

Kondenzált anyagok fizikája, 2. zárthelyi dolgozata

2018. DECEMBER 14. (PÉNTEK) 14⁰⁰ – 16⁰⁰

Tudnivalók

- feladatlapon is dolgozhat, a végén ezt is adja be! Minden lapon szerepeljen a név és a neptunkód!
- A feladatok megoldási ideje 90 perc.
- A rajzos feladatoknál nyugodtan használhat ceruzát, egyébként használjon tollat.
- A feladatok megoldásához író- és rajzeszközökön kívül semmilyen segédeszköz (könyv, füzet, mobil eszköz, laptop stb.) **nem** használható.
- A megoldásoknál az egyes lépésekhez írt 1-1 magyarázó mondatért is jár pont!

Segédlet

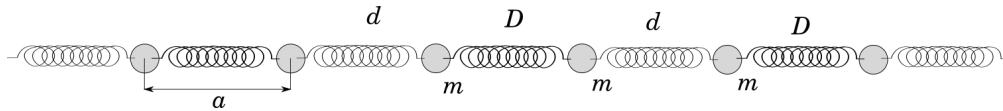
$$\cos \phi = \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2} \quad \sin \phi = \frac{e^{i\phi} - e^{-i\phi}}{2i} \quad \sin 2\phi = 2 \cos \phi \sin \phi$$

$$\cos 2\phi = \cos^2 \phi - \sin^2 \phi \quad 1 - \cos \phi = 2 \sin^2 \frac{\phi}{2}$$

$$E_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

1. (40 pont)

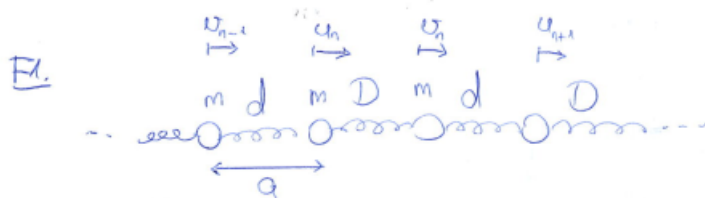
Vízszintes síkban a távolságra levő, m tömegű atomok helyezkednek el egymástól, amelyek között a kémiai kötést felváltva d és D rugóállandójú rugókkal modellezzük az ábrán látható módon. Ilyen lánc például a kizárólag szén atomokat tartalmazó egydimenziós molekula, ahol egyes és hármas kötések váltják egymást. Egy ilyen molekula a valóságban körülbelül 10 atom felett rendkívül instabil és robbanékony.



A rugók egyensúlyi állapotban feszítetlenek.

a) Periodikus határfeltételt használva (N darab atom esetén) határozza meg a modell rezgéseinek lehetséges $\omega(q)$ sajátfrekvenciáit a hullámszám(vektor) függvényében!

b) Ábrázolja az eredményt grafikonon az első Brillouin-zónán belül (ügyelve a Brillouin-zóna méretére)! Hány diszperziós relációt kapunk? Melyik az optikai ág?



$$m\ddot{u}_n = D(u_n - u_{n-1}) - d(u_n - u_{n+1})$$

$$m\ddot{u}_n = d(u_{n+1} - u_n) - D(u_n - u_{n-1}) \rightarrow \text{2a } a \text{ u-val illetve } v\text{-vel}$$

Ansatz: $u_n(t) = u(q) e^{iq \cdot 2a} e^{-i\omega t}$ jelenlétét egyenlő egyenlettel
 $u_n(t) = v(q) e^{iq \cdot 2a} e^{-i\omega t}$ vált ábrázolása

$$-\omega^2 \begin{pmatrix} u(q) \\ v(q) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{D}{m} - \frac{d}{m} & \frac{D}{m} + \frac{d}{m} e^{-iq \cdot 2a} \\ \frac{d}{m} e^{iq \cdot 2a} + \frac{D}{m} & -\frac{d}{m} - \frac{D}{m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(q) \\ v(q) \end{pmatrix}$$

