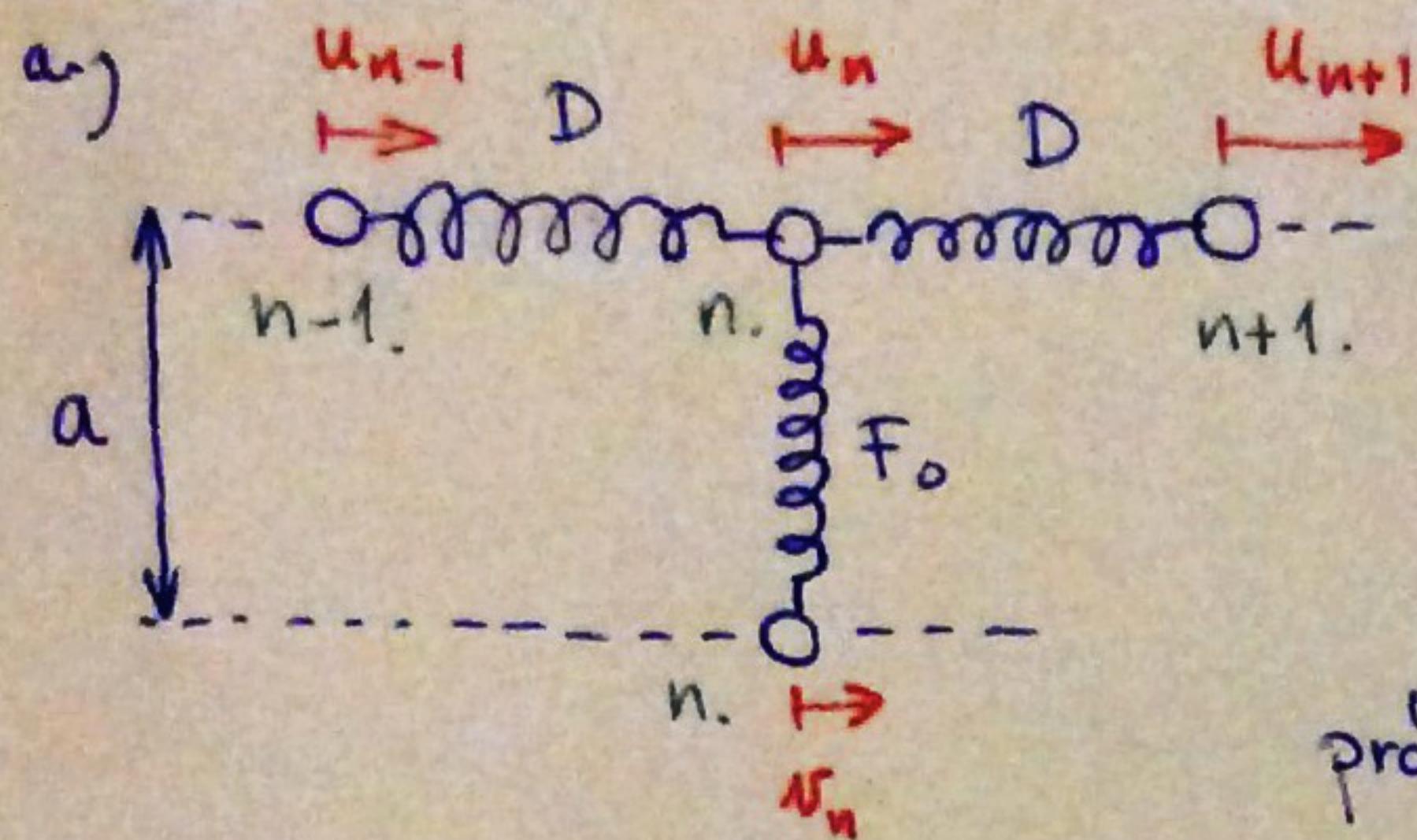


1.) feladat.



A mozgásegyenletek:

$$\ddot{u}_{n+1} = D(u_{n+1} - u_n) - D(u_n - u_{n-1}) - F_0 \frac{u_n - u_{n-1}}{a}$$

$$\ddot{u}_n = D(u_{n+1} - u_n) - D(u_n - u_{n-1}) + F_0 \frac{u_n - u_{n-1}}{a}$$

problamegoldás:

$$u_j(t) = u(q) \cdot e^{iqat} \cdot e^{-i\omega t}$$

$$v_j(t) = v(q) \cdot e^{iqat} \cdot e^{-i\omega t}$$

Ezzel a mozgásegyenletek a következő alakba írhatók:

$$(*) \quad -\omega^2 \begin{pmatrix} u(q) \\ v(q) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{D}{m}(e^{iqq} + e^{-iqq} - 2) - \frac{F_0}{ma} & \frac{F_0}{ma} \\ \frac{F_0}{ma} & \frac{D}{m}(e^{iqq} + e^{-iqq} - 2) - \frac{F_0}{ma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(q) \\ v(q) \end{pmatrix}$$

