

Kondensált anyagok fizikája

- előadó: Tichy Gyula, tichy@ludens.elte.hu (szégyedanyagokat lehet kérni)
- ajánlott irodalom:
 - C. Kittel: Bevezetés a szilárdtestfizikába
 - Togornyi Balint: Fejlesztek a szilárdtestfizikából
 - Solyom Jenő: A modern szilárdtestfizika alapjai 1, 2, 3
 - H. Haas, H. Lütt: Solid State Physics, An Introduction to the Principles of Materials Science
 - N. W. Ashcroft, N. D. Mermin: Solid State Physics
 - Daer Wei: Solid State Physics
- vissza: szobeli (Block-típus kell majd!)

1. óra

1) Osztályozás:

Halmazállapot:

kond.
mág. folyékony
legnemű



Rendszertípus:

Kristályos
↔
Amorf

2) Fázisdiagram:



(itt van nem $P-V$ diagramon ábrázolunk, mert nem egymáshoz írva -t is kaphatunk, pl. vizel $\leftarrow V_{\text{fug}} > V_{\text{víz}}$)

↳ nem összetartozó extenzív és intenzív

- 1- menetirányban szil. állapotban:

3) állandók:

• legnemű

$$pV = nRT$$

$$U = n \cdot c_v \cdot T$$

- szilárds
 - folyékony } kondenzálható anyag
- $\rightarrow V = \text{állandó}$
- $$U = \int_{T_1}^{T_2} c_v(T) dT$$

Kristályos anyag

1)



van állandó simmetriája (önmagaval fedésbe hozható)

→ rácsektor (transzlációs, állandó vektor): ha az eltalált vektorok

→ elemi vektor: az elemi részvettörök összege a többi részvektor elvállal

$$\dots \quad \quad \quad F$$

$$\text{pontracs} + \text{bázis} = \text{valóságos racs}$$

2) Fogalmak

- részvektor = transl. vektor R_n

- pontracs = a részvektorek négyzetjei

- elemi részvekterek: a_1, a_2, a_3 (3D-lan) (nem egysétműük)
szabálytalan felületek

$$R_{n_1, n_2, n_3} = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3 \quad [R] = \text{horizontális mérő (m)}$$

- elemi cella: $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$ által körültekparallelepipedon
(ez sem egységteljes)

pl.



- Wigner - Seitz - cella:



felelős meredek

(azon pontok halmaza, melyek az adott részponthoz közelebb vannak, mint bármely másikhoz)

- Egy részponthoz tartozik.

Azon pontok összessége melyek közelebb vannak az adott részponthoz, mint bármely más részponthoz.

W-S.-cella határa = felelős meredek sík

$$\pi \cdot R_n = \frac{R_n^2}{2} \quad (\text{a határ} \rightarrow \text{egyenlete})$$

$a \sim$ területe = elemicella területe!



(\cong definíció
a cella hatának
egyeneset)

3.) Simmetriák (anyag szimmetriái)

1) transláció! \rightarrow valóságos idcs

2) forgatás, pl.

(1-es: 360°)

2-es: 180° digir

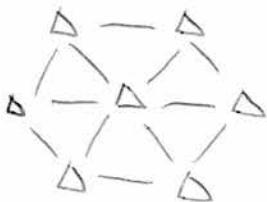
3-as: 120° trigir

4-es: 90° tetragir

5-ös: $72^\circ \rightarrow$ kiostalyos anyagban nincs!

6-os: 60° hexagir (hatágúszögű)

7,8,9: nincs!



(3 fogás szimmetria)

levezetés: m egész szám



$$ma = a + 2 \cdot a \cdot \sin(l - \frac{\pi}{2})$$

$$m = 1 - 2 \cos l$$

fogásnak el az

elemi résvektort.

$$\cos l = \frac{1-m}{2}$$

Szógy 2-ig résvektort használunk,

melyek köztötti résvektor az elemi részv. egész számú többszöse (m₂)

m	-1	0	1	2	3	4
l	$2\pi, 0$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{2\pi}{3}$	π	x ← nem lehetik (< -1)
n	1	6	4	3	2	x

⇒ csak 1, 2, 3, 4 és 6 fogások maradnak. Lehet

3) Inverzió: $r \rightarrow -r$ T (inverzió jelölése)

4) Inverziós tengely: $\bar{z} = m$ (tükörök) (2-es inverziós tengely)



Lehetőség, hogy 2 fogások maradnak.

Nincs, de 2-es inverziós tengely van

5) csíkosok:



(csíkot teljesítő:

230 tükörösök van = 230 félre simmetria T elvileg

(nem biztos, hogy mindenki T-rek van is
anyagi reprezentációja))

1 pont illendo → 32 pontesopot (mindig a legismenő abb
 (nincs translació) (hogy melyik) pontra
 a min. minéltek
 köröd)

4.) Pontok szimmetriája:

14 Bravais rác (7 kristályosztaly)

↳ körök, otomorf, triklin, monoklin, hexagonalis,
 trigonalis, tetragonalis

5) Reciprok rác (pontosokhoz)

$$G_R \cdot R_n = 2\pi \cdot e^{j\varphi}$$

$\underline{b}_1, \underline{b}_2, \underline{b}_3$: elemi reciprokrácrendszer
 \underline{G}_R : reciprokvektor

$$\underline{R}_n = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3$$

$$G_R = h_1 \underline{b}_1 + h_2 \underline{b}_2 + h_3 \underline{b}_3$$

$$[\underline{b}] = \frac{1}{m}$$

$$\underline{a}_i \cdot \underline{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

elemi cella térfogata

$$\underline{b}_1 = 2\pi \cdot \frac{\underline{a}_2 \times \underline{a}_3}{\underline{a}_1(\underline{a}_2 \times \underline{a}_3)}, \quad \underline{b}_2, \underline{b}_3$$

$$\underline{a}_1 (\underline{a}_2 \times \underline{a}_3) = V_C = V_{WS}$$

$$\underline{a}_1 = 2\pi \cdot \frac{\underline{b}_2 \times \underline{b}_3}{\underline{b}_1(\underline{b}_2 \times \underline{b}_3)}$$

$$[V_{RC}] = \frac{1}{m^3}$$

$$\underline{b}_1(\underline{b}_2 \times \underline{b}_3), \quad \underline{a}_2, \underline{a}_3$$

$$\underline{b}_1(\underline{b}_2 \times \underline{b}_3) = V_{RC} = V_{BS}$$

Billouin-zóna:

~ reciprok rác Wigner-Seitz
 cellája

reciprok-
 rác térfogata

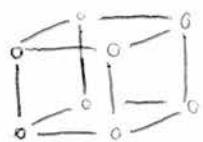
Billouin-zóna

$$V_C \cdot V_{RC} = (2\pi)^3$$

$$G_{h_1, h_2, h_3} R_{n_1, n_2, n_3} = (h_1 \cdot a_1 + n_2 \cdot a_2 + n_3 \cdot a_3) \cdot 2\pi = 2\pi \cdot e^{i\varphi}$$

f) Egyenes (fontosabb) kristályszereketelek

1) Egyenes kőbös (∞ : simple cubic)



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

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

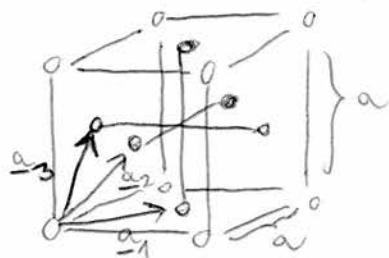
$$\underline{a}_3 = a (0 \ 0 \ 1)$$

• elemi cella = WS cella = kocka

• így csak az atomok szerepelnek kristályosodni, ezek közül is a $\boxed{\text{Po}}$ (polonium) (nem könnyen deformálódik)

2) Díszcentrális kőbös szerkezet (fcc: face centered cubic)

pl. Cu, Al, Au, Ag, Ni, Pb ... stb. kristályosodik így
(fe 900°C fellett)



$$\frac{\text{atomok száma}}{\text{elemi cella;}\text{dizcentrális kocka}} = \frac{1}{8} + \frac{3}{8} = 4 \text{ atom/kocka}$$

ez nem elemi cella!

Nagyobb a lapközépe mutató vektorkat elemi vektoroknak

$$\underline{a}_1 = \frac{a}{2} (0 \ 1 \ 1)$$

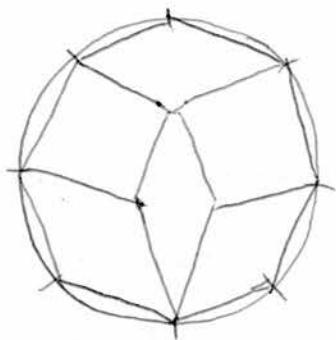
$$\underline{a}_2 = \frac{a}{2} (1 \ 0 \ 1)$$

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

$$V_c = a_1 (\underline{a}_2 \times \underline{a}_3) = \frac{a^3}{4} \leftarrow \text{mets } \frac{1 \text{ elemi cella}}{1 \text{ atom}}$$

nr, így az elemi cella területe a 4 atomos kockának az 1/4-e

- 12 rombosíkja van A atomnak



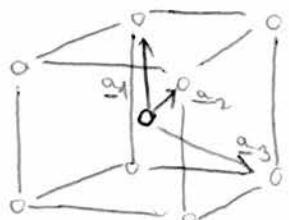
rombododekaéder

Wigner - Seitz - cella

- reciprok rése = tércentrum rcs

3) Tércentrum kölcs rcs (bcc: body centred cubic)

pl. Fe, W, Mo, stb. (Na, K)



2 (atom) posz
térc. kocka

- elemi cella:

$$\hat{\omega}_1 = \frac{a}{2} (-1, 1, 1)$$

$$V_c = \frac{a^3}{2}$$

$$\hat{\omega}_2 = \frac{a}{2} (1, -1, 1)$$

$$\hat{\omega}_3 = \frac{a}{2} (1, 1, -1)$$

- W-S.-cella:

8 atom van közel hozzá + 6 a rombosíkos kockák közepén



szabályos hatszögök

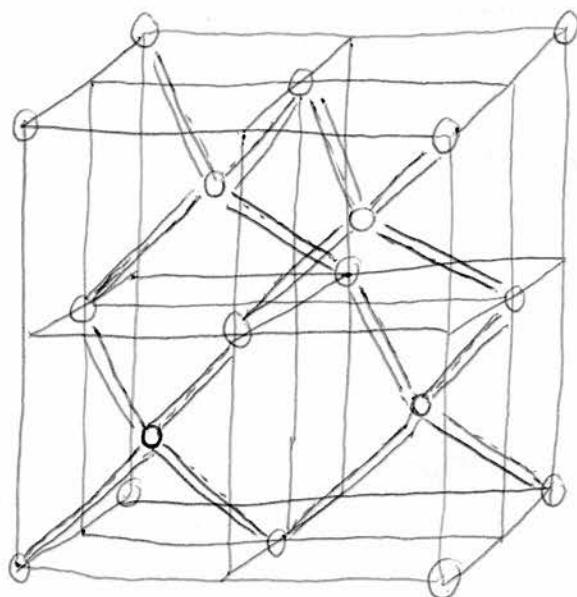
14 lap

8 hatszög + 6 negyszög

- bcc reciprok rcsa fcc \rightarrow A reciprok rcs reciprok rcsa az eredeti rcs!

4) Gyémántszíks

pl. C (gyémánt), Si, Ge

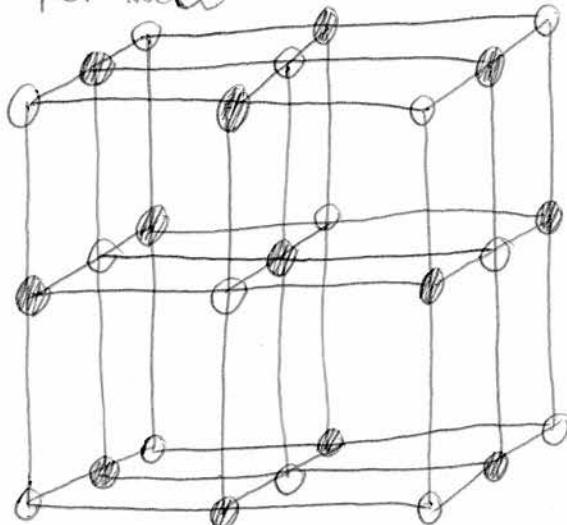


→ a nagy kocka 8 kis kockára osztjuk, és minden 2. kis kocka közepén teszünk a kocka közepére egy atomot

→ Bravais-nincs (pontszíks): fcc
de a basis $\{ A(000) \}$ (egy centrális)
 2 atomból! $B = \frac{a}{4}(111)$

5) NaCl szerkezet

pl. NaCl



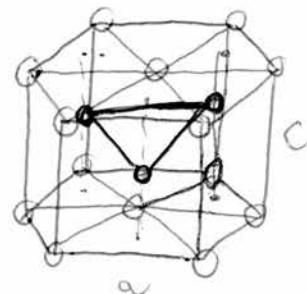
→ pontszíksa: fcc
 (elég csak a O pontokat megjeleníti)

→ basis:

$$Na = (000)$$

$$Cl = \frac{a}{2}(100)$$

6) Hexagonalis mosz illeszkedésű réz (hcp: hexagonal closed pack)



$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1,633$$

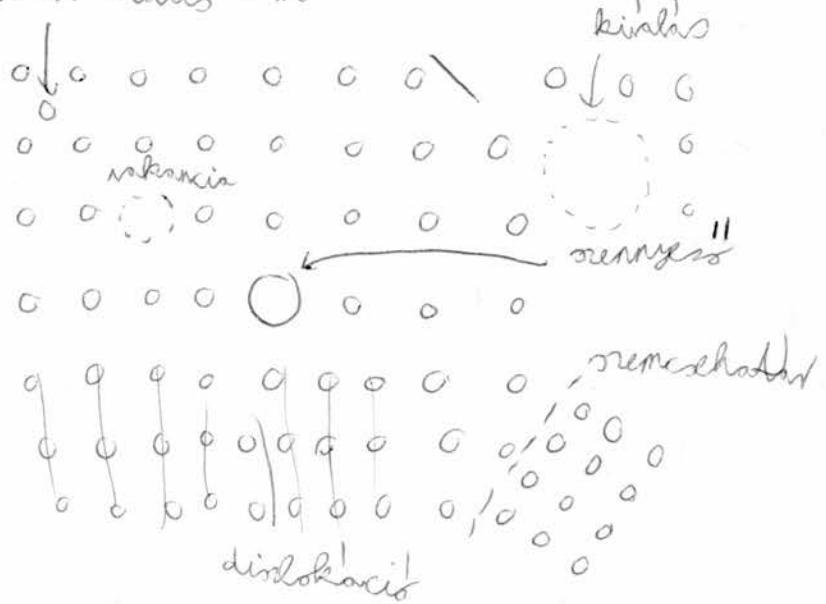
	Be	Co	Hf	Mg	Ti	Zn	Zr
a (pm)	229	250	320	321	295	266	323
c (pm)	359	407	501	521	469	495	516
$\frac{c}{a}$	1,563	1,628	1,578	1,623	1,590	1,860	1,594

(ezek elég kemény anyagok, pl. Zn hajtás köben zöög)

2. óra

Kristályhibák

interstitialis atom



o) pontihibák (0D hiba)

pl. sziváncia:

1 atom fizikai, melyre folytatódik a kristályrács rendje

1) vonalhiba

2) felületi hiba (pl. menteshatár)

3) törötti hiba (pl. kinkas, ...)

d) Ponthibák:

- vakancia

- interstitialis atom (a pontháson kívül kerül be egy + atom)

- szennyezők:

• substitutio
(a pontháson egyik pontba szennyezés)
• interstitialis

(minél többetől
közé "szennyez"
ékelődik)

Si - V, In, Ga, As

Ag - Ben Au, Cu

benben H, O, N

Fe - C (acél): a C a középponttól közel
más középeibe ill, ha gyorsan lehűtjük,
a Fe középponttól rökk. ill, a C pedig
interstitialisan helyezkedik el, miféle ami
a részt (keményebb lesz)

→ vakancia:

- termikus hiba feltételezik, hogy a vakanciók köth nincs k.h.
- koncentrációja: E_V (vacancy formation energy) energiat van

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_{n=0}^N n \binom{N}{n} e^{-\frac{n E_V}{kT}}}{\sum_{n=0}^N \binom{N}{n} e^{-\frac{n E_V}{kT}}} \quad \text{N atomban } n \text{ vakancia}$$

\uparrow
multiplicitás [ennyi felén lehet n db vakancia N atomban
(réspontok)]

$$x := -\frac{E_V}{kT}$$

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_{n=0}^N n \binom{N}{n} e^{nx}}{\sum_{n=0}^N \binom{N}{n} e^{nx}} = \frac{d}{dx} \ln \left[\sum_{n=0}^N \binom{N}{n} e^{nx} \right] = \frac{d}{dx} \ln (1 + e^x)^N =$$

$$= N \frac{d}{dx} \ln(1+e^{-x}) = N \cdot \frac{e^{-x}}{1+e^{-x}} = N \cdot \frac{1}{e^{-x}+1} = \frac{N}{1+e^{\frac{E_F}{kT}}} \approx N \cdot e^{-\frac{E_F}{kT}}$$

$E_V = 0,8 - 2 \text{ eV}$
 $kT_{\text{ord}} =$
 $= 25 \text{ meV} =$
 $= 0,025 \text{ eV}$

→ a működésük száma T-val nő

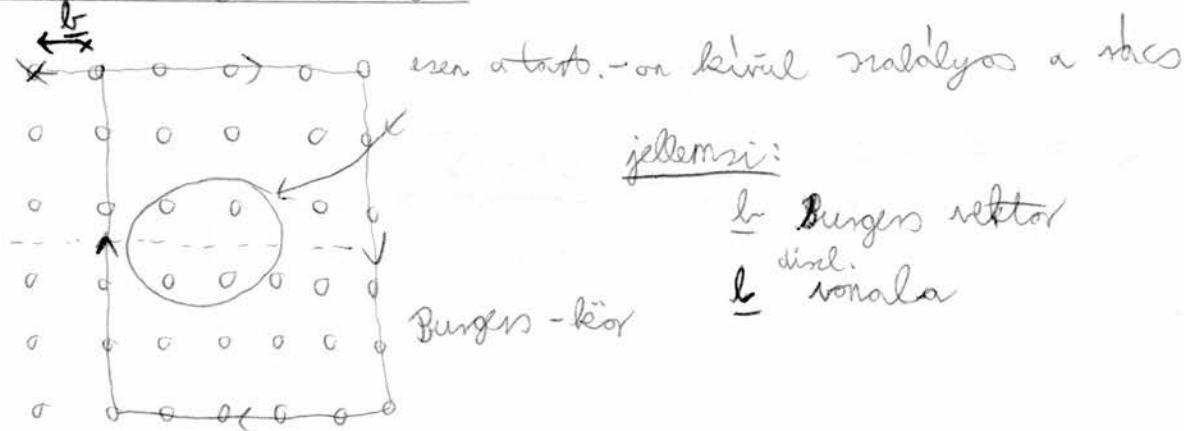
(eladás- és árak közélelén lehet pl. $\sqrt{1000}$ -szor működés)

• működés mérése pl. ellenállásmérőssel

→ Intercstitialis atom: hasonló működés

• $E_I^F = 2-4 \text{ eV} \Rightarrow$ nagyobb energia, kevésbé fordul elő

1) Vonalalha = diszlokáció



ha elindulunk 1 atomtól, és minden ugyanannyit lépünk (pl. nem közel a diszlokáció), nem ugyanoda lesz vissza.

A visszakeresési és kiindulási hely köötti vektort Burgers-vektornak nevezik

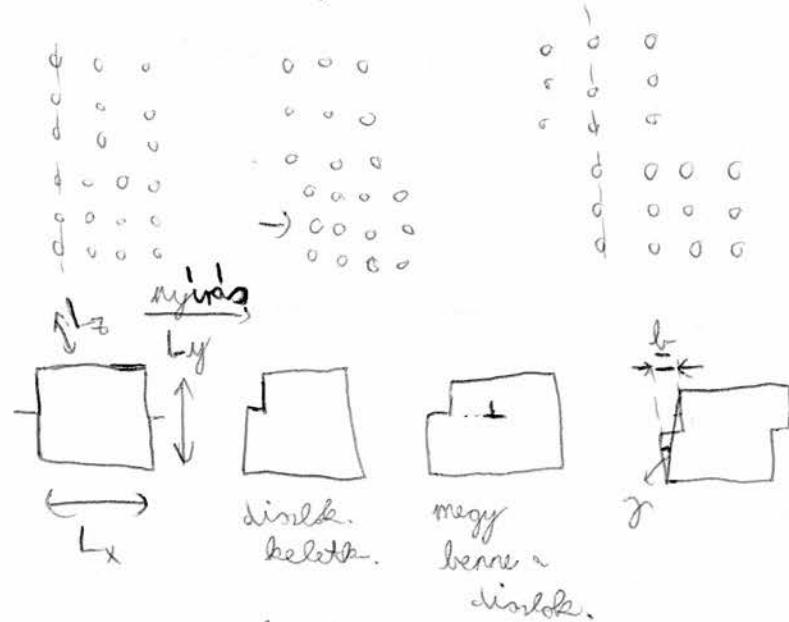
ha $b \perp l$: ellendiszlokáció

ha $b \parallel l$: csavar-diszlokáció

de lehet körök is: el- és csavar-diszlokáció!

Fontosak a dislokációk:

T dislokációs vonalak mentén elmodultak az anyag
 → plasztikus deformáció kis eső hatására is!
 (maradandó)



$$\epsilon_{xy} = \frac{\Delta y}{L_y} = \frac{b}{L_y} \cdot \frac{\Delta x}{L_x}$$

↓

plast.
deform.

