

Kondenzállt anyagok fizikája gyakorlat

gyakorlatozó: Kojánk Péter

gyakorlatozó beszéde: 11.10

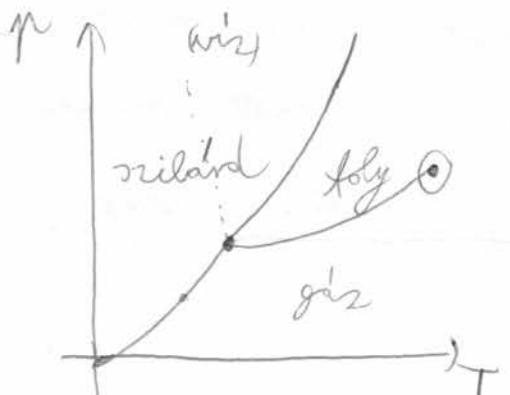
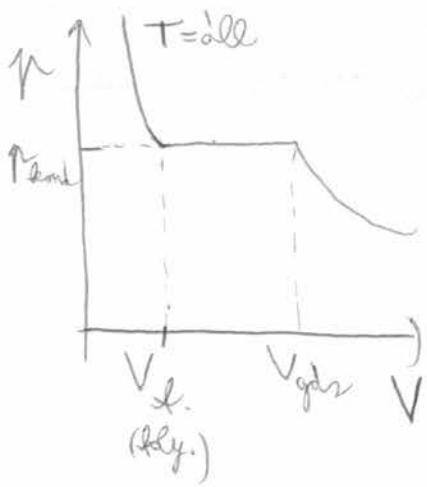
honlap: <http://softs.elte.hu> → gyakorlatozó

jegyzeteszet: 27H lesz (példatárat nem lehet használni, TK-ot általánosan igen, matematikát igen)

1. óra

0) Kond. anyagokban atomokat tartalmaznak, de kontinuumban leírva ez egy "kísérőlősei k. a."

1) Kondensáció:



$P-T$ -t
mentén
mátrix
met a fázis
szereplés
nélkül

kondensáció: $\text{gáz} \rightarrow \text{foly.}$
 $\rightarrow \text{szil.}$

Id. gáz:

$$PV = nRT; U = n \cdot C_V \cdot T$$

Fiz. fázis: $n=1$ (egységesi mérték)

$$n = A \cdot T - B \cdot (V - V_0); U = B \cdot T + \frac{1}{2} (V - V_0)^2$$

a fázis az állapotjegyeket
típusa jellemzi!

$\rightarrow A, B, D$ minden állapot

Ezek közelítés ¹¹ Vantaggioinál (Taylor-sorfejtés)

$$U = -U_0 + BT + \frac{D}{2} (N - V_0)^2$$

→ valójában ez is íth van

- U_0 a belső energia nullpunktja (akk. ha n=0 veszínk)

a szilárd testben levő atomok (még renegatán is)

vonzásuk egynél → a szilárd állapot a gázhoz képest
egy potenciálgyökerben van

→ U_0 : a -II- alja

szisztaálakulási (fázisát) \rightarrow az az aktiváló energia,
ami a szilárd fázisban levő (nyugó) atomok "kisvalaki"-
ára a szilárd fázisban levő (nyugó) atomok "kisvalaki"-

fázisára" kell

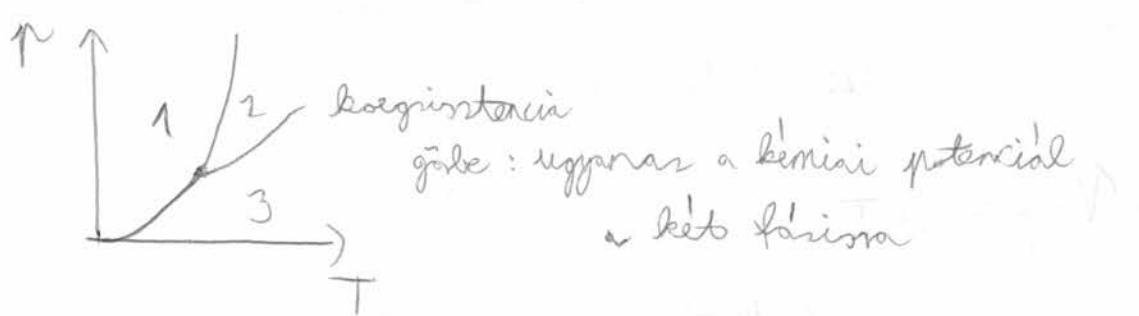
↓
ez a konstans az U_0 , amivel szisztaálalon nem osztak
foglalkozni (ha adott fázisban marad az nyugó), de
fázisállalkuláskor igen.

2. óra

0. derivált: G, F (termodyn. potenciál)	szilárd-testek: ($n=1$)	$\leftarrow A, C, D:$
1. derivált: E, S, V, p, T (allapotj.)	$p = A \cdot T - D \cdot (V - V_0)$,	molaris állandók
2. derivált: α_p, K_T, K_S (nyugdíjell.)	$E = C \cdot T + \frac{D}{2} \cdot (V - V_0)^2$	

hőmag. rendszer adinabatikus kin. helyzetenergia
 elh. kompr. kompr. modulus energia ("negatív") energia
 modulus

$$\alpha_p = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p, K_T = - \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)$$



$$\boxed{dE = T dS - p dV} ; G = E + pV - TS$$

$$dG = \cancel{T dS} + p dV + V dp - T dS - SdT$$

$$dG = V dp - SdT \quad V = \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_{T=\text{all}} ; S = - \left. \frac{\partial G}{\partial T} \right|_{p=\text{all}}$$

$$\boxed{\left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T = T \cdot \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V - p}$$

$$\frac{\partial E}{\partial V} \Big|_T = T \cdot \left. \frac{\partial S}{\partial V} \right|_T - p, \quad \left. \frac{\partial S}{\partial V} \right|_T = \frac{\partial p}{\partial T} \Big|_V$$

$$D \cdot (V - V_0) = T / A - \left(\cancel{A} T - D \cdot (V - V_0) \right)$$

$$D \cdot (V - V_0) = D \cdot (V - V_0) \quad \Rightarrow \text{ugyanaz a } D \text{ merev } p\text{-ban és } E\text{-ben}$$

~~potenciálköl~~

2) Clausius - Clapeyron - egyenlet:

(fázisáthalású):

$$\left(\frac{dp}{dT} \right)_{1,2} = \frac{\Delta S}{\Delta V} = \frac{L_2}{T(V_2 - V_1)}$$

bázisfázisáthalásúkor:

$$(T\Delta S) = L = q$$

$$(T_2 - T_1) \quad \text{nincs}$$

hőm. növekedés!

1: foly. fázis

2: ~~gáz~~ fázis

ha nem ideális
van Hugelaki
munkás is
végünk

energiás hőlünk, ami egy
potenciálgyöörök „szint”
résekkel kiemeli őtől



$$V_2 - V_{g2} \gg V_1$$

($g2$: Van der Waals-gáz → nem ideális
 $g1$: ideális-gáz)

$$(p + \frac{a}{V^2}) \cdot (V - b) = nRT$$

első korrekció (nem terlogálva a koz.-kéntek)

↓

$L \approx$ áll T-ben (nem teljesen igaz)

$$\frac{dL}{dT} = \frac{\Delta S}{\Delta V} = \frac{L_2}{T(V_2 - V_1)} = \frac{L}{T \cdot V} = \frac{Lp}{nRT^2} \quad \leftarrow V = \frac{nRT}{p}$$

elhanyagoljuk

a második fázis
folyadék

terfogatoss

$p \sim n$

$$\frac{dp}{n} = \left(\frac{L}{nRT^2} \right) dT \rightarrow dp = -\frac{L}{nRT} + \text{konst}$$

$$\underline{\underline{p = p_0 \cdot \left(e^{-\frac{L}{nRT}} \right)}}$$

$$\sim n = n_0 \cdot e^{-\frac{L}{nRT}} = n_0 \cdot e^{-\frac{E}{kT}}$$

$\frac{L}{n} = E$ (aktivációs energia)

\Rightarrow az eprz. eprz. Boltzmann-féle aktivitás füszere

3)

$$p = A \cdot T - D (V - V_0)$$

$$\alpha_p = \frac{1}{A} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p$$

$$\alpha_{p, \text{real}}^{\text{id. grz}} = \frac{A}{DV} = \cancel{0.01} \cdot 10^{-5} - 10^{-6} \text{ K}^{-1}$$

$$\alpha_{p, \text{id. grz}} = \frac{1}{T} = \frac{1}{300 \text{ K}} = 3 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$$

terhőtükör melegítés

\Rightarrow a gázok nagyon erősen visszatérítik a melegítést hőszára

$$K_T^{\text{id. grz}} = \frac{1}{p} = 10^{-5} \text{ Pa}^{-1}$$

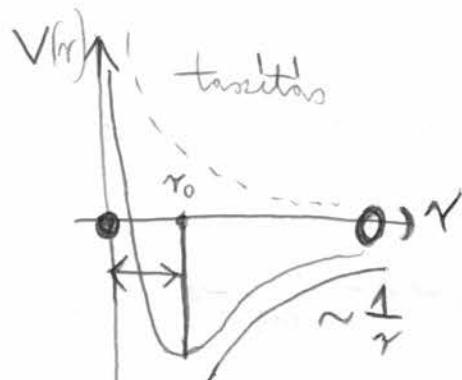
$$K_T^{\text{Hall}} = 3 \cdot 10^{-10} \text{ Pa}^{-1} \quad (\leftarrow \text{ha itt is } \frac{1}{p} \rightarrow \text{felfeléreink}, 10^5 \text{ atm nyomás esne be})$$

\Rightarrow a szilárd anyag nem nagyon össenhangolható

(mert már elég közel vanak egymáshoz a részecskék)

\rightarrow 0 kompressziómódussal közelíthetünk

Potenciálök

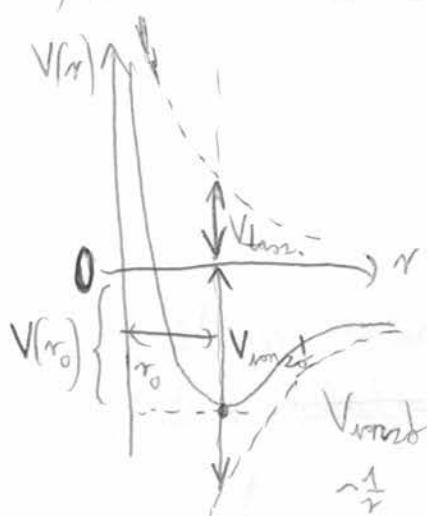


Egyrennétebb kör: 2 atom egymáshoz viszsen

Pauli-elv miatt van ez a tasztás

3. óra

1) Pátpotenciál (sim.)



$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\lambda}{r^n}$$

Coulomb \rightarrow vonz k.l.
-pot.

