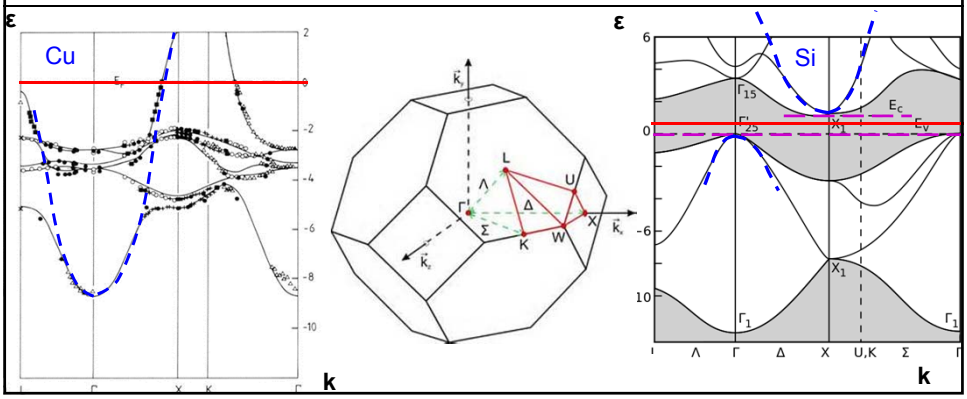
Tiltott sávok a gerjesztési spektrumban:



negatív effektív tömeg: lyuk

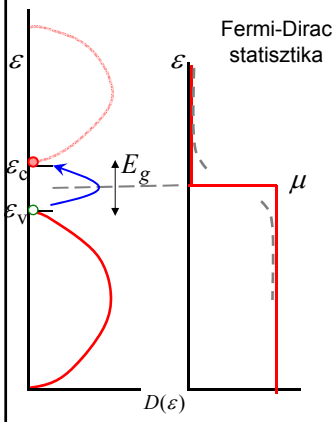
3-dimenzió: effektív tömeg tenzor

$$\underline{\underline{m}}^*=\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2\varepsilon_{\vec{\mathbf{k}}}}{\partial\vec{\mathbf{k}}^2}\right)^{-1}$$



Intrinsic félvezető

állapotsűrűség



Fermi-Dirac statisztika

$$n = \int_{\varepsilon_c}^{\infty} D_c(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = 2\left(\frac{m_n^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left\{-\frac{\varepsilon_c - \mu}{k_B T}\right\}$$

$$p = \int_{-\infty}^{\varepsilon_v} D_v(\varepsilon)[1 - f(\varepsilon)] d\varepsilon = 2\left(\frac{m_p^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left\{-\frac{\mu - \varepsilon_v}{k_B T}\right\}$$

Az elektronok és a lyukak száma megegyezik

$$\mu = \frac{1}{2}(\varepsilon_c + \varepsilon_v) + \frac{3}{4} k_B T \ln\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right)$$

$$\mu \approx \varepsilon_v + \frac{E_g}{2}$$

tiltott sáv közepe

$$n = p = \sqrt{np}$$

$$f(\varepsilon) \approx \exp\left\{-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right\}$$

$$np = 2\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^3 \left(m_n^* m_p^*\right)^{3/2} \exp\left\{-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_v}{k_B T}\right\}$$

Töltéshordozó koncentráció (RT)

Si: 1.02 10^{10}cm^{-3}

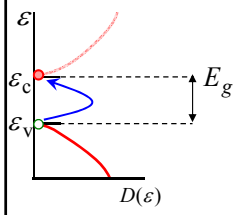
Ge: 2.33 10^{13}cm^{-3}

$$n = p = 2\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \left(m_n^* m_p^*\right)^{3/4} \exp\left\{-\frac{E_g}{2k_B T}\right\}$$