Δx -es moduláns
el

(1 dislok. mentén)

$$\gamma = \frac{M_b \cdot \Delta x}{L_x \cdot L_y} = \left\{ \begin{array}{l} \frac{M_b \cdot \Delta x}{L_x \cdot L_y \cdot L_z} \\ \frac{M_b \cdot \Delta x}{L_x \cdot L_y \cdot L_z} \end{array} \right\}$$

felületen
elői dislokáció
nincs

egz
anyag
plasztikus
deformációja

$$\boxed{\gamma = g \cdot b \cdot \overline{\Delta x}} \quad \text{Hooke-összefüggés}$$

g : dislok. számegység

b : dislok. vektor

$\overline{\Delta x}$: átlagos elmoduláns

- Elveretökben a dislokációs nágyan rom (a jó si lyukban ált. han egységes)
- $10^5 - 10^{13}$ dislok. / cm²
- ha az anyagon nincs dislok.: tökély lez

- a dislok. "működés" a deformációk
- de ha túl sok a dislok., megint rövid és tökély lez az anyag

2) Felületi hibák

pl. nemcsatlak

- polikristálys anyagok : 0,1 mm-nél kisebb nemcsék (pl. fémek)
- dimenziomos -II- : -II- nagyobb -II-

monokristálys anyag ~10 nm-es nemcsatlak \Rightarrow az anyag nagy része nemcs

3) Testogati hibák

- kiválás (második fasisz)

Al-lan

- pl. Mg_2Si nemcsék kiválnak \rightarrow megalakadályozzák a dislokációk továbbtöredést (felleküdik köülötté)

- üregek ; pl. izomrallan K

(pórosok, void)

- anyag vége

4) felhasználások :

- anyagnakozáti tul.-ok megrázottatható (keményíté)
- veretesi tul.-ok
 - fémekben
 - illesztőben

Ha nagyon sok atomos részben \Rightarrow amorf anyag (nincs hozzá tartozó rend)

Amorf anyagok

- folyadékok, üveg

- közelíthető pl. SiO_2 rend van



Na: nátron üveg

Ca: flint üveg

B: borosilikát

(jénai, piroxén:
kicsi a hotágyulásra)
üvegzákok

- pl. Fe+B fémüveg

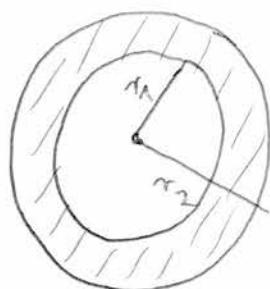
Körözet: gyorsan lehűtő



meg az anyag ($\frac{1000^\circ}{\text{ms}}$): splat cooling (folyadékot hűtő
szélben frissítés)

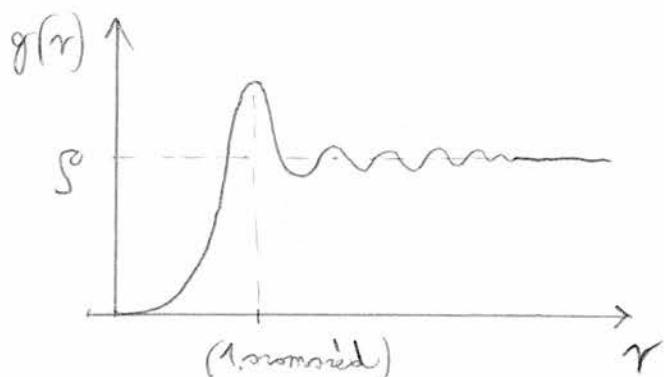
- jellemzés:

$g(r)$: radialis eloszlás fv. RDF: radial distribution function



$$N = \int_{r_1}^{r_2} g(r) \cdot 4\pi r^2 dr$$

hány atom van az r_1 és r_2 sugárú
gömbfelület között



(RTG-el kinevezik)

\rightarrow ha több atomos amorf anyag van, több $g(r)$ is definíálható,
pl. Fe-B, B-B, Fe-Fe egy $\frac{\text{molekula}}{14}$ -ből álló összetében

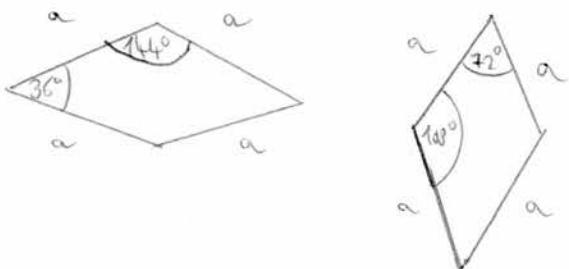
Kvázikristályok

- 1985-ben fedezték fel

Al_6Mn ← splat cooling

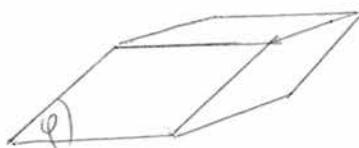
5 fogaskör simmetriás tulajdonságai lennének!

1) 2D kvázikristály (Penrose - csempés)



- ki lehet velük működni a teret
- soha nem fog ismétlődni!
- nincs hosszú tökéletes rend
(de minden négy részből van → minden négy 36°-al osztatható)

2) 3D: ikoszaéderek kvázikristály



$$\operatorname{tg} \varphi = 2$$

a diffúziós képe ilyen
→ az ikoszaéderek szerkezete
romboéderekkel áll

romboéder: H oldala ugyanakkor

3) Felhasználás:

- mosás hővezetők → ipari forrásokban
(kvázikristályos fémek is vannak)
- nem kompatibilis

Tolyadék kristály

- 1888, Friedrich:

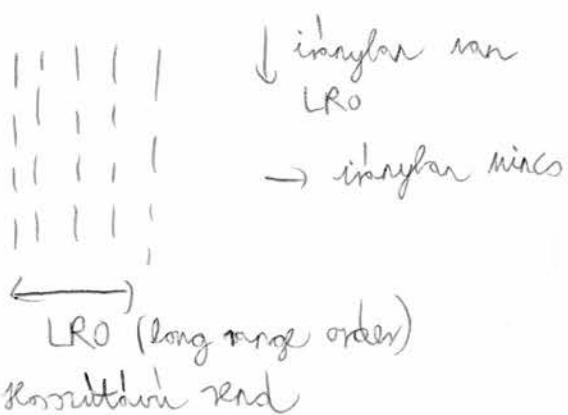
koleszterin melegítésre nőőrök → 150°C "homogén" 170° → tolyadék

- 1970-es években kerülték el "újra felfedezni" (1969)

"
kristályos
tolyadék"

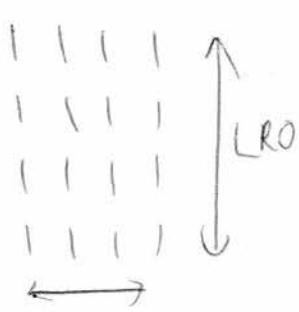
- Legefontosabb ~ szerkezetek:

- nemetikus



(tolyadék → hosszú molekulák)

- smektikus A

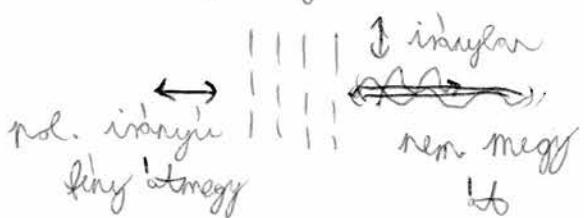


- smektikus C



- Telkristály

- LCD kijelzők



pd. lemez
foly kr.

felülettel
(el. vezet.)
elforgatókkal

a felületen való töltés
~~magy~~
kéziterek, amikbe magától
lesálnak a kristályok
+ hogyan forgatják
írás?

— — — maskapp
— — — polarizál
← → a pd. felület már nem engedi

Fizikai fizikai eljárások

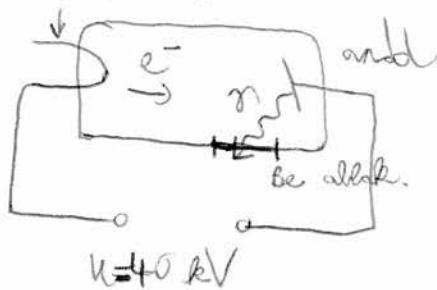
- (makroszkopikus: optikai mikroskop)
- mesoszkopikus: e^- mikroskop, RTG
- mikroszkopikus: atomi körültekercs)

1) Röntgen:

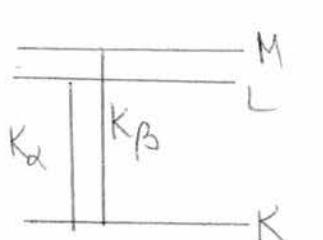
- Első alkotás

a) Nagyományos - RTG ≈ 1895

indukció

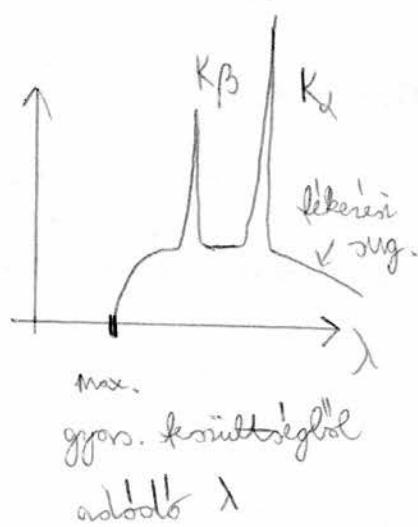


katód anyagától függ
a kilépő e^- energiája (és a lekér. töl)
 $\begin{cases} \text{Cu} \\ \text{W} \end{cases}$ } katód



\rightarrow sugárzások:

- Lékerekű
- Karakterisztikus (K_α, K_β)



\rightarrow Röntgen és az összes a lékerekű sugárzást használják / használták

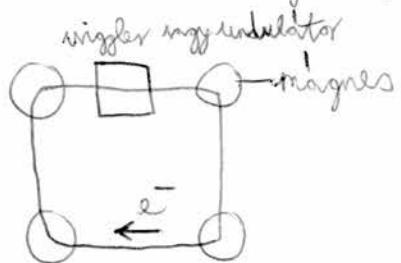
\rightarrow Lékerekűök monokromatikus nyaláb kell $\rightarrow K_\alpha, K_\beta$

$$eU = h\nu_{\text{küszöb}} = hc \cdot k = hc \cdot \frac{2\pi}{\lambda_{\text{küszöb}}} = \frac{hc}{\lambda_{\text{küszöb}}}$$

$$40 \text{ kV} \sim \lambda = 0,03 \text{ nm}$$

$$c_0, K_d \quad \lambda = 0,15 \text{ nm}$$

b) sincrotron sugárzás



undulator
előre sugárzó,
"1 db frekvenciával"
(ellenben)

→ előnye:

- monokromatikus
- nagy intenzitás

→ hátrány:

- nagy méret
- drágá

c) szabadelektron lásér

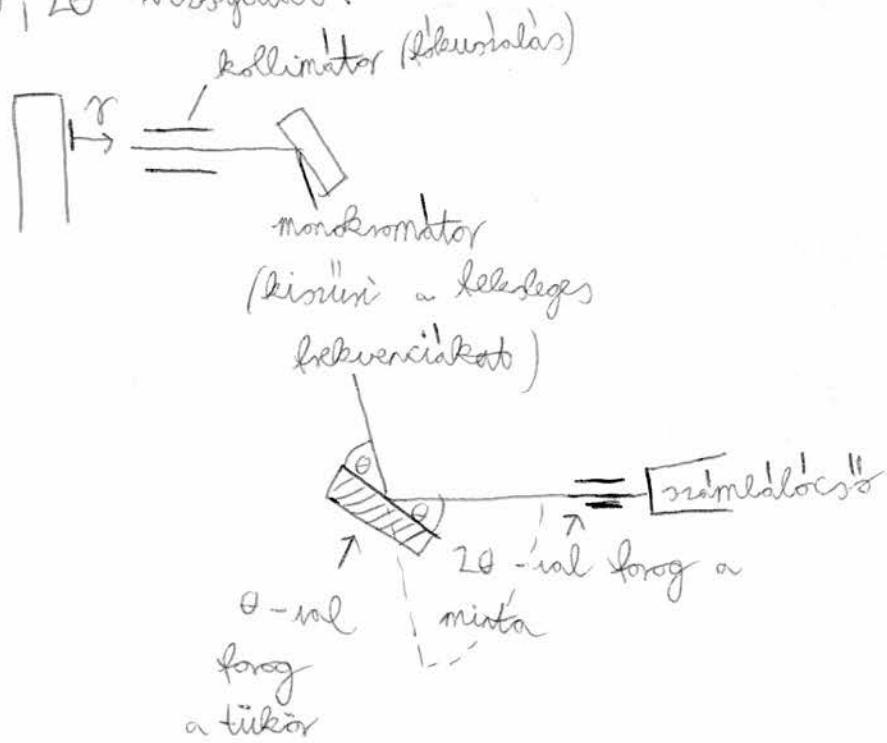
lineáris gyorsúság undulációval

— vizsgálat RTG sugarzással:

- negatív szíras: amilyen energiájú foton lemegez, olyan energiájú foton is jön ki (nem rezonálva az anyagban semmi, mert túl nagy a frekvencia) → de inkább megváltásik (diffraction)
- fotolemez, CCD → 8 bit (256) intenzitási értékhez 10^4 MP (kisebb a felbontás) $\sim 50 \text{ MP}$

imaging plate: lásérrel kialakított patrón kialakítása, fotolemez → majd ki istölti $\rightarrow 10^5$ int. rész

- 8.20 vizsgálat:



- elektronosztáziajegyet érzékel
- könnyű atomokat (C) nem lehet látni
- elhajlású kép \rightarrow intensitás kép

kine a fókus is, de az anyag ismeret
tulajdonságaiiból így is rövidebbük
számítani a sebességet

3. óra

2) Elektronmikroszkóp:

- elektronok: irodáktól lepnek ki, $200 - 300 \text{ eV} \rightarrow$ gyorsító-
kerüttseg hatására

$$e \cdot U \cdot \frac{n^2}{2m} \rightarrow n = \frac{\lambda}{\lambda} \rightarrow \lambda = 0,1 \text{ pm}$$

300 eV

\rightarrow atomrávadság $\sim \frac{1}{1000} \text{ e}$

magam lelök ilyen kis távolságokat felbontani a leképezési hibák miatt

!!

max. 1 atomos felbontás

- mikroskop: $\frac{1}{t} + \frac{1}{k} = \frac{1}{f}$

diffrakció: $k = f$



— minta

— tárgylencse

— inkább

a) TEM: transzmissziós elektronmikroskop

→ ilyekkor a minta kb. 10 nm vastag

→ minta előkészítése: lecsiszolják vékonyra, majd kemini áton átmarratják, amíg lyukas nem lesz → a lyuk nélküli rész egy vékony réteg

- lencsék: magnesteknerek → nagyon kicsi az átmérőjük, hogy jól lehessen kialakítani őket

→ a magneses ter miatt a kép torz! (e spirálpályán halad)

- íráskelet: elektrostatiskus potenciált használ

- előny: nagyon kis területről lehet képet csinálni

határny: ebből a megelőzően írtaknak aranya + jól kell preparálni a mintát, mivel a kih minősége

b) HREM (high-resolution e. mic.)

nagyfelbontású e-mikroskop → atomi felbontás

c) SEM (scanning e. mic.)



- elérkezés:

- primer e^- : nagy E , rögtön röntgenfelvétel
- sekunder e^- : ha primer e^- -ek bejutnak az anyagba, tovább e^- -eket löknek ki
- karakteristikus RTG sugárzás
- előny: nem kell a mintát elvekonyítani
hatrány: 10-20-50-szer kisebb felbontás, mint a TEM-nél
- legjobb képet a sec. elektronok adják

3) Neutron diffrakció:

- neutron: termikus neutronok reaktorból

$$\frac{1}{2} kT = \frac{f^2}{2M_n} \quad n = \frac{\hbar}{\lambda} \rightarrow \lambda = 0,05 \text{ Å} = 5 \mu\text{m}$$

- előny: csak a magon rövidik, az e^- felhőn nem
→ kevesebb hosszú körön átanyaggal: hullámhosszra
hatrány: - II - → nagy minta kell,
melyen detektálunk (3 m)

\rightarrow drágá
 \rightarrow maga a reakció is elég nagy, keves nö forrás
 előny (2): \rightarrow van spinje: spinorok mérhetők
 \rightarrow isotopenergiával!

4) Kölcsönhatások

RTG - elektronhímseg $\rho(r)$

elektron - elektrostatikus potencial $U(r)$

neutron - maghímseg $b \cdot \delta(r)$ röntgen hossz
 \uparrow

Demi-féle kontaktkölcsönhatás

(szabadtestekben a magok nagyon kicsik (δ),
 a n^0 nem hat kölcsön erőt a magok között)

(Born-közelítés: pl. ütközéknél \rightarrow előbb feltételezik, hogy
 eggyes pályán halad, kiszámoljuk az erőt id, majd
 ebből egy görbület kapható, amire megint kiszámoljuk az erőt,...
 Ez a folyamat köreli a pályához)

- Floras kinematikus elmélete:

1. Born-közelítés

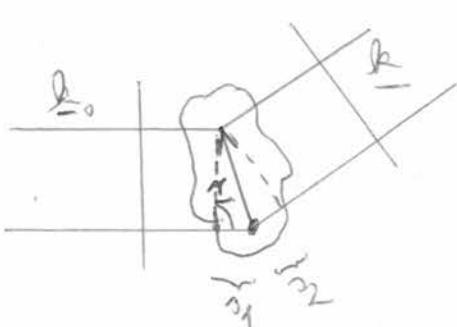
2. Fraunhofer interkoncia jelenség (\rightarrow pl. függőleges lebegő)

$k \rightarrow \infty$ \rightarrow (a bejövő $k_0 - k$ és a kimenő $k - k'$ is)

bejövő hullámzám: $k_0 - |k_0| = \frac{2\pi}{\lambda} - |k|$ $|k| = \frac{2\pi}{\lambda}$

kimenő - $|k|$: $k - |k| = \frac{2\pi}{\lambda}$

(ha energia megnarad, hullámzám abszolút értéke is meg-
 narad)



$$\Delta \underline{\sigma} = \sigma_1 + \sigma_2 = -\frac{k_0 \cdot \underline{r}}{|k_0|} + \frac{\underline{k} \cdot \underline{r}}{|k|} = (\underline{k} - \underline{k}_0) \cdot \underline{r} \cdot \frac{\lambda}{2\pi}$$

$$\Delta \ell = \frac{\Delta \underline{\sigma}}{\lambda} 2\pi = (\underline{k} - \underline{k}_0) \underline{r}$$

- amplitud, nincs származás:

$$A(\underline{k}) = \underbrace{\int g(\underline{r}) e^{i(\underline{k} - \underline{k}_0) \cdot \underline{r}} d^3 r}_{\text{elektromosfeld}} = (\text{Fourier-transzformáció})$$

$\underline{k} - \underline{k}_0 = \underline{k}$ socrászi vektor
(kappa)

$$\begin{aligned} I(\underline{k}) &= |A(\underline{k})|^2 = \int g(\underline{r}_1) e^{i(\underline{k} - \underline{k}_0) \cdot \underline{r}_1} d^3 r_1 \cdot \int g(\underline{r}_2) e^{-i(\underline{k} - \underline{k}_0) \cdot \underline{r}_2} d^3 r_2 = \\ &= \iint g(\underline{r}_1) g(\underline{r}_2) e^{i(\underline{k} - \underline{k}_0)(\underline{r}_1 - \underline{r}_2)} d^3 r_1 d^3 r_2 \end{aligned}$$

- Helyes intensitás:

$$\langle I(\underline{k}) \rangle = \iint \underbrace{\langle g(\underline{r}_1) g(\underline{r}_2) \rangle}_{K(\underline{r}_1 - \underline{r}_2) = K(\underline{R})} e^{i(\underline{k} - \underline{k}_0)(\underline{r}_1 - \underline{r}_2)} d^3 r_1 d^3 r_2 =$$

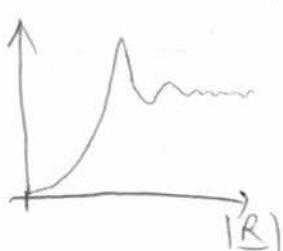
Patterson-fv., párokorelaciós fv. (autokorelaciós fv.)

$$= K(\underline{R}) \cdot e^{i(\underline{k} - \underline{k}_0)(\underline{R})}$$

\Rightarrow az elliplási képből a párokorelaciós fv.-t lehet csak meghatározni

- $K(\underline{R})$

folyadék,
amorf



• Kristályos anyag:

$$A(\underline{k}) = \int \rho(\underline{r}) e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} d^3 r \quad \underline{r} + \underline{R}_n = \underline{r}'$$

$$\rho(\underline{r}) = \rho(\underline{r}' + \underline{R}_n) \quad A(\underline{k}) = \int \rho(\underline{r}' + \underline{R}_n) \cdot e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}'} d^3 r' =$$

\searrow

recsvektor

$$= \int \rho(\underline{r}') e^{i \underline{k} \cdot (\underline{r}' - \underline{R}_n)} d^3 r' = e^{-i \underline{k} \cdot \underline{R}_n} \cdot A(\underline{k})$$

$$\Rightarrow A(\underline{k}) \cdot (1 - e^{-i \underline{k} \cdot \underline{R}_n}) = 0$$

$$\begin{array}{ll} \checkmark & \rightarrow \\ A(\underline{k}) = 0, & A(\underline{k}) \text{ lehet } \neq 0, \\ \text{ha } 1 - e^{-i \underline{k} \cdot \underline{R}_n} \neq 0 & \text{ha } 1 - e^{-i \underline{k} \cdot \underline{R}_n} = 0 \\ 1 = e^{-i \underline{k} \cdot \underline{R}_n} & \leftarrow \end{array}$$

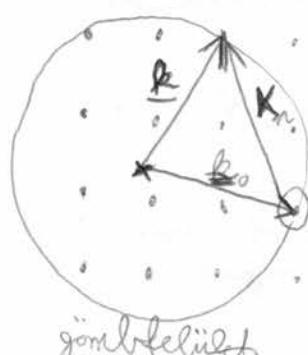
$$\text{ha } \underline{k} \cdot \underline{R}_n = 2\pi \cdot \text{egysz}$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\underline{k} = \underline{K}_n} \text{ reciprok vektor!}$$

$$\boxed{\underline{k} - \underline{k}_0 = \underline{K}_n} \text{ Bragg-feltétel}$$

Ewald-szerekes:



reciprok vektor kerülete

IDE megy BE \underline{k}_0 végpontja

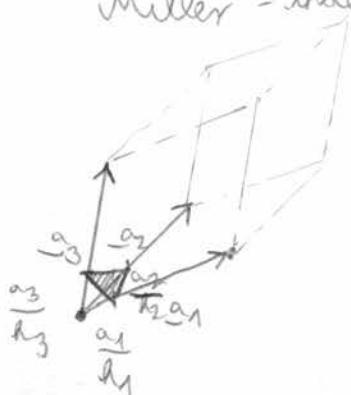
görbölűlés

le tudom tapasztani a reciprok vektor \underline{k}_0 változtatásaval

Reciprok rész és rácikk

- reciprok rész: l. elso rész
- rácikk: \propto azon rácikpek száma (elmi eredményekre egz. számítottak)

Miller - indexek $h_1 h_2 h_3$ (h k l - nek szabtak fölött)



$$1) h_1 h_2 h_3 \text{ rácikk } \perp \underline{a} \quad K_{h_1 h_2 h_3} =$$

$$= h_1 \underline{a}_1 + h_2 \underline{a}_2 + h_3 \underline{a}_3$$

egysébbeli vektor

$$\text{Biz.: } K_{h_1 h_2 h_3} \cdot \left(\frac{\underline{a}_2}{\underline{a}_1} - \frac{\underline{a}_1}{\underline{a}_2} \right)^2 =$$

$h_1 h_2 h_3$ rácikk

is a reciprok rész ködö

nem egészben a

megfelelés

$$2) \underline{a} h_1 h_2 h_3 \text{ rácikk hossza} = \frac{2\pi}{|K_h|}$$

(2-réz reciprok rész)

$$\text{-vektormb is } d_{h_1 h_2 h_3} = \frac{\underline{a}_1}{h_1} \cdot \frac{\underline{K}_h}{|K_h|} = \frac{2\pi}{|K_h|}$$

ugyanaz a síkja

a sík normálvektora



Bragg - feltétel: $\underline{k} - \underline{k}_0 = \underline{K}_h$

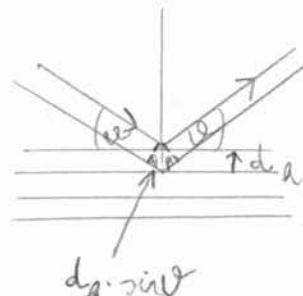


$$2|\underline{k}| \sin \theta = |\underline{K}_h|$$

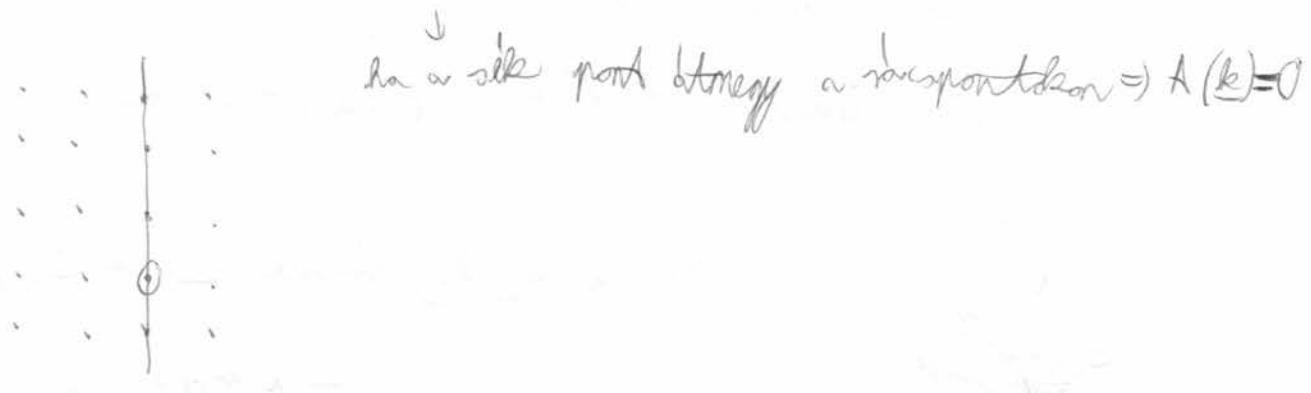
$$\rightarrow 2 d_{hkl} \sin \theta = \lambda$$

$$2 \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \sin \theta = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

Bragg - felt.