V_{vonz}
 \downarrow
nem feltételező
 $\frac{1}{r}$ -es, pl. lehets
dipol-dipol $(\frac{1}{r^2}) \dots$

Gl: az eddigi esetekben makromennyiségek (E, V) szerepeltek. Ki lehetséges ilyet fizetni mikromennyiségekkel (R_0) is?

r_0 : egysélyi távolság

$$f = -\left(\frac{\partial V}{\partial r}\right)_{r_0} = 0 \quad \rightarrow \text{előiről szereket végezhetnek az atomok}$$

Belső energia:

$$E = BT + \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2}_{\text{"szegélyi kinetikus energia"} \text{ nél}} + \underbrace{V - V_0}_{\text{potenciális energia}}$$

egysélyi helyen:

$$f = -\left(\frac{\partial V}{\partial r}\right)_{r_0} = 0 = -\frac{1}{r^2} \left(-\frac{\alpha}{r} + \frac{\lambda}{r^n} \right) \Rightarrow \frac{\partial V}{\partial r} = -\frac{\alpha}{r^2} (-1) + \frac{\lambda}{r^{n+1}} \cdot (-n) \Big|_{r=r_0} = 0$$

$$V(r_0) = -\frac{\alpha}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \quad \frac{\alpha}{r_0} = n \cdot \frac{\lambda}{r_0^n} \Rightarrow \frac{\lambda}{r_0^n} = \frac{1}{n} \frac{\alpha}{r_0}$$

~~Ha n kicsi, a potenciálgyöör is kis lesz (pl. dipolok)~~

$\frac{\lambda}{r^n}$ mindenkor emelkedő és összegyűrűs hatásra

$$V(r_0) = -\frac{\alpha}{r_0} (0,9)$$

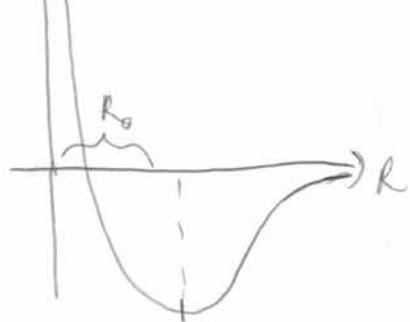
↓

az ionpot

- Lenard-Jones-pot. ~~Kristályos alakba~~ = palyopotenciál
- tökötőtől gyakoriból vonhatók

2) Kohäsziós potenciál ($U(R)$)

$U(R) \uparrow$ Ez nem ugynoz, mint a palyapot.!



$$U(R) = -\frac{\alpha}{R} \cdot (A_M)^{1/n} + \frac{\lambda^*}{R^n}$$

kristályra jellemző kohäsziós
 potenciál (Madelung)
 → palyapot
 felépítés
 a hossz

$$\left. \frac{\partial U}{\partial R} \right|_{R_0} = 0 \Rightarrow U(R_0) = -\frac{\alpha}{R_0} \cdot A_M \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

R_0 : rekallando

R_0 kicsit kisebb, mint r_0 .

• palyopotenciál



→ r_0 : molekula egységesíti

kötöttessége

• kohäsziós potenciál



→ R_0 : rekallando

⇒ az atomok kisabudáthatók a kristályos anyagból a kohäsziós potenciálhoz kell „legyőzni”

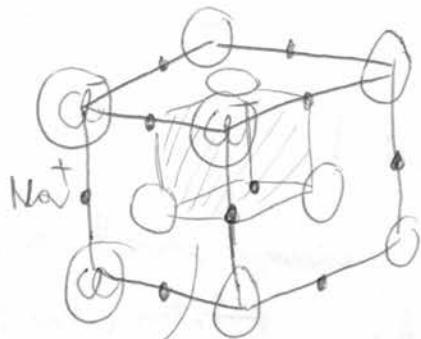
$$3) E = BT + \frac{1}{2} (V - r_s)^2$$

$$(E = E_0 + \dots)$$

↑

$$V_0 = \dots$$

← illendo S-en a kinetikus tag nem változik, így elegendő a potenciális taggal foglalkozni

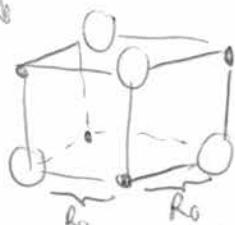


$$r_{\text{Na}^+} < 1\text{ Å}$$

$$r_{\text{Cl}^-} > 2\text{ Å}$$

$$\Rightarrow \frac{V_{\text{Na}^+}}{V_{\text{Cl}^-}} = \frac{1}{8}$$

Nagy műk.



$$\frac{8}{8} + \frac{6}{2} = 4 \text{ Cl}^- / \text{cella}$$

$$1 + \frac{12}{4} = \frac{4}{3} \text{ Na}^+ / \text{cella}$$

1 kockakötöldön $\frac{1}{2} \text{ Cl}^-$, $\frac{1}{2} \text{ Na}^+$ van ($\frac{1}{2}$ molekula)
1 molekula (par) energiája körülbelül

$$E = \frac{1}{2} N_a \cdot U = N_{\text{mol}} \cdot U$$

(molekulák az energiájukat és töke

a potenciális rétege)

$$N_{\text{Cl}^-} + N_{\text{Na}^+} = N_a^+ + N_a^- = N_{\text{molekula}}$$

a két elektromos
szíma

→ több molekulára, mint
molekulaszerkezetben
es használható, és
az előbb is gyakor
hatásokat meg az
energiát

$$N_{\text{atom}} \cdot V_{\text{cella}} = V_{\text{(össz)}}$$

$$R_s^3 = V_{\text{cella}} = \frac{V}{N_a} = \frac{V}{2N_{\text{mol}}} \Rightarrow$$

$$V = 2N_{\text{mol}} \cdot R_s^3$$

kapszidatot

teremtettük egy

makromenny. (V) és egy

-f-

mikromenny. (R_s) közt

4) K_T, K_S

$$K_S = \frac{1}{K_P} \quad K = \frac{C_P}{C_V} = \frac{k+2}{k}$$

$$K_S = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_S$$

$$k=3 \rightarrow K=\frac{5}{3}$$

$$k=5 \rightarrow K=\frac{7}{5}$$

$$dE = TdS - pdV \rightarrow -p = \left. \frac{\partial E}{\partial V} \right|_S$$

$$K_S^{-1} = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S = V \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \right)_S$$

$$K_S^{-1} = \underbrace{2 \cdot N \cdot R_0^3}_{V} \cdot \frac{\partial^2}{\partial V^2} (N \cdot U(R)) \Big|_{R=R_0}$$

$$U(R) = -\frac{\alpha}{R} \cdot A_M + \frac{\lambda^*}{R^n}$$

$$V = 2N \cdot R^3$$

$$K_S^{-1} \Big|_{R=R_0} = (3 \cdot 10^6 \text{ Pa})$$

↑
erstes
neg V, -nak

$$\frac{\partial V}{\partial R} = 6NR^2$$

$$K_S^{-1} = \frac{A_M}{18} \cdot \left(\frac{7e^2}{R_0^4} \right) (n+1)$$

$$\frac{\partial}{\partial V} = \left(\frac{\partial}{\partial R} \right) \frac{\partial R}{\partial V} = \cancel{\frac{\partial}{\partial R}} \cdot \frac{1}{\frac{\partial V}{\partial R}} \cdot \frac{\partial}{\partial R}$$

ist: mikromeng. (R_0) \Rightarrow makromeng. (K_S)

(effektiv koordinationszahl)

Mehrcole a Modellung - stimmt keine
magnetooptische!

↓

$$\text{Modellung - stimmt: } n = 1 - \sigma \quad (A_F = A_M)$$

$$0) \quad U(R) = -\frac{\alpha}{R} \cdot A_M + \frac{\lambda^*}{R^n} \quad \left| \begin{array}{l} V(r) = -\left(\frac{7 \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \cdot \frac{1}{r} + \frac{\lambda}{r^n} \\ \text{potentiale} \end{array} \right.$$

$R_0 \neq \infty$ kohäsos potentiell

parapotentiell

$n_0 = \infty$

$$U(R) = -V_0 \left(A_S \cdot 2 \cdot \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 - A_L \cdot \left(\frac{\sigma}{R} \right)^12 \right)$$

Vander Waals - pot.

$$V(r) = -V_0 \left(2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^12 \right)$$

London - Fajans - pot.

$$V(r) = -V_0 \left(2 \cdot e^{\alpha(1-\frac{r}{r_0})} - e^{2\alpha(1-\frac{r}{r_0})} \right)$$

Morse-pot.

Mi a kapcsolat a kölönbség és a potenciál között?

1) Kohéziós-potenciál (Coulomb-tanulmány ről)

$$\frac{N}{2} \cdot N = E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, i \neq j}^N V(r_i - r_j) =$$

↑ ↑
i atomok attérők
száma kölönbség
↓ ↓
 $\frac{N}{2}$: párba számlálás alkotók száma

igye ugyanazt az összegzőt kijuttuk,
mivel többeszer tülmélyítő hatásra
szüksége van a kölönbséghez, melyet effektív
energiának nevezünk

kohéziós potenciálra:

az atomok közötti kölönbségekkel, de összessége,

hogy az összes többi atomnak a vele alkotott
páros mellett potenciált energiát hordoz

\rightarrow minden atomnak az összegzett kölönbségek szumme (i=1)

helyettesítésre kerül a kölönbségek közt

Mivel a kölönbségek közt
nincs elválasztás, a kölönbségek közt

az összegzett kölönbségek közt

$$\cancel{\frac{N}{2} \cdot N} = \frac{N}{2} \cdot \sum_{i=1}^N V(r_i) =$$

$\underline{= U(\text{kohéziós potenciál})}$

$$E = \frac{N}{2} \left[\lambda \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{r_i} \right) + \lambda \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i^n} \right] =$$

$$r_i = r_i R_0 \quad \text{atomok közi távolság}$$

$$r_i: \text{egész szám } \in \mathbb{Z}$$

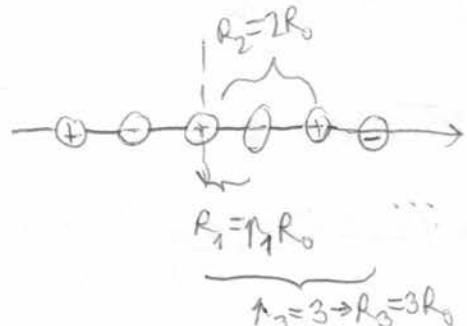
$$= \frac{N}{2} \left(-\frac{\lambda}{R_0} \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i} \right) + \frac{\lambda}{R_0^n} \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{r_i^n} \right) \right)$$

\downarrow
n indexek Madelung -szám

$$A_M = \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i}$$

2) A_M :

a) 1D (ion) $r_2=2$



Más:

$$Z = 2 \cdot Z_{\text{ion}} \leftarrow Z \text{ eligeletből}$$

vagy, ha 1-től leírunk

$$V(r) = -\left(\frac{Z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \cdot \frac{1}{r} + \frac{\lambda}{r^n}$$