További periodikus határfeltétel: $e^{iq \cdot 2a} = e^{i(N+1)q \cdot 2a}$
 $1 = e^{iNq \cdot 2a}$
 $Nq \cdot 2a = 2\pi \cdot l, l \in \mathbb{Z}$
 $q = \frac{\pi}{Na} \cdot l$

Megoldások ω -ra a kvantálás:

$$\begin{pmatrix} \omega^2 - \frac{D+d}{m} & \frac{D}{m} + \frac{d}{m} e^{-2iqa} \\ \frac{d}{m} e^{2iqa} + \frac{D}{m} & \omega^2 - \frac{D+d}{m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(q) \\ v(q) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Ez a nemtriviális megoldás:

$$\begin{vmatrix} \omega^2 - \frac{D+d}{m} & \frac{D}{m} + \frac{d}{m} e^{-2iqa} \\ \frac{d}{m} e^{2iqa} + \frac{D}{m} & \omega^2 - \frac{D+d}{m} \end{vmatrix} \stackrel{!}{=} 0$$

Fl. Schf.

$$\left(\omega - \frac{D+d}{m}\right)^2 - \left(\frac{D}{m} + \frac{d}{m} e^{-2iqa}\right) \left(\frac{d}{m} e^{2iqa} + \frac{D}{m}\right) = 0$$

$$\left(\omega - \frac{D+d}{m}\right)^2 - \left[\frac{Dd}{m^2} e^{2iqa} + \frac{D^2}{m^2} + \frac{d^2}{m^2} + \frac{Dd}{m^2} e^{-2iqa}\right] = 0$$

$$= \left(\omega - \frac{D+d}{m}\right)^2 - \frac{D^2+d^2}{m^2} - \frac{2Dd}{m^2} \cos(2qa) = 0$$

$$\omega^4 - \frac{2(D+d)}{m} \omega^2 + \frac{D^2+2Dd+d^2}{m^2} - \frac{d^2+D^2}{m^2} - \frac{2Dd}{m^2} \cos(2qa) = 0$$

$$\omega^4 - \frac{2(D+d)}{m} \omega^2 + \frac{2Dd}{m^2} [1 - \cos(2qa)] = 0$$

$$\omega^4 - \frac{2(D+d)}{m} \omega^2 + \frac{4Dd}{m^2} \sin^2(qa) = 0$$

$$\omega = \frac{D+d}{m} \pm \sqrt{\frac{(D+d)^2}{m^2} - \frac{4Dd}{m^2} \sin^2(qa)}$$

Nur $\omega \geq 0$ hell

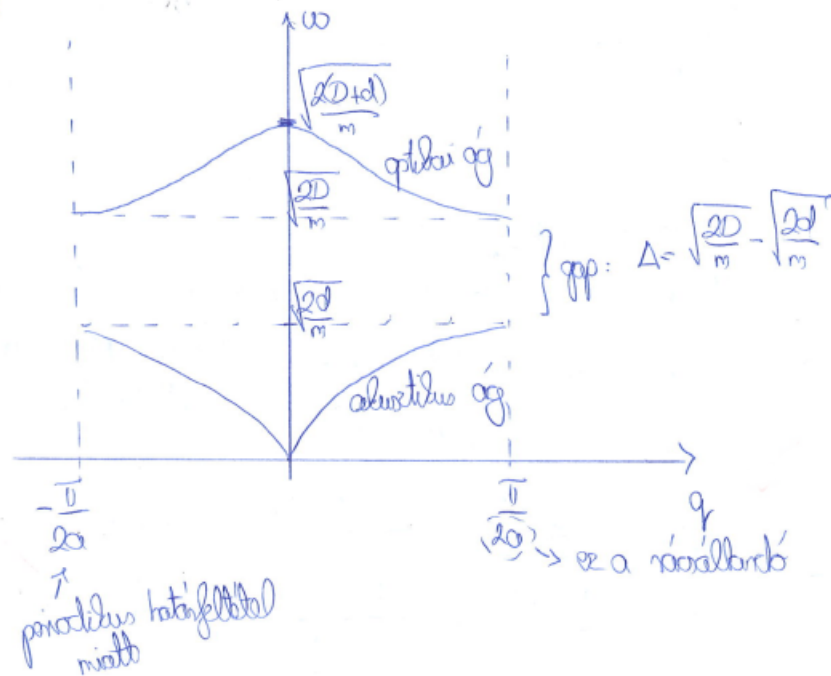
(kürzen exponentialen bezieht ω linear, nur mit feilschlag mehrmals)