\bar{e} , n^o diffrakció: λ nagyon kicsi $\Rightarrow |\underline{k}|$ nagyon nagy
 \Rightarrow az Ewald-gömb elyén nagy, hossz gyakorlatilag
 egy síkot metszik ki a rácstól



$$A(\underline{x}) = A(\underline{k}) = \int p(r) e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} d^3 r = \sum_n \int p_c(\underline{r} - \underline{R}_n) e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} d^3 r =$$

$$p(\underline{r}) = \sum_{n_1, n_2, n_3} p_c(\underline{r} - \underline{R}_n) \quad \underline{R}_n = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3$$

\uparrow
 "cellák száma"

$$\underline{r}' := \underline{r} - \underline{R}_n \quad \text{az adott pontban (rácson)}$$

$$= \sum_n \int p_c(\underline{r}') e^{i \underline{k} \cdot (\underline{r}' - \underline{R}_n)} d^3 r' = \sum_n \int p(\underline{r}') e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}'} d^3 r' \cdot e^{-i \underline{k} \cdot \underline{R}_n}$$

$$A(\underline{k}_h) = N_c \int p_c(\underline{r}) e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} d^3 r$$

N_c nagyon nagy (cellák száma) \Rightarrow

\Rightarrow differ. képzés legtöbb helyen 0 az intensitás, de ha nem, akkor
 nagyon nagy (adott pontban)

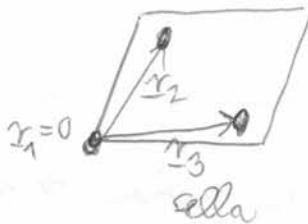
$$g_c(r) = \sum_{p=1}^3 g_p (r - r_p)$$

a cella elektron "színezet"

törölhető lenne, ha

az e^- felől nem lövén

kitevőt



||

$$A(\mathbf{k}_h) = N_c \int g_c(r) e^{i\mathbf{k}_h \cdot r} d^3r = N_c \sum_p \int g_p(r - r_p) e^{i\mathbf{k}_h \cdot (r - r_p)} d^3r =$$

$$= N_c \sum_p \underbrace{\int g_p(r) e^{i\mathbf{k}_h \cdot r} dr}_{\text{atom szávi tényező}} \underbrace{e^{+i\mathbf{k}_h \cdot r_p}}_{\substack{\text{faktor} \\ \text{szab. faktor}}} f_p(\mathbf{k}_h) \quad (\text{atomra, reakcióra})$$

(form. faktor, alakfaktor, alak-tényező) jellemző

$$A(\mathbf{k}_h) = N_c \sum_p \underbrace{f_p(\mathbf{k}_h) e^{i\mathbf{k}_h \cdot r_p}}_{\substack{\text{rekeszeti tényező} \\ (\text{struktur. faktor, strukt. tényező, str. faktor})}} \rightarrow \text{a cellára jellemző mélység}$$

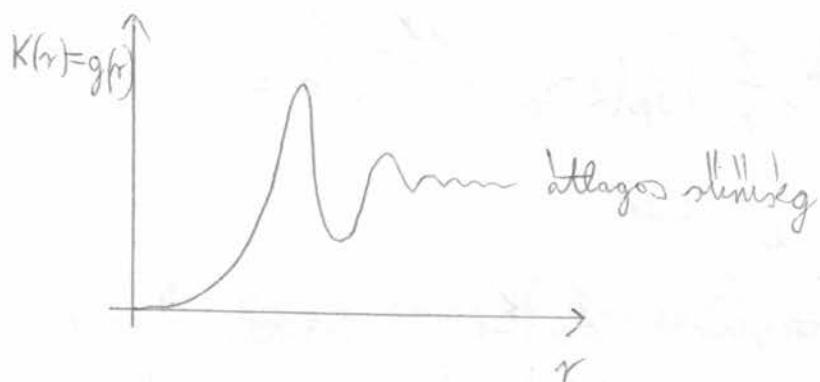
Intensitás tudtak csak mérni, faktor nem \rightarrow a rekeszetet meg is meg tudjuk határozni különösen ikollszabályok alapján.

5) Rácshibák hatása

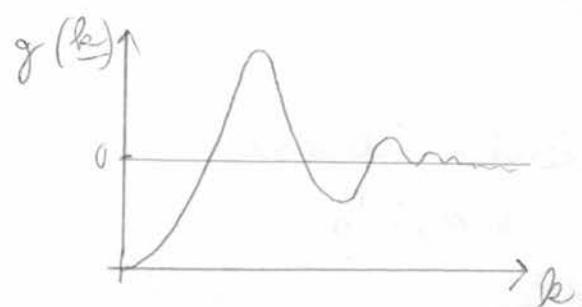
- ponthibák (vakancia,...) \rightarrow elkerülhetetlenek (Ruang - sebesség)
- vonal + felületi hibák \rightarrow vonalszélesedést okoz

6) Folyadékok, amorf anyagok:

- radialis eloszlásfr.: RDF



Fourier-transzformáltja



(több komponensű anyagnál és összetevén a különböző eloszlásfr.-eket, de van a módszer, hogy szétválasztanak őket)

7) Körkristályos anyagok:

Először is körkristályos szerkezetre jellemző diffúziós spektrum alakul ki, de az intensitás félérvittekkel valóban mindenhol pöttyököt látunk.)

Kötések kondenzált anyagokban

(millard)

Elsőrendű kötések

1) Kovács kötés:

- nagyon erős
- az ilyen anyagok tökébenek

pl. :C:C:C: (gyemánt)

:C:C:C: telítettség

:C:C:C:

" " "

2) Ionos kötés:

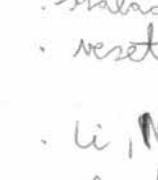
7el 1el

Cl \leftarrow Na

:Cl⁻: Na⁺

(elektrostatikai vonás, de közéjük tartalék a Pauli-elv miatt)

3) Fémes kötés:

- ⊕   maladon elmondott e-ök
- veszeti az elektronos darabot

• Li, Na (alkalifémek)

• Be, Mg (alkalifeldfémek)

• Al, Ga (fémek)

• Pb, In, Sb

• (3d, 4d, 5d) átmeneti fémek: d e-ök hozzik létre a kötést,
→ elektronok vesznek

• (4f, 5f) → e-ök vesznek, f e-ök kötnek

4. Óra

(fémes kötés)

- fémek: l-kötés, s-véset

3d	Sc	Ti	V	G	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
4d					Mo		Pd	Ag	Cd	
5d					W		Rh	Au	Hg	

- ritka földfémek: f-kötés, s-véset

Mássalagos kötések

1) dipol-dipol kötés



pl. cukor, H_2O , NH_3
(4°C lefölt)

2) Induktív dipol (Van-der Waals)

- pl. nemegyárak



- távságfüggős $\sim \frac{1}{r^6}$ \rightarrow nagyon gyenge kötés
- Kozimir - effektus: két szemleges fémlemez köött is kialakulhat induktív dipolus kötés \rightarrow nagyon gyenge, de kiemelkedő (az elvártból 1000-szerese)

3) H-dipol kötés



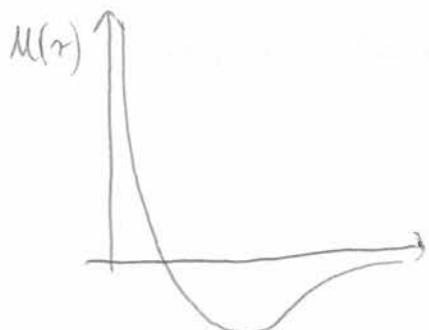
- H_2O , HF , NH_3
- szerves molekulák } csak N_2O , F tud kialakítani

(összetettebb anyagokban többfélé kötés is kialakulhat)

pl. $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ → kovalens kötés: NH_4^+ -en belül
ions kötés: NH_4^+ és SO_4^{2-} kötött)

(külsőből anyagok közötti összetartó erő - adhesio
aromas - II - - cohesion)

3) Kötést potenciál (2 atom közötti vonás k.l.)

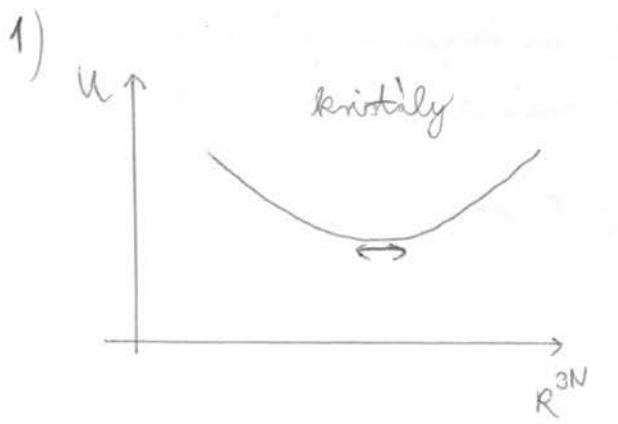


pl. Lennard-Jones-potenciál

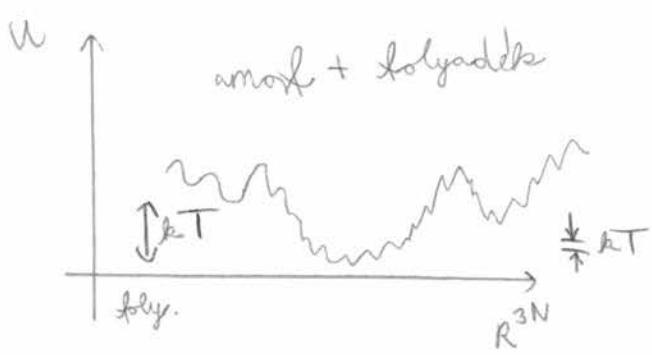
$$U(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}$$

↳ kiráktaki modell (Van der Waals tag + közelre Pauli-törzsl)

Atomok mozgása, atomdinamika



→ kristályszerű anyagban a potenciálnak kristályszerű (rendesített) helyzetben minimuma van, eközül vesznek az atomok (N atomhoz sima)



→ folyadéknál kT nagy → külsőpotenciálgodtságba is beülhet, gyorsan váltózik az anyag
→ amorf anyagban kT kicsi, ezért általában csak egy godtságban, de kimondhatatlan módon (melegítés)

2) Kristályos anyag rezonansai

$$\underline{x}_n(t) = \underbrace{\underline{x}_{\text{no}}}_{\substack{\text{egysélyi} \\ \text{helyzet}}} + \underbrace{\underline{u}_n(t)}_{\substack{\text{kikötés} \\ \text{a többi atom} \\ \text{hatása az n-re}}} \quad n = \{1, 2, \dots, N_a\}$$

↑
atomok száma

$$m_n \cdot \ddot{\underline{x}}_n = - \sum_{m=1}^{N_a} D_{nm} \cdot \underline{u}_m$$

a többi atom
hatása az n-re

D_{nm} : dinamikus matrix
(erő összefüggés matrix)
 $3N_a \times 3N_a$ méretű

$$\underline{u}_n(t) = \underline{u}_n e^{int}$$

$$m_n w^2 \cdot \underline{u}_n = \sum_{m=1}^{N_a} D_{nm} \cdot \underline{u}_m$$

$$w^2 \underline{M} \underline{u} = \underline{D} \underline{u} \quad \rightarrow \text{ha azonos atomjaink vannak, akkor } \underline{M} = m \cdot \underline{I} \rightarrow \text{szimmetrikus - egenségtől független}$$

$\rightarrow \underline{D}$ simmetrikus ($F_{nm} = -F_{mn}$ (Newton III))

\rightarrow ha: $\underline{M}^{-1} \cdot \underline{D}$ nem önszajungáló \rightarrow ez igy nem s.t.

egyenlet

diagonális, pozitív definit!

\exists negyedgyöke

$$\underline{M} = \begin{pmatrix} m_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & m_{N_a} \end{pmatrix}$$

$$\underline{M} = \underline{S}^2 \rightarrow \underline{S} = \begin{pmatrix} \sqrt{m_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sqrt{m_{N_a}} \end{pmatrix}$$

$$\underline{S}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{m_1}} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \frac{1}{\sqrt{m_{N_a}}} \end{pmatrix}$$

$$w^2 \cdot \underline{S}^2 \cdot \underline{u} = \underline{D} \underline{u}$$

$$\underline{w}^2 \underline{M} \underline{u} = \underline{S}^{-1} \underline{D} \underline{S}^{-1} \cdot \underline{S} \underline{u}$$

\underline{M} \underline{S} \underline{S}

$\omega^2 \underline{v} = \underline{\zeta} \underline{v}$, ahol $\underline{\zeta}$ önzajlófolt \rightarrow sajátékegyenlet!

$$\underline{v}_n = \sqrt{m_n} \cdot \underline{u}_n \quad \underline{\zeta}_{nm} = \frac{\underline{\zeta}_{nm}}{\sqrt{m_n \cdot m_m}}$$

Még ez a s.k. egyenlet is til sok számítás igényel.

Tudunk-e többi egyszerűsítéseket tenni?

- Riccs cella $R_n = R_{n_1 n_2 n_3} = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3 \quad n_1 = \{1 \dots N_1\}$
cellák száma: az anyag környezetében $N_1 \times N_2 \times N_3 \times$ elemi $n_2 = \{1 \dots N_2\}$
 $N_c = N_1 N_2 N_3 \quad$ cella (parallelepipedon) $n_3 = \{1 \dots N_3\}$
- a határfeltételek igezésből nem szükséges számítások nagy kiterjedésű anyag esetén:
 - az anyag réslein a kiterül 0
 - periodikus határfeltétel: az anyag egysik résle ugyanaz, mint a másik \rightarrow ezt fogjuk most használni
- Cellán belül: $\underline{r}_p, p = \{1 \dots s\} \quad \rightarrow$ ottól is száma ~ cellán belül

$$\omega^2 \underline{v} = \underline{\zeta} \underline{v}$$



$3N_c \rightarrow$ hosszú

$$\omega^2 \underline{v}_n = \sum_m \underline{\zeta}_{nm} \cdot \underline{v}_m$$



$\rightarrow \underline{\zeta} = (R_n - R_m)$ a translációs szimmetria miatt!

$$\underline{v}_n = A \cdot e^{ik \cdot \underline{R}_n}$$



$$w^2 \cdot A \cdot e^{ikR_n} = \sum_m C(R_n - R_m) \cdot A \cdot e^{ikR_m}$$

$$R_n - R_m := R_r$$

$$w^2 \cdot A \cdot e^{ikR_n} = \underbrace{\sum_r C(R_r) \cdot e^{-ikR_r}}_{C(k)} \cdot A \cdot e^{ikR_n}$$

$C(k)$:

$$w^2 \cdot A = C(k) \cdot A$$

3×3 mérték

$$R_n - R_r = R_m$$

- \underline{k} hullámszám $\rightarrow w^2(\underline{k})$: 3×3 db sajátétek
(3×3 különösök)
 $w(\underline{k})$: $\begin{array}{c} -11- \\ \uparrow \\ \text{disperziós reláció, } 3 \text{ helyen lesz} \end{array}$
- Mire a \underline{k} ?

$$v_n = A \cdot e^{ik \cdot \underline{R}_n}$$

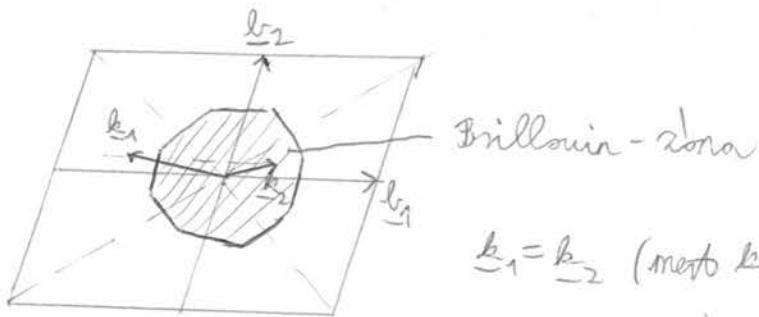
ha $\underline{k} \rightarrow \underline{k} + \underline{k}_h$ \leftarrow reciprok vektor

(reciprok vektorral szemben 2π egész számok)

$$e^{i(\underline{k} + \underline{k}_h) \cdot \underline{R}_n} = e^{ikR_n} \cdot e^{\frac{i\underline{k}_h \cdot \underline{R}_n}{2\pi \cdot \text{egész}}} = e^{ikR_n}$$

\Downarrow

\underline{k} ekvivalens $\underline{k} + \underline{k}_h$ -val



$\underline{k}_1 = \underline{k}_2$ (metszésekben egy reciprok vektor van)

$\Rightarrow \underline{k} \in$ Brillouin-zóna (aztól kívül \underline{k} ekvivalens merekkel a \underline{k} -val)

• periodikus határfeltétel miatt:

$$v_n = A \cdot e^{ikR_n} = A \cdot e^{ik(R_n + N_1 \cdot a_1)}$$

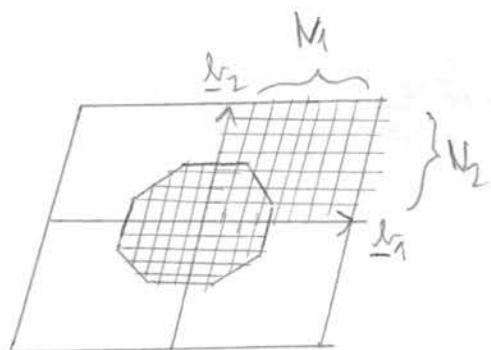
$$e^{ik \frac{N_1 \alpha_1}{\lambda}} = 1 \Rightarrow k \alpha_1 = \frac{2\pi}{N_1} \cdot p_1$$

$$\text{hasonlóan } k \alpha_2 = \frac{2\pi}{N_2} \cdot p_2$$

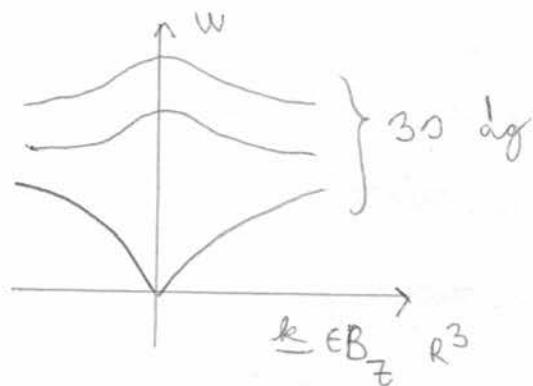
$$k \alpha_3 = \frac{2\pi}{N_3} p_3$$

$$k = \frac{p_1}{N_1} b_1 + \frac{p_2}{N_2} b_2 + \frac{p_3}{N_3} b_3$$

$$p_1, p_2, p_3 \in \mathbb{Z}$$



dispersio relacio:

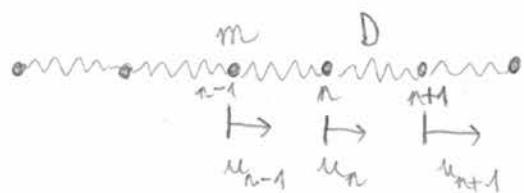


(k csak diskret értékeket vehet fel)

elvileg csak N db módszinn → a diszp. relacio diskret pontokból állna, de $N_1, N_2, N_3 = \mathcal{O}(10^8)$ ⇒ folytonos görbevel közelíthető

3) Példák numerikusra

a) atomláncok rezgési:



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

$$\ddot{u}_{n-1} = -D(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})$$

$\forall n \neq 0$

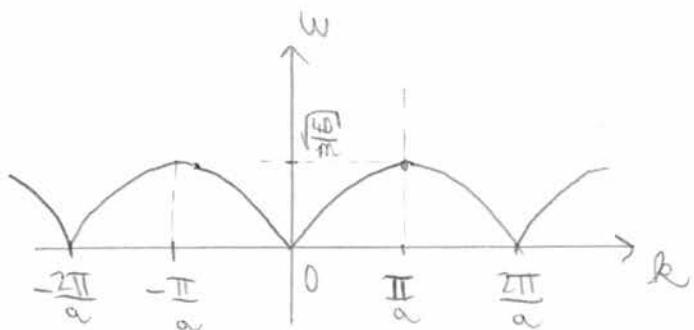
$$u_n = A \cdot e^{i\omega t} \cdot e^{ik_n a}$$

$$\omega^2 m K \cdot e^{i\omega t} \cdot e^{ika} = D (2K e^{i\omega t} e^{-ika} - K e^{i\omega t} e^{ika} - K e^{i\omega t} e^{-ika})$$

$$m\omega^2 = D(2 - e^{ika} - e^{-ika})$$

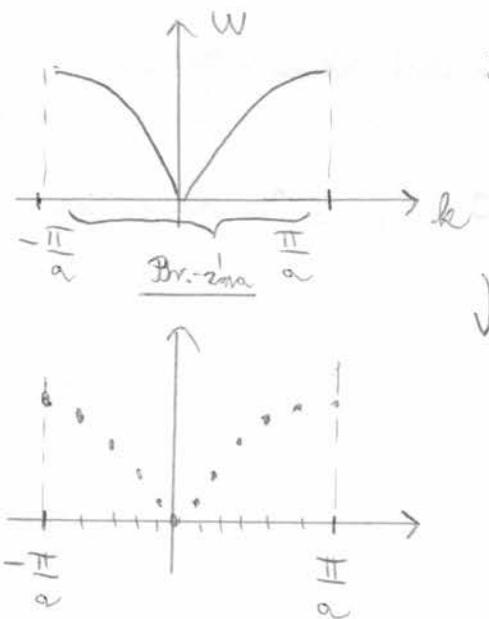
$$\omega^2 = \frac{2D}{m} \left(1 - \cos(ka)\right) = \frac{4D}{m} \cdot \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)$$

$$\omega = 2\sqrt{\frac{D}{m}} \cdot \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$



periodikus $\frac{2\pi}{a}$ -ra (eltolási szimmetria)

↳ teknikailag csak a kör. tartományt



Brillouin-zóna (Fázis tartomány, ahol a tökéletes végzet fel)

$$\downarrow \text{vagyiban } k = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{n}{N} \quad n \in \mathbb{Z}$$

diszkrét pontok

$N \rightarrow \infty$ kvázifelületek

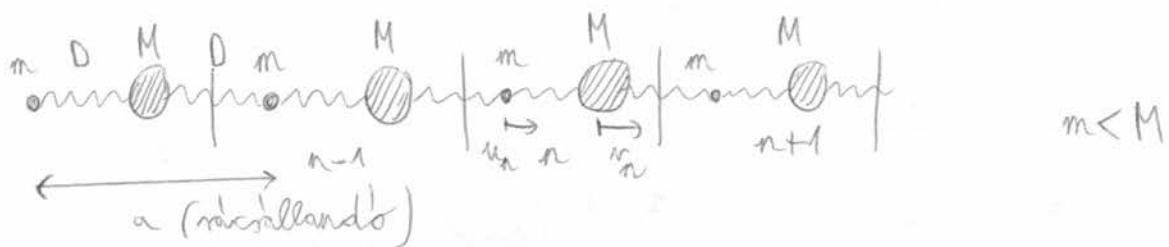
(lineáris láncra 1'igra van, mert 3×30 -ról is \rightarrow atom/cellára volt igaz $\Rightarrow s=1$, dimenziószám = 1)

bolytonos linc: $a \rightarrow 0$

$$w = c \cdot k$$

(Brillouin-zóna nem mindenkor megfelelő $k = m$!)