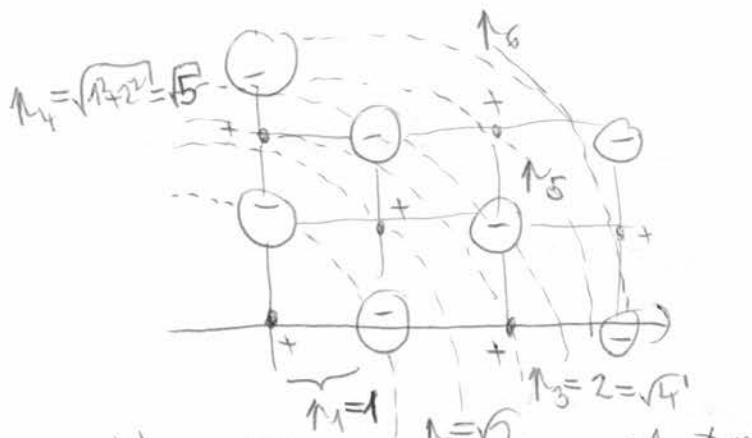
p-vel!
(ellenkező töltések
ion nincs abban a
interakcióban)

$$A_M = \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i} (-1)^{i-1} \rightarrow A_M^{10} = 2 \left(\frac{1}{1} - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} - \frac{1}{6} \dots \right) =$$

$$= 2 \left[\frac{1}{1}x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{4}x^4 \dots \right] = 2 \cdot \ln(1+x) \Big|_{x=1} =$$

$$= 2 \ln 2$$

b) 2D (ion)



r_1 : elso koordinácia
r₂: sugar horrgyűrűkben
 r_3 : n. koord. sugar - II -

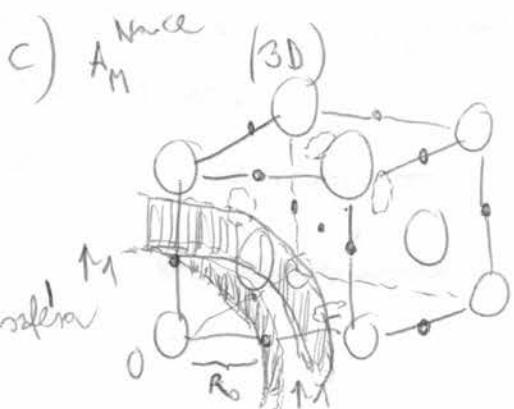
4 térenkötözők
 $\sqrt{2}$ atom van VF sugarban

$$A_M = 4 \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{4}} + \frac{2}{\sqrt{5}} - \frac{1}{\sqrt{8}} + \frac{1}{\sqrt{9}} \dots \right)$$

↑ + töltés miatt

$4 \cdot 2 \cdot \frac{1}{2}$. törlődés

$\frac{1}{2}$ atom van 1 negyedterületen (attólgnak a mögök
térbenek $\rightarrow \frac{1}{2}$ törlőfaktor)



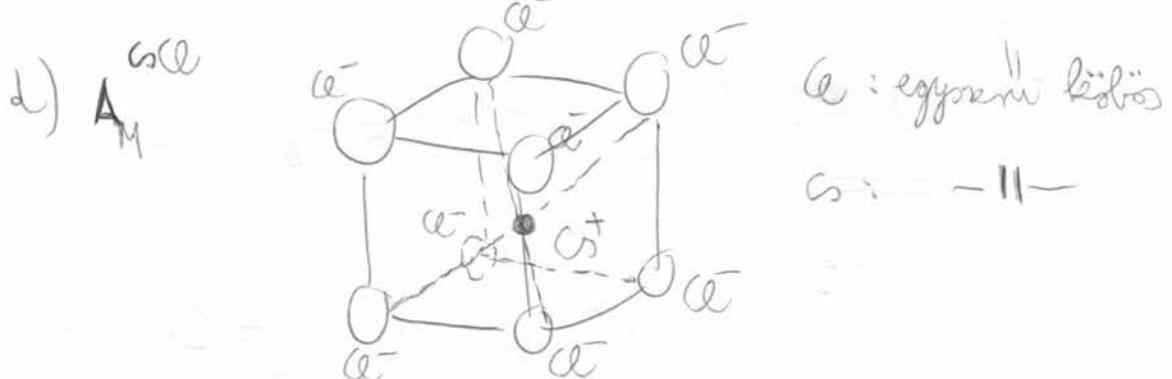
Nel
6 atom min. körfölle

$$A_M = \left(1 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} \dots \right)$$

2 egymásba
tölt. fcc
sec-nel
a k. nél 12

-11-

$A_M^{\text{Nel}} = 1.7445$



a : egyszerű körös

c : - II -

c -nek 8 Cl^- szomszédja van

A_M : effektív rész "koordinációs" szám

$$A_M^{CsCl} = 1,7626 = \left(\frac{8}{1} - \dots \right)$$



$$> A_M^{\text{NaCl}}$$

így tűnik, hogy a nagyobb A_M miatt a CsCl kedvezőbb szerkezetet

vállal (megij) vonás szempontjából

↓
míg a legtöbb szerkezet a Null!



Nem a vonás határosa meg alapvetően a törésekben,
hanem a tartalts!



az a lehely, hogy befér-e egy kis helyre az ion!
(ionkristályok végzettsége ~ mérte a lehely)

(pl. Na)

ha befér, akkor
a tartalts ^{energia} miatt

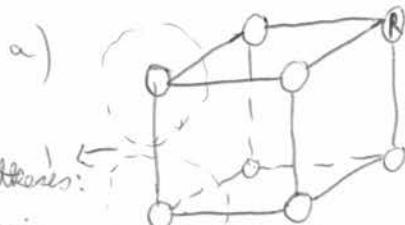
az oroszlán szerkezetet
alakít ki

Struktúrakészszimmetria

Konsultáció: jövő héten 10-12 (másik csoport gyakorlata alatt)

3D-s rendszerek Bravais-cellái

1) SC (simple cubic, egyszerű kőső)



a) $N=1$ atom/elemi cella → primitív cella

(amiből 1 atm van)

kitülsz:

mennyi
dely van

az előző
szövetségig

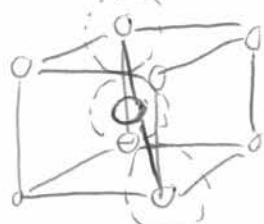
$\rightarrow 2R$

gömbbel
versük

kölcsönös atomokat a lehetséges legnagyobb sugárral

\Rightarrow a cellatartalmakhoz köthetően az atomok mekkora helyet foglalnak el $= K$

2) BCC (tizenötös kőső)



$$N^{BCC} = 2 \Rightarrow K^{BCC} = \frac{V_{gömb}}{V_{cella}} = \frac{2 \cdot \frac{4\pi}{3} R^3}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}} R\right)^3} = \frac{\frac{8\pi}{3} R^3}{\frac{64}{3\sqrt{3}} R^3} =$$

$$\sqrt{3} a = 4R$$

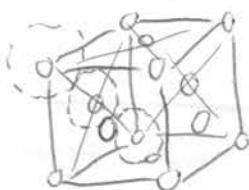
(4 sugar ster a
testhez)

$$= \frac{\pi \sqrt{3}}{8} = 68\%$$

\Rightarrow a BCC módonban tölti ki a test,

kevesebb hely van

c) FCC (tizenötös kőső)

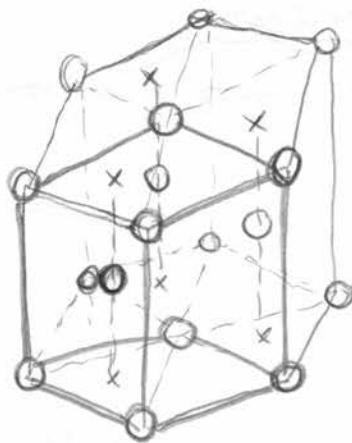


$$N^{FCC} = 4$$

$$K^{FCC} = \frac{V_{gömb}}{V_{cella}} = \frac{4 \cdot \left(\frac{4\pi}{3} R^3\right)}{\left(\frac{4}{\sqrt{2}} R\right)^3} = \frac{16\pi}{6} = 74\%$$

$$\sqrt{2} a = 4R$$

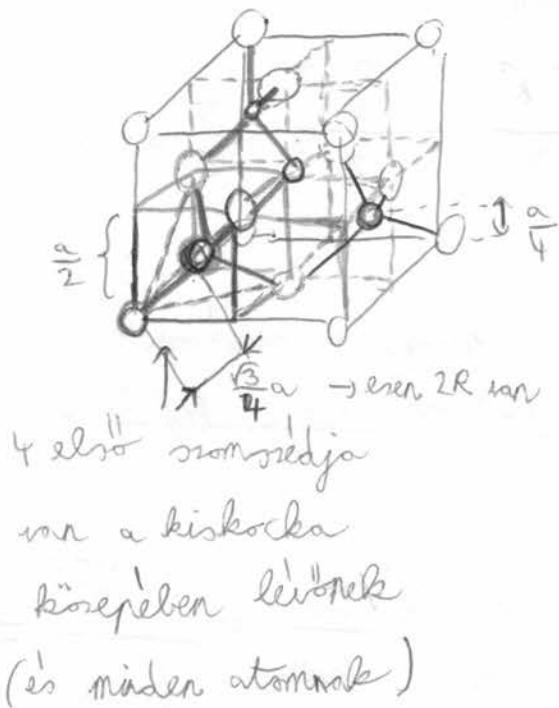
d) HCP (hatzögös rác)



- O : elemi cella
(a HCP nem elemi!)

$$K^{\text{HCP}} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} = 74\%$$

e) gyémánt (diamond)

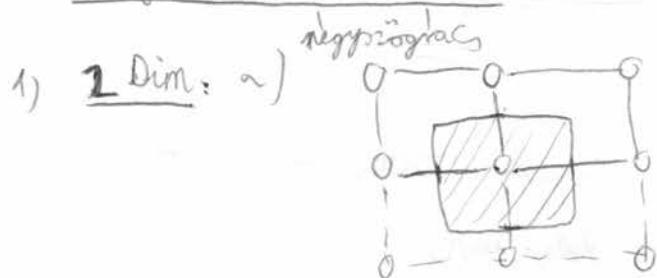


$$\sqrt{3} \cdot \left(\frac{a}{2}\right) = 4R$$

$$a = \frac{8}{\sqrt{3}} R$$

$$N^0 = 8, K^0 = \frac{8 \cdot \left(\frac{4\pi}{3}\right) \cdot R^3}{\left(\frac{8}{\sqrt{3}} R\right)^3} = \frac{\sqrt{3} \pi}{16} = 34\%$$

Wigner - Seitz - cellák



Def.: WS-cellák

egy kisemellett rácsonkba legközelebb lersz pontok
mentani helye

A Wigner - Seitz - cella előnye, hogy a szélén nincsenek atomok, és viszonylag gömbösen

↳ potenciálban jó alkalmazás!

Negyöngyötök WS-cellája önmaga

→ többszörökkal rekesztetve ki

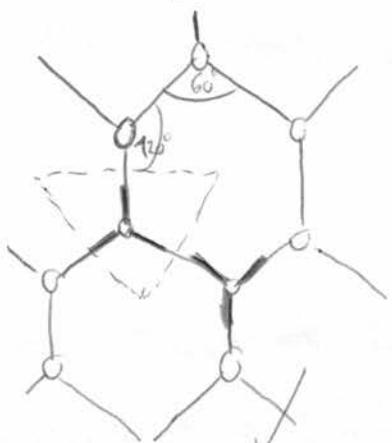


1 atom \rightarrow 6 surrounding

WS-cell: hexagonal

nem primitív cella ($\frac{1}{2}$ atom van benne)

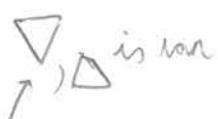
c) hexagonal (mehsejtőracs)



1 atom \rightarrow 3 surrounding

∇ , Δ er nem WS-cell!

(nincs jó vizek.)

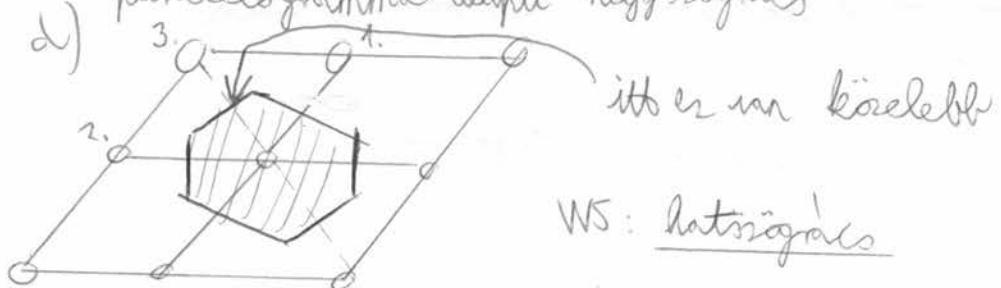


Mert nem tördítik belülle felépíteni az egész rendszert elből!

