

Szilárdtest-fizika gyakorlat, házi feladatok, 2013. ősz

1. házi feladat, 2. gyakorlat

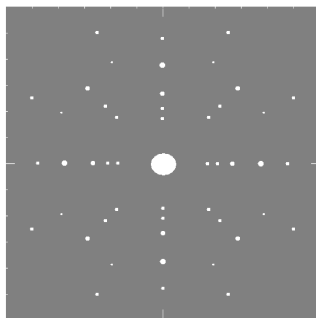
Szabályos háromszögrács esetén add meg az elemi rácsvektorokat, az általuk meghatározott elemi cellát és a Wigner-Seitz cellát! Add meg a reciprok rács elemi rácsvektorait és mondd meg, milyen rácsot határoznak meg! Számold ki a direkt rács és a reciprok rács Wigner-Seitz cellájának területét! Megoldásodat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

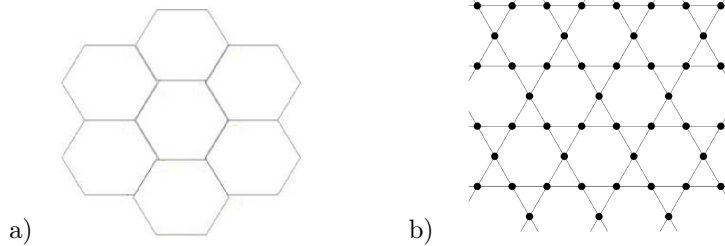
8. házi feladat, 4. gyakorlat

A 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_{Cu} és f_{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 divergenssek 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 sávszerkezetét 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 reciprokrács-vektorokkal!
 - Vizsgáld meg, hogy a Γ 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 másodszomszédig 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 Γ pont közelében $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 - 6|t| + |t|(ak)^2$; 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!