$$\omega(q) = \left(\frac{D+d}{m} \pm \sqrt{\frac{(D+d)^2}{m^2} - \frac{4Dd}{m^2} \sin^2(qa)} \right)^{1/2}$$

$$\omega \quad q = \frac{\pi}{Na} \cdot l, \quad l \in \mathbb{Z}$$

↪ 2 dispersionen

F1. ábr.



segédtranszformáció:

$$\omega_{\pm}(q) = \left(\frac{D+d}{m} \pm \sqrt{\frac{(D+d)^2}{m^2} - \frac{4Dd}{m^2} \sin^2(qa)} \right)^{1/2}$$

$$\omega_{-}(0) = 0$$

$$\omega_{-}\left(\frac{\pi}{2a}\right) = \left[\frac{D+d}{m} - \left(\frac{(D+d)^2}{m^2} - \frac{4Dd}{m^2} \right)^{1/2} \right]^{1/2} = \left(\frac{D+d - |D-d|}{m} \right)^{1/2}$$

$$\text{t.h. } D > d: \omega_{-}\left(\frac{\pi}{2a}\right) = \left(\frac{2d}{m} \right)^{1/2}$$

$$\text{(egyszerűbb ha } d > D: \omega_{-}\left(\frac{\pi}{2a}\right) = \left(\frac{2D}{m} \right)^{1/2})$$

$$\omega_{+}(q) = \left[\frac{D+d}{m} + \left(\frac{(D+d)^2}{m^2} - \frac{4Dd}{m^2} \sin^2(qa) \right)^{1/2} \right]^{1/2}$$

$$\omega_{+}(0) = \sqrt{\frac{2(D+d)}{m}}$$

$$\omega_{+}\left(\frac{\pi}{2a}\right) = \left(\frac{D+d}{m} + \frac{|D-d|}{m} \right)^{1/2}, \text{ ha } D > d: \sqrt{\frac{2D}{m}}$$

2. (20 pont) Egy egydimenziós, a rácsállandójú kristályban az akusztikus fononág diszperziós görbéje:

$$\omega(q) = \sqrt{\frac{4D}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|,$$

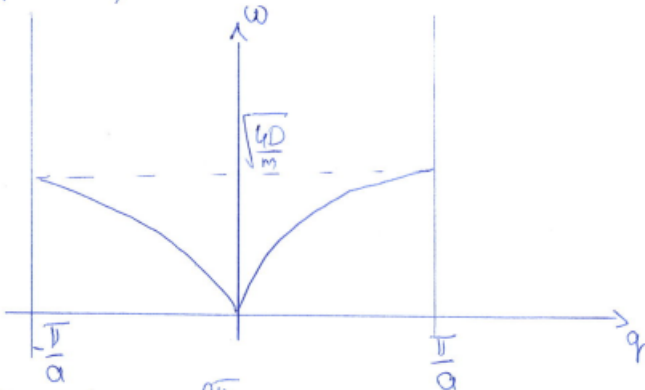
ahol D a l nc atomjait  sszek t  rug  er ss ge, m az atomok t mege  s a az atomok k z tti t vols g.

Határozza meg az ilyen diszperziós relációval leírható fononok $g(\omega)$ állapotsűrűségét!