NINCS WS-cella!

nem primitív
cella!

d) parallelogramma alapú negyedracs

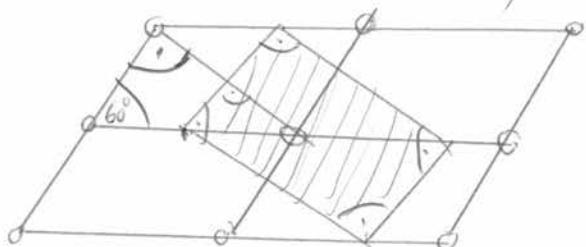


itt van közelebb

WS: hexagonal

- spec. eset: (szögök miatt)

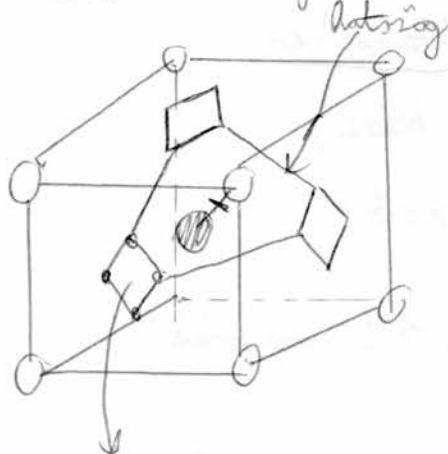
DE nem mindig!



WS: rhombic!

2) 3 dim:

Sikosat kell rajzolni



határig testtől teltek

ha a sik teljesen a cellán,

már nem "lesz a WS cella

határsíja, hanem a cella

lapja

itt lépne ki a

testtől teltek feléspontjaiál az) rajzolt sik

→ regisztek, melyek a cellalapok felé és negyedelőpontjaiál vannak

WS cella területe = $\frac{1}{2} \cdot$ cella területe, mert

$$\frac{2 \text{ atom}}{1 \text{ cella}} \rightarrow 1 \text{ atomra jutó terület : } \frac{1}{2} \text{ cella}$$

||

WS cella területe

6. olda

ZH javítása

$$p = -D(V-V_0) + AT \quad E = \frac{D}{2} (V-V_0)^2 + CT$$

$$dE = TdS - pdV \quad dS = \frac{dT}{T} + \frac{1}{T} dV$$

$$dE = D(V-V_0) dV + CT$$

$$\cancel{E(T,V) = \int dS = \int \left(-\frac{1}{T} dV + \frac{A}{T} dT - \frac{1}{T} (V - V_0) \right)}$$

$$S(T, V) = \int dS = \int \frac{D}{T} (V - V_0) dV + \frac{C \ln T}{T} \left(-\frac{D(V-V_0)}{T} + \frac{AT}{T} \right) dV =$$

$$S(T, V) = C \ln T + AV + S_0$$

$$S(T, V) = C \ln(T) + A \left(-\frac{D}{T} + V_0 \right) + S_0$$

$$\Delta S(p_1, T) = S(p_1, T_2) - S(p_1, T_1) = C \cdot \ln(T_2/T_1) + A \left(\frac{A}{D}(T_2 - T_1) \right)$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 =$$

$$= \frac{D}{2} \left((V_2 - V_0)^2 - (V_1 - V_0)^2 \right) +$$

$$+ C \cdot (T_2 - T_1) =$$

$$= \frac{D}{2} \left[\underbrace{(V_2 - V_1)^2}_{2V_0(V_2 - V_1)} - 2V_0(V_2 - V_1) \right] + C(T_2 - T_1) = \textcircled{*}$$

$$V_2 - V_1 = \frac{A}{D}(T_2 - T_1)$$

$$\boxed{\frac{\partial V}{\partial T}} \Big|_P = \frac{A}{D}$$

$$V_1 = -\left(\frac{p_1 - AT_1}{D}\right) + V_0$$

$$V_2 = -\left(\frac{p_1 - AT_2}{D}\right) + V_0$$

$$\textcircled{*} = \frac{D}{2} \left[\left(-\left(\frac{p_1 - AT_2}{D} + V_0\right)^2 \right) - \left(-\frac{p_1 - AT_1}{D} + V_0 \right)^2 \right] + \dots$$

$$\Delta E = \frac{D}{2} \left(\left(\frac{n_1 - AT_2}{D} \right)^2 - \left(\frac{n_2 - AT_1}{D} \right)^2 \right) + C(T_2 - T_1)$$

2) a) $V = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\lambda}{r^n}$ $U(r) = -\frac{\alpha}{R} A_M + \frac{\lambda A_M}{R^n}$

$$\left. \frac{\partial V}{\partial r} \right|_{r=r_0} = \frac{\alpha}{r^2} - \frac{\lambda}{r^{n+1}} \quad n=0$$

$$\left. \frac{\partial U}{\partial R} \right|_{R=R_0} = 0$$

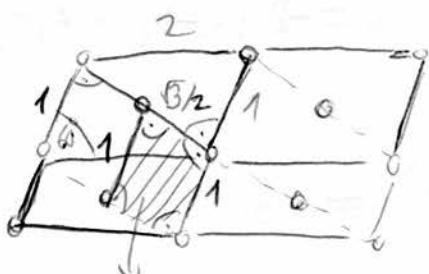
$$\sqrt[n-1]{n \cdot \frac{\lambda}{\alpha}} = r_0$$

$$\sqrt[n-1]{n \cdot \frac{\lambda A_M}{\alpha A_M}} = R_0$$

$$\frac{r_0}{R_0} = \sqrt[n-1]{\frac{A_M}{A_n}} \approx 1 \quad \left(\frac{A_M}{A_n} \approx 2-3, n \approx 12 \right)$$

b) $V(r_0) = -\frac{\alpha}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$ $U(R_0) = -\frac{\alpha}{R_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right) \Rightarrow \frac{V(r_0)}{U(R_0)} = \left(\frac{r_0}{R_0} \right) \cdot A_M =$

3)

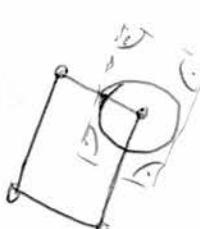


$$N = 2$$

$$= \sqrt[n-1]{\frac{A_n}{A_M}} \cdot A_M$$

W.S.

$$T = \frac{\sqrt{3}}{2} h$$



$$d = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$\frac{T_0}{T_C} = K = \frac{\left(\frac{\sqrt{3}}{4}\right)^2 \pi}{\frac{\sqrt{3}}{2} \cdot 1} = \frac{\frac{\sqrt{3}}{16} \pi}{\frac{\sqrt{3}}{2}} = \frac{\sqrt{3} \pi}{8}$$

7.0x
7H justify

$$1) \quad dS = \frac{dE}{T} + \frac{V}{T} dV \quad , \quad E = C \cdot T + \frac{D}{2} (V - V_0)^2$$

$$dS(T, V) = c \cdot \frac{dT}{T} + \cancel{\frac{D(V-V_0)}{T} dV} + \left(-\frac{\cancel{D(V-V_0)}}{T} + \frac{A \cdot f}{T} \right) dV$$

$$\int \lambda S = S(T,V) = C \ln T + A \cdot V + S_0$$

$$a) \quad \Delta S = C \ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right) + A \cdot (V_2 - V_1)$$

$$\Delta S = C \cdot \ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right) + \frac{A^2}{D} (V_2 - V_1) \quad n_1 = n_2 = -D(V_2 - V_0) + AT_2$$

$$\Rightarrow (V_2 - V_1) = A(T_2 - T_1)$$

$$\Delta V = \frac{A}{l} (T_2 - T_1)$$

$$\left. \frac{\partial V}{\partial T} \right|_P = \frac{A}{D}$$

$$b) \Delta E = C(T_2 - T_1) + \frac{D}{2} \left(V_2^2 - V_1^2 - (V_1 V_g)^2 \right) = \\ \uparrow \\ V_1, V_2 = \dots$$

$$2) \quad \text{a)} \quad \left. \frac{\partial V}{\partial r} \right|_{r_0} = 0 = -\frac{\alpha}{r_0^2} + \frac{\lambda}{r_0^{n+1}} \cdot n \quad r_0^{n-1} = \frac{n\lambda}{\alpha} \quad r_0 = \sqrt[n]{\frac{n\lambda}{\alpha}}$$

$$\left. \frac{\partial h}{\partial R} \right|_{R_0} = -\frac{\alpha}{R_0^2} A_n + \frac{\lambda}{R_0^{n+1}} \cdot A_n$$

$$R_0 = \sqrt[n+1]{\frac{\lambda n}{\alpha} \cdot \left(\frac{A_n}{A_M} \right)}$$

$$\frac{r_o}{R_o} = \sqrt[n-1]{\frac{A_M}{A_n}}$$

$$b) \frac{V(r_0)}{W(R_0)} = \frac{\frac{-\frac{d}{r_0}(1-\frac{1}{n})}{A_M}}{\frac{R_0}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)} = \frac{1}{A_M} \cdot \frac{r_0}{R_0}$$

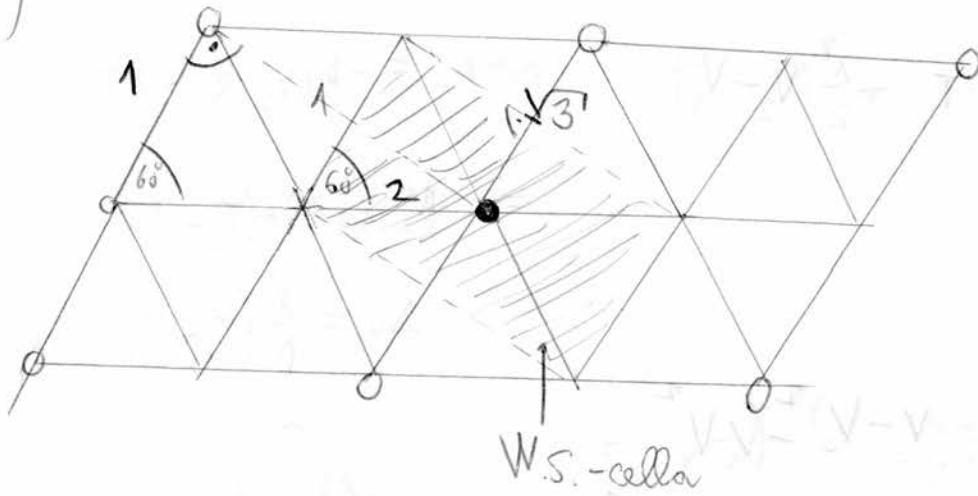
$$\frac{r_0}{R_0} \approx 1$$

$$U(R_0) = A_M V(r_0) \cdot \left(\frac{R_0}{r_0}\right) \approx A_M V(r_0)$$

≈ 1 ↓

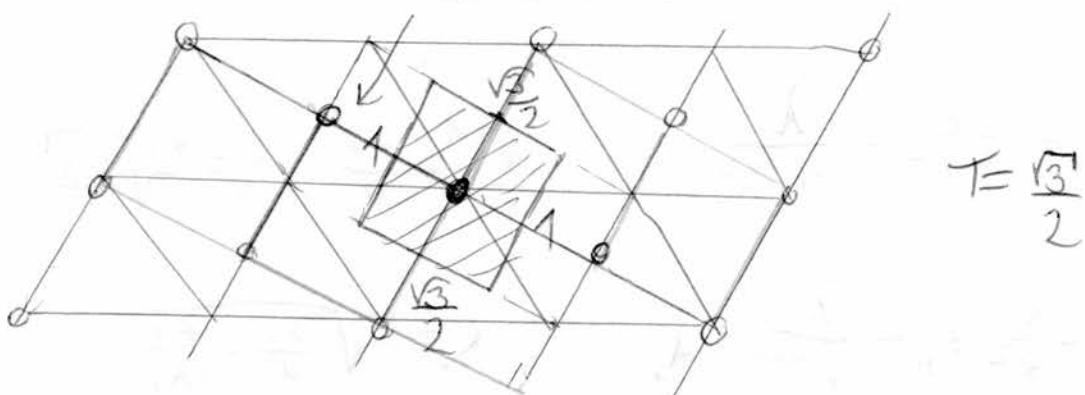
a vonalakból adódó energianövekedés
nem olyan nagy

3)

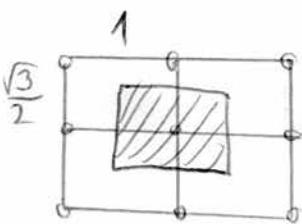


7H példa

most ez az előző módszer!