Felhasználva, hogy

$$e^{iqq} + e^{-iqq} - 2 = -2(1 - \cos(qa)) = -4 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right),$$

a következő egyenlet adja meg (*) nemtrivialis megoldását:

$$\det \begin{bmatrix} \omega^2 - \frac{4D}{m} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) - \frac{F_0}{ma} & \frac{F_0}{ma} \\ \frac{F_0}{ma} & \omega^2 - \frac{4D}{m} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) - \frac{F_0}{ma} \end{bmatrix} = 0 \quad (\square)$$

A determinánszt kifejtve:

$$\left[\omega^2 - \frac{4D}{m} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) - \frac{F_0}{ma} \right]^2 - \left(\frac{F_0}{ma} \right)^2 = 0 \quad , \quad \text{felhasználva az } A^2 - B^2 = (A+B)(A-B)$$

azonosságot:

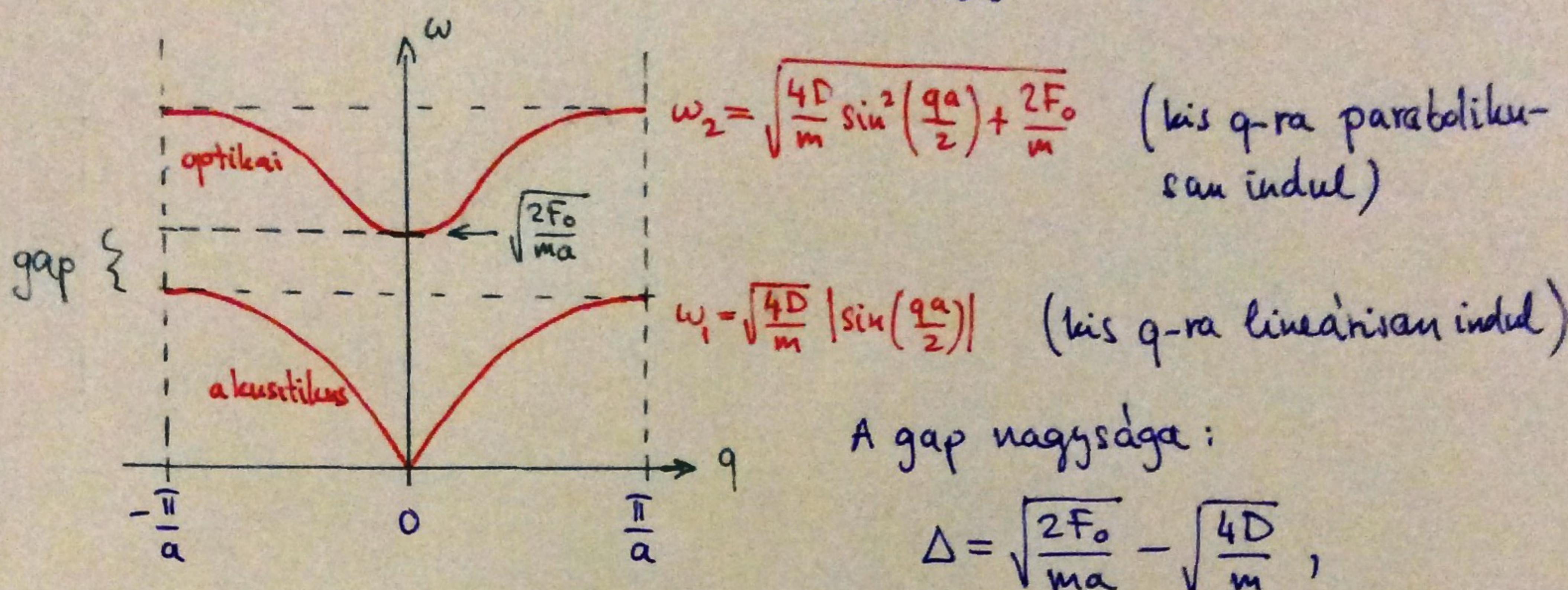
$$(**) \quad \underline{\omega_1^2 = \frac{4D}{m} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)} ; \quad \underline{\omega_2^2 = \frac{4D}{m} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + \frac{2F_0}{ma}}$$

A periodikus határfeltétel miatt csak azok a q hulladásról lehet megengedettek, melyre

$$e^{iqNa} = 1, \text{ azaz } q = \frac{2\pi}{Na} \cdot (\text{egész szám})$$

b.)

A kapott ($\star\star$) disperziós relációkat ábrázolva:



csak akkor van, ha $F_0 > 2Da$.