Emlékeztető: A $g(\omega)$ állapotsűrűség megadja, hogy egységnyi térfogatú mintában az $(\omega, \omega + \Delta\omega)$ (kör)frekvenciaintervallumban $g(\omega)\Delta\omega$ darab rezgési állapot lehetséges.

$$\frac{F_2}{F_1} \omega(q) = \sqrt{\frac{4D}{m}} \cdot \left| \sin\left(\frac{q_0}{2}\right) \right|$$

1D+5 flocks.



periodikus határfeltétel esetén: $q = \frac{2\pi}{Na} \cdot l, l \in \mathbb{Z}$

Számoljuk ki, hogy egy Δq -höz hány m szükséges.

$$\Delta q_r = \Delta w \cdot \frac{dq_r}{dw} = \frac{\Delta w}{dw/dq_r}$$

moduł składowy

$$(2.) \frac{\Delta q}{2\pi/\lambda a} = \frac{N_0}{2\pi} g(w) \Delta w$$

 ± 19 [illegible]

Partiallindern aufstellen

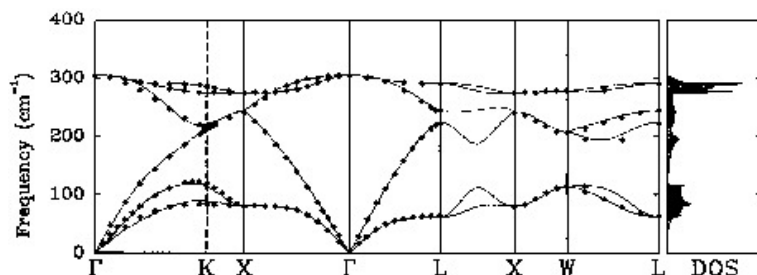
$$\frac{dw}{dq} = \sqrt{\frac{4D}{m}} \cdot \frac{a}{2} \cdot \sin\left(\frac{q_0}{2}\right) = \frac{a}{2} \underbrace{\sqrt{\frac{4D}{m}}}_{\omega} \sqrt{1 - \sin^2\left(\frac{q_0}{2}\right)} =$$

$$= \frac{0}{2} \sqrt{\omega_0^2 - \omega_0^2 \sin^2\left(\frac{0.99}{2}\right)} = \frac{0}{2} \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}$$

$$\Rightarrow \lim_{\Delta \omega \rightarrow 0} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2} = g(\omega) \Delta \omega$$

$$g(\omega) = \frac{1}{\pi a \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}} = \frac{1}{\pi a \sqrt{\frac{4D}{m} - \omega^2}}$$

3. (10 pont) Az ábrán egy kristályos anyag fononspektruma látható (azaz a lehetséges sajátfrekvenciák a sajátmódus hullámszámának függvényében) a Brillouin-zóna jellegzetes, magas szimmetriájú irányai mentén. (A kis pöttyök a mért értékeket, a folytonos vonalak pedig az elméleti jóslatot jelölik.) Hány dimenziós a kristály szerkezete, és hány atom van az elemi cellájában? Nevezzen meg egy anyagot, amely ilyen tulajdonságokkal rendelkezik!



Egy kristályos anyag fononspektruma és állapotsűrűsége (DOS).

③. 3 optikai ág és 3 akusztikus ág
(6 fonon ág)

akusztikus ágak száma = dimenzió

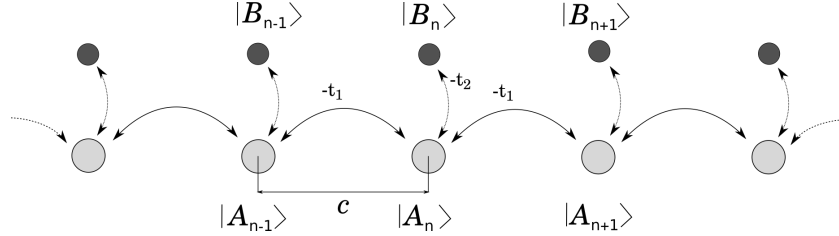
optikai ágak száma = dimenzió $\cdot$ (elemi cellában lévő atomok - 1)

$\Rightarrow n = 3$ dimenzió

$n \cdot (p - 1) = 3(p - 1) = 3 \Rightarrow p = 2$ atom az elemi cellában

Ilyen anyag a q/émant.