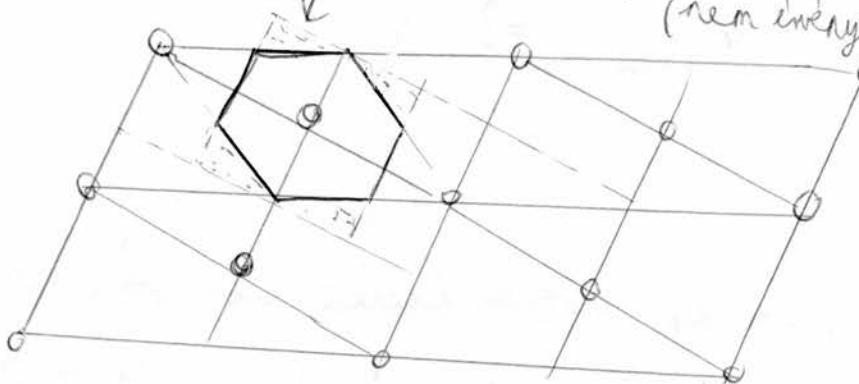


Más kép: ez egy négyzetes! (Hegelöröklés)

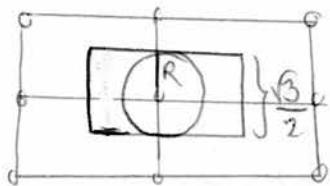


Ha másikra viszonylik a WS. cellát

most nem ragdik le az a rész, ha kijelölünk van!
(nem érvényes az a szabály most)



Kitölts: WS-cellába kerülhető kört!

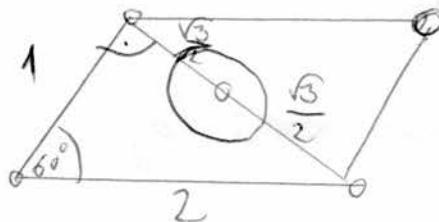


2 atom/cella

$$2R = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$R = \frac{\sqrt{3}}{4}$$

$$K = \frac{2(\pi R^2)}{\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8}$$

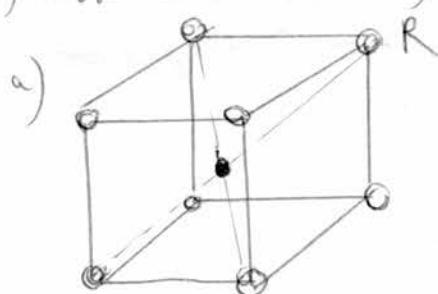


eredeti cellával

Ebből is ki lehet számolni a WS-cellá tűret!

Heterogen köröltés

1) egysemen kölcs (SC):



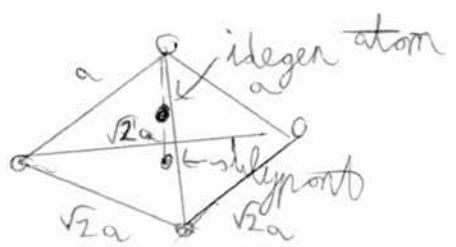
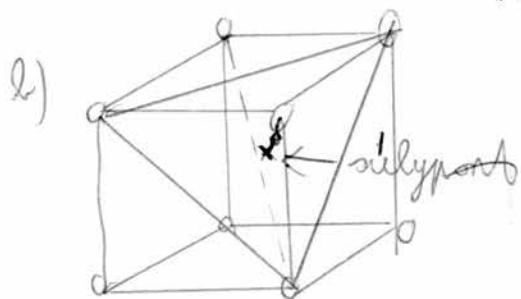
$$r_{\text{másik atom}} = ?$$



ha másik bontjuk meg a réset \rightarrow több rég,

tetraéderek integráció

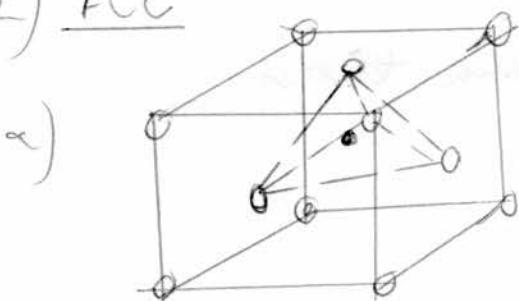
de kisebb idegen atomok



} nem szabalyos tetraéder

interstitialis atomi hely

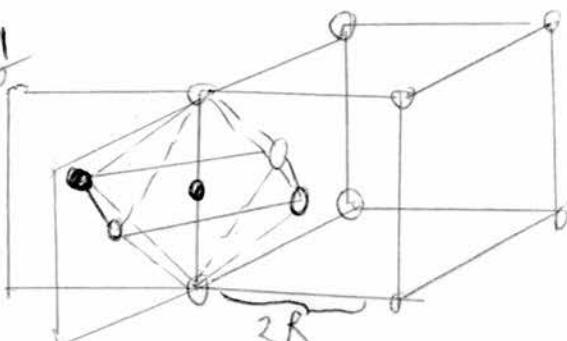
2) FCC



$$r_{\text{tetraéder}} = r \cdot ?$$

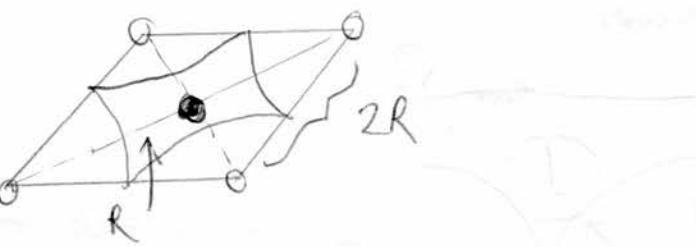
b) oktaéderek integráció
(substitúció)

$$r_{\text{okt}} = r \dots$$



$$d(r+R) = \sqrt{2}(r \cdot R)$$

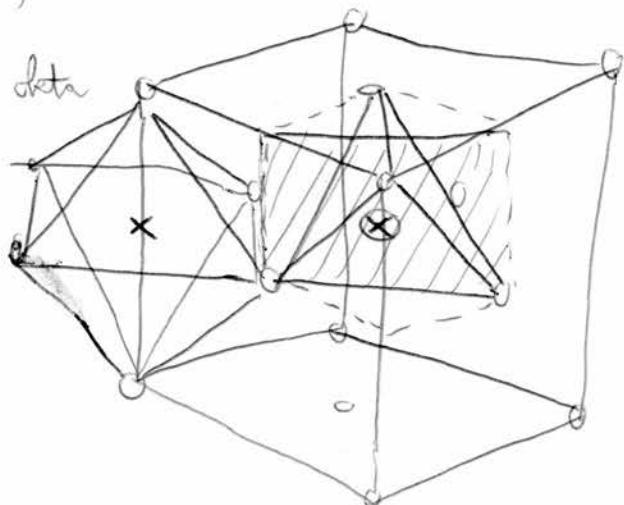
$$r = (\sqrt{2}-1)R = 0,414$$



↓
stink masha is pakolhatás atomokat

→ FCC-hez több fer mint BCC-hez!

1)



↓
ora

(elégítő)

o elégítő atomja

$\Sigma_{\text{db}} = \times$ oktaederes atom
pl.
(menyerő")

\otimes tetraederes atom

- FCC üvegei:

• oktaeder

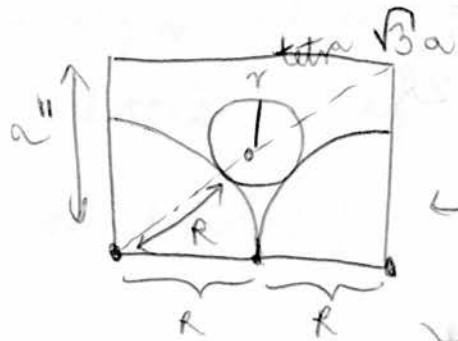


$$2(r+R) = \sqrt{2}a = \sqrt{2} \cdot 2 \cdot R$$

$$r_{\text{db}} = (\sqrt{2}-1)R$$

$$\frac{r_{\text{db}}}{R} = (\sqrt{2}-1) = 0,41$$

• tetraeder



← ein atom hat einen Abstand von der Lattice über a'
zukommen

es ist also zu unterscheiden

$$A = \sqrt{2} a'' = 2R$$

$$a'' = \sqrt{2} R$$

$$\frac{\sqrt{3} a''}{2} = (r^t + R)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\sqrt{3}}{2} \sqrt{2} R = (r^t + R)$$

$$\frac{r^t}{R} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} - 1 \right) = 0,23$$



Reciprok räcs

direkt räcs

Reciprok räcs

$$\underline{R} = i \underline{a}_1 + j \underline{a}_2 + k \underline{a}_3 \quad \leftrightarrow \quad \underline{R} = h \underline{l}_1 + k \underline{l}_2 + l \underline{l}_3$$

FCC, BCC

\leftrightarrow BCC, FCC

- ein direkt räcs entspricht einer atomaren Masse

- ein reciprok räcs - II - nem - IT - (!), hanem

z.B. impulsster (k)

(a végükkel működik a D-s, mert π és τ különös törekedések alkotnak \rightarrow egy fiz. problema kerülhetetlensége is itt kell kijelölni)

a direkt rácós négszög, DE a reciprok rácós nézetben

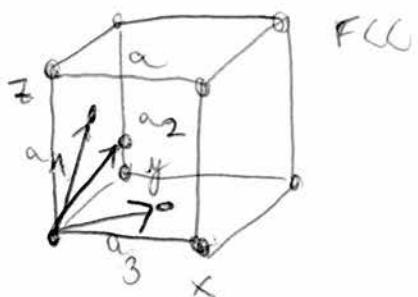
$$e^{\frac{iKR}{\lambda}} = 1$$

↓

$$KR = 2\pi \cdot n$$

ez definíciója a reciprok rácosszám

2) Példák:



$$a_3 = \frac{a}{2} (1, 1, 1)$$

$$a_2 = \frac{a}{2} (1, 0, 1)$$

$$a_1 = \frac{a}{2} (0, 1, 1)$$

(az primitive cella
vektorai nem
merőlegesek)

$$\lambda_i = \frac{2\pi}{V} (\underline{a}_i \times \underline{a}_j)$$

direkt rácobeli
terfogat

$$V = (\underline{a}_i \times \underline{a}_j) \cdot \underline{a}_k \quad (\text{vegyszámszám})$$

