Megmaradási tételek

Elektromágneses hullám (pl. Röntgen-szórás)

$E = h\nu \qquad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$

Részecske (pl. neutron-szórás)

$E = \frac{p^2}{2m} \qquad \mathbf{p} = m\mathbf{v}$

Rugalmas szórás

$$\left.\begin{aligned} E' = E \quad &\Rightarrow \quad |\mathbf{p}'| = |\mathbf{p}| \\ \mathbf{p}' = \mathbf{p} + \hbar\mathbf{G} \quad &\Rightarrow \quad \Delta\mathbf{p}/\hbar = \mathbf{G} \end{aligned}\right\}$$

Bragg-törvény = impulzus megmaradás

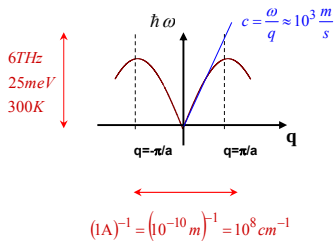
Rugalmatlan szórás

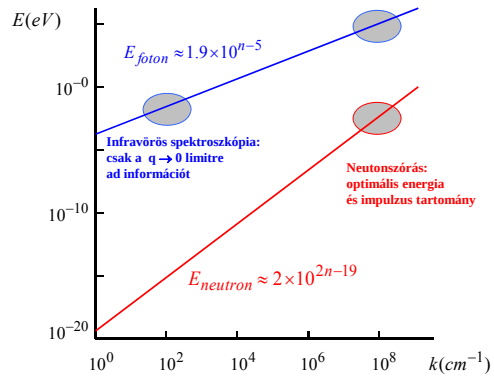
$$\left.\begin{aligned} E' &= E \pm \hbar\omega(\mathbf{q}) \\ \mathbf{p}' &= \mathbf{p} \pm \hbar\mathbf{q} + \hbar\mathbf{G} \end{aligned}\right\}$$

+ fonon abszorbció
- fonon emisszió

Röntgen: keV mellett kell meV-t mérni (többfononos folyamatok)

Mérési tartományok





Neutron szórás

Rugalmatlan szórás

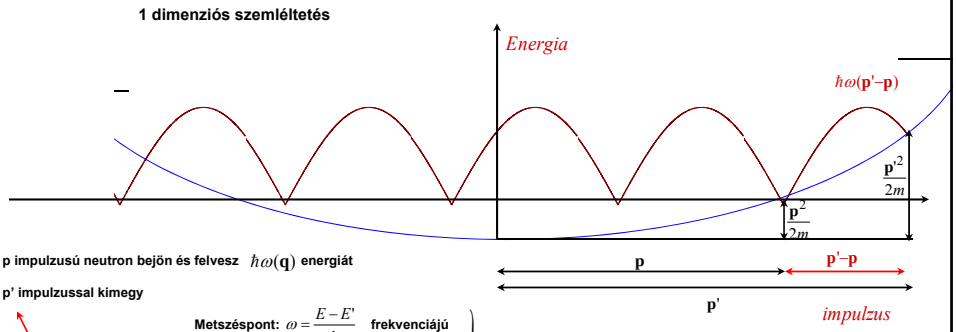
$$\left.\begin{aligned} E' &= E \pm \hbar\omega(\mathbf{q}) \\ \mathbf{p}' &= \mathbf{p} \pm \hbar\mathbf{q} + \hbar\mathbf{G} \end{aligned}\right\} \qquad \left.\begin{aligned} \frac{p'^2}{2m} &= \frac{p^2}{2m} \pm \hbar\omega(\mathbf{q}) \\ \hbar\mathbf{q} &= \mp\mathbf{p}' - \mathbf{p} - \hbar\mathbf{G} \end{aligned}\right\} \qquad \frac{p'^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \pm \hbar\omega\left(\frac{1}{\hbar}(\mp\mathbf{p}' \pm \mathbf{p}) - \mathbf{G}\right)$$

Az $\hbar\omega(\mathbf{q})$ függvény argumentumát átskálázva és kihasználva, hogy $\mathbf{G}$ szerint periódikus

$$\boxed{\frac{p'^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \pm \hbar\omega(\mathbf{p}' - \mathbf{p})}$$