4. (30 pont) Egy hosszú, N atomból álló molekulaláncot, ahol minden A atomhoz egy B atom van kötve, szoros kötésű közelítésben modellezzük az ábrán látható módon. Ilyen modellt használhatunk például hosszú szénhidrogén molekulák legkülső elektronjainak leírására. Az *on-site* energia ϵ_A és ϵ_B az A és a B atomokon. Az ábrán folytonos vonallal összekötött szomszédok közötti *hopping* mátrixelemek különböznek csak nullától. Az $A - A$ atomokat összekötő mátrix elem nagysága $-t_1$ és illetve az $A - B$ atomokat összekötő paraméter $-t_2$. t_1 és t_2 valós számok. A rácspontokra lokalizált állapotokat $|A_n\rangle$ és $|B_n\rangle$ módon jelöltük az ábra szerint.



Tételezzünk fel periodikus határfeltételt.

a) Határozza meg az elektronok $E(k)$ diszperziós relációját a k hullámszámvektor függvényében a szoros kötésű közelítésben! Legyen $\epsilon_A = 0$, $\epsilon_B = 0$, $t_1 = 1$ és $t_2 = 2$ egység. Ábrázolja vázlatosan a diszperziós reláció(ka)t!

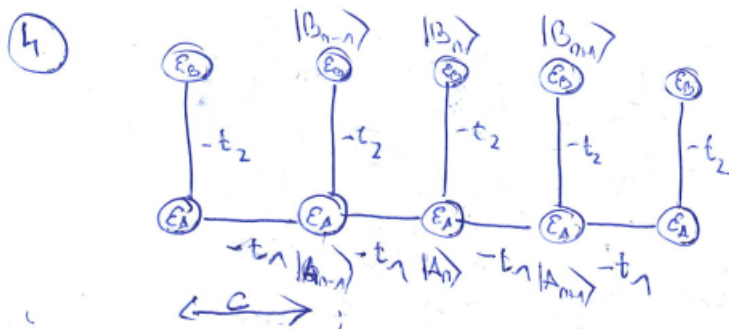
b) Van-e tiltott sávja (gap) a rendszernek? Ha igen, akkor mekkora a tiltott sáv?

c) Hogyan változik $E(k)$ alakja, ha $\epsilon_A > 0$?

Útmutatás. Írjuk fel a Hamilton-operátor mátrixát, ügyelve a hermitikusságra! A sajátvektort keressük a következő alakban:

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ Ae^{iknc} \\ Be^{iknc} \\ Ae^{ik(n+1)c} \\ Be^{ik(n+1)c} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (1)$$

ahol A és B konstansok.



$$\begin{pmatrix}
 \epsilon_A & -t_2 & -t_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 -t_2 & \epsilon_B & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 -t_1 & 0 & \epsilon_A & -t_2 & -t_1 & 0 & \dots \\
 0 & 0 & -t_2 & \epsilon_B & 0 & 0 & \dots \\
 0 & 0 & -t_1 & 0 & \epsilon_A & -t_2 & \dots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & -t_2 & \epsilon_B & \dots
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 Ae^{ik(n-1)c} \\
 Be^{ik(n-1)c} \\
 Ae^{iknc} \\
 Be^{iknc} \\
 Ae^{ik(n+1)c} \\
 Be^{ik(n+1)c}
 \end{pmatrix}
 = E(k)
 \begin{pmatrix}
 Ae^{ik(n-1)c} \\
 Be^{ik(n-1)c} \\
 Ae^{iknc} \\
 Be^{iknc} \\
 Ae^{ik(n+1)c} \\
 Be^{ik(n+1)c}
 \end{pmatrix}$$

$$-t_1 A e^{ik(n-1)c} + \epsilon_A A e^{iknc} - t_2 B e^{iknc} - t_1 A e^{ik(n+1)c} = E(k) A e^{iknc}$$

$$\cancel{t_1 A e^{ik(n-1)c}} - t_2 A e^{iknc} + \epsilon_B B e^{iknc} = E(k) B e^{iknc}$$

$$-t_1 e^{-ikc} A + \epsilon_A A - t_2 B - t_1 e^{ikc} A = E(k) A$$

$$-t_2 A + \epsilon_B B = E(k) B$$

$$\begin{pmatrix}
 \epsilon_A - t_1(e^{ikc} + e^{-ikc}) & -t_2 \\
 -t_2 & \epsilon_B
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 A \\
 B
 \end{pmatrix}
 = E(k)
 \begin{pmatrix}
 A \\
 B
 \end{pmatrix}$$