A (\square) mátrix sajátvektorait $q \rightarrow 0$ határesetben vizsgálva képet kapunk a tétejővő (akustikus és optikai) rezgési módszerekkel:

$\omega = \omega_1$ esetén:

$$\begin{pmatrix} -\frac{F_0}{ma} & \frac{F_0}{ma} \\ \frac{F_0}{ma} & -\frac{F_0}{ma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0 \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{normált})$$

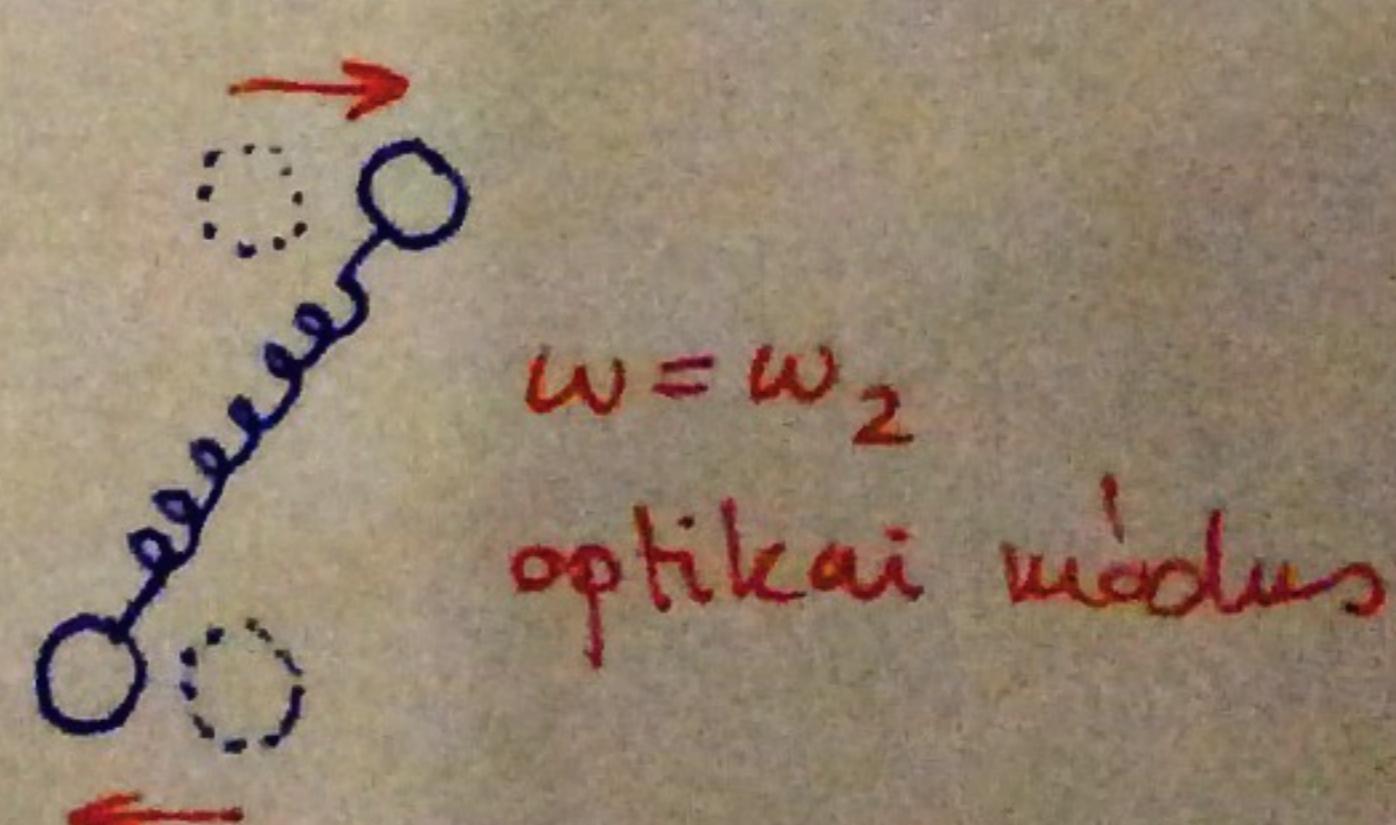
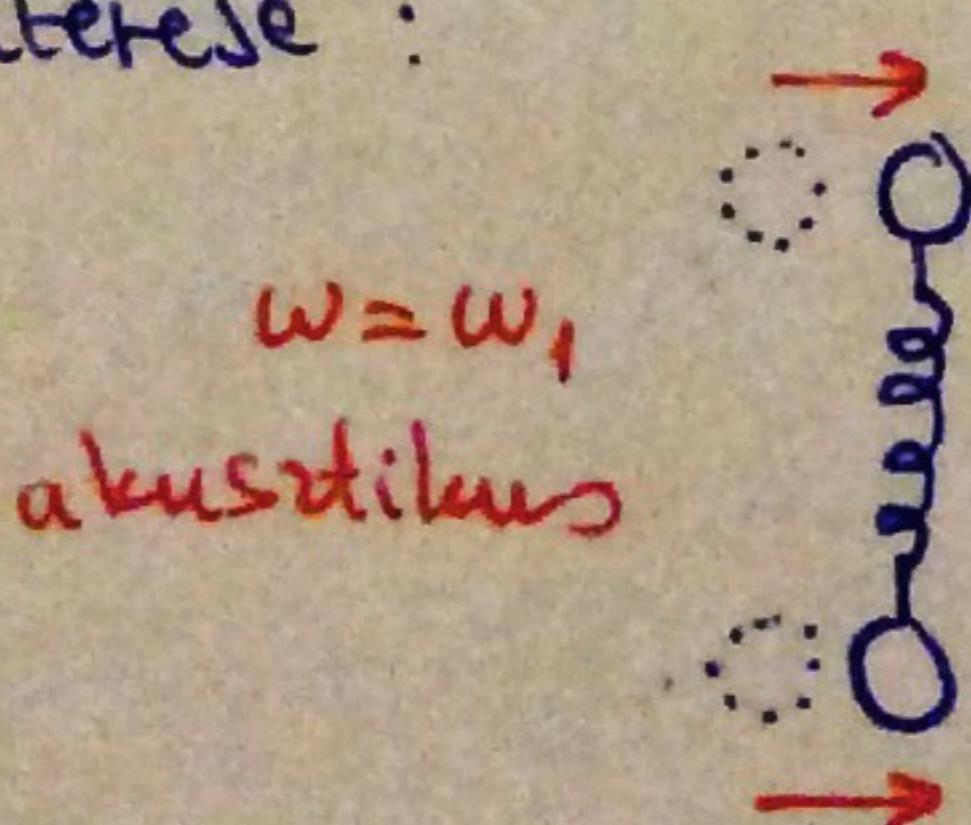
a sajátvektorok:

$\omega = \omega_2$ esetén:

$$\begin{pmatrix} \frac{F_0}{ma} & \frac{F_0}{ma} \\ \frac{F_0}{ma} & \frac{F_0}{ma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0 \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (\text{normalva})$$

a sajátvektorok:

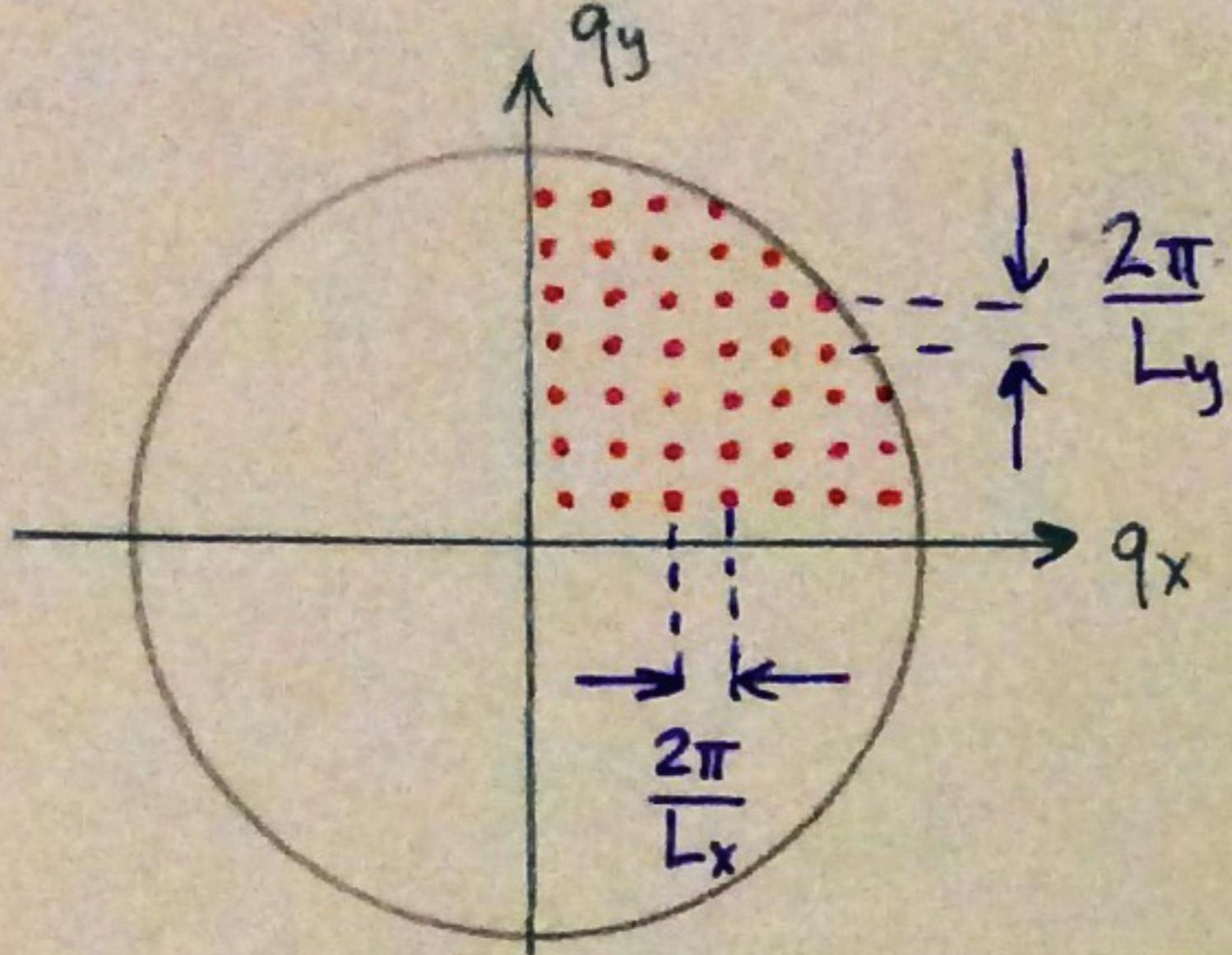
Tehát az ω_1 (akustikus) és ω_2 (optikai) módszban az egymás alatti atomok kitétése:



2. feladat.

$$\omega(q_x, q_y) = \gamma (q_x^2 + q_y^2), \text{ ebből: } 1 = \frac{q_x^2}{(\frac{\omega}{\gamma})} + \frac{q_y^2}{(\frac{\omega}{\gamma})} \quad (*)$$

(*) a hullámszám térben egy $\sqrt{\frac{\omega}{\gamma}}$ sugarú kör egyenlete, az arányos ω -hoz tartozó kontúrok tehát körök.



Az $L_x \cdot L_y = A$ területű mintában a megengedett hullámszámvektorok (a periodikus határfeltétel miatt) q_x irányban $\frac{2\pi}{L_x}$ távolságra, q_y irányban pedig $\frac{2\pi}{L_y}$ távolságra helyezkednek el.

Igy az ω -nál kisebb körfrekvenciájú spinhullámmódusok száma:

$$N(\omega) = \frac{\text{kör területe}}{\frac{2\pi}{L_x} \cdot \frac{2\pi}{L_y}} = \frac{\omega}{\gamma} \pi \cdot \frac{L_x L_y}{4\pi^2} = \frac{A\omega}{4\pi\gamma}.$$

Ezzel az állapotsűrűség:

$$g(\omega) = \frac{dN(\omega)}{d\omega} = \frac{A}{4\pi\gamma}.$$

Megjegyzés: sokszor $\frac{g(\omega)}{A}$ -t nevezik állapotsűrűségeknek.

3. feladat.

A gyémánt lapcentrálból köbös Bravais-rácsal rendelkezik, minden rácspontról egy két atomból álló bázis található.

Általánosan, d dimenziós kristályban, amely p atomból álló bázissal rendelkezik

d darab akusztikus és

d(p-1) darab optikai fonon-ág van.

Most d=3, p=2, így 3 akusztikus és 3 optikai ága van a disperziós relációkban.

4. feladat. a.)

A megadott potenciál: $V(x) = V_0 \left[1 - 2 \sin^2 \left(\frac{2\pi}{d} x \right) + \cos \left(\frac{2\pi}{d} \cdot x \right) \right]. \quad (*)$

Ez a potenciál d-szerint periodikus, így a rátállandó $a=d$.

b.) Alakítsuk át $V(x)$ kifejezését:

$$1 - 2 \sin^2 \left(\frac{2\pi}{d} x \right) = \sin^2 \left(\frac{2\pi}{d} x \right) + \cos^2 \left(\frac{2\pi}{d} x \right) - 2 \sin^2 \left(\frac{2\pi}{d} x \right) = \\ = \cos^2 \left(\frac{2\pi}{d} x \right) - \sin^2 \left(\frac{2\pi}{d} x \right) = \cos \left(\frac{4\pi}{d} \cdot x \right).$$

Ezt (*)-ba helyettesítve, majd a trigonometrikus függvények Euler-féle alakját felhasználva:

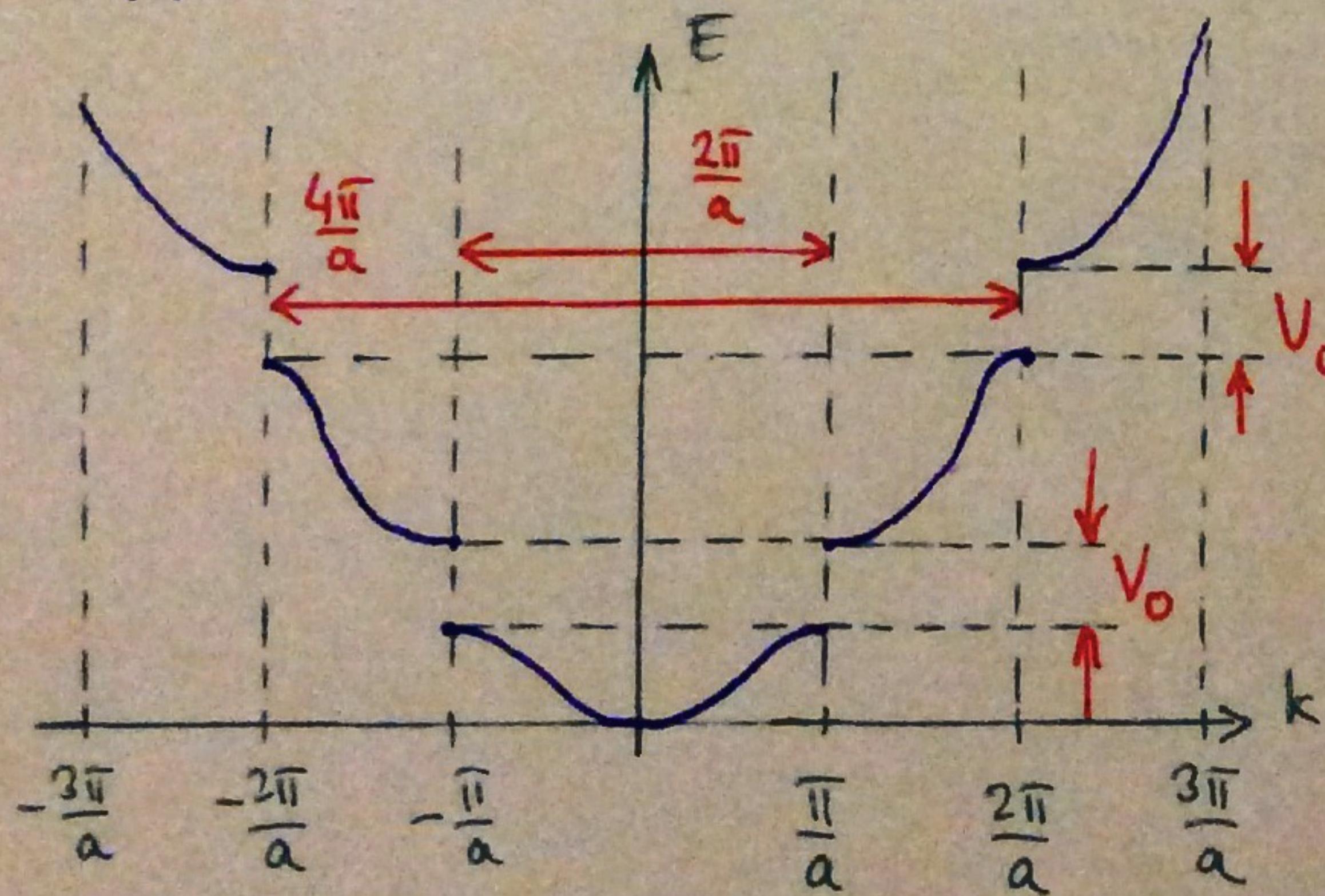
$$V(x) = V_0 \left[\cos \left(\frac{4\pi}{d} x \right) + \cos \left(\frac{2\pi}{d} x \right) \right] = \frac{V_0}{2} e^{i \frac{4\pi}{d} x} + \frac{V_0}{2} e^{-i \frac{4\pi}{d} x} + \frac{V_0}{2} e^{i \frac{2\pi}{d} x} + \frac{V_0}{2} e^{-i \frac{2\pi}{d} x}.$$

Ez már valóban ilyen alakú:

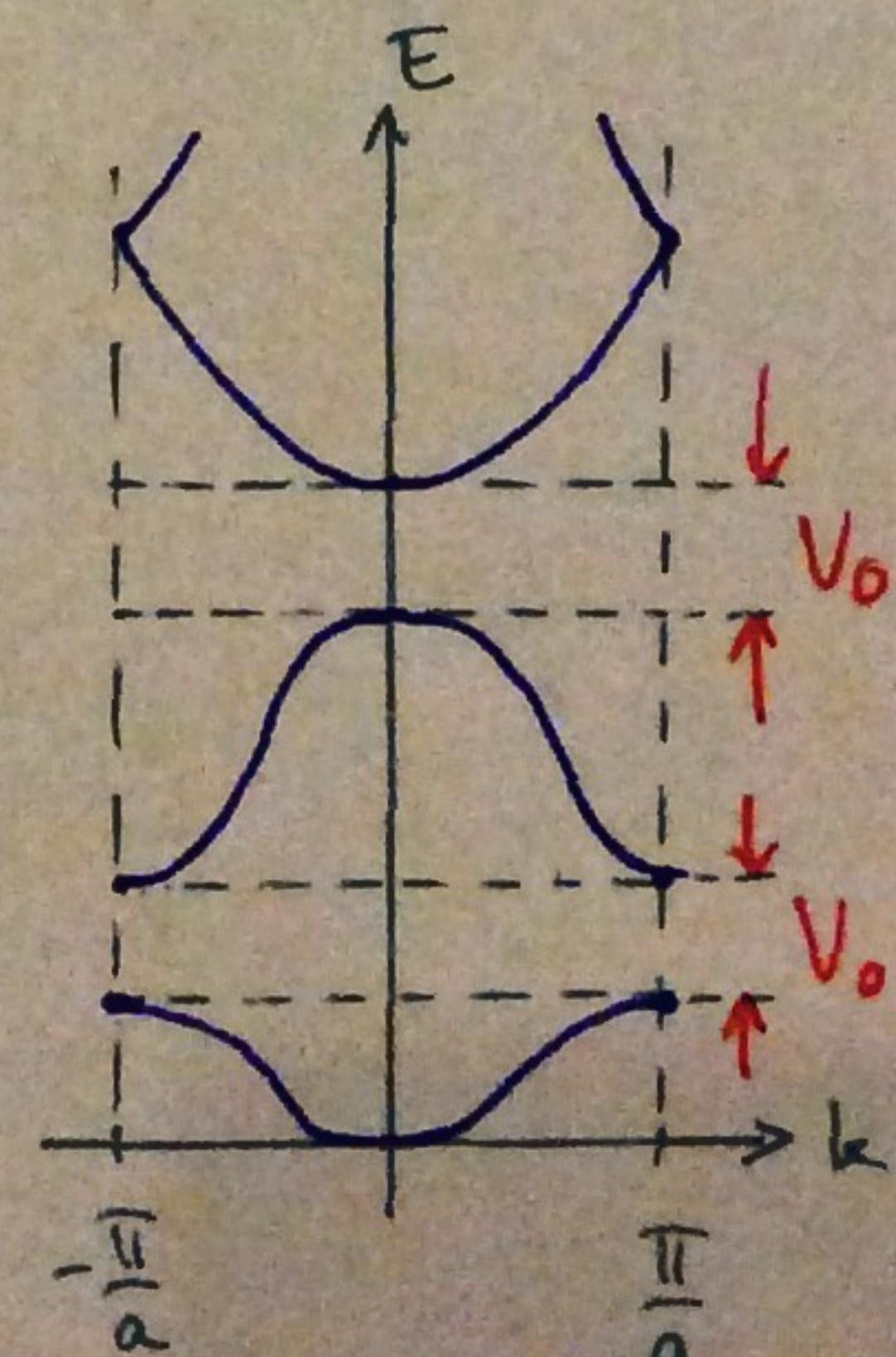
$V(x) = \sum_G V_G e^{i G x}$, hiszen most a reciprokrács-vektorok éppen $G = 0, \pm \frac{2\pi}{d}, \pm \frac{4\pi}{d}, \pm \frac{6\pi}{d}, \dots$ alakúak.