FCC

fcc-ker

$$V_0 = (\underline{a}_1 \times \underline{a}_2) \cdot \underline{a}_3 = \left(\frac{a}{2}\right)^3$$

$$4V_0 = V_{\text{cella}} = a^3$$

↓

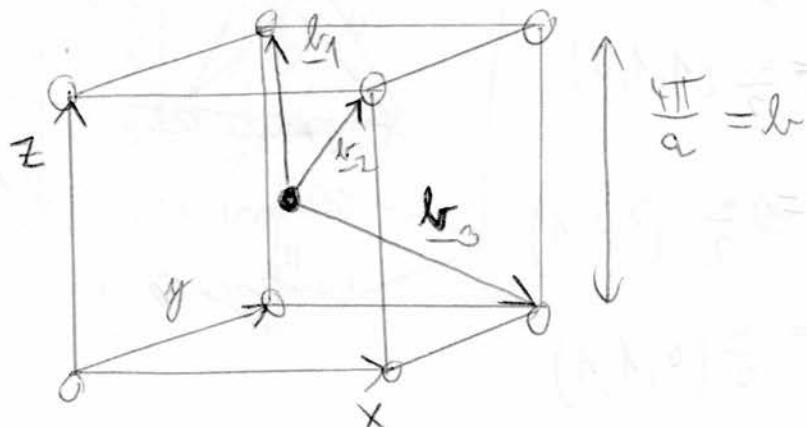
$$\cdot \left((1,1,1) \times (1,1,1) \right) \cdot (1,1,0) = \frac{a^3}{8} \cdot 2 = \frac{a^3}{4} \quad \checkmark$$

$(1,1,1)$ · $(1,1,0)$

$$b_3 = \frac{2\pi}{(a^3)} \cdot (\underline{a}_1 \times \underline{a}_2) = \frac{2\pi}{a^3} \cdot \cancel{\frac{1}{2}} \cdot (1,1,-1) \cdot \cancel{\frac{1}{2}} \cdot \cancel{\frac{1}{2}} = \frac{\pi}{a} (1,1,-1) =$$

$$b_2 = \frac{8\pi}{a^3} (\underline{a}_3 \times \underline{a}_1) = \frac{8\pi}{a^3} (1,-1,1) = \frac{\pi}{2} (1,-1,1)$$

$$b_1 = \frac{8\pi}{a^3} (\underline{a}_2 \times \underline{a}_3) = \frac{8\pi}{a^3} (1,1,1) = \frac{\pi}{2} (-1,1,1)$$



(ezek nem merőleges vektorkék!)

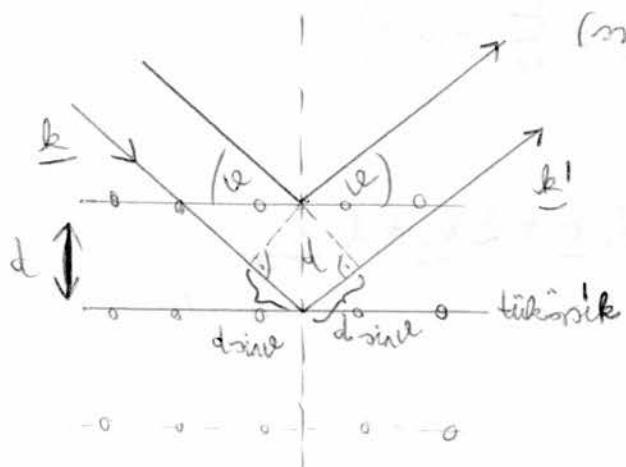
az impulusszövek is csak speciális pontok leírásai

(akkor azzal az atommal miatt a direkt rácslan)

A reciprokáris felhasználásai

diffráció

(refrakciós viszg.)



Bragg-egyenlet: (visszaverődés)

$$2d \sin\theta = n \cdot \lambda$$

előtér helyei illetve

szögként
lesznek

lizonyos szögekben megvalósítva
visszaverődés termodalunk

(más szögekkel is
van visszaverődés,
csak a differ. képen
az nem látszik)

(az elnyelődés szögfüggő: $\downarrow \left\{ \begin{array}{l} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right.$)

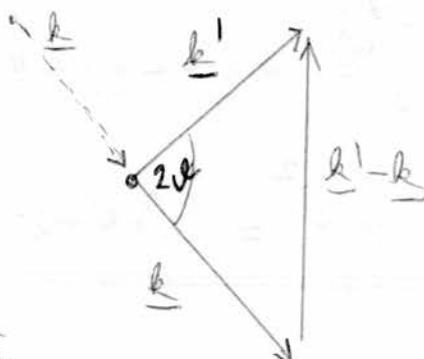
pl. CaCO_3 , lénik elnyelik (kis behatólású mélyég)
emben több egyéb részi türesek stb.

$$k = |\underline{k}'| = |\underline{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \text{differ. negatív szögek}$$

$$\underbrace{\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)}_{n=1} (2 \sin \theta) = n \cdot \left(\frac{2\pi}{d}\right)$$

$$|\underline{k} - \underline{k}'| = n \cdot \left(\frac{2\pi}{a}\right) = |\underline{K}|$$

\uparrow
atomhálózat
reciprokáris
vektor



$$\underline{k} - \underline{k}' = \underline{K}$$

(ez valójában a impulsusmegmaradás ellenlete $\rightarrow \underline{t} \underline{k} - \underline{t} \underline{k}' = \underline{t} \underline{K}$)

ha jo irányból érkezik, a több a másod határbeli tulaj lönök

1)

SC.

$$\underline{a}_1 = a(1,0,0) \quad \underline{a}_2 = a(0,1,0)$$

$$\underline{a}_3 = a(0,0,1)$$

SC.

$$\underline{b}_1 = \frac{2\pi}{a} (1,0,0) \quad \underline{b}_2 = \frac{2\pi}{a} (0,1,0)$$

$$\underline{b}_3 = \frac{2\pi}{a} (0,0,1)$$

$$\underline{k} - \underline{k}' = K$$

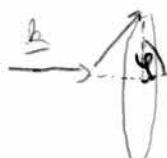
$$K = h \underline{b}_1 + k \underline{b}_2 + l \underline{b}_3$$

Vánder egyszerűsítésre volt igaz.

- Polikristályos anyagoknál jobban megtérül a négyzetes emelt egységek

(d)

$(\underline{k} - \underline{k}')^2 = K^2 \rightarrow$ Ilyenkor az irányzöggel nem kell foglalkoznom, amit szélekbent nem tudok, mert a polikristályban össze-vissza illnak a kis kristályok (de kiátlagolólik az elfordulás) az erő nem $\underline{k}' - \underline{k}$ most ekvivalens



$$\left[\left(\frac{2\pi}{\lambda} \right) \cdot 2 \sin \vartheta \right]^2 = \left(h \underline{b}_1 + k \underline{b}_2 + l \underline{b}_3 \right)^2 = \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 \left[h(1,0,0) + k(0,1,0) + l(0,0,1) \right]^2 =$$

$$\left[2 \left(\frac{\pi}{\lambda} \right) \sin \vartheta \right]^2 = (h^2 + k^2 + l^2) \quad (\text{ez a képlet egyszerűsítésre is igaz})$$

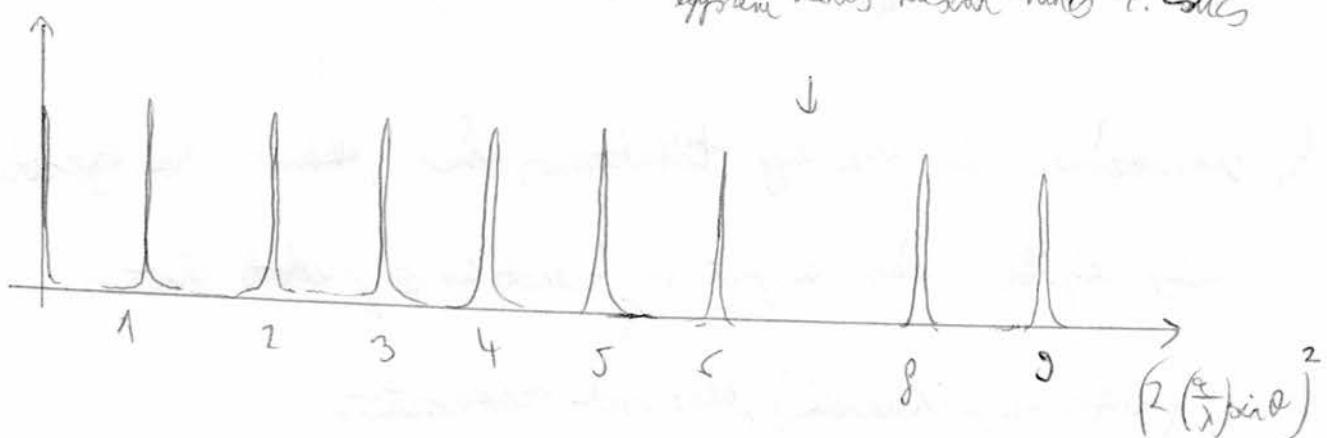
\rightarrow különleges mögökkel lenne csak visszaverődés

		r h, k, l - ber szimmetriával							
h	k	0	1	1	2	2	2		
l	0	0	1	1	0	1	1	2	
$\left(2\left(\frac{a}{\lambda}\right) \sin \theta\right)^2$		0	1	2	3	4	5	6	8
		↓						↑	

Ha $\theta \rightarrow 90^\circ$, λ ismét \rightarrow a meghatározott

I

egyszerű kölcsönben nincs f. csúcs



2) FCC:

$$\underline{\alpha} = \frac{a}{2} (0, 1, 1) \Rightarrow \underline{k} \Rightarrow k_1 = \frac{2\pi}{a} (-1, 1, 1), k_2 = \frac{2\pi}{a} (1, -1, 1), \dots$$

$$\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 (2 \sin \theta)^2 = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \left(h(-1, 1, 1) + k(1, -1, 1) + l(1, 1, -1) \right)^2 =$$

$$\left(2\left(\frac{a}{\lambda}\right) \cdot \sin \theta\right)^2 = 3(k^2 + k^2 + l^2) - 2(hk + hl + kl)$$

h	0	1	1	1	2	2	
k	0	0	1	1	0	1	
l	0	0	0	1	0	0	
$\left(2\left(\frac{a}{\lambda}\right) \sin \theta\right)^2$	0	3	4	3	12	8	

↓

lehetetlenek ötfedések! → csak a helyen 2x akkoran
legy az intensitás

$\frac{0}{3} \frac{3}{7} \frac{4}{7} \frac{8}{4}$ → a diff. csúcsok
távolságai is mekkora!

$$\begin{matrix} 0 & 3 & 4 & 8 & 11 & 12 \\ \overbrace{3} & 1 & 4 & 3 & 1 & 4 & \dots \end{matrix}$$

↳ az fcc kepe rögtön látvánik

3) Az bcc -t meg lehet komponálni egymánnal kétöt másik differenciálás révén!