b) Kötetomos linearis linc



$$m \ddot{u}_n = -D (2u_n - v_n - v_{n-1})$$

$$M \ddot{v}_n = -D (2v_n - u_{n+1} - u_n)$$

(a tömeg transzformálásával most nem fogalkozunk)

$$\begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \cdot e^{ik \cdot an} e^{iwt}$$

$$m w^2 A = D (2A - B - B e^{-ika})$$

$$M w^2 B = D (2B - A e^{ika} - A)$$

$$\begin{pmatrix} mw^2 - 2D & D(1 + e^{-ika}) \\ D(1 + e^{ika}) & Mw^2 - 2D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0$$

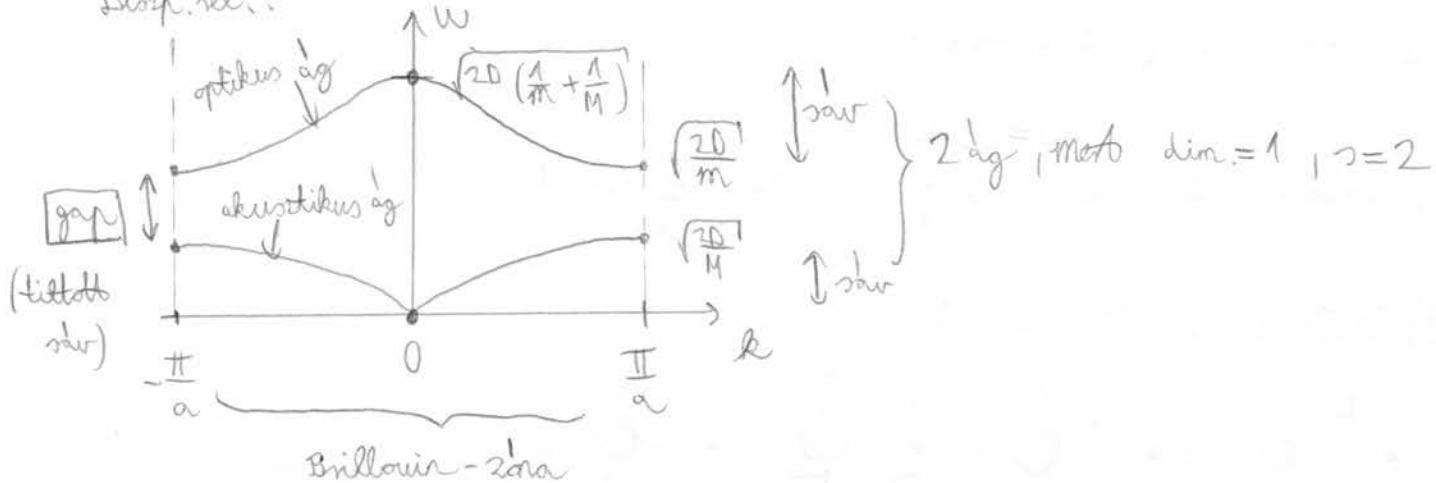
$$(mw^2 - 2D)(Mw^2 - 2D) - D^2 (1 + e^{-ika})(1 + e^{ika}) = 0$$

$$mM w^4 - 2D(m+M)w^2 + 4D^2 - D^2(2 + 2\cos ka) = 0$$

$$mM \cdot w^4 - 2D(m+M)w^2 + 2D^2(1 - \cos ka) = 0$$

$$w^2 = \frac{D(m+M) \pm \sqrt{D^2(m+M)^2 - 8D^2 m M (1 - \cos ka)}}{2mM} = \frac{D}{mM} \left(m+M \pm \sqrt{m^2 + M^2 + 2mM \cos ka} \right)$$

diszp. rel.:



$$k=0, k_a=0, \cos k_a=1$$

$$w^2 = \frac{D}{mM} (m+M \pm (m+M))$$

$$k=\frac{\pi}{a}, k_a=\pi, \cos k_a=-1$$

$$w^2 = \frac{D}{mM} (m+M \pm (m-M))$$

$$w^2 = 0$$

$$w^2 = 2D \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)$$

$$w^2 = \frac{2D}{m}$$

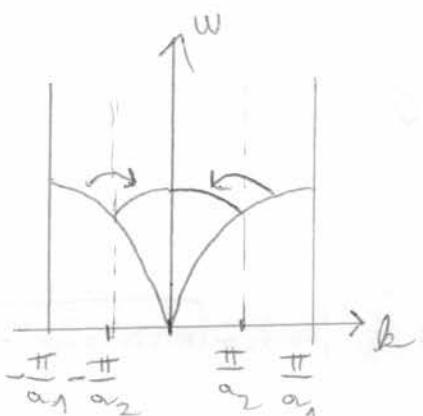
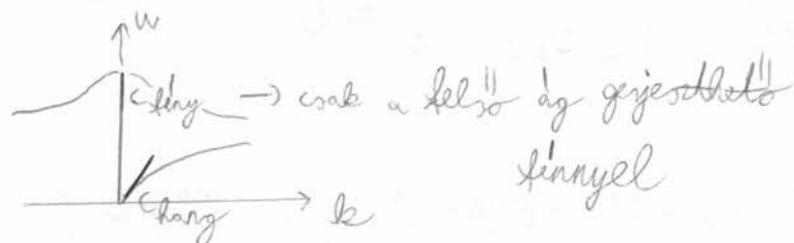
$$w^2 = \frac{2D}{M}$$

a 2. ág 2 különböző modussal

felelnek meg:

: az atomok egysége mozdognak \rightarrow Nagy frekvenciák
akustikus ág (hanggal gejzethető) ($k=0-k_a$, $w=0$)

: az atomok finnyel gejzethetők \rightarrow optikus ág
(fény sebessége szilárd anyagon $\approx 10^5$. hang sebessége)



a_1 : 1 atoms hanc metallandaja

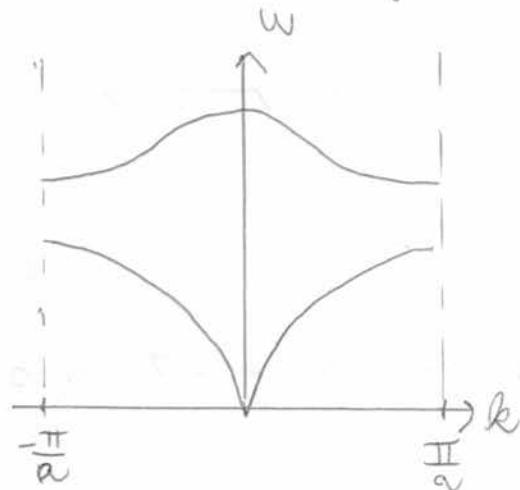
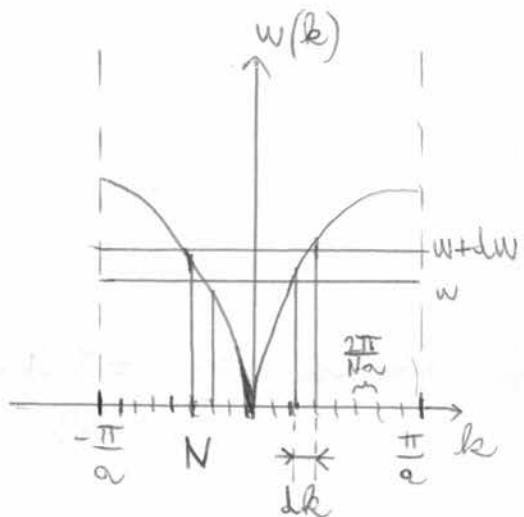
a_2 : 2 atoms hanc \rightarrow II-

az 1 atoms hanc diszp. rel. jobb viszahajtja a
közelítőleg a 2 atomsat körülük

5. öra

ToronokToron spektrum, frekvenci spektrum, modulusstillség

1)



$D(w)$ definíció: modulusstillség

$\int_{w_1}^{w_2} D(w) dw = w_2 - w_1$ köre egy modulus
száma

1 atoms láncra:

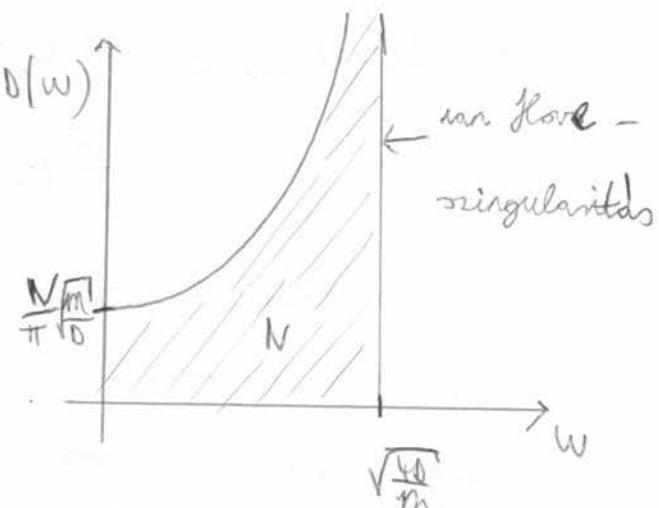
$$D(w) dw = \frac{2}{\frac{2\pi}{Na}} dk = \frac{N\alpha}{\pi} \frac{dw}{\sqrt{\frac{4D}{m} \cos\left(\frac{ka}{2}\right)} \cdot \frac{a}{2}}$$

$$w = \sqrt{\frac{4D}{m}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right)$$

$$dw = \sqrt{\frac{4D}{m}} \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \cdot \frac{a}{2} dk$$

$$D(w) = \frac{2N}{\pi} \sqrt{\frac{m}{4D}} \frac{1}{\sqrt{1 - \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}}$$

$$D(w) = \frac{N}{\pi} \cdot \sqrt{\frac{m}{D}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{mw^2}{4D}}}$$



van Hove-sing. nincs minden dim-lan:

2D-s rendszer: szakadásai a $D(w)$ -nak

3D-s - II- : a derékkal szinguláris



\leftarrow 3D-lan $D(w)$ már nem singuláris

3N kristály:

cellák száma

Brillouin - zóna 3D \rightarrow $3N_c^3$ részeti működés $3 \times 2^3 = 3$ alkalmazkodás + $3(-1)$ gyökök

2) Fotonok (kváziárcsökkentések)

egy módsz. frekvenciája $w_n(\underline{k})$
színindex

$$E_n(\underline{k}) = \hbar w_n(\underline{k}) \left(n_n(\underline{k}) + \frac{1}{2} \right)$$

fotonok száma

- egy energiaszinten bármennyi foton lehet \rightarrow Bose-Einstein statisztika
- energiája $= \hbar w(\underline{k}) = E$
- kváziimpulzus $= \hbar \underline{k} = \underline{p}$
- kerelhető "rezonansokat":

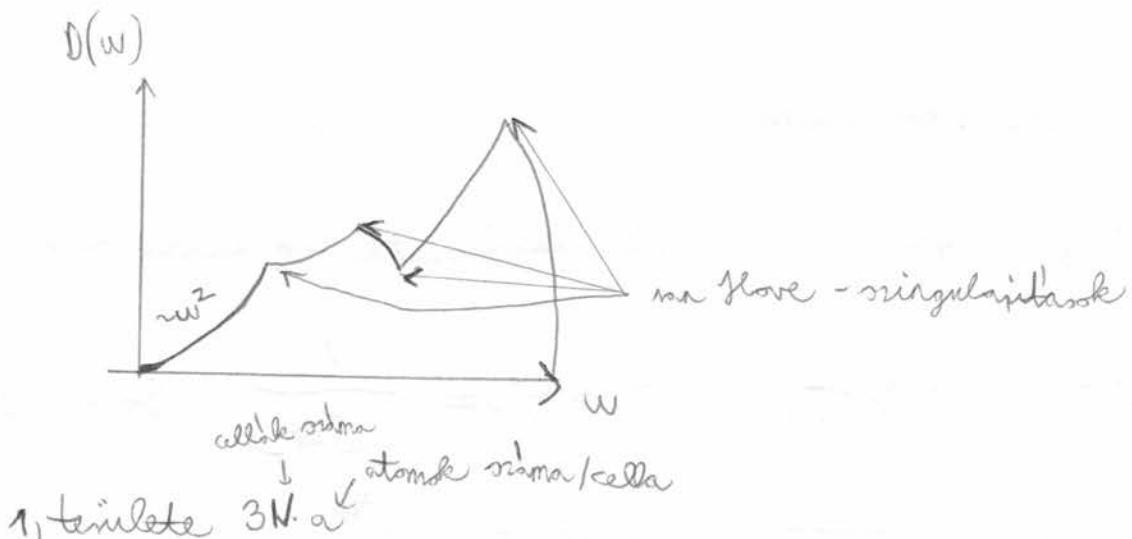
• ha ütközik: $\sum_n E_n = 0$ energia megtartása

$$\sum_n p_n = \hbar \underline{K}_n$$

reciprok vektor
(ha a két kváziimp.)

- fotonok kikészíthetetlenek
(ez ebből a modellből bizonyos elhangolások miatt nem jön ki)
- összeg a Brillouin - zónán kívül erre, egy reciprok - művelettel el kell tolni)

- Tonospektrum 3D-lan



2) van Hove singularitások : ahol az $w_n(\underline{k})$ disperziós relációk maximuma, minimuma vagy inflexioja van. $\sqrt{w-w_0}$ jellegű singularitások.

3) Ha $w=w$ $w=c|\underline{k}|$ (lineáris közelítés)

3D-lan a Brillouin-zóna területe Néhány van osztva :

$$D_{\text{tag}}(w) dw = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k = \underbrace{\frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk}_{\text{infinit. intag. görbék}} = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{w^2}{c^2} \frac{dw}{c} =$$

$w < w(\underline{k}) < w+dw$

$$= \frac{V}{2\pi^2} \frac{w^2}{c^3} dw$$

$$D(w) = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3} \right) w^2 = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{3}{c^3} w^2$$

↑ ↑ ↑
longitudinalis transversalis kettőszöb. hangszab.
hangszab. hangszab.

Fotonok Rosta termikus tulajdonságok

1) fotonok energia, hőkapacitás:

$$E = \sum_i \hbar \omega_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \quad n_i : i. \text{ energiaszintre eső fononok száma}$$

$$\langle E \rangle = \sum_i \hbar \omega_i \left(\langle n_i \rangle + \frac{1}{2} \right) \quad \leftarrow \langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_i}{kT}} - 1} \quad \text{Bose-Einstein- eloszlásból}$$

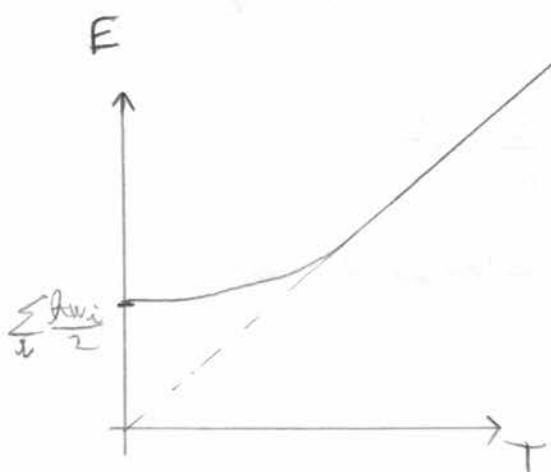
$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \sum_i \hbar \omega_i \left(\frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_i}{kT}} - 1} + \frac{1}{2} \right) = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} \cdot \frac{e^{\frac{\hbar \omega_i}{kT}} + 1}{e^{\frac{\hbar \omega_i}{kT}} - 1} = \\ &= \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} \cdot \frac{e^{\frac{\hbar \omega_i}{2kT}} + e^{-\frac{\hbar \omega_i}{2kT}}}{e^{\frac{\hbar \omega_i}{2kT}} - e^{-\frac{\hbar \omega_i}{2kT}}} = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} \cdot \coth\left(\frac{\hbar \omega_i}{2kT}\right) \end{aligned}$$

Hogy T-re:

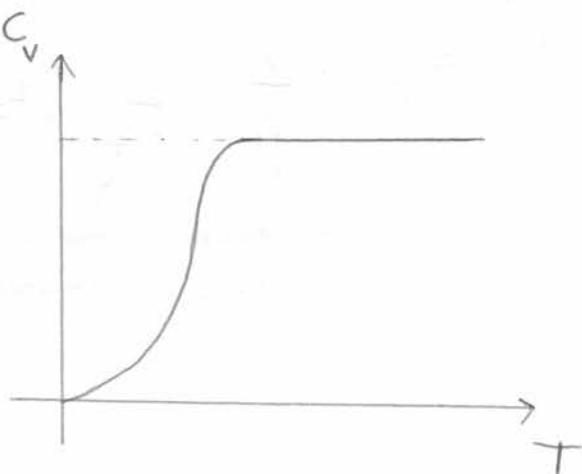
$$\lim_{x \rightarrow 0} \coth x = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} = \frac{2}{1+x - (1-x)} = \frac{1}{x}$$

$$\Rightarrow \langle E \rangle = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} \cdot \frac{2kT}{\hbar \omega_i} = \sum_i kT = NkT \quad (\text{ekviparticiós tételekből})$$

↑
működő száma (azaz jön ki)



energia - hőmérőként



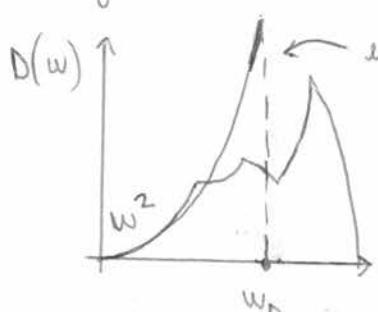
folyadék (működés hőkapacitás) - hőm.

$$\langle E \rangle = \sum_i \frac{h\omega_i}{2} + \sum_i h\omega_i \langle n_i \rangle = E_0 + \int h\omega \langle n_i \rangle D(\omega) d\omega$$

$$\frac{1}{(e^{\frac{h\omega}{kT}} + 1)}$$

[öbölj]

- Debye-közeliítés:



ezzel a fr.-el kölcsönök az ellaptsámlás

↳ kis és nagy T-re jó közelítés (nagy T-re $\rightarrow 0$ minden)

közepes T-kre már nem.

↳ területe megegyezik az igazi ellaptsámlás

Debye-frekvencia alatti területtel

$$D_D(w) = \begin{cases} \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{3}{c^3} w^2, & \text{ha } 0 < w < w_D \\ 0, & \text{ha } w > w_D \end{cases}$$

$$\int_0^{w_D} D_D(w) dw = 3N_\alpha \quad \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{3}{c^3} \underbrace{\int_0^{w_D} w^2 dw}_{\frac{w_D^3}{3}} = 3N_\alpha \quad (\text{eredeti ellaptsámlás})$$

$$w_D = \sqrt[3]{c\pi^2 \cdot \frac{N_\alpha}{V}}$$

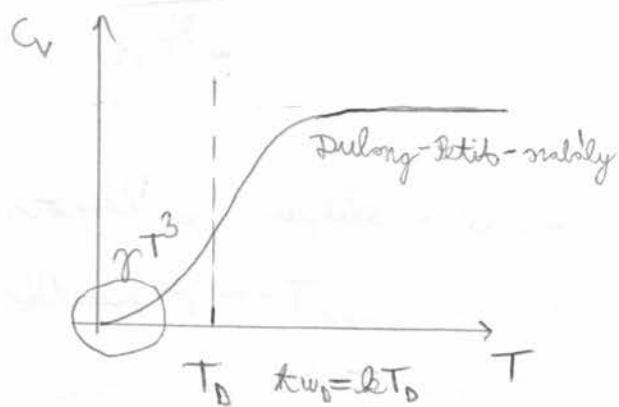
$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_0^{w_D} dw \ h\omega \cdot \frac{1}{e^{\frac{h\omega}{kT}} - 1} \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{3}{c^3} w^2 = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{3}{c^3} (kT)^4 \int_0^{w_D} \frac{1}{e^{\frac{h\omega}{kT}} - 1} \frac{w^2}{(kT)^3} dw \\ &= \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{3}{c^3} \cdot \frac{(kT)^4}{k^3} \int_0^{\frac{h w_D}{kT}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \end{aligned}$$

Ha csak T-n:

$$\langle E \rangle = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{3}{c^3} \cdot \frac{1}{k^3} (kT)^4 \cdot \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}$$

$$\langle E \rangle = \frac{V}{c^3} \cdot \frac{\pi^2}{10} h \cdot \left(\frac{e}{\hbar}\right)^4 \cdot T^4 \quad \langle C_V \rangle = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{V}{c^3} \cdot \frac{2\pi^2}{5} h \cdot \left(\frac{e}{\hbar}\right)^4 \cdot T^3$$

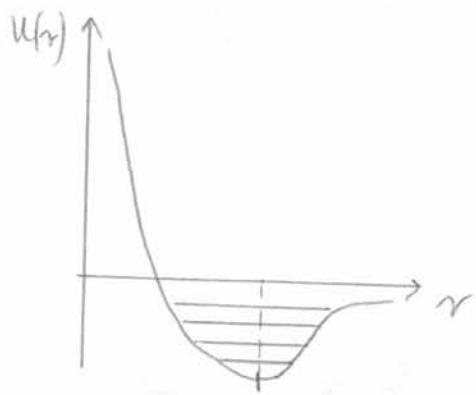


anyag	Na	K	Cu	Rb	Al	Cr	Ag	Au	Fe
T_0 (K)	158	91	343	105	428	630	225	165	430

- Térrel: $T \ll T_0 - \infty: C_V = \underbrace{\alpha}_{\text{elektron}} \underbrace{T + \beta T^3}_{\text{foton}} \underbrace{T_0}_{\text{jármélek}}$
 $(T < 10 \text{ K})$

- magasabb T -re már csak a foton jármélek hatásik
- még magasabb T -re a Debye-közéletes már nem lesz jó, a fajló tart a Dulong-Petit-mályhoz (konstans)

2) Hőátgörülés:



lineáris erőtérny

→ foronok minél, de minden hőátgörülés
(kis részletek)

erők gyors felponthatók ← esik (foronak kölcsönhatása is kell)

- termikus anyag

↳ lassú folyamat

zéró depresszió (pl. "hőnélküli") : először beáll egy hőmérséklettelőkönél (pl. -2°C) , majd lassan viszavall 0° -ra \rightarrow ennek az okra , hogy az integrálás van egy lassú meghatározása is ,

3) Hővesztés:

- vékony: a hőt nem veszi , de a hőmérsékleti színváltás igen

$$T_2 \left| \begin{array}{c} \uparrow \\ \rightsquigarrow \end{array} \right| A$$

$$\dot{q} = \sigma (T_2^4 - T_1^4) \cdot A \quad \dot{q} = X \cdot A \cdot \frac{T_2 - T_1}{L}$$

$$\dot{q} = 3\sigma T^3 \Delta T \cdot A \quad \dot{q} = K \frac{A}{L} \cdot \Delta T$$

- fononok (villás)

(gyakrabban a legjobb hővesztés : akkorosak a fémeteknek , melyik is hideg tapintása van , mert elveszti a test hőmérsékletét)

vonalak , ezért a hővesztés nem ∞

fonon-fonon kölcsönhatás:

$$w_1, k_1 \quad w_2, k_2 \quad w_3, k_3$$
$$\hbar w_1 = \hbar w_2 + \hbar w_3 \quad \text{reciprocal vector}$$
$$\hbar k_1 = \hbar k_2 + \hbar k_3 + \hbar K_a$$

• $K_a = 0$ normál folyamat

• $K_a \neq 0$ umklapp folyamat \rightarrow járulékok
az umklapp folyamatok
adja

Disperciois relacio kimerese

1) $\hbar \omega_0 = kT_0 \approx 4T_{\text{noda}} = 0,025 \text{ eV}$

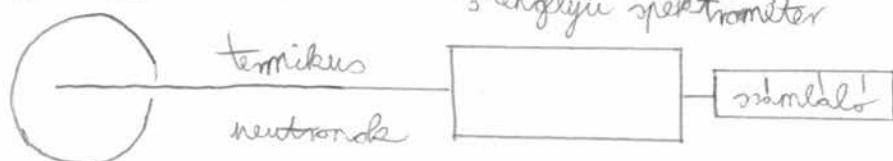
röntgen foton, 10-40 keV

fény 1,7-3,4 eV Raman-szabás

elektronok 200-300 keV

neutron 0,1-2 eV (megfelel)

2) neutronosztó:



neutronforrás
(atomreaktor)

a) fononok (szilárd
anyag)

3.tengely spektrométer

- 1.tengely: monokromátor (Bragg-reflex)

$$E_{\text{be}} = \frac{\hbar k_{\text{be}}^2}{2m_N} \quad N \leftarrow \text{neutron tömege}$$

(előtérben
ismeretlen
lehet merni)

- 2.tengely: elhajlás (minta stan)

- 3. tengely: analizátor

$$E_{\text{ki}} = \frac{\hbar k_{\text{ki}}^2}{2m_N} \quad (\text{akkor váltostatikus})$$

ha energiát akarunk

$$\Rightarrow \hbar \omega_{\text{ph}} = E_{\text{be}} - E_{\text{ki}} \quad (\text{váltostatikus})$$

fonon

(akkor van fonongyorsítás, ha

váltórik a bemenő energiája a neutronnak)

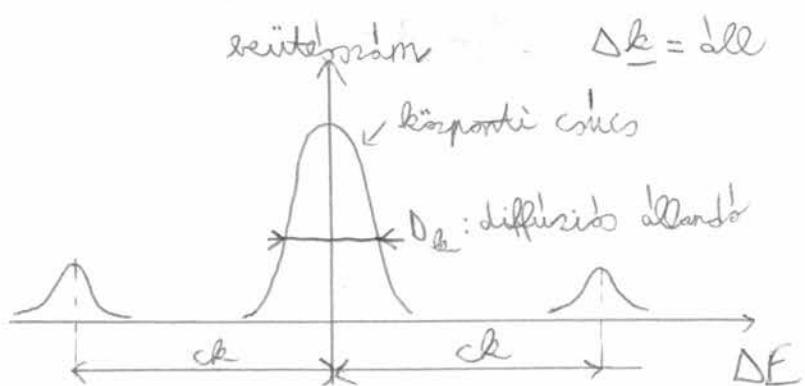
$$\hbar \omega_{\text{ph}} = \hbar k_{\text{be}} - \hbar k_{\text{ki}} + \hbar K_h$$

= a bemenő és kimenő neutronok tulajdonságaiiból a fononok

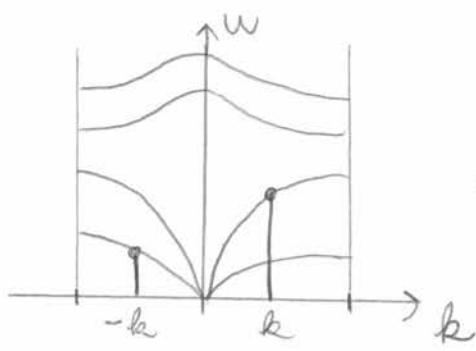
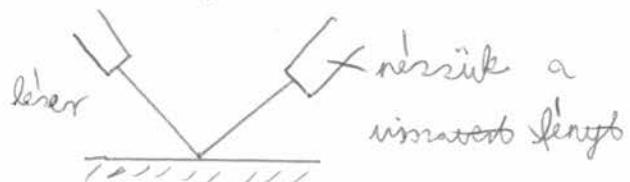
visszalhatóak $\rightarrow w(k)$ kimerítő!
 (disp. el.)