A közel szabad elektronok közelítésében a G reciprokrács-vektoroknál nyiló gap-ek nagysága $2|V_G|$.

Tehát a két sávszerkezetek:

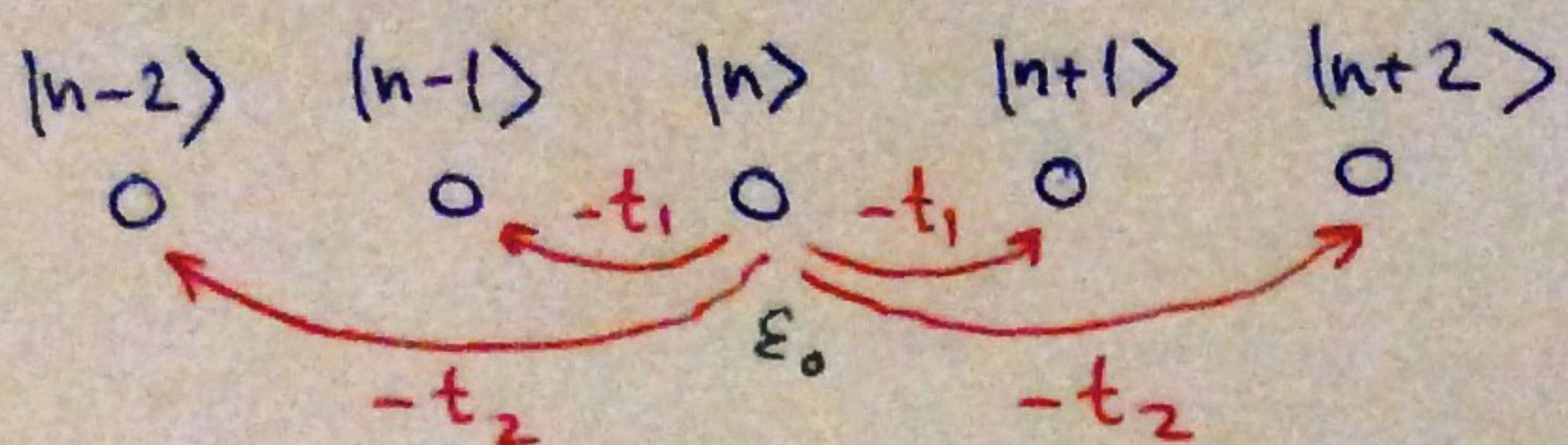


kiterjesztett zónák



redukált zónák

5. feladat.