Egy felület egyenlete

1 dimenziós szemléltetés



p impulzusú neutron bejön és felvesz $\hbar\omega(\mathbf{q})$ energiát

p' impulzussal kimegy

ezt mérjük

Metszéspont: $\omega = \frac{E - E'}{\hbar}$ frekvenciájú

$\mathbf{q} = \frac{\mathbf{p}' - \mathbf{p}}{\hbar}$ hullámszámú

fonon

Infravörös spektroszkópia

$\lambda \approx 10^{-6}$ -10^{-3} m

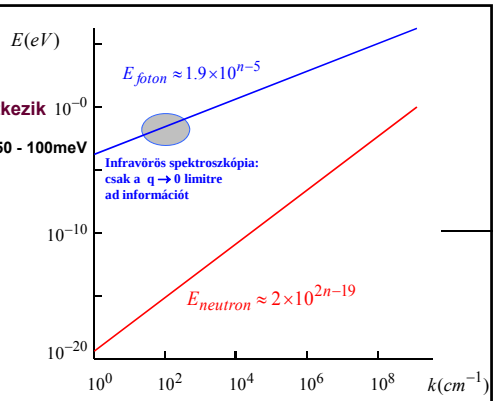
Infravörös abszorpció: foton elnyelődik, fonon keletkezik

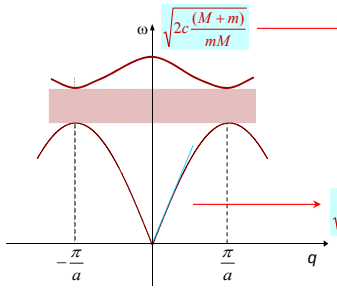
Infravörös sugárzás: $k \approx 10^2$ -10^3 cm^{-1}, $\nu \approx 10^{11}$ - 10^{12} Hz, $h\nu \approx 50$ - 100meV

↓

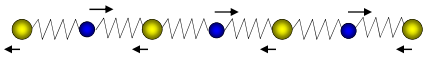
optikai fonon

Feltétel: dipólmomentum változással járó
transzverzális optikai rezgés – IR aktív módus
(TO, mivel az elektromágneses hullámban E ⊥ k)





optikai ág



akusztikus ág

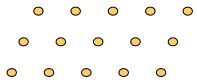
1. Kristályrács definíciója. Reciprok-rács, kristálysíkok, Miller-index. Szimmetriaműveletek, kristályrendszerek, Bravais-rácsok.

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

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

Kristály: diszkrét transzlációs szimmetriát mutató szilárd test

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

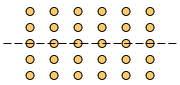


$$\underline{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{pmatrix}$$

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

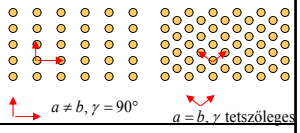
$\boxed{\text{Kristályszerkezet} = \text{Bravais rács szimmetriák} \otimes \text{bázis szimmetriák}}$

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

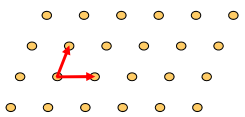
$$\mathbf{R_n} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

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

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

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

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

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

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

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'	3
σ_h $\sigma_{nh} = C_n\sigma_h$	n/m	főtengelyre merőleges síkra tükrözés	σ_h	3/m
σ_v $\sigma_{nv} = C_n\sigma_v$	nm	főtengelyt tartalmazó síkra tükrözés		3m
$S_n = \sigma_{nv} = \sigma_h C_n$	$\bar{n}$	forgatva tükrözés	S_3	$\bar{3}$

pontcsoport műveletek

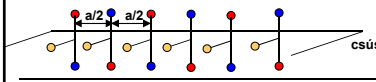
legalább egy pont helyben marad (nincs transzlációs szimmetria felhasználva)

szimmomorf műveletek

Kristály – diszkrét transzlációs szimmetria

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

σ + eltolás frakcionális rácsvektorral

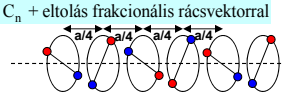


csúszva tükrözés

$\sigma + T_{a/2}$

csúszósík

C_n + eltolás frakcionális rácsvektorral



csavarva forgatás

$C_4 + T_{a/4}$

forgástengely

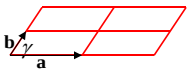
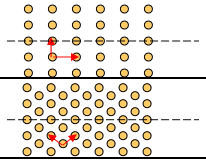
nem szimmomorf műveletek

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

tércsoport műveletek

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

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

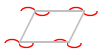
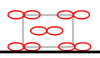
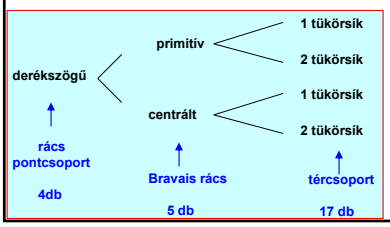
nem elemi cella, de tükrözi a kristály szimmetriáját

Kétdimenziós tércsoportok

Bázis szimmetriái

	C_1	C_2	C_3	C_4	C_6	
$\cancel{\sigma}$	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