~ ~ ~

$$\begin{pmatrix} \epsilon_A - 2t_1 \cos(kc) & -t_2 \\ -t_2 & \epsilon_B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = E(k) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} \epsilon_A - E(k) - 2t_1 \cos(kc) & -t_2 \\ -t_2 & \epsilon_B - E(k) \end{vmatrix} \stackrel{!}{=} 0$$

$$(\epsilon_A - E(k) - 2t_1 \cos(kc))(\epsilon_B - E(k)) - t_2^2 = 0$$

$$\epsilon_A \epsilon_B - \epsilon_A E(k) - \epsilon_B E(k) + E(k)^2 - 2t_1 \epsilon_B \cos(kc) + 2t_1 \cos(kc) E(k) = t_2^2$$

$$E^2(k) + (2t_1 \cos(kc) - \epsilon_A - \epsilon_B)E(k) + \underbrace{\epsilon_A \epsilon_B - 2t_1 \epsilon_B \cos(kc) - t_2^2}_{\Delta P} = 0$$

$$E_{1,2}(k) = \frac{\epsilon_A + \epsilon_B - 2t_1 \cos(kc) \pm \sqrt{(2t_1 \cos(kc) - \epsilon_A - \epsilon_B)^2 - 4\Delta P}}{2}$$

$$\epsilon_A = 0 \quad \epsilon_B = 0 \quad t_1 = 1 \quad t_2 = 2:$$

$$E_{1,2}(k) = \frac{-2\cos(kc) \pm \sqrt{(2\cos(kc))^2 + 4(4)}}{2} =$$

$$= -\cos(kc) \pm \sqrt{\cos^2(kc) + 4} \quad \checkmark$$

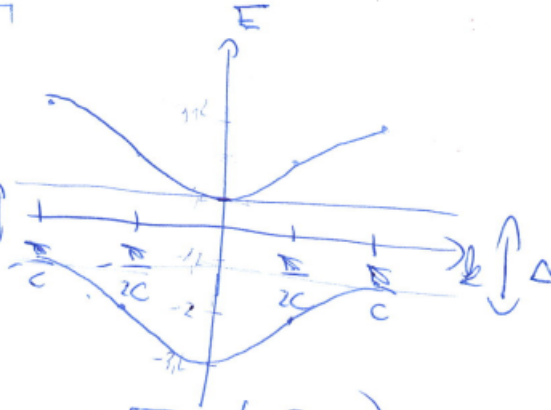
~ 2 ~

④

$$E_{12}(0) = -1 \pm \sqrt{5}$$

$$E_{12}\left(\pm \frac{\pi}{c}\right) = 1 \pm \sqrt{5}$$

$$E_{12}\left(\pm \frac{\pi}{2c}\right) = \pm 2$$



Van tilhott adv: $\Delta = -1 + \sqrt{5} - (1 - \sqrt{5}) = -2 + 2\sqrt{5} \checkmark$

$$\epsilon_A > 0:$$

$$E_{12}(k) = \frac{\epsilon_A - 2t_1 \cos(kc) \pm \sqrt{(2t_1 \cos(kc) - \epsilon_A)^2 + 4t_2^2}}{2} \checkmark$$

$$\epsilon_A = 0 \quad \epsilon_B = 0 \quad t_1 = 1 \quad t_2 = 2$$

$$E^2(k) + 2\cos(kc)E(k) - 4 = 0$$

$$E_{12}(k) = \frac{-2\cos(kc) \pm \sqrt{4\cos^2(kc) + 16}}{2} =$$

$$= -\cos(kc) \pm \sqrt{\cos^2(kc) + 4}$$

$$E(0) = -1 \pm \sqrt{5} \quad E\left(\pm \frac{\pi}{c}\right) = 1 \pm \sqrt{5} \quad E\left(\pm \frac{\pi}{2c}\right) = \pm 2$$

~ ~ ~