Vezetőképesség

$$\sigma = \mu_e n + \mu_h p$$

dominál a töltéshordozók számának exponenciális T-függése

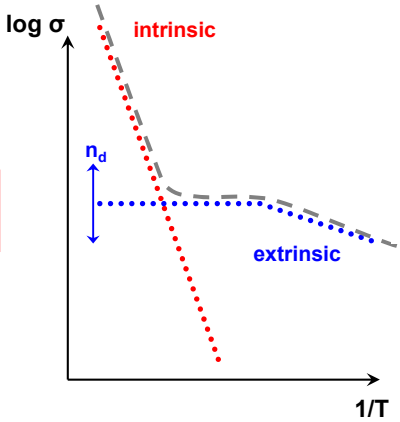


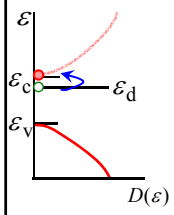
Intrinsic (saját) félvezető

$$n = p$$

$$\sigma = (\mu_e + \mu_h) n$$

$$\sigma \propto \exp\left\{-\frac{E_g}{2k_B T}\right\}$$





n-típusú adalékolás járuléka

$$\sigma = \mu_e n$$

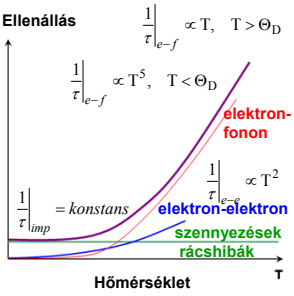
$$n \propto \exp\left\{-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_d}{2k_B T}\right\}$$

alacsony hőmérséklet: aktivált viselkedés

$$n = n_d$$

telítési tartomány

Fémek vezetőképessége



Matthiessen-szabály:

$$\frac{1}{\tau} = \left.\frac{1}{\tau}\right|_{imp} + \left.\frac{1}{\tau}\right|_{e-e} + \left.\frac{1}{\tau}\right|_{e-f}$$

A külső erők hatására megváltozik az elektronok állapota, amit ekkor egy új stacionárius eloszlás-függvény ír le. Az **eltolódott Fermi-gömb**höz tartozó átlagsebességből kiszámolható a vezetőképesség.

Kvadratikus diszperziós relációt feltételezve: $\vec{\mathbf{p}} = \hbar\vec{\mathbf{k}}_d = m\vec{\mathbf{v}}_d$

$$\frac{\hbar \mathbf{k}_d}{\tau} = \frac{m\mathbf{v}_d}{\tau} = e\mathbf{E}$$

$$\mathbf{v}_d = \frac{e\tau}{m}\mathbf{E}$$

mobilitás (μ)

$$\mathbf{j} = ne\,\mathbf{v}_d = ne\mu\,\mathbf{E}$$

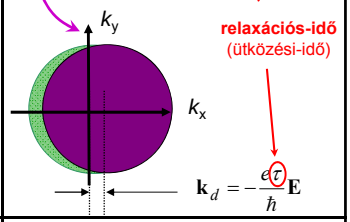
$$\boxed{\sigma = ne\mu = \frac{ne^2\tau}{m}}$$

Drude-formula

A Boltzman-egyenlet megoldása relaxációs idő közelítésben:

$$f(\vec{\mathbf{k}}) = f^0(\vec{\mathbf{k}}) + \frac{e\tau}{\hbar}\vec{\mathbf{E}}\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \vec{\mathbf{k}}}$$

$$f(\vec{\mathbf{k}}) = f^0\left(\vec{\mathbf{k}} + \frac{e\tau}{\hbar}\vec{\mathbf{E}}\right)$$



relaxációs-idő
(ütközési-idő)

Hall-effektus

Az eltolódott eloszlásfüggvényhez tartozó $\vec{\mathbf{p}} = \hbar\langle\vec{\mathbf{k}}_d\rangle$ átlagos impulzus időfejlődése relaxációs idő közelítésben:

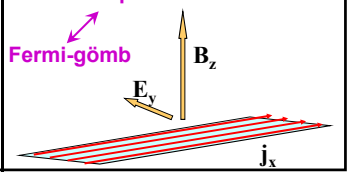
$$\boxed{\frac{d\vec{\mathbf{p}}}{dt} = -\frac{\vec{\mathbf{p}}}{\tau} + \vec{\mathbf{F}}(t)}$$

Lorentz-erő:

$$\left.\begin{aligned} \vec{\mathbf{F}} &= -e\left[\vec{\mathbf{E}} + \vec{\mathbf{v}} \times \vec{\mathbf{B}}\right] \\ \vec{\mathbf{j}} &= ne\,\vec{\mathbf{v}}_d = \frac{ne}{m}\vec{\mathbf{p}} \end{aligned}\right\} \quad \frac{m}{ne\tau} j_y = eE_y + \frac{1}{n} j_x B_z \rightarrow R_H = -\frac{1}{ne}$$

stacionárius egyensúly

Hall-állandó

Edwin Hall **(lásd: bevezető előadás)**

„If electricity is assumed to be an **incompressible fluid**…"