2) folyadéknál:

nincsenek periodikus rögzítések



3) Raman-spektroszkópia:



- csak az optikai ágazat tudja ki gejzíteni
 - gyakorlatai a kötőfonos reakciók ↑
 (több ágazat is gejzíti)
 adott k -val)
- a berendezés
 kimenső fény hullám
 szíma kicsi
 $\Rightarrow \Delta k$ is kicsi

6. óra

Elektronoszerkezet

nélkülttestek } magik) } ion
 molekulák }
 atomok } e⁻-ök: · törsi e⁻-ök
 }
 • vegyületek e⁻-ök - "elektrons"

I. Elektronok és ionok körülönhatása: adiabatikus szétválasztás

(az másik alkalmazásai:

- nélkülttestekkel: kristály leírása
- kvantumkémiaiaknál: molekulák - " "

1) felületek:

$$\cdot e^- : \underline{z}_i \quad i=1, \dots N_e, \quad \underline{p}_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \underline{z}_i}, \quad m_e$$

$$\cdot \text{ionok: } \underline{R}_I \quad I=1, \dots N_{\text{ion}}, \quad \underline{P}_I = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \underline{R}_I}, \quad M_I$$

2) Hamilton-fn.:

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{I=1}^{N_{\text{ion}}} -\frac{\hbar^2}{2M_I} \frac{\partial^2}{\partial \underline{R}_I^2} + V_{I-I}(\{\underline{R}_I\}) && \text{az összes inkordináttal függ} \\
 &+ \sum_{i=1}^{N_e} -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial \underline{z}_i^2} + V_{i-i}(\{\underline{z}_i\}) && \rightarrow \text{ion-ion kl.-i tag: nem kötő, fogy} \\
 &+ v_{e-I}(\{\underline{R}_I\}, \{\underline{z}_i\}) && \text{Coulomb (a törsi e⁻-ök ellenjellegűek az elektromos teret)} \\
 &+ v_{e-e}(\{\underline{R}_I\}, \{\underline{z}_i\}) && \left(\frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N_e} \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 |\underline{z}_i - \underline{z}_j|} \right) \quad (\text{Coulomb-} \\
 & && \text{terhettség})
 \end{aligned}$$

3) adiabatikus szabályozás elve:

- e⁻-ek füngék

$$m_p \approx 1800 m_e$$

- ionsok komolyak

$$M_{Fe} \approx 56 m_p$$

$$M_{Cu} \approx 63 m_p$$

\Rightarrow feltételezünk, hogy az e⁻ rendszer pill. állapota az aktuális ionelrendezéshez tartozó energiasajtaballapot

$$H = \sum_{i=1}^{N_e} -\frac{e^2}{2m_e} \frac{j_i^2}{\sum_j j_{ri}^2} + v_{e-e} \{x_{ij}\} + v_{e-I} (\{R_{ij}\}, \{x_{ij}\})$$

↑

parameterekkel függ a

Kamilton a pillanatnyi ionelrendezéstől

$$\textcircled{*} \quad \left(\sum_{i=1}^{N_e} -\frac{e^2}{2m_e} \frac{j_i^2}{\sum_j j_{ri}^2} + v_{e-e} \{x_{ij}\} + v_{e-I} (\{R_{ij}\}) \right) \psi_n = E_n (\{R_{ij}\}) \cdot \psi_n (\{x_{ij}\}, \{R_{ij}\})$$

↑

az adott e⁻ konfiguráció energiaja is
parameterekkel függ R_{ij} -től

↓

A teljes m. energia:

$$H = \sum_I \frac{p_I^2}{2M_I} + V_{I-I} (\{R_{ij}\}) + E_n^{\text{el}} (\{R_{ij}\})$$

→ teljes m.

Kamiltonia

igy min. csök

a magok (ions)

drendezésével

függ

felhasználás

klasszikusan: ionsok nyugalmi pozíciósak meghat.

klassz./kvantumos: ionsok mozgása (források)

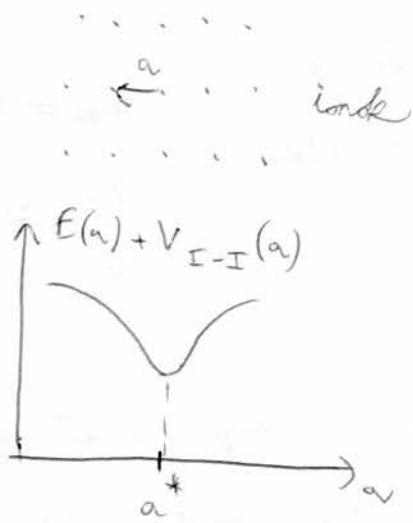
pl. ismetségesitályosít.

ismetséges kémiai összetételek

\Rightarrow nincs alkohol: $a = ?$

$$E_n(\{R_I\}) = E_n(a)$$

$$V_{I-I}(\{R_I\}) = V_{I-I}(a)$$



az a rekoncilliant, ami az a potenciális minimalizálja (a^*)

4) Allítás: (adiabatikus szövets. művek megfogalmazása)

$$\text{adiabatikus szövets. elv} \cong \text{fth. } \Psi(\{R_I\}, \{z_i\}) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{teljes ion- } e \text{-rr.}}}{\Phi(\{R_I\})} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{energiarajtellel}}}{{\psi}_n(\{z_i\}, \{R_I\})}$$

"Biz": $E \Phi(\{R_I\}) \stackrel{\substack{\uparrow \\ \text{normalis műfkt.}}}{=} E \Phi(\{R_I\}) \cdot \int_{i=1}^{N_e} \prod_{j=1}^{3N_e} dz_{ij} \cdot {\psi}_n(\{z_i\}, \{R_I\}) \cdot \psi_n(\{z_i\}, \{R_I\}) =$

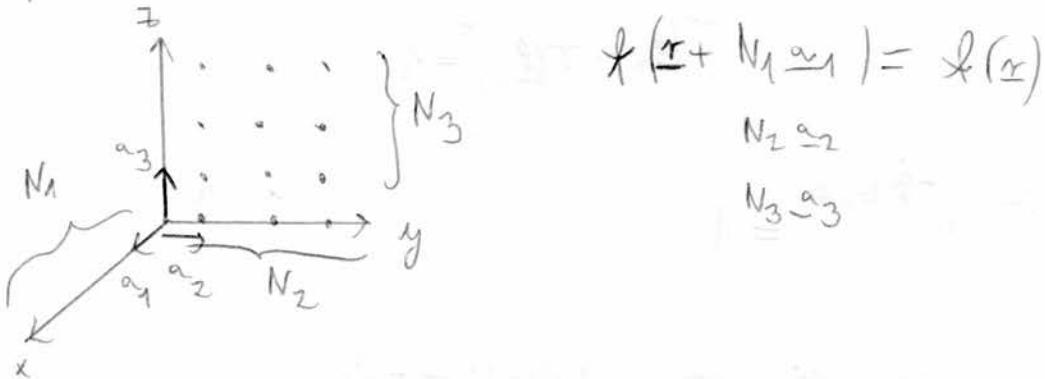
$$= \int_{i=1}^{N_e} \prod_{j=1}^{3N_e} dz_{ij} \cdot \underbrace{\psi_n(\{z_i\}, \{R_I\})}_{\substack{\uparrow \\ \text{teljes } e\text{-ion Hamiltoni}}} E \Phi(\{R_I\}) \cdot \underbrace{\psi_n(\{z_i\}, \{R_I\})}_{\substack{\uparrow \\ H \Phi(\{R_I\}) \cdot \psi_n(\{z_i\}, \{R_I\})}} \approx$$

\hookrightarrow Selyom-féle
kaym II
23.1 fejezet

$$\cong \left[\frac{1}{2} - \frac{\hbar^2}{2M_I} \frac{\partial^2}{\partial R_I^2} + V_{I-I}(\{R_I\}) + E_n^{\text{el}}(\{R_I\}) \right] \cdot \Phi(\{R_I\})$$

II) Bloch-tétel (kristály)

- 1) feltételesek: $\xrightarrow{\text{rögzített ionok}}$ periodikus határlelt.
- periodikus ionacs \rightarrow



$$f(\underline{x} + N_1 \underline{a}_1) = f(\underline{x})$$

$$N_2 \underline{a}_2$$

$$N_3 \underline{a}_3$$

Hr.:

- a e-ek egymással nem hatnálcs kölcsön

$$H = -\frac{\hbar^2}{2me} \Delta + V_{\text{ion}}(\underline{r})$$

- $V_{\text{ion}}(\underline{r})$ növekonstans: $\nabla r, \nabla R_n$ növekonstans:

$$V_{\text{ion}}(\underline{r} + \underline{R}_n) = V(\underline{r})$$

2) előzetes tétel:

- definíció: " R_n valószínűleg való előzetes": $t(R_n): H \rightarrow H$,

$$\underline{r} \mapsto \underline{r} + \underline{R}_n$$

- def.: " $t(R_n)$ reprezentációja a Hilbert-térben": $T(R_n): \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$,

$$(\Psi : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \underline{r} \mapsto \Psi(\underline{r})) \mapsto (T(R_n)\Psi : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \underline{r} \mapsto \Psi(\underline{r} + \underline{R}_n))$$

- $T(R_n)$: lineáris operátor (felátható)

- akk.: $T(R_n) = e^{i \underline{R}_n \cdot \nabla}$

Biz.:

$$(T(R_n)\Psi)(\underline{x}) = \Psi(\underline{x} + \underline{R}_n) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\underline{R}_n^k}{k!} \cdot (\underline{\partial}_{\underline{x}}^k \Psi)(\underline{x}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\underline{R}_n^k}{k!} \cdot \left(\frac{\underline{x}}{\underline{x}} \right)^k \cdot \left(\underline{\partial}_{\underline{x}}^k \Psi \right) \left(\frac{\underline{x}}{\underline{x}} \right)$$

$$(e^{i \underline{R}_n \cdot \nabla})(\underline{x})$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\underline{R}_n^k}{k!} \cdot \left(\frac{\underline{x}}{\underline{x}} \right)^k \cdot \left(\underline{\partial}_{\underline{x}}^k \Psi \right) \left(\frac{\underline{x}}{\underline{x}} \right)$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar} \underline{R}_n \cdot \underline{p}}$$

Könthermény: $T(\underline{R}_n)$ univerzális $T(\underline{R}_n)^{-1} = T(\underline{R}_N)^+$

$$T(\underline{R}_n) \cdot T(\underline{R}_n)^+ = 1$$

biz.: $e^{\frac{i}{\hbar} \underline{R}_n \cdot \underline{p}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \underline{R}_n \cdot \underline{p}} = 1$

3) El.: nesperiodikus Hamilton ($H(\underline{r})$) tetszőleges művektoralakú előfordulási invariants.

$$\Rightarrow \forall \underline{R}_n - \text{re}: [T(\underline{R}_n), H] = 0$$

Biz.: $(T(\underline{R}_n) \cdot H(\underline{r}) - H(\underline{r}) T(\underline{R}_n)) \downarrow \psi(\underline{r}) = \underbrace{H(\underline{r} + \underline{R}_n)}_{H(\underline{r})} \psi(\underline{r} + \underline{R}_n) - H(\underline{r}) \psi(\underline{r} + \underline{R}_n) = 0$

Könthermény: H -nak és $T(\underline{R}_n)$ -nek von körös ölt. rendszere

II

4) Bloch-tétel: Ha $\psi(\underline{r})$ ölt. -e $\forall T(\underline{R}_n)$ -nél $\Rightarrow \exists \underline{k} \in$ Brillouin-zóna:

$\forall \underline{r}, \forall \underline{R}_n$ művektorra:

$$\psi(\underline{r} + \underline{R}_n) = e^{i \underline{k} \cdot \underline{R}_n} \psi(\underline{r})$$

biz.: legyen ψ ölt. -e $T(\underline{R}_n)$ -nél

$$(T(\underline{a}_1) \psi)(\underline{r}) = \psi(\underline{r} + \underline{a}_1) = c_1 \psi(\underline{r})$$

periodikus h. minta

$$\psi(\underline{r}) = (T(N_1 \underline{a}_1) \psi)(\underline{r}) = (T(\underline{a}_1))^N \psi(\underline{r}) = \underline{c}_1^N \cdot \psi(\underline{r})$$

$$c_1^{N_1=1} \rightarrow |c_1| = 1$$

$$\downarrow \quad \uparrow$$

$$x_1 N_1 = 2\pi \leftarrow c_1 = e^{ix_1}$$

$$x_1 = \frac{2\pi}{N_1}$$

$[-\pi, \pi]$ intervallumon definiáljuk (egyelőre nem egészben)

$$\Downarrow n_1 \in \left[-\frac{N_1}{2}, \frac{N_1}{2} \right]$$

$$\psi(x + \underline{a}_1) = e^{i2\pi \frac{n_1}{N_1}} \cdot \psi(x)$$

- Tölgyik el ψ -t bármelyeket:

$$\psi(x + \underbrace{n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3}_{\text{bármelyeket}}) = e^{i2\pi \left(n_1 \frac{n_1}{N_1} + n_2 \frac{n_2}{N_2} + n_3 \frac{n_3}{N_3} \right)} \cdot \psi(x)$$

bármelyeket

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{k} = \frac{n_1}{N_1} \underline{b}_1 + \frac{n_2}{N_2} \underline{b}_2 + \frac{n_3}{N_3} \underline{b}_3 \in \text{Brillouin-zóna} \\ \text{reciprokáros elemi vektor} \quad (\text{mely } n_1 \in \left[-\frac{N_1}{2}, \frac{N_1}{2} \right], \\ n_2 \in \dots) \\ \underline{a}_i \cdot \underline{b}_j = \delta_{ij} \pi \rightarrow \text{felhasználva} \end{array} \right.$$

$$\psi(x + \underline{b}_n) = e^{i\underline{k} \cdot \underline{b}_n} \cdot \psi(x)$$

7. önm

II) Bloch - Hétel (ism.):

1) $H(\underline{r} + \underline{R}_n) = H(\underline{r}) \quad H\psi = E\psi$

$$H = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\underline{r}) \quad \leftarrow \text{micropotential}$$

$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m} + \sum_i V(\underline{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\underline{r}_i - \underline{r}_j|}$$

Ha micropotential a Hamilton, melyen szimmetria lesz a megoldásnak?

$$T(\underline{R}_n) \cdot \psi(\underline{r}) = \psi(\underline{r} + \underline{R}_n) \quad T^{-1}(\underline{R}_n) \psi(\underline{r}) = \psi(\underline{r} - \underline{R}_n)$$

$$H(\underline{r}) \psi(\underline{r}) = E \psi(\underline{r})$$

) ottols

$$H(\underline{r} + \underline{R}_n) \cdot \psi(\underline{r} + \underline{R}_n) = E \psi(\underline{r} + \underline{R}_n)$$

$$H(\underline{r}) \cdot \psi(\underline{r} + \underline{R}_n) = E \psi(\underline{r} + \underline{R}_n)$$

a) azaz: nem degeneráltságot:

$$T \cdot H \cdot \psi = T \cdot E \psi$$

$$(THT^{-1})(T\psi) = ET\psi$$

$$H(T\psi) = E(T\psi)$$

$$\Rightarrow T\psi \text{ is rögzítve. } \Rightarrow T(\underline{R}_n) \cdot \psi(\underline{r}) = \psi(\underline{r} + \underline{R}_n) = c_n \cdot \psi(\underline{r})$$

ez csak nem degenerált \rightarrow (konstans szorzó, exkluzív rögzítve)
nullamfor - elkez igaz

$$\psi(x+a_1) = c_1 \psi(x)$$

Periodikus határfeltétel:

$$\psi(x+a_2) = c_2 \psi(x)$$

$$+ \quad N_1 \xrightarrow{=} N_2 \xrightarrow{=} N_3 - \text{al}$$

$$\psi(x+a_3) = c_3 \psi(x)$$

ettől a hullámf. nem
változik

$$\Rightarrow \psi(x+N_1 a_1) = \psi(x) \rightarrow c_1^{N_1} = 1 \quad c_1 = e^{2\pi i \frac{p_1}{N_1}} \quad \text{and } p_1, p_2, p_3 \in \mathbb{Z}$$

$$c_2^{N_2} = 1 \quad c_2 = e^{2\pi i \frac{p_2}{N_2}}$$

$$c_3^{N_3} = 1 \quad c_3 = e^{2\pi i \frac{p_3}{N_3}}$$

$$\psi(x+R_n) = \psi(x + n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3) = e^{2\pi i \left(\frac{p_1 n_1}{N_1} + \frac{p_2 n_2}{N_2} + \frac{p_3 n_3}{N_3} \right)} \cdot \psi(x)$$

$$R_n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$$

$$k = \frac{p_1}{N_1} b_1 + \frac{p_2}{N_2} b_2 + \frac{p_3}{N_3} b_3$$

n_1, n_2, n_3 itt csak olyan

egyen szám lehet, hogy k a teljesüljön

$k \in B^2$ (Brillouin-zóna)

$$\boxed{\psi(x+R_n) = e^{ik \cdot R_n} \cdot \psi(x)}$$

Bloch-tétel

(k jellemzi a hullámf. -r \rightarrow jó kvantumszám lesz)

b) Degeneráció eset

$$H\psi_1 = E\psi_1$$

$$H\psi_2 = E\psi_2$$

$$T\psi_1 = \lambda_{11}\psi_1 + \lambda_{12}\psi_2 \quad \left. \begin{array}{l} \text{az ilyen} \\ \text{hullámf. -ek} \end{array} \right.$$

$$T\psi_2 = \lambda_{21}\psi_1 + \lambda_{22}\psi_2 \quad \left. \begin{array}{l} \text{az ilyenek} \\ \text{illetőleg kisebbek} \end{array} \right.$$

iken varázsa műve

Hengely transformáció

$$\begin{pmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} \end{pmatrix} \text{ mtrix!}$$

$\exists \psi_a, \psi_b :$

$$\Rightarrow T\psi_a = \lambda_1 \psi_a \quad \text{isod:}$$

$$T\psi_b = \lambda_2 \psi_b \rightarrow (\text{nem degenerált eset})$$

2) Bloch-függvények (kv. osztály) tulajdonságai (tételek)

Tétel:
 a) "különös" \underline{k} -hoz tartozó Bloch-függvények (Bloch-fv. = teljesítik a Bloch-tételt) mindenekkel (ortogonalitás):

Biz.:

$$\int \psi_{\underline{k}_1}^*(\underline{r}) \cdot \psi_{\underline{k}_2}(\underline{r}) d^3r = \int \psi_{\underline{k}_1}^*(\underline{r} + \underline{R}_n) \cdot \psi_{\underline{k}_2}(\underline{r} + \underline{R}_n) d^3r =$$

$$= e^{-i\underline{k}_1 \cdot \underline{R}_n} \cdot e^{i\underline{k}_2 \cdot \underline{R}_n} \cdot \int \psi_{\underline{k}_1}^*(\underline{r}) \cdot \psi_{\underline{k}_2}(\underline{r}) d^3r$$

$$(1 - e^{i(\underline{k}_2 - \underline{k}_1) \cdot \underline{R}_n}) \cdot \int \psi_{\underline{k}_1}^*(\underline{r}) \cdot \psi_{\underline{k}_2}(\underline{r}) d^3r = 0$$

$$1 = e^{i(\underline{k}_2 - \underline{k}_1) \cdot \underline{R}_n}$$

$$\Rightarrow \int \psi_{\underline{k}_1}^*(\underline{r}) \cdot \psi_{\underline{k}_2}(\underline{r}) d^3r = 0$$

$$\underline{k}_2 - \underline{k}_1 = 0$$

mivel $\underline{k}_1, \underline{k}_2 \in B_2$,

ez csak úgy lehet, ha

$$\underline{k}_2 = \underline{k}_1 \rightarrow \text{lehetlők, hogy } \underline{k}_1 \neq \underline{k}_2$$

b) Tétel: Bloch-függvények rendszere teljes

Biz.:

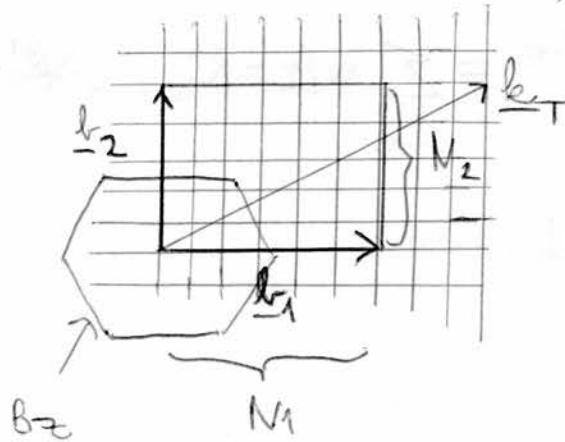
ha $f(x)$ Bloch-fv. \rightarrow periodikus \Rightarrow Fourier-szab. leítható

$$f(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^3} a_{k \cdot \frac{\underline{k}}{T}} e^{i k \cdot \frac{\underline{k}}{T} x}$$

ahol $\frac{\underline{k}}{T} = \frac{p_1}{N_1} \underline{l}_1 + \frac{p_2}{N_2} \underline{l}_2 + \frac{p_3}{N_3} \underline{l}_3$ $\frac{\underline{k} \cdot R_n}{T} = 2\pi \left(\frac{p_1 n_1}{N_1} + \frac{p_2 n_2}{N_2} + \frac{p_3 n_3}{N_3} \right)$

\uparrow
teljes

($\underline{l}_1, \underline{l}_2$ nem füllhetőenél merőlegesek)



de:

$$\underline{k} = K_n + \underline{k}'$$

$\curvearrowright \curvearrowright$

reci-
pik-
műveletek

$$\Rightarrow f(x) = \sum_{K_n, \underline{k}} \left(a_{K_n + \underline{k}} e^{i K_n \cdot x} \right) \cdot e^{i \underline{k} \cdot x} = \sum_{\underline{k}} u_{\underline{k}}(x) \cdot e^{i \underline{k} \cdot x}$$

noperiodikus

$$u(x) = u_n(x) e^{i \underline{k} \cdot x}$$

Kérdés: ez Bloch-fv.?

$$u(x + R_n) = u_n(x + R_n) \cdot e^{i \underline{k}(x + R_n)} = \underbrace{u_n(x) e^{i \underline{k} x}}_{u(x)} \cdot e^{i \underline{k} R_n} = e^{i \underline{k} R_n} \cdot u(x)$$

\Rightarrow tetszőleges felítható Bloch-fv.-ek összegként \rightarrow teljes mű.