A Hamilton-operátor matriixa (amely tényegeben egy szimédsági matrix) megkonstruálható. A sajátvektor komponenseit e^{ikna} alakban keresve a megoldandó egyenlet:

$$\begin{matrix} \vdots & \vdots & \vdots \\ n-2. & \dots & \dots \\ n-1. & -t_2 & -t_1, \epsilon_0 - t_1, -t_2 \\ n. & -t_2 & -t_1, \epsilon_0 - t_1, -t_2 \\ n+1. & -t_2 & -t_1, \epsilon_0 - t_1, -t_2 \\ n+2. & \vdots & -t_2 & -t_1, \epsilon_0 \dots \\ \vdots & 0 & \vdots & \ddots \end{matrix} \begin{bmatrix} 0 \\ e^{ik(n-2)a} \\ e^{ik(n-1)a} \\ e^{ikna} \\ e^{ik(n+1)a} \\ e^{ik(n+2)a} \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik(n-2)a} \\ e^{ik(n-1)a} \\ e^{ikna} \\ e^{ik(n+1)a} \\ e^{ik(n+2)a} \\ \vdots \end{bmatrix} \cdot E(k)$$

Az n -edik sort kifejtve:

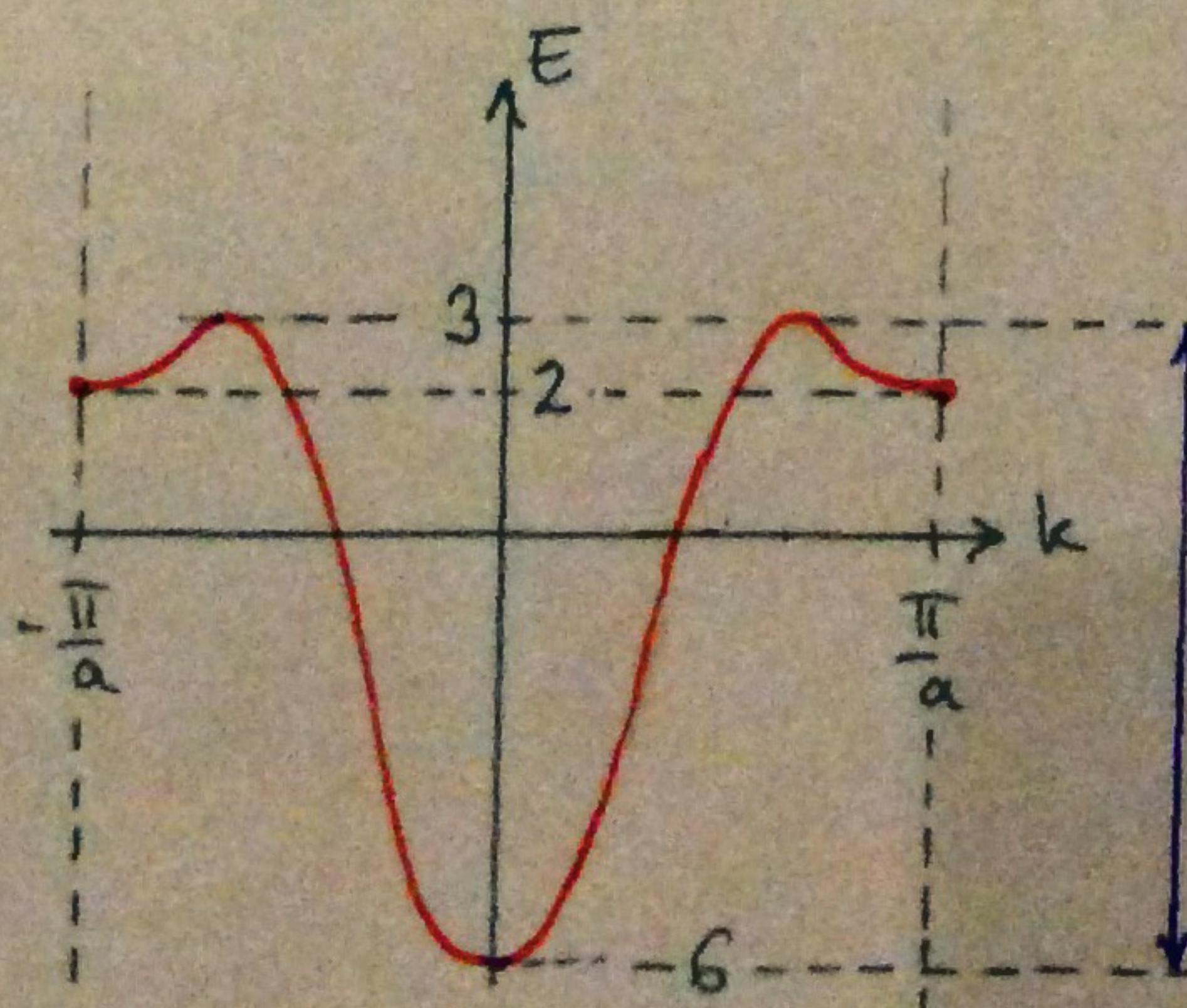
$$-t_2 e^{ik(n-2)a} - t_1 e^{ik(n-1)a} + \epsilon_0 e^{ikna} - t_1 e^{ik(n+1)a} - t_2 e^{ik(n+2)a} = E(k) e^{ikna},$$

egyszerűítve e^{ikna} -val, majd az exponenciálisokat kosinus-függvényekre átírva:

$$E(k) = \epsilon_0 - 2t_1 \cos(ka) - 2t_2 \cos(2ka).$$

A megadott adatokkal ábrázolva:

$$\begin{aligned} t_1 &= 2 \\ t_2 &= 1 \\ \epsilon_0 &= 0 \end{aligned}$$



sávszélesség: 9 egység