Szilárdtest-fizika gyakorlat, házi feladatok, 2017. ősz

A HF-ek után zárójelben az szerepel, hogy hány hallgatónak szánjuk kiadni, utána pedig a hallgatókat azonosító sorszám (1-21), így: *(hallgató/feladat, (hallgató(k) sorszáma(i)))*. A hf-ek címsorában pedig a kiadás tantervi hete, és a bemutatás tantervi hete, ebben a formátumban: *(kiadás hete)⇒(bemutatás hete)*.

1. házi feladat, (2)⇒(3)
a.) 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 grafikusan is szemléltesd!
b.) Tekintsd az 1. ábrán található méhsejt- és kagomerácsot! Mik az elemi rácsvektorok, és mi a bázis? Miben különbözik a reciprokrács az a.) feladatban kiszámolthoz képest? Fejezd ki az elemi cellában az atomok helyvektorait az elemi rácsvektorokkal! Egyértelmű-e a bázis megválasztása? Ha nem, adj meg több lehetőséget is! Próbáld meg megtalálni a legkellemesebbet (ez azért mérsékelten szubjektív ...)!
(2, (1,2))

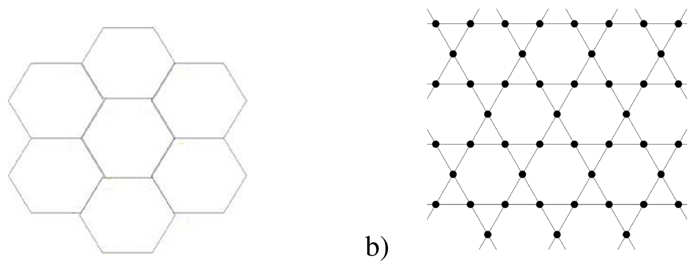
2. házi feladat, (3)⇒(4)
Tekintsük azt a lapcentrált köbös rácsot, melynek minden rácspontjában egy C_{60} (fullerén) molekula helyezkedik el.

a) 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.)

b) 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?

(2, (3,4))

3. házi feladat, (3)⇒(4)
Tekintsük a 1.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!
(1, (5))



a) b)

1. ábra. Grafit sík és kagome-rács.

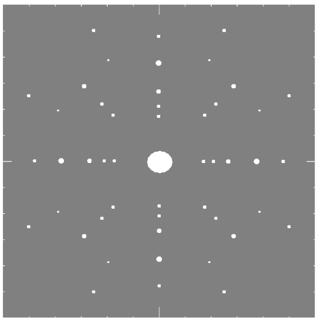
4. házi feladat, 3. gyakorlat
Az A típusú atomokból álló négyzetrács esetén a négyzetek középpontjába helyezzünk B típusú atomokat. (Ekkor az A és B atomok külön-külön egymáshoz képest eltolt négyzetrácsot alkotnak. $A = B$ esetén centrált négyzetrácshoz jutunk.) Hány atomból áll a bázis? Számold ki 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?
(0, ())

5. házi feladat, (5)⇒(6)
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 $f_{\mathrm{Cu}}/f_{\mathrm{O}}$ aránynál okoz a szerkezeti tényező kioltást, azaz tiltott reflexiót valamely reciprokrács-vektor esetén!
(1, (6))

6. házi feladat, (4)⇒(5)
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!
(1, (7))

7. házi feladat, (4)⇒(5)
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!



2. ábra. Laue szórási kép

(1,(8))

8. házi feladat, 4. gyakorlat
Soroljuk be a 10 kétdimenziós pontcsoportot az 5 kristályosztályba!
(0, (0))

9. házi feladat, (6)⇒(7)
Vizsgáljuk a hatszöges grafitsík síkra merőleges kitéréseihez tartozó fononmódusait a megfeszített rugós modellben.

a) 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?

b) Írd fel a bázisatomok mozgásegyenletét Fourier-térben általános $\mathbf{q}$ hullámszámvektorra!

c) Határozd meg a fononmódusok frekvenciáit és a hozzájuk tartozó atomi elmozdulás vektorokat $\mathbf{q} = 0$-ra!

d) 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, (9,10))

10. házi feladat, (6)⇒(7)
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→0 esetben! Milyen hasonlóságot veszel észre a háromszög és a Kagome rács rezgései között?
(2, (11,12))

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 másodszomszéd k_2 rugóállandójú rugóval van összecsatolva.

a) Írd fel a mozgásegyenleteket, a láncirányba, illetve az arra merőleges irányban.

b) 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 divergensek a $d = 1, 2, 3$ esetekben. A képletben $\beta > 0$.

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

13. házi feladat, (7)⇒(8)
Mutasd meg, hogy egy 2-dimenziós izotróp rendszerben az alacsony hőmérsékletű fonon fajhő T^2 szerint változik!
(1, (13))

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)⇒(10)
Tekintsünk egy L hosszúságú, egydimenziós rácsban lévő elektronokat kvázi-szabad elektron közelítésben. A rácsatomok hatását közelítsük a következő periodikus potenciállal.

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

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

(1, (14))

16. házi feladat, (10)⇒(12)
Tekintsük az a rácsallandójú szabályos négyzetrácsot!

a) 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 $0 \leqq \varepsilon \leqq 7\hbar^2\pi^2/2ma^2$ 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 reciprokrács-vektorokkal!

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 $\tilde{U}(2\pi/a,0) = \tilde{U}(-2\pi/a,0) = \tilde{U}(0,2\pi/a) = \tilde{U}(0,-2\pi/a) \triangleq U_1$ 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 fönti U_1 és U_2 Fourier együtthatók különböznek nullától!

(2, (15,16))

17. házi feladat, (12)⇒(13)
Egy s atomi pályákból felépülő kétdimenziós négyzetrácson 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 sávszerkezetet tight-binding - azaz szoros-kötésű - közelítésben másodszomszédig bezárólag!

b) Határozd meg az elemi reciprokrácsvektorokat! Milyen rácsot definiálnak? Add meg a Brillouin-zóna nevezetes $\Gamma(0,0)$, $X(\pi/a,0)$, $M(\pi/a,\pi/a)$, $\Gamma(0,0)$. pontjaiban az elektronenergiákat, majd ábrázold vázlatosan a diszperziót a megadott pontok mentén! Mekkora a sávszélesség?

(1, (17))

18. házi feladat, (12)⇒(13)
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 sávszerkezetet 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 sávszélesség?

(2, (18,19))

19. házi feladat, (13)⇒(14)
Tekintsünk egy háromdimenziós egyszerű köbös rácsot s atomi nívókkal, ahol az elektron sávszerkezet 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!

(1, (20))

20. házi feladat, (13)⇒(14)
Tekintsünk egy háromdimenziós egyszerű köbös rácsot s atomi nívókkal, ahol az elektron sávszerkezet 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!

(1, (21))