3) Bloch-fv.-ek előállítása

a) Bloch-féle előállítás:

$$\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = u(\underline{r}) \cdot e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}$$

nácsperiodikus → ennek más lattuk,
hogy Bloch-fv.

b) Wannier-féle előállítás:

$$\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \sum_{\underline{R}_m} w(\underline{r} - \underline{R}_m) \cdot e^{i\underline{k} \cdot \underline{R}_m}$$

Bis.:

$$-\underline{R}_m^1 = \underline{R}_n - \underline{R}_m$$

$$\begin{aligned} \psi_{\underline{k}}(\underline{r} + \underline{R}_n) &= \sum_{\underline{R}_m} w(\underline{r} + \underline{R}_n - \underline{R}_m) \cdot e^{i\underline{k} \cdot \underline{R}_m} = \sum_{\underline{R}_m^1} w(\underline{r} - \underline{R}_m^1) \cdot e^{i\underline{k}(\underline{R}_m^1 + \underline{R}_n)} \\ &= e^{i\underline{k} \cdot \underline{R}_n} \cdot \underbrace{\sum_{\underline{R}_m^1} w(\underline{r} - \underline{R}_m^1) \cdot e^{i\underline{k} \cdot \underline{R}_m^1}}_{\psi_{\underline{k}}(\underline{r})} \end{aligned}$$

⇒ Bloch-tétel türetele:

⇒ olyan $\underline{k} \in B_Z$, amivel \forall illatos jellemzetű

Számítoggyel meg lehet oldani a Schrö.-egyenletet innenül, de ha mostnék elleni is az összefüggésnek elhangzó következetet kell tennünk

III) Elektron-szabad

- Schrödinger
 - Dirac
- } egyenlet megoldása, elhangsodásokkal (közelítésekkel)

1) Szabad elektron + potenciál \rightarrow kidiszabott elektron
(Sommerfeld-modell)



2) Atomok közelítik egymást

1) a) Szabad el. modell:

$$\psi(x) = e^{i \frac{k_F x}{\hbar}} = e^{i k_n x} \cdot e^{i \frac{ik_F x}{\hbar}}$$

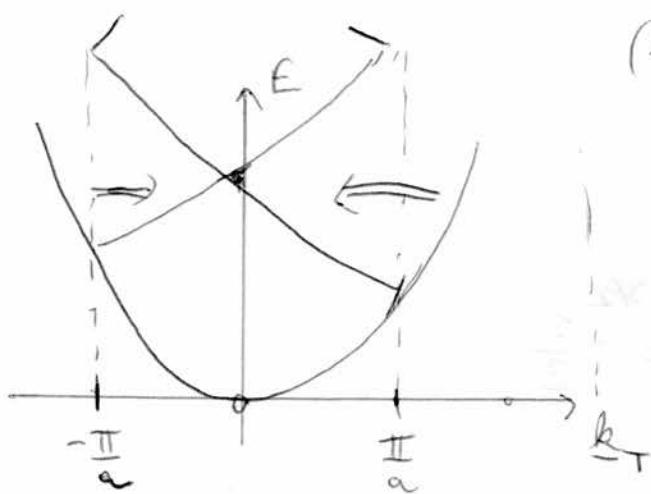
$\epsilon B \approx$

$\underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{n(x)}$ növekedő periodikus

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$m = m^*$ effektív tömeg

(nem passz az e^- tömeg)



beltartogatás: k_F -nak csak

B_F -ben van értelme

$$\text{ellipticus} \quad \text{kristalgelegeteg} \leftarrow \frac{N(E, E+\Delta E)}{V} = g(E, E+\Delta E)$$

$$D(E) \Delta E = 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi k^2 dk =$$

spin miatt $E(k) < E + \Delta E$

$2e^-/\text{ellipt}$

↑

hány e^- van $E, E+\Delta E$ tartományban

$$dk = \frac{1}{k} \sqrt{2mE}$$

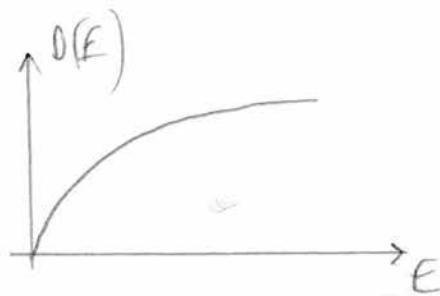
$$dk = \frac{1}{k} \sqrt{2m} \cdot \frac{1}{2\sqrt{E}} dE$$



$$4\pi \cdot k^2 \cdot dk$$

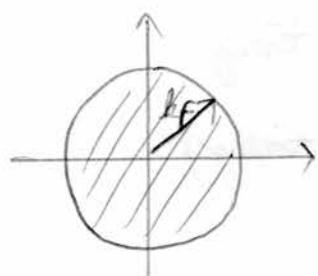
$$= \frac{V}{\pi^2} \cdot \frac{1}{k^2} \cdot 2mE \cdot \frac{1}{k} \sqrt{\frac{m}{2E}} dE$$

$$D(E) = \frac{V \cdot \sqrt{2}}{\pi^2} \cdot \frac{m^{3/2}}{k^3} \sqrt{E} \Rightarrow D \sim \sqrt{E}$$



$$N = \int_0^{E_F} D(E) dE \quad E_F = \frac{k^2 k_F^2}{2m}$$

↑ $k_F \sim \text{folytonos, ha } \omega \rightarrow \infty$
 $\Rightarrow E \sim \text{folytonos}$
 a Fermi-energiáig működő



a rendszer

$$N = \int_0^{E_F} D(E) dE = V \cdot \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \cdot \frac{m^{3/2}}{k^3} E_F^{3/2} \cdot \frac{2}{3}$$

$$O(E_F) = \frac{3}{2} \cdot \frac{N}{E_F}$$

$$N = V \frac{\cancel{\pi^2}}{\cancel{\pi^2}} \cdot \frac{m^{3/2}}{\cancel{k^3}} \cdot \frac{2}{3} \frac{k^3 k_F^3}{\hbar \sqrt{2} m^2} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3$$

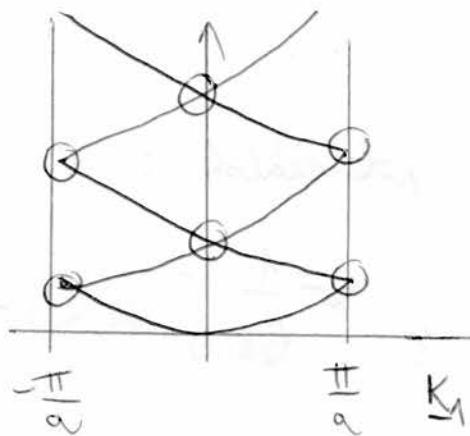
$$k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 \frac{N}{V}}$$

$$E_T = \int_0^{E_F} D(E) \cdot E dE = V \cdot \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \cdot \frac{m^{3/2}}{k^3} \int_0^{E_F} E^{3/2} dE = \\ = V \cdot \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \cdot \frac{m^{3/2}}{k^3} \cdot \frac{2}{5} \cdot E_F^{5/2}$$

$$E_T = N \cdot \frac{3}{5} E_F$$

teljes energia

b) Kvantálás el. modell:



normalizált "layer" (kinetikus integrálás)

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{V}} \cdot e^{ikx}$$

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{V}} \cdot e^{-ikx} \cdot e^{ikx}$$

$$u_{\underline{k}}(x)$$

$$H = -\frac{\hbar^2 \delta}{2m} + U(x)$$

$$U = c_0 \psi_0 + c_1 \psi_1 = \frac{c_0}{\sqrt{V}} \cdot e^{ikx} + \frac{c_1}{\sqrt{V}} \cdot e^{i(k-K_1)x}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(c_0 \cdot k^2 \cdot e^{ikr} + c_1 (\underline{k} - \underline{k}_1)^2 \cdot e^{i(\underline{k} - \underline{k}_1)r} \right) + u(r) \cdot (c_0 e^{ikr} + c_1 e^{i(\underline{k} - \underline{k}_1)r}) = E (c_0 e^{ikr} + c_1 e^{i(\underline{k} - \underline{k}_1)r})$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} (c_0 k^2 + c_1 (\underline{k} - \underline{k}_1) e^{-i\underline{k}_1 r}) + u(r) \cdot (c_0 + c_1 e^{-i\underline{k}_1 r}) = E (c_0 + c_1 e^{-i\underline{k}_1 r})$$

néspériódikus lett az egér egyenlet!

- 1. eset: $\frac{1}{V_{\text{cella}}} \int_{\text{cella}} \dots d^3 r$
egyenlet

$$\frac{1}{V_{\text{cella}}} \int d^3 r = 1 \quad , \quad \frac{1}{V_{\text{cella}}} \int e^{-i\underline{k}_1 r} d^3 r = 0$$

teljes periódusra vett integral

- 2. eset: $\frac{1}{V_{\text{cella}}} \int \dots \cdot e^{+i\underline{k}_1 r} \cdot d^3 r$
egyenlet

potenciálok:

1. esetben:

$$\frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 + V_0 c_0 + V_1 c_1 = E c_0$$

$$V_0 = \frac{1}{V_{\text{cella}}} \int u(r) d^3 r = 0$$

2. esetben:

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\underline{k} - \underline{k}_1)^2 \cdot c_1 + V_1 \cdot c_0 + V_0 c_1 = E c_1$$

$$V_1 = \frac{1}{V_{\text{cella}}} \int u(r) e^{-i\underline{k}_1 r} d^3 r$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m} k^2 & V_1 \\ V_1 & \frac{\hbar^2}{2m} (\underline{k} - \underline{k}_1)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}$$

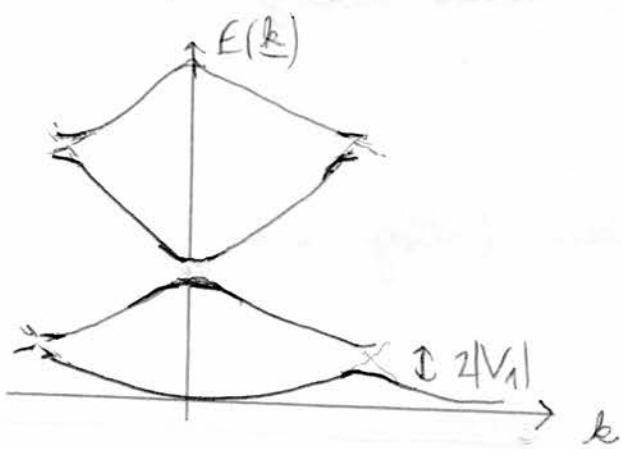
$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E\right) \cdot \left[\frac{\hbar^2}{2m}(k - k_1)^2 - E\right] - |V_1|^2 = 0$$

$$E^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \left[k^2 + (k - k_1)^2 \right] \cdot E + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 k^2 (k - k_1)^2 - |V_1|^2 = 0$$

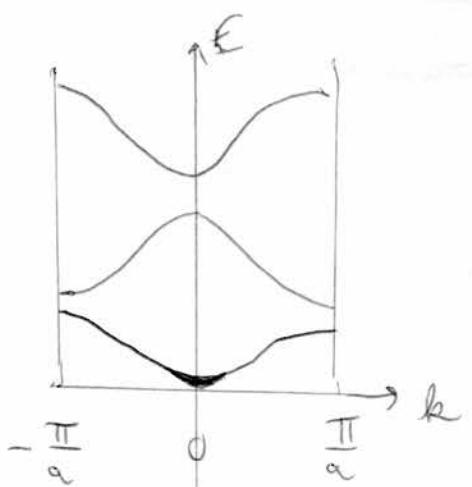
$$E = \frac{\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 + (k - k_1)^2) \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \cdot (k^2 + (k - k_1)^2)^2 - 4 \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 k^2 (k - k_1)^2 + |V_1|^2}}{2}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{k^2 + (k - k_1)^2}{2} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \left(k^2 - \frac{(k - k_1)^2}{2} \right)^2 + |V_1|^2}$$

- ha $V_1 = 0 \rightarrow$ nincsakapja a malom el. diszp. reláció-görbe
- ha $V_1 \neq 0$



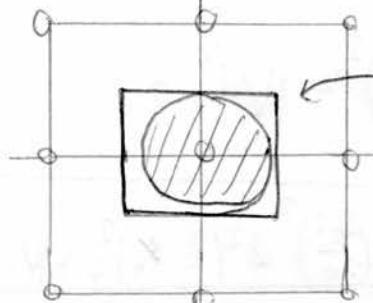
[gap]-ek jelennek meg!



a diszperziós reláció ált.ban
megleesen megy le a B.-zona
határán , kivéve hypercentrális
kötés idejében

pl. 2Dm modell: nábold. el.

reciprokraum -ter $1 \text{ el.}/\text{cella} = \text{atom}$



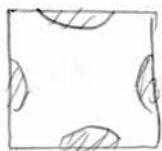
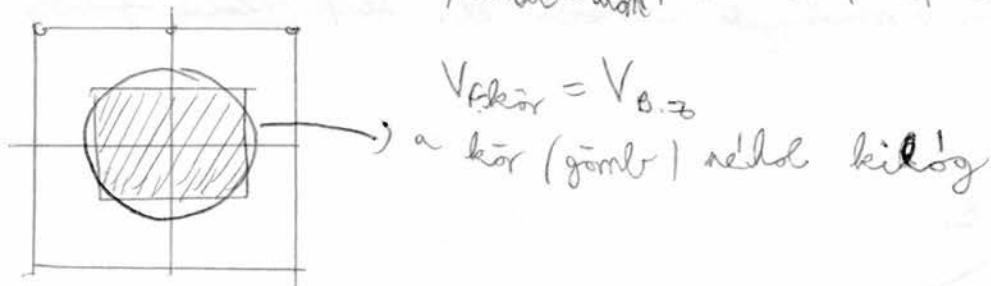
B.z.: arryi állapot van benne, elágy cella

ha 1 atom van 1 cellában

B.z.-ben arryi állapot, ahány atom

Vissz a Fermi-gömbben körözöt arryi állapot van spin miatt, mint a Brillouin-zónában

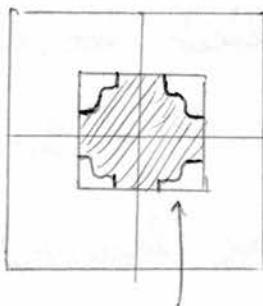
$2 \text{ el.}/\text{cella} = \text{atom}$ (pl. alkalisövétek)



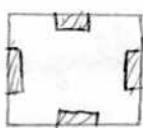
2. Brillouin-zóna (átleg a kör)

kávásbold. el.:

a diszp. elágás + a B.z. határán



1. B.z.

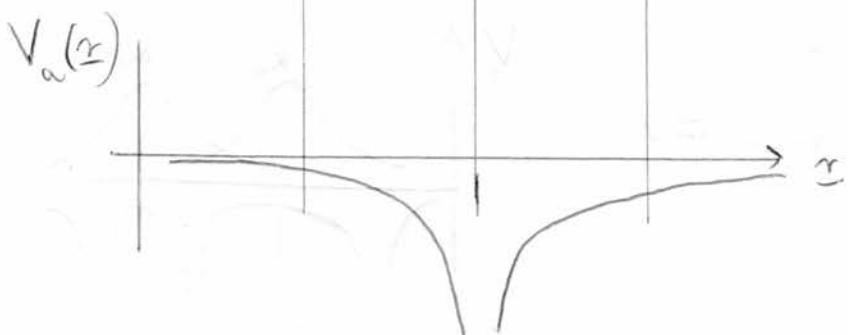
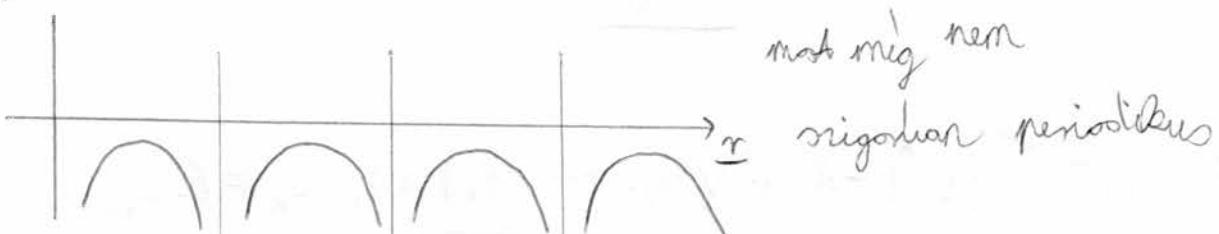


Szoros kötésű közelítés (Tight Binding Approximation, TBA)
(közelítés atomi oldalról)

$$H = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(r) \quad H_a = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V_a(r)$$

$$H_a \psi = E_a \psi \quad \psi: \text{atomi hullámf.}$$

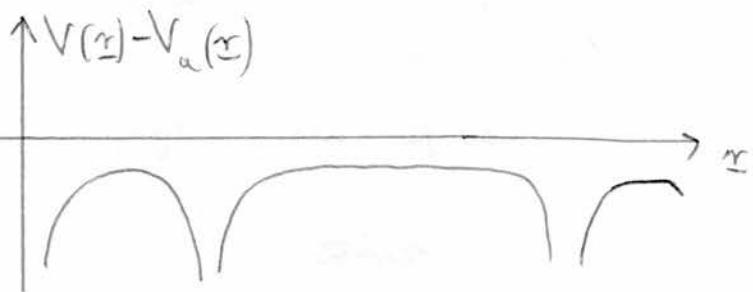
$V(r)$



$$\Psi(r) = \sum_n c_n \psi(r - R_n)$$

$$\sum_n c_n \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(r) \right) \cdot \psi(r - R_n) = E \sum_n c_n \psi(r - R_n)$$

$$\sum_n c_n \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V_a(r - R_n) + (V(r) - V_a(r - R_n)) \right) \cdot \psi(r - R_n) = E \sum_n c_n \psi(r - R_n)$$



Koreláció: az átlagos integrálók 0-k.

$$\int d^3r \cdot \phi^*(\underline{r} - \underline{R}_m) \cdot \dots$$

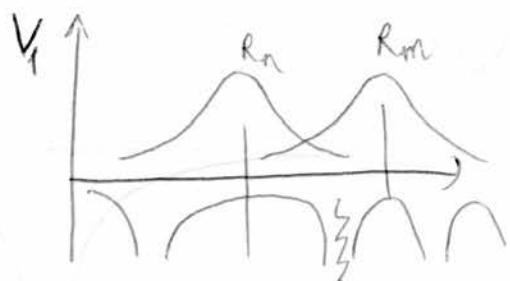


$$E_a \cdot c_m + \sum_n \int \phi^*(\underline{r} - \underline{R}_m) [V(\underline{r}) - V_n(\underline{r} - \underline{R}_n)] \phi(\underline{r} - \underline{R}_n) d^3r = E \cdot c_m$$

8. össz

$$E_a \cdot c_m + \sum_n \underbrace{\int \phi^*(\underline{r} - \underline{R}_m) \cdot V_i(\underline{r}) \cdot \phi(\underline{r} - \underline{R}_n) d^3r}_{c_n} = E \cdot c_m$$

- ha $n=m$: legyen 0
- ha $n \neq m$ elhosszúsági $= V_i$
- máskülönben 0



$$E_a \cdot c_m + \sum_n V_i \cdot c_{m+n} = E \cdot c_m$$

↑
elhosszúság

$$H = \begin{pmatrix} E_a & & & \\ & \ddots & V_i & \\ & & \ddots & \\ & & & E_a \end{pmatrix}$$

elhosszúság

$$H = \begin{pmatrix} E_{a1} & & & \\ & \ddots & V_{1,ij} & \\ & & \ddots & \\ & & & E_{an} \end{pmatrix}$$

kristály
hopping

non-periodikus anyag
on site

Bloch-féle miatt:

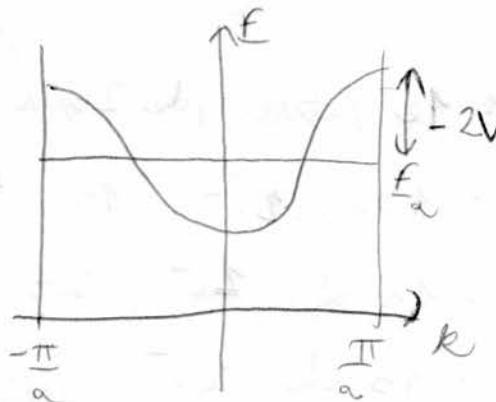
$$c_m = e^{-ikRm}$$

$$\frac{f_a}{\hbar} \cdot e^{i k R m} + \sum V_1 e^{i k (R m + \frac{\hbar}{m})} = f_a e^{i k R m}$$

(1) ← elso mondsága

$$E = E_a + V_1 \sum_{k \in B} e^{i k \frac{\hbar}{m}}$$

$$\text{lancsol: } E = E_a + 2V_1 \cos ka$$



30:

- Egyenlő kölcs: $E(\underline{k}) = E_a + 2V_1 (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$
- Lapcentrális kölcs:

$$E(\underline{k}) = E_a + 2V_1 \left[\cos \left(\frac{k_x + k_y}{2} a \right) + \cos \left(\frac{k_y + k_z}{2} a \right) + \cos \left(\frac{k_x + k_z}{2} a \right) + \right.$$

$$\left. + \cos \left(\frac{k_x - k_y}{2} a \right) + \cos \left(\frac{k_y - k_z}{2} a \right) + \cos \left(\frac{k_z - k_x}{2} a \right) \right]$$

A részben magó elektronok tulajdonságai. ($T=0$)

$$\Gamma_{ij} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_i k_j} \quad (\text{Hamilton imp. mennyi deriváltja} = \text{sebesség})$$

$$(m_{eff})^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$$

effektív tömegtengör

(inflexio pontban $m_{eff} = \infty$)

$$\text{Magasztalás: } \underline{\mathbf{t}} = e\underline{\mathbf{E}} + e(\underline{\mathbf{v}} \times \underline{\mathbf{B}})$$

tight-binding modellben atomi nívók \rightarrow saját

betöltés az határozza meg, hogy céllanként mennyi elektronot

pl. H: $1e^-$ /atom, de 2 spin: \uparrow sár felhasad, de csak 1 feleig
van betölthető ($1e^-$ /atom)

He: 1 atom: $2e^-$, 1s sár

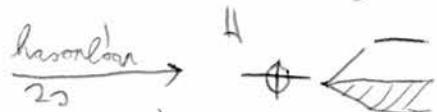
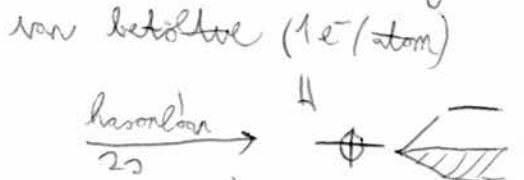
Li: 1s sár $2e^-$, 2s sár $1e^-$

Be: 1s sár $2e^-$
2s sár $1e^-$ } elvileg mindenketel

B: párba számlál atom/cella \rightarrow nem lehet

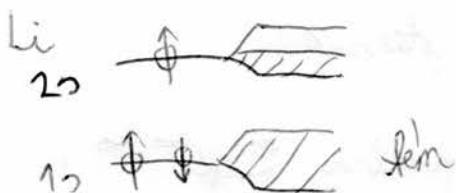
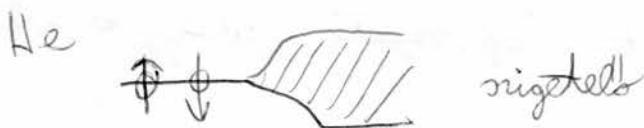
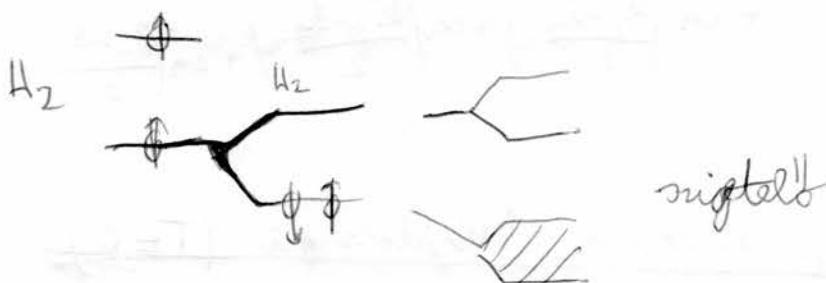
C: nincs " (gyümölcs)

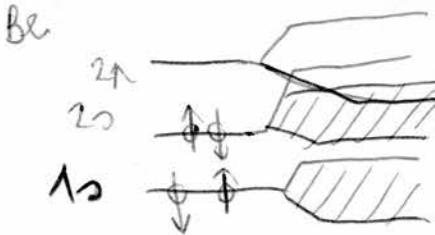
N_{atom} 2 nívó



a $2s, 2p$ polylek

H nem lenne, de molekulát alkot!