(bcc = 2SC egymásba képest eltolva)

4) Kéziratban ha van egy többatomos réteg, akkor az egységek differ. Réptől már anyagi minőségek is meg lehet határozni
(differ. amplitúdók) nem csak merőleges

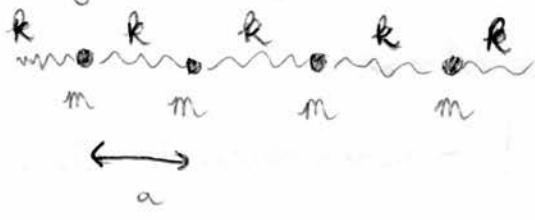
10.0a

Törönök

Az akustikus ter kiátervezéséi (boronok)

(↔ fotonok: elektromágneses ter részletei)

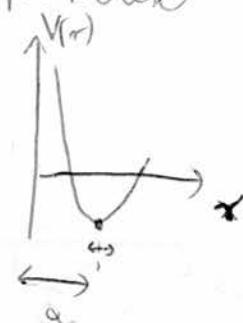
1) homogen lánc



(~2-3 Å)

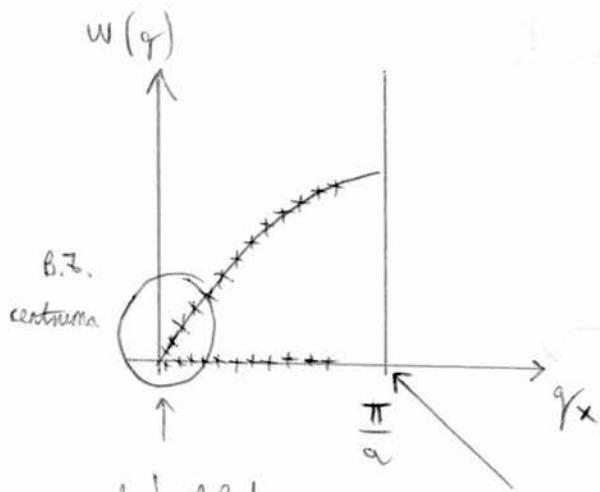
← k a potenciállok paramtere

$$k = \left(\frac{\partial^2 V(r)}{\partial^2 r} \right)_{r=r_0=a}$$



$$w = \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \cdot 2\sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$(q = \frac{2\pi}{\lambda})$$



B.Z.
centrum

kürtőlyukos

diszp. elágás

(nagyra nőni lehetőségek)

$q \rightarrow k$, mert az anyag kölcsönhatása (L) nagy) $\leftarrow n\lambda = L / 2\pi/\lambda$

B.Z. (Brillouin-zóna)

határa (az elágásban egyet felülött eggyel 3D reciproktereken)
se most 1D-nél nemük

$$qL = n \cdot 2\pi$$

$$v_f = \frac{w}{q} \quad | \quad \frac{\partial w}{\partial q} = v_{\text{exp}}$$

$$q_x = \frac{n_x \cdot 2\pi}{L_x} \quad \frac{2\pi}{L_x} \text{ kicsi}$$

B.Z. centrummalan $q_x \ll 1$

$$\frac{\pi}{a} \approx \frac{3.14}{0.3 \cdot 10^{-9} \text{ m}} \approx 10^9 \frac{1}{\text{m}}$$

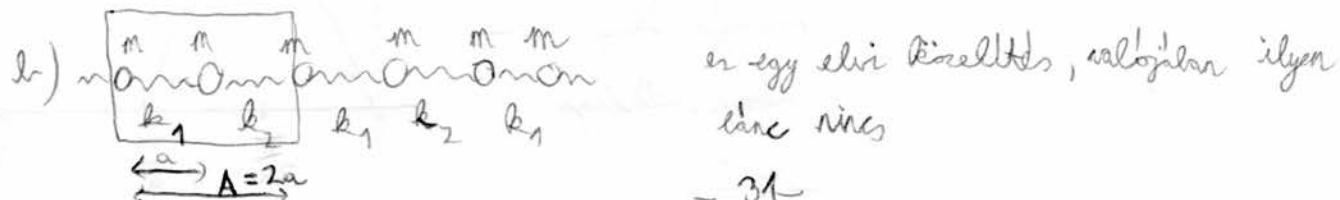
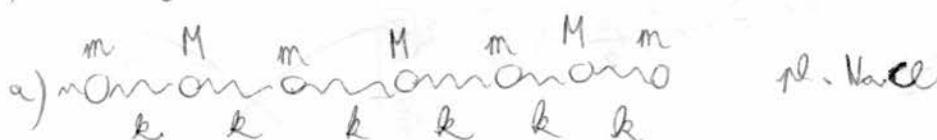
$$\sin\left(\frac{qa}{2}\right) \approx \frac{qa}{2}$$

$$v_f = \sqrt{\frac{e}{m}} \cdot \left(\frac{qa}{2}\right) \cdot \frac{1}{q} = \sqrt{\frac{e}{m}} \cdot a$$

$$v_s = \cos\left(\frac{qa}{2}\right) \cdot \frac{a}{2} \cdot \sqrt{\frac{e}{m}} \approx \sqrt{\frac{e}{m}} \cdot a \quad q \ll 1$$

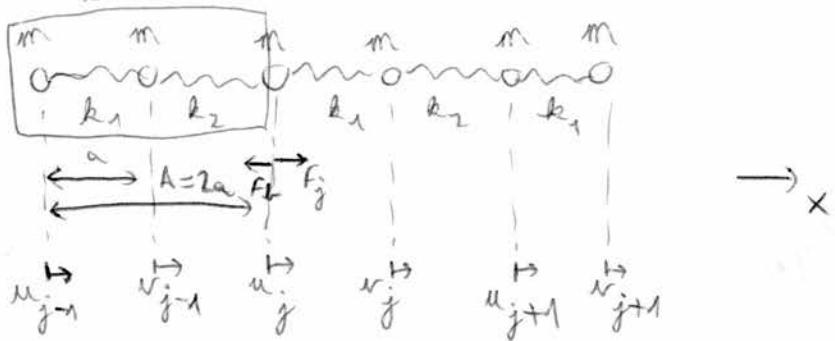
DE Brillouin-zóna határa ($\frac{\pi}{a}$ -nál) $v_s = 0$

2) Heterogen lincs



2-rére hosszabb lett a periodusossz (A) !!

elemi cella



$$m \ddot{u}_j = k_2 (v_{j+1} - u_j) + k_1 (v_j - u_j)$$

$$m \ddot{v}_j = k_1 (u_j - v_j) + k_2 (u_{j+1} - v_j)$$

Keresük a megoldást:

$$u_j = A_1 e^{i(\omega t - q(j2a))} ; v_j = A_2 e^{i(\omega t - q(j2a+a))}$$

egyenályi helyzetek

$$u_j = j \cdot 2a$$

$$v_j = j \cdot 2a + a$$

$$m A_1 \omega^2 = A_1 (k_1 + k_2) - A_2 (k_2 \cdot e^{iqa} + k_1 \cdot e^{-iqa})$$

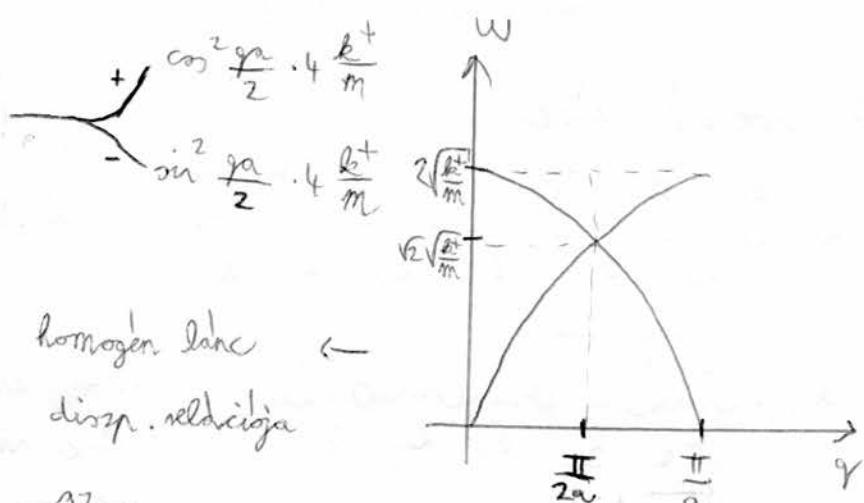
$$m A_2 \omega^2 = A_2 (k_1 + k_2) - A_1 (k_1 \cdot e^{iqa} + k_2 \cdot e^{-iqa})$$

$$\det = 0 \quad ; \quad k^+ := \frac{k_1 + k_2}{2} \quad ; \quad k^- := \frac{k_1 - k_2}{2} \quad (k \rightarrow 0 : \text{homogen linc})$$

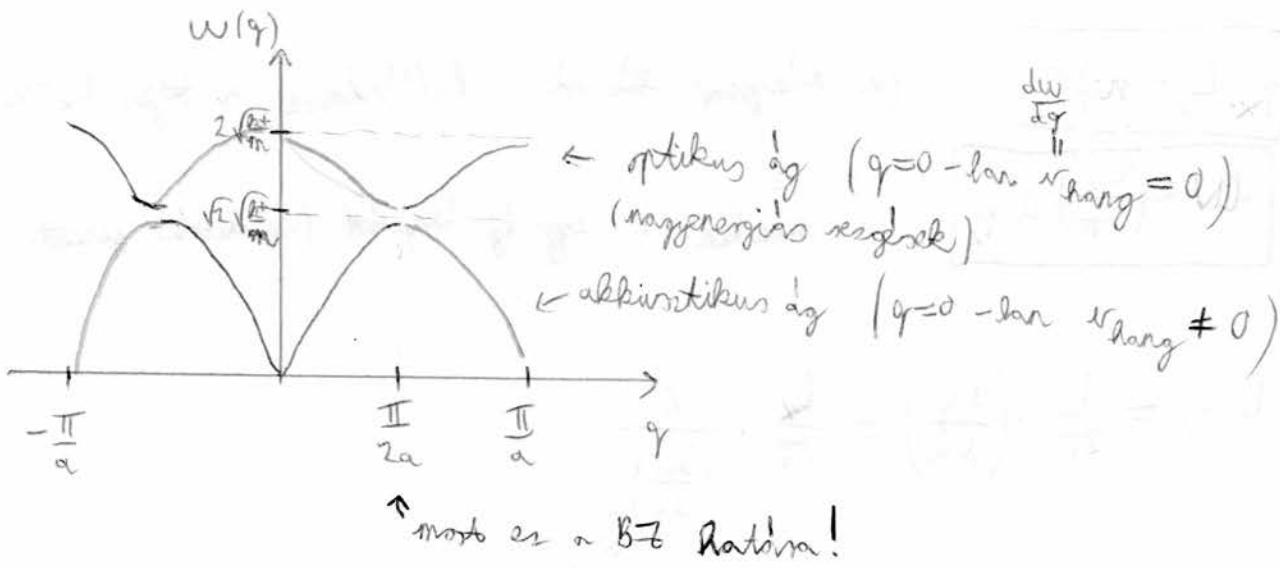
$$\omega^2 = \left(2 \frac{k^+}{m} \right) \pm \sqrt{\left(2 \frac{k^+}{m} \right)^2 \cos^2 qa + \left(2 \frac{k^-}{m} \right)^2 \sin^2 qa}$$

$$k^- \rightarrow 0 \quad (k_1 = k_2)$$

$$\omega^2 = \frac{2k^+}{m} \left(1 \pm \cos qa \right) = \underbrace{\cos^2 \frac{qa}{2}}_{\cos^2 \frac{qa}{2} - \sin^2 \frac{qa}{2}} \pm \underbrace{\sin^2 \frac{qa}{2}}_{\sin^2 \frac{qa}{2} + \cos^2 \frac{qa}{2}} \cdot 4 \frac{k^+}{m}$$



heterogen láncra van egy kis eltérés az előző görbékhez:



11. óra

Allapotstabilitás

1) fotonokhoz:

$$N = \int_{\text{modus}} D(w) dw$$

$$\frac{dN}{dw} = D(w) \quad (\text{allapotstabilitás})$$

$$\begin{aligned} \text{vissz } \boxed{\frac{dN}{dw} = D(w) dw} &= D(w) dw = (w \text{ és } dw + w \text{ közé eső modusszám (illapostak}} \\ &= dN^{q_1, q_1 + dq} = \left(\frac{L_x}{2\pi}\right) \cdot dq_{L_x} \quad (\text{modus}) \\ &\quad (1D-\text{ban}) \quad (q: \text{nullkönnyű}) \end{aligned}$$

$w(q) \Rightarrow$ inverz (dispersziós reláció adja, de ez fotonakra és elektromosra eltér) \Rightarrow általánosítva a q minden integrálra / deriválásra

n: $\lambda = L_x$ (peremfeltétel)

$$\left(\frac{2\pi}{\lambda} = q_x \right)$$

$$q_x L_x = n \cdot 2\pi$$

$$dN = \left(\frac{L_x}{2\pi} \right) d q_x$$

(n: hártyar terülő a hullámhossz a teljes L_x -re)

\downarrow
minde n eggyel illesztet (módosít) jelent

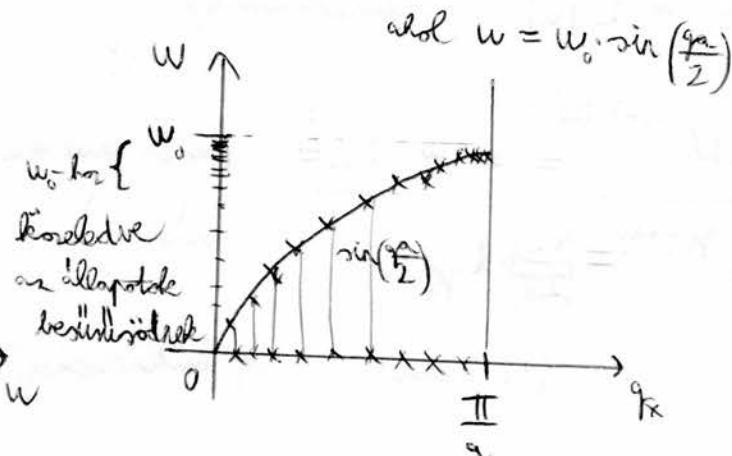
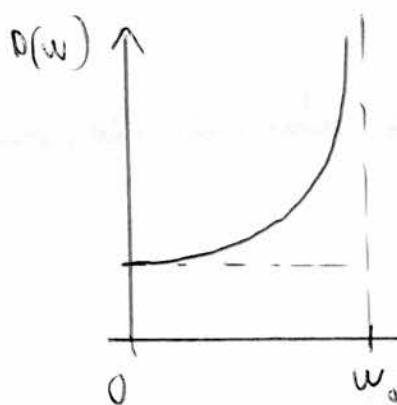
$$\Rightarrow D(\omega) = \frac{L_x}{2\pi} \cdot \left(\frac{dq}{d\omega} \right) = \frac{L_x}{2\pi} \cdot \frac{1}{\left(\frac{\partial \omega}{\partial q} \right)} = n_{\text{csoport}}$$

• Forma:

$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{k}{m}} \sin \frac{q a}{2}$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial q} = 2 \cdot \frac{a}{2} \sqrt{\frac{k}{m}} \cos \left(\frac{qa}{2} \right) = \omega \sqrt{\frac{k}{m}} \sqrt{1 - \sin^2 \left(\frac{qa}{2} \right)}$$

$$D(\omega) = \frac{L_x}{2\pi} \cdot \frac{2}{\omega \underbrace{\left(\sqrt{\frac{k}{m}} \sqrt{1 - \sin^2 \frac{qa}{2}} \right)}_w} = \frac{L_x}{2\pi} \cdot \frac{2}{\sqrt{\omega^2 - w^2}}$$



az illesztések száma
színes részegel

\Leftarrow Brillouin-zóna hatalan $\left(\frac{\pi}{a} \right)$ száma
eltérítik

Néhány pontos 3D-nel:

$$D(w) dw = \left(\frac{L_x}{2\pi} \cdot dq_x \right) \left(\frac{L_y}{2\pi} \cdot dq_y \right) \left(\frac{L_z}{2\pi} \cdot dq_z \right)$$

$\checkmark \rightarrow$ körönkörön elágazik

$$D(w) dw = \underbrace{\left(\frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} \right)}_{\text{V}} \cdot (dq_x dq_y dq_z) \quad \left| \begin{array}{l} L_x q_x = n_x \cdot 2\pi \\ L_y q_y = n_y \cdot 2\pi \\ L_z q_z = n_z \cdot 2\pi \end{array} \right.$$

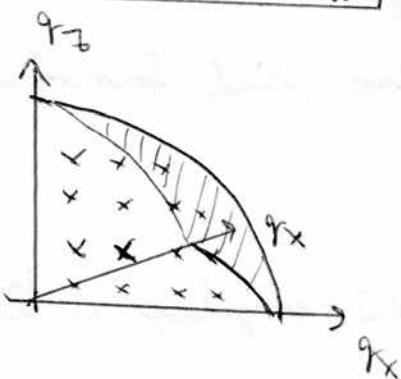
$D(q) dq = dN^{q_1, q_2, q_3}$ $\Rightarrow z(q) \cdot dq$

ahol $z(q) \equiv \frac{\partial N}{\partial q} = \frac{V}{(2\pi)^3 \cdot 4\pi q^2}$

$$dN^{q_1, q_2, q_3} = z(q) dq$$

$$\Rightarrow D(w) = z(q) \cdot \frac{dq}{dw}$$

$q = |q|$ (hullámszám abszolútértéke)



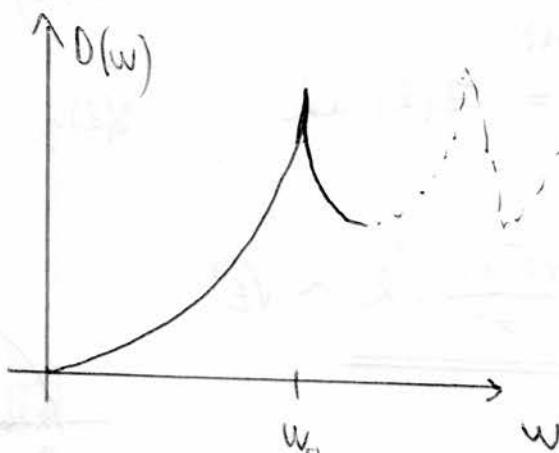
Különös dimenziókban:

$$\left(\frac{\pi}{L_x}\right) z(q) = 1$$

$$\left(\frac{2\pi^3}{L_x L_y}\right) z(q) = 2q \pi$$

$$\left(\frac{(2\pi)^3}{V}\right) z(q) = 4\pi q^2$$

3D:

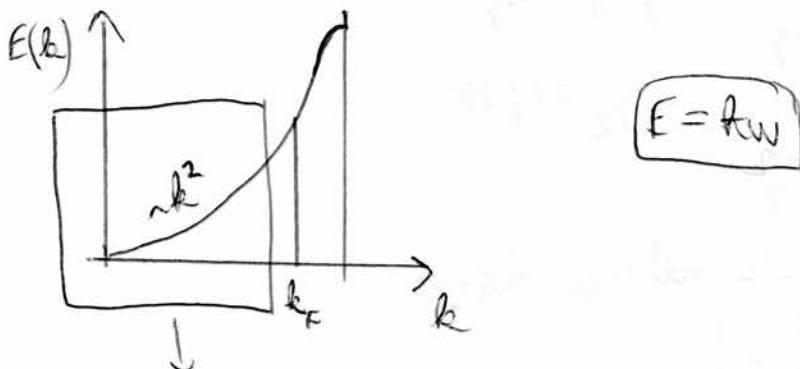


disperziós részis elektronokra

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{klasszikus rezonánseléktrom közelítés})$$

$$(k = \frac{2\pi}{\lambda})$$

↳ Brillouin-zóna határain az más
nem teljesen igaz



legföldibb ebből a tartományban ragyunk, mert a spin miatt
2× van e⁻ für el az illéptókban, min a fonosokban
(fonosokban)

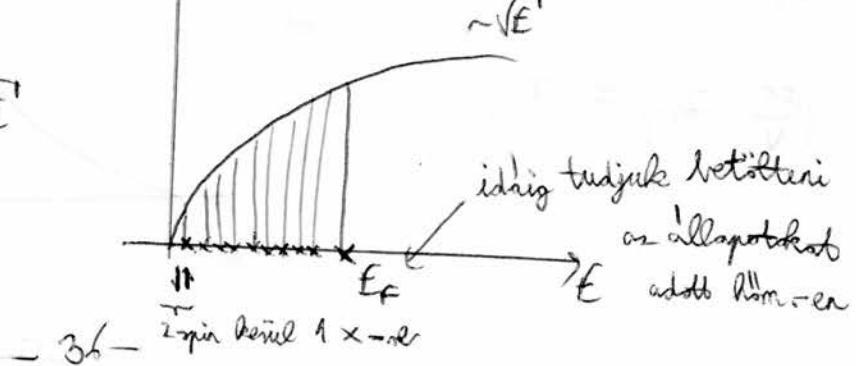
⇒ általában felig töltve a Fermi-energiáig az illéptők

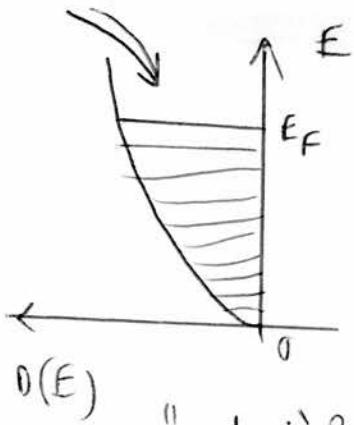
$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{(\mathcal{Z}(k) \cdot dk)}{dE} = \frac{\mathcal{Z}(k)}{\left(\frac{dE}{dk}\right)} = \frac{4\pi \cdot k^2}{\frac{\hbar^2 k}{m}} \quad \begin{array}{l} \text{ugyanaz a } \mathcal{Z}(k), \\ \text{min a fonosokban}, \\ \text{ezek a disz.} \\ \text{relatív mabs} \end{array}$$

$$\frac{dN}{dk, k=k(E)} = \mathcal{Z}(k) \cdot dk$$

$$D(E) = \frac{4\pi m}{\hbar^2} \cdot k \sim \sqrt{E}$$

$$D(E) \uparrow$$





"potencial kör"

Attvalban így szoktak ábrázolni a szintek
betöltését, mert így nem lehetséges elyár,
mintha egy körbe viset töltenék
(mivel több viszink van, mint magassági
energiáig (magasságig) tudjuk feltölteni
a köröt)

• Fermi-energiához tartozó k hullámzását k_F -nek jelöljük.

Kristályokban minden előfordulásban, hogy több vegyületek elektronunk van, és emiatt a feltöltődés, mert k_F minden Brillouin-zónában (szintükkel is mehet rajta → illyenkor nincs lehet transzformálni a BZ-ka az illyeneket).

Hangsúlyozás:

$$\boxed{\bar{E} = \frac{1}{N} \int E dN = \frac{1}{\int_{E_F}^E D(E) dE} \cdot \int_{E_F}^E E D(E) dE}$$

$$N(E) = \int_0^E D(E') dE'$$

$$N(F_i) = N^{el} \quad (\text{összes elektronok száma} \rightarrow \text{orszi illyezet, amennyi a Fermi-szintig le van töltve})$$