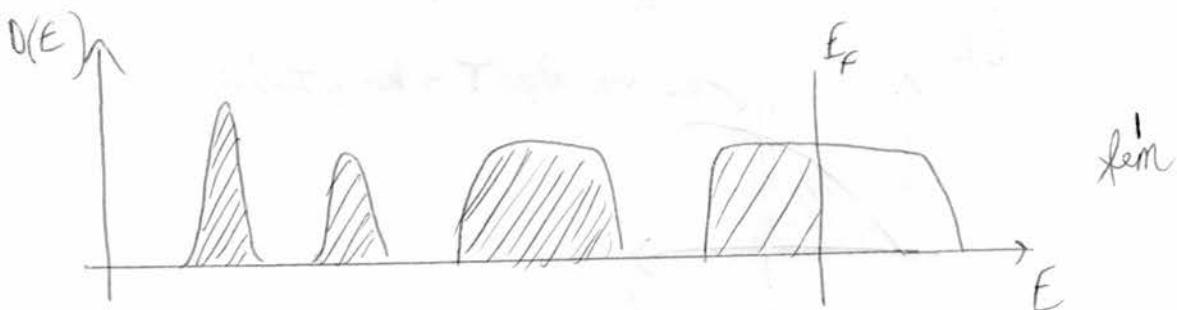
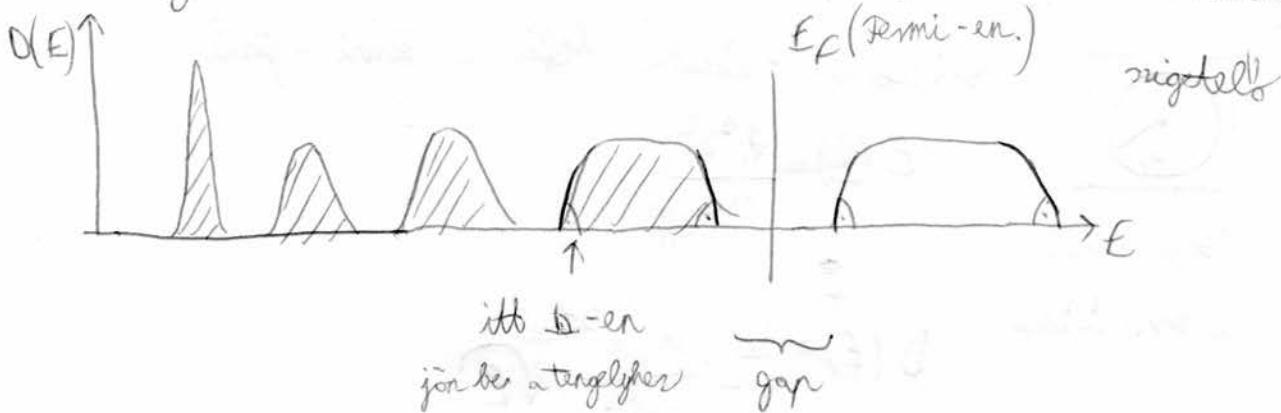




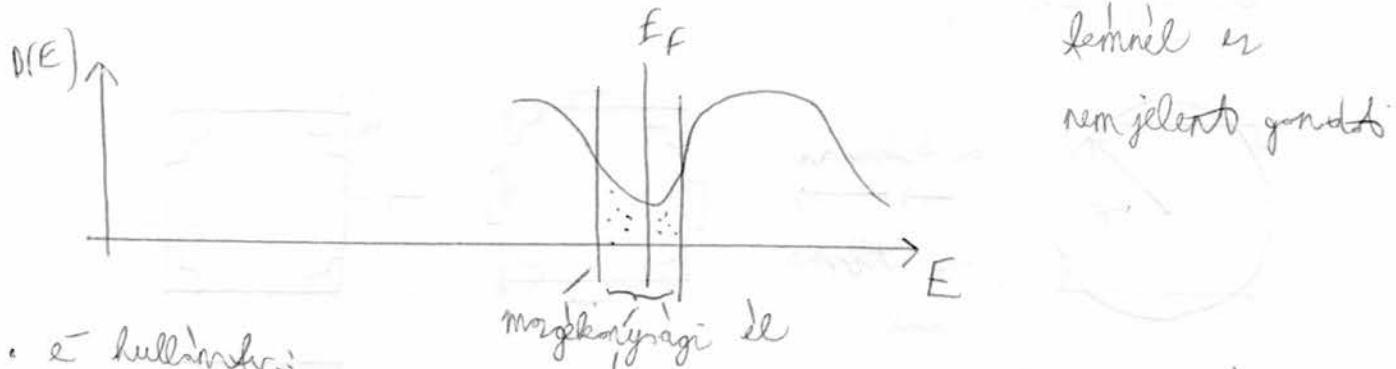
a pályák tökéletes!
emott nem vezetés

92 elemük 70 fém!

Elásványok:



Kemperidikus anyagokkal (pl. amorf, foly.)



e⁻ hullámok:

Bloch-hullám \Rightarrow insperidikus hullámok! (elvileg az egész részen léhet az e^-)

amorf anyagokkal megjelennek nem Bloch-hullámok is \rightarrow erek lokálisabb

tullamok (ezeket) lernek \rightarrow a négelők többra is négelők maradnak

Egyenlőkémek:

pl. Li, Na, K stb. ; szabad e⁻ modell jó



Fermi-gömb

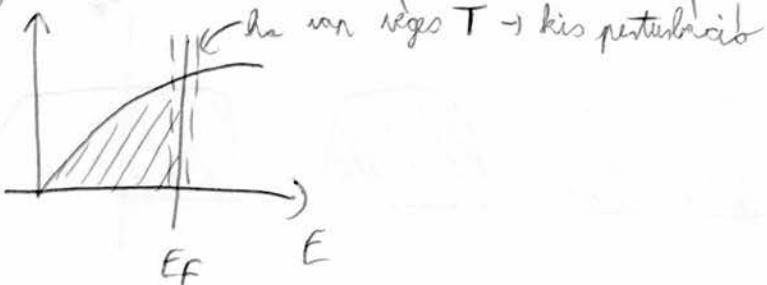
Brillouin-zónákhoz belép a Fermi-gömb

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{eff}}}$$

a Br.-zónához

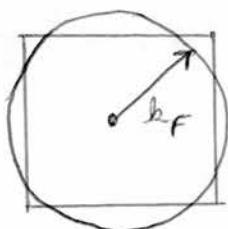
$$D(E) = \frac{V}{\pi^2} \cdot \frac{m_{\text{eff}}^{3/2}}{\hbar^3} \cdot \sqrt{E}$$

D(E)

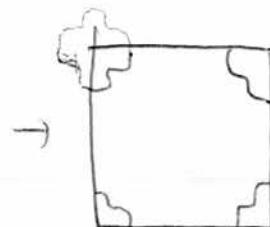
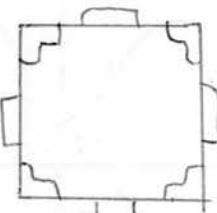


Kötöttések kémek

Be, Mg, Ca

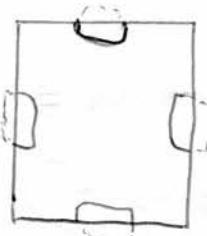


de felhasznál
 \rightarrow
az átlagos-
zóna



(Melyik egy
szimmetria
relatív
horizontális
szimmetria
adni)

itt már nem
lesz jó a szabad-e-
modell



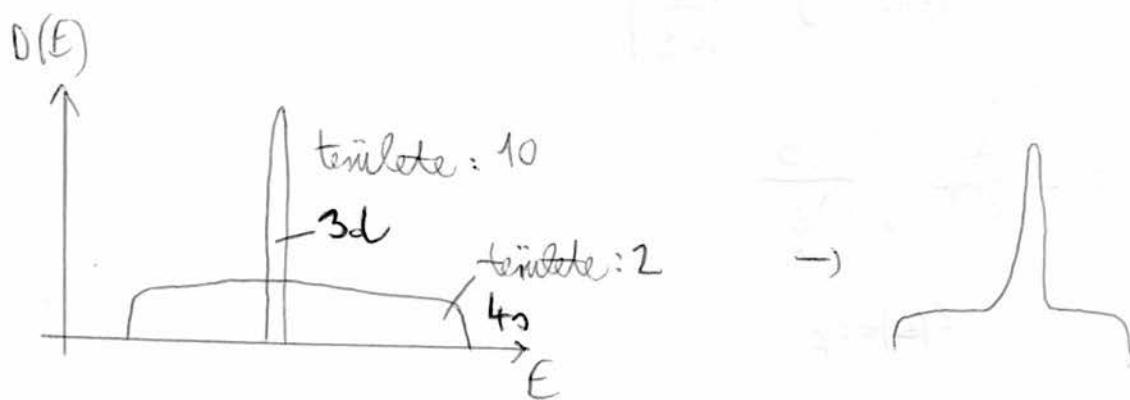
Háromszöklékű fémek

B, Al, Ga

Atomosító fémek

Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
Y	...						Pd	Ag	Cd
...		Am	Hg

Átadnak a d és s pályák!



Amikor növekszik: $d: e^-$ költ (első kölcs → atomosító fémek
 $s: e^-$ növekszik (kemények)

Összefoglalás:

- Az e^- sebessége: $v_s = \frac{1}{e} \frac{\partial E}{\partial k}$

- Effektív tömeg: $(m_{eff})^{-1} = \frac{1}{e^2} \frac{\partial E}{\partial k \partial k}$

- Fermi - felület: $k_F = \sqrt{E + \frac{B}{2}} - \frac{\hbar k_B T}{2}$

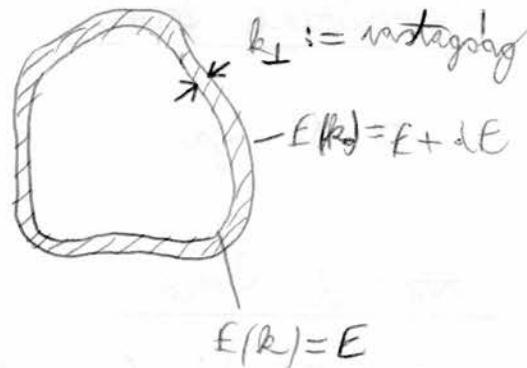
felkészülés → pl. nem többletűs arádás

Hypothér. (málik leveretés):

$$D(E) dE = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{spin}}^{\beta E} d^3 k =$$

$E < E(k) < E + dE$

$$= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int k_{\perp} ds$$



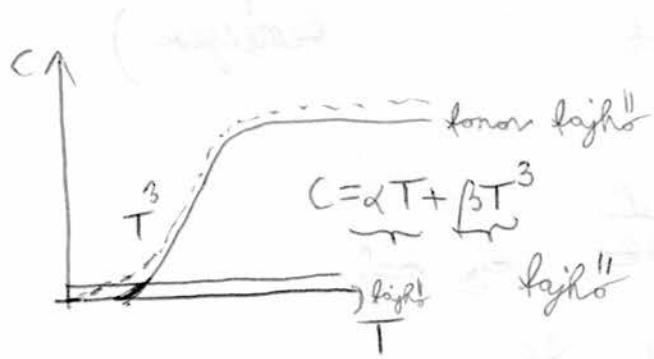
$$\frac{\partial E}{\partial k} \perp \text{ felület} \Rightarrow \left| \frac{\partial E}{\partial k} \right| k_{\perp} = dE$$

$$D(E) dE = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{ds}{\left| \frac{\partial E}{\partial k} \right|} \cdot dE$$

$$D(E) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{ds}{\left| \frac{\partial E}{\partial k} \right|}$$

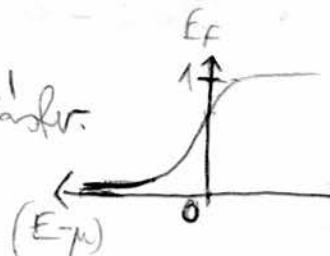
$$E(k) = E_F$$

Elektronfajho

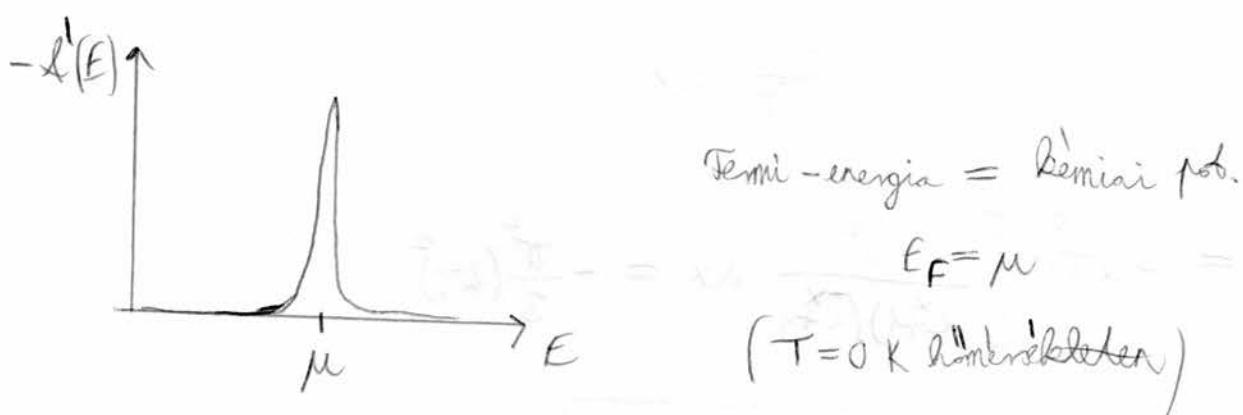
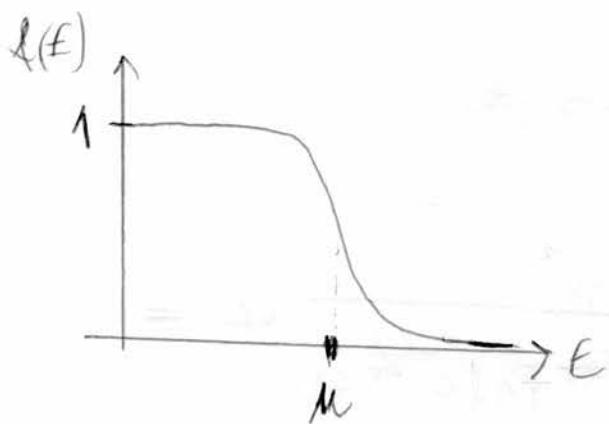


$$kT \ll E_F \quad 25 \text{ meV} \ll 1-3 \text{ eV } (E_F)$$

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} g(E) f(E) dE, \text{ ahol } f(E): \text{Fermi-eloszlásfüg.}$$



$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}$$



Bethe-Sommerfeld - softgute (alt. formular)

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} g(E) f(E) dE = \underbrace{G(E) f(E)}_{\uparrow 0} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} g(E) f'(E) dE =$$

$$\text{d}E \quad G(E) = \int_{-\infty}^E g(E') dE'$$

$G(E)$ softgute
 μ konst

$$= - \int_{-\infty}^{\infty} \left(G(\mu) \cdot f(E) + G'(\mu) \cdot (E-\mu) \cdot f'(E) + \frac{1}{2} G''(\mu) (E-\mu)^2 f''(E) \right) dE$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f'(E) dE = -1 \quad \int_{-\infty}^{\infty} (E-\mu) f'(E) dE = - \int_{-\infty}^{\infty} (E-\mu) \cdot \frac{e^{\frac{E-\mu}{kT}}}{(e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1)^2} \cdot \frac{1}{kT} dE =$$

$$= - \frac{1}{kT} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{(E-\mu)}{(e^{\frac{E-\mu}{kT}}+1)(e^{-\frac{E-\mu}{kT}}+1)} = 0$$

naml.: partition
never": pars } \rightarrow pte

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (E-\mu)^2 \cdot f(E) dE = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(E-\mu)^2}{kT} \frac{1}{(e^{\frac{E-\mu}{kT}}+1)(e^{-\frac{E-\mu}{kT}}+1)} dE =$$

$$\frac{E-\mu}{kT} := x$$

$$= -(kT)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2}{(e^x+1)(e^{-x}+1)} dx = - \frac{\pi^2}{3} (kT)^2$$

$$I = g(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \cdot \left. \frac{dg}{dE} \right|_{E=\mu}$$

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} D(E) \cdot f(E) dE = \int_{-\infty}^{\infty} D(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \left. \frac{dD}{dE} \right|_{E=\mu(T)} =$$

↓ $\mu(T)$

allapotstabilitás

$$= \underbrace{\int_{-\infty}^{\mu(0)} D(E) dE}_{N \text{ (0 hőmérsékleten)}} + (\mu(T) - \mu(0)) \cdot D(\mu(0)) + \frac{\pi^2}{6} \cdot (kT)^2 \left. \frac{dD}{dE} \right|_{\mu(0)} =$$

In T körül N (0 hőmérsékleten
 lebegő elektronokban)

$$\mu(T) = \mu(0) - \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \left(\frac{1}{D(E)} \cdot \frac{dD(E)}{dE} \right) \Big|_{E=\mu(0)}$$

$$E(T) = \int_{-\infty}^{\mu(T)} E D(E) dE = \int_{-\infty}^{\mu(0)} E D(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \frac{d(E D(E))}{dE} \Big|_{E=\mu(0)} =$$

$$= \underbrace{\int_{-\infty}^{\mu(0)} E D(E) dE}_{E(T=0)} + \left[\mu(T) - \mu(0) \right] \cdot \left(E D(E) \right) \Big|_{E=\mu(0)} + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \frac{d(E D(E))}{dE} \Big|_{E=\mu(0)}$$

$E(T=0)$ & μ -ig van betöltve az enderz

$$= E(0) - \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \cdot \left(\cancel{\frac{1}{D(E)} \frac{dD(E)}{dE} \cdot E D(E)} \right) \Big|_{E=\mu(0)} + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \left(D(E) + E \cancel{\frac{dD(E)}{dE}} \right) \Big|_{E=\mu(0)} =$$

$$E(T) = E(0) + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 D(\mu(0))$$

$$c_{el} = \frac{\partial E(T)}{\partial T} = \frac{\pi^2}{3} k^2 T D(\mu(0))$$

ha $c_{el} \rightarrow$ megszűk $\rightarrow D \rightarrow$ meg tudjuk határozni!

(először hom.-en

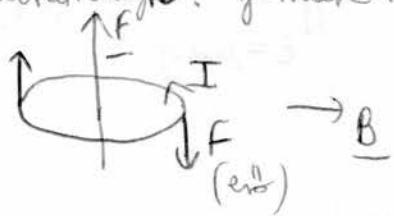
$$(c_{el} \gg c_{phonon})$$

Pauli susceptibility

felületvektor
 $\underline{I} = \underline{I} \underline{F}$
magn. áramhosszeg
mom.

$$\frac{\underline{I}_m}{V} = \underline{M} \quad \text{magnesztettség}$$

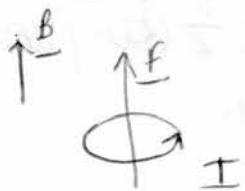
- ha van különböző \underline{B} :
 - paramagn. járulékok:



fogatónymolek. hat:

a dipolmomentum beakarulni
 \underline{B} irányába $\rightarrow \underline{m}$ nő

- diamagn. járulékok:



\rightarrow ha $\underline{B} \rightarrow$ bekopcsoljuk |Lenz-törvénye
mitt I \rightarrow csökkeneni akarja

\underline{m} csökken

- Szabad e- paramagn. járuléka

Pauli-paramagnesség

M_B : Bohr-magneton

$$\underline{M} = \frac{M_B}{V} (N_\uparrow - N_\downarrow)$$

$$N_\uparrow = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D(E + \mu_0 B)}{2} f(E) dE$$

$$N_\downarrow = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D(E - \mu_0 B)}{2} f(E) dE$$

$$N_{\uparrow\downarrow} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(E)}{2} \cdot f(E) dE \pm \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D(E)}{2} \cdot \mu_0 B \cdot f(E) dE =$$

$$\underline{H} = \frac{\mu_0}{V} \int_{-\infty}^{\infty} D(E) f(E) dE \cdot \mu_0 B$$

g. da

$$M = \frac{\mu_0^2}{V} \cdot D(E_F) \cdot B + (kT)^2 \cdot (\dots)$$

\uparrow
 $\mu_0 H$

$$\chi_p = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{\mu_0^2}{V} D(E_F) \cdot \mu_0$$

→ er is een relatie t.w.v susceptibiliteit ! (naar atomenkrak van magnetmomentum , en kubus jaagdekk)

→ Uitgaansstelling is dat jol mechtig !

Standaard el. aantal : $D(E_F) = \frac{2}{3} \frac{N}{E_F}$

$$\chi_p = \frac{\mu_0^2}{V} \cdot \frac{2}{3} \mu \cdot \frac{N}{E_F}$$

Transportfolyamatok

Elektromos vezetés

1) Drude-modell:

$$m\ddot{v} = -eE - \frac{m}{\tau} \dot{v} \quad \tau \text{ relaxációs idő}$$

(Erőhesség: ha a villanyműködés bekapcsoljuk, 3 jelenség miatt is lassabban kapcsol le:

- az elektronokat fel kell gyorsítani (ns)
- az $-n$ - be kell kanyarítani (elektromos tér kell a göbületnél)
- kötés fel kell melegíteni ($0,01 \rightarrow$)

$$\underline{\dot{v}} = \underline{n} = -\frac{eT}{m} \underline{E}$$

$$\dot{v} = -en\underline{\dot{v}} = \frac{e^2 n \tau}{m} \underline{E} \quad \rightarrow \sigma = \frac{1}{\tau} = \frac{e^2 n \tau}{m}$$

(a relaxációs időre külön számolások történnek)

2) Boltzmann-egyenlet:

$$\frac{V}{(2\pi)^3} f(\underline{k}r) d^3r d^3k \quad (\underline{r}, \underline{r}+d\underline{r}), (\underline{k}, \underline{k}+d\underline{k}) \text{ intervallokkban levő elektromos száma}$$

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3r \int d^3k f(\underline{k}, \underline{r}) = N \quad (\text{összes elektronraam})$$

$$\left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \cdot \int d^3k \cdot f(\underline{k}, \underline{r}) = n(r) \quad \text{elektronlínleg}$$

spin
↓

$$f = 2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \int e \underline{v} \cdot \underline{f}(\underline{k}, \underline{r}) d^3k$$

(áramszínleg)

$$f = 2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \int \underline{v} \cdot \underline{f}(\underline{k}, \underline{r}) d^3k$$

(anyagaram)

(höversettség):

$$dE = T dS - p dV + \mu dN$$

$$d\left(\frac{E}{V}\right) = T d\left(\frac{S}{V}\right) + \mu d\left(\frac{N}{V}\right)$$

$$T d\left(\frac{S}{V}\right) = d\left(\frac{E}{V}\right) - \mu d\left(\frac{N}{V}\right)$$

analog módon: $E_F = \mu$ ($T=0$ leggyakoribb elosztás energia)

$$f_N = 2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \int (E(\underline{k}) - E_F) \sim \cdot f(\underline{k}, \underline{r}) d^3k$$

$f(\underline{k}, \underline{r})$ -re van igénybe:

$$\frac{df}{dk} = I_{\text{ittk}} \quad (\text{akkor változik elosztás})$$

$$\frac{\partial f}{\partial k} + \frac{\partial f}{\partial \underline{k}} \cdot \dot{\underline{k}} + \frac{\partial f}{\partial \underline{r}} \cdot \dot{\underline{r}} = I_{\text{ittk}} \quad (\text{ha változik az})$$

$$\dot{\underline{r}} = \underline{v} = \frac{1}{t} \frac{\partial E(\underline{k})}{\partial \underline{k}} = \dot{\underline{k}} \cdot \underline{B} = \underline{E} + e(\underline{v} \times \underline{B})$$

$\underline{v} = \frac{\partial E}{\partial \underline{p}}$

$$I_{\text{ittk}} = - \frac{f(\underline{k}, \underline{r}) - f_0(\underline{k})}{e} \quad \text{ahol } f_0(\underline{k}) = \frac{1}{e^{\frac{E(\underline{k}) - E_F}{kT}} + 1} \quad \begin{matrix} \text{eggyensúlyi} \\ \text{el. elosztás} \end{matrix}$$

Megoldás:

$$\hat{D} := \frac{\partial}{\partial t} + i \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y}, \Rightarrow Df = - \frac{f-f_0}{\tau}$$

$$f = f_0 - \tau Df$$

előrendű közelítés (f röjtkezel)

$$f = f_0 - \tau \cdot Df_0$$

$$\sigma(E) = 2e^2 \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{\pi^2} \int \tau \frac{e^{\omega/E}}{|\omega|} d\omega$$

felületek kvantálása (ω török)

(ittal minden σ tensor,

$$E(\underline{k}) = E$$

de isotrop esetben csak skalar (keret nem állig az irányhoz))

- Elektromos vezetékképesség:

$$j = \sigma E \Big|_{T=\text{konst}} \quad \text{ahol } \sigma = \sigma(E_f) = \frac{1}{\rho}$$

\uparrow
hogy ne legyen hő
működésben

- Flövöröttékképesség:

$$j_{\parallel} = -\kappa \cdot \text{grad} T \quad \text{ahol: } j_{\perp} = 0, \quad \kappa = \frac{\pi^2 \cdot e^2 T}{3 \cdot e^2} \cdot \sigma(E_f)$$

(illetve működésben)

$$\frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{e}{k} \right)^2 = L$$

Niedermann - Franz - tw. ($\sim 10\%$ hibáig jö
eredményes ad.)

- Körerzteljektus:

- Termofeszültség (Seebeck - együttható)

$$E = S \cdot \text{grad } T \quad j_{\text{el}} = 0 \quad (\text{de ferz. van})$$

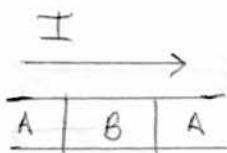
$$S = \frac{\pi^2 k^2 T}{3 e^2} \frac{J \ln \sigma(E)}{JE} \quad \left|_{E=E_F} \right.$$

a hőáram mint termofesz. alakul ki

Seebeck - együttható

- Peltier - effektus:

$$j_R = \pi \cdot j_{\text{el}} \quad T = \text{all}$$



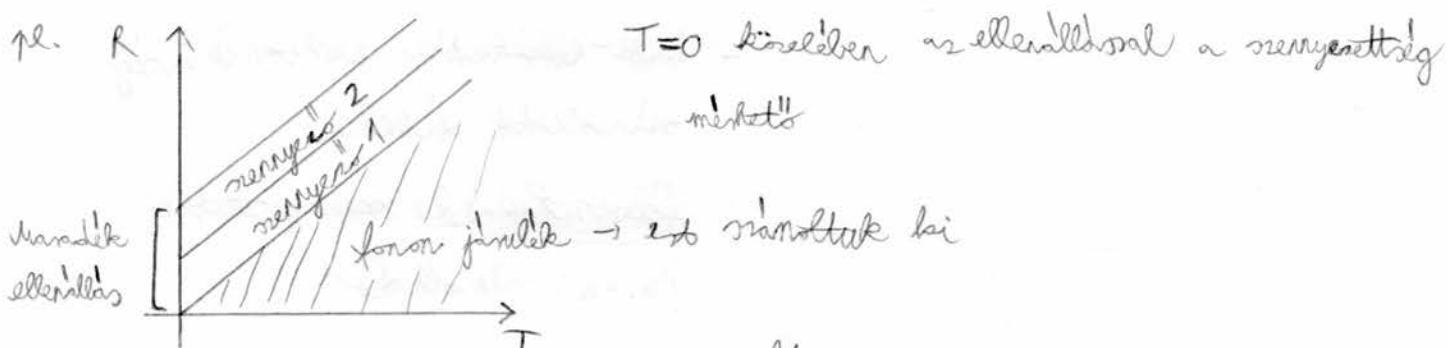
Onsager - reláció: $\pi = S \cdot T$

3) Elektromos vezetékpároság

$$\frac{1}{T} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \dots \quad \text{Matthiesen - szabály}$$

ha többfajta "szabadság" (szilárdból) is van, akkor $\frac{1}{T} = k$ összes szabadság

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 + \dots$$

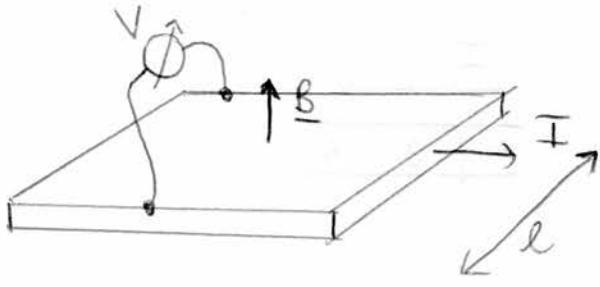


- jövelekok:

- foton
- szennyes "
- részhilak \rightarrow vakanciák
 \rightarrow diszlokációk
- magnon (ferromagnes)

4) Hall - effektus

(80. éd szimultánan 2. rendű jövelek)



famílisan er eggyel tömöreggel lesz betű (eztől)

$$E = R_H \cdot j \times B \quad E = R_H \cdot j \cdot B$$

↑

Hall - törzsből

( a többi bemenetnél,
"nemineggy" a bemenet
le egy terhelést hoz
szüre, ami a többi
töltésekkel ellentéti)

$$E \cdot l = \frac{R_H}{d} (jld) B$$

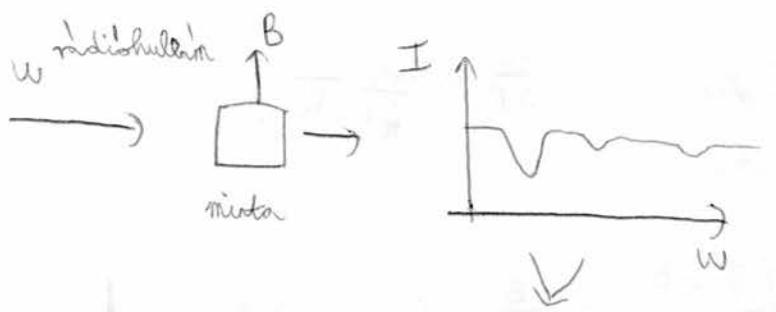
$$U = \frac{R_H}{l} I \cdot B$$

$$\text{ha} \quad E = v \times B \quad E = vb$$

$$E = \underbrace{j \cdot \frac{1}{en}}_v \cdot B = R_H \cdot j \cdot B \quad \Rightarrow \boxed{R_H = \frac{1}{en}}$$

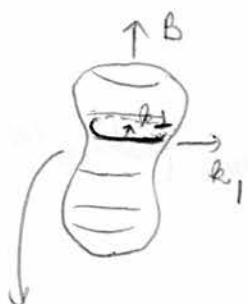
- Hall - effektusnál elektronoknálrig
szimultán feltekerel
- Felvérzetnél szennyezettség
(p-n) szimultán

Fermi-felület körékes ciklotron frekvencia



lesznek elnyelésük a mintában

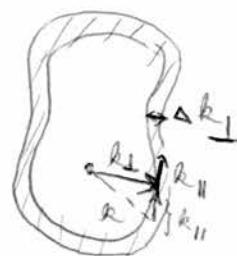
Közben marognak ~ Fermi-felületen az e^- -ek



olyan "pályán" megy köde az e^- a Fermi-felületen, ahol merülés van elvárt B -re

$$\underbrace{t \frac{d\vec{k}}{dt} = e(\vec{v} \times \vec{B})}_{\text{erősítés}} \quad T = \oint dt \quad t \frac{dk_{||}}{dt} = ev_{||} B$$

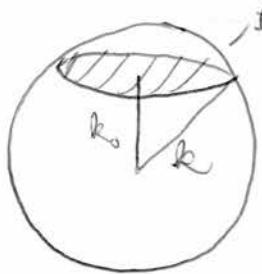
$$t dk_{||} = ev_{||} B dt$$



$$T = \frac{\hbar}{eB} \oint \frac{dk_{||}}{v_{||}} = \frac{\hbar}{eB} \oint \frac{dk_{||}}{\frac{1}{eB} \left(\frac{\partial E}{\partial k_{||}} \right)} = \frac{\hbar^2}{eB} \cdot \frac{1}{\Delta E} \int \overbrace{\Delta k_{||}}^{\Delta S \text{ (felület)}} dk_{||} = T$$

$$T = \frac{\hbar^2}{eB} \left(\frac{\Delta S}{\Delta E} \right)_{E=E_F}$$

$$\omega = \frac{2\pi eB}{\hbar^2 \left(\frac{\Delta S}{\Delta E} \right)_{E=E_F}} = \frac{2\pi}{T}$$



$$f = \frac{k^2 k^2}{2m}$$

k. rágásában
kör felülete

$$S = (k_1^2 - k_2^2) \pi = \frac{2m}{eB} \cdot E \cdot \pi - k_2^2 \pi$$

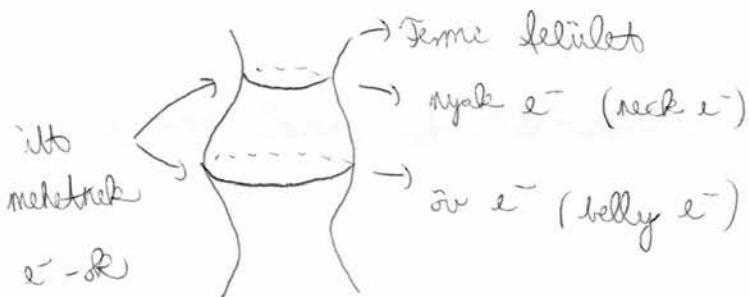
$$\frac{S}{E} = \frac{2m}{eB} \pi$$

$$\omega = \frac{2\pi \cdot eB}{m} = \frac{eB}{m} \quad \text{Larmor-frekvencia!}$$

$$\omega = \frac{eB}{m_{\text{eff}}} \rightarrow \text{effektív tömeg} \quad (\text{amivel ellen köhle-köhl megz})$$

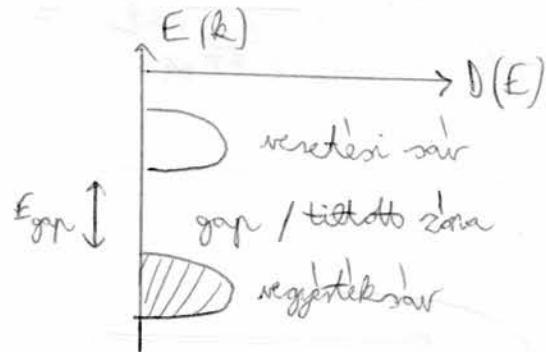
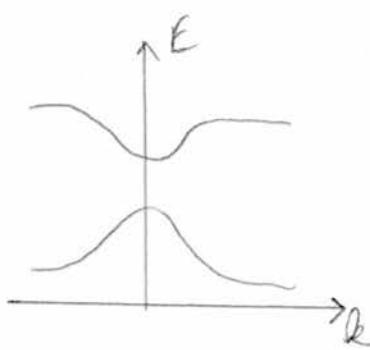
(az e- B-ből)

ω a frekvencia jelenik meg, ahol $\left(\frac{S}{E}\right)_c$ stacionáris (széria nem változik)



Szigetelők és felveretők

1)



ha $E_{gap} > 4 \text{ eV}$

szigetelő

$E_{gap} < 2 \text{ eV}$

felverető

(köztes tartomány elnevezése)

valószínű, lehetnek esetek

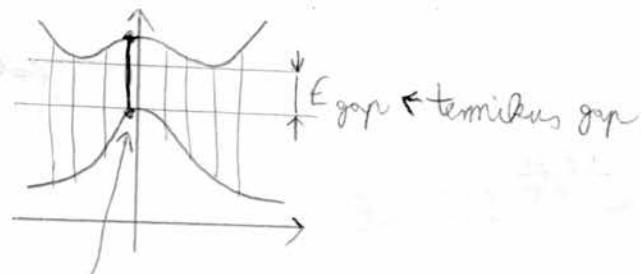
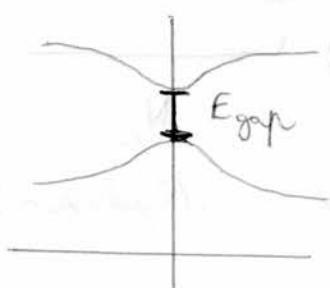
amelyek is szigetelők v. felveretők

Mutatjuk felv. es szig. között nem törünk különbséget

2)

direkt felverető

indirekt felverető



optikai gap: a függőleges irányok közül a legkisebb

a flyg (látható) mit tud gejsteni?

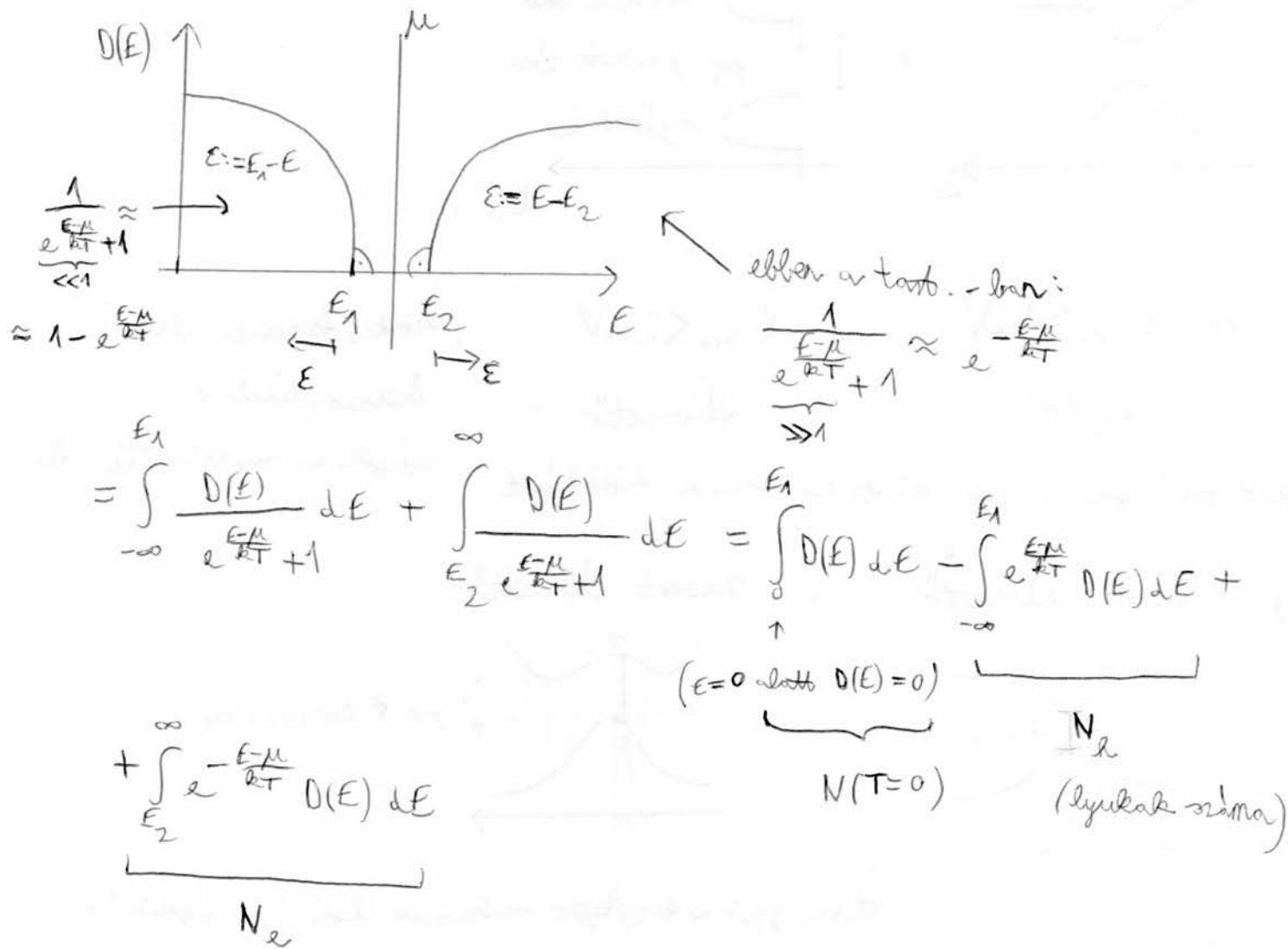
ha c nagy \rightarrow k kicsi \rightarrow a flygnak kiari nincs impulnsa \Rightarrow

\Rightarrow a flyg csak "függőlegesen" tud gejsteni \Rightarrow optikai gap

(eztól függ, hogy átlátni-e egy anyag \leftrightarrow melykor az opt. gap?)

3) Elektronik és lyukak:

$$N = 2 \sum_{E_k} \frac{1}{e^{\frac{E(E_k) - \mu}{kT}} + 1} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D(E)}{e^{\frac{E - \mu}{kT}} + 1} dE =$$



$$\text{Mivel } N(T) = N(0) \Rightarrow N_h = N_e$$

(az e⁻-alkalmazás)

T-wel nem műt.) → feltételezés

ezek e⁻-lyuk párok keletkeznek

$$N_e = \int_{E_2}^{\infty} e^{-\frac{E-\mu}{kT}} D(E) dE, \quad N_h = \int_{-\infty}^{E_1} e^{\frac{E-\mu}{kT}} D(E) dE$$

Leggen $\varepsilon = \begin{cases} E_1 - E & \text{für } E < E_1 \\ E - E_2 & \text{für } E > E_2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

\Downarrow

$$N_e = \int_{E_2}^{\infty} e^{-\frac{E-\mu}{kT}} D(E) dE = e^{-\frac{E_2-\mu}{kT}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \cdot D_2(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$N_h = \int_{-\infty}^{E_1} e^{\frac{E-\mu}{kT}} D(E) dE = e^{\frac{E_1-\mu}{kT}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \cdot D_1(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$N_e \cdot N_h = e^{-\frac{E_2-E_1}{kT}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} D_2(\varepsilon) d\varepsilon \cdot \int_0^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} D_1(\varepsilon) d\varepsilon$$

"ionisiert" μ -tol neu liegt

da $N_e = N_h$

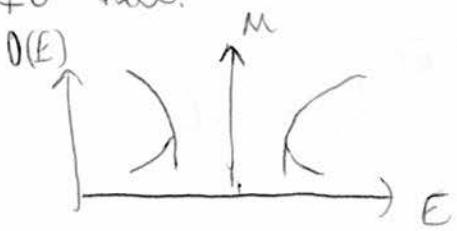
$$e^{-\frac{E_1+E_2-2\mu}{kT}} \cdot \frac{\int_0^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} D_2(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_0^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} D_1(\varepsilon) d\varepsilon} = 1$$

$$\frac{E_1+E_2-2\mu}{kT} = \ln \frac{\int_0^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} D_2(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_0^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} D_1(\varepsilon) d\varepsilon}$$

$$\mu = \frac{E_1+E_2}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{\int_0^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} D_1(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_0^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} D_2(\varepsilon) d\varepsilon}$$

$T=0$ -nál határtöréken kijön, hogy μ E_1 és E_2 között van

$T \neq 0$ -nál:



hamar lecseng



Ki is a tömörlekeltetés

$$\mu(T) = \mu(T=0) = \frac{E_1 + E_2}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{\int_0^{\infty} e^{-\frac{E}{kT}} D_1(E) dE}{\int_0^{\infty} e^{-\frac{E}{kT}} D_2(E) dE}$$

10. óra

Felvezetők (folyt.)

$$\mu(T) = \frac{E_1 + E_2}{2} + \frac{3kT}{4} \ln \frac{m_A}{m_B} \quad \text{effektív tömegek}$$

	In P	Si	Si
$\frac{m_e}{m}$	0,073	0,07	$\frac{m_e}{m} = \begin{pmatrix} 0,92 & 0 & 0 \\ 0 & 0,92 & 0 \\ 0 & 0 & 0,19 \end{pmatrix}$
$\frac{m_A}{m}$	0,4	0,68	

$$D(E) = \sqrt{\frac{m^3}{\pi^2}} \sqrt{E} = \alpha \sqrt{E}$$

$$\int_0^{\infty} D(E) \cdot e^{-\frac{E}{kT}} dE = \alpha \int_0^{\infty} \sqrt{E} \cdot e^{-\frac{E}{kT}} dE = \alpha kT \int_0^{\infty} \sqrt{x} \cdot e^{-\frac{x}{kT}} dx$$

Nézettsé felvezetőkben

margékonyiság (μ): n_e, n_h
 \downarrow

ez most nem a kémiai
pot!

$$N_e = -n_e E$$

$$N = n_h E$$

(elt. hozzájárulásban minden
az elektronok)

$$j = e(n_{h,v} - n_{e,v}) = e(n_h M_h + n_e M_e) E$$

$$\sigma = e(n_h M_h + n_e M_e) \sim e \frac{\Delta E}{kT}$$

Felvezető anyagok típusai

1) IV. osztály: Si : Si : Si : Si :

Ge

: Si : Si :

↓
(0,2 eV gap, direkt felvezető)
↑
kicsi

SiC (szilicium-karbid)

(nagy gap (gyakorlatilag nélküli), hatszögű rác
mégis csinlások belül diódákat nagy

gyémántbács (felváltva Si, C)

2) III - V. osztály: GaP ferdelegések eggyinisztrikációval (pl. LED)

GaAs

: Ga⁻ : P⁺ :

InP

: P⁺ : Ga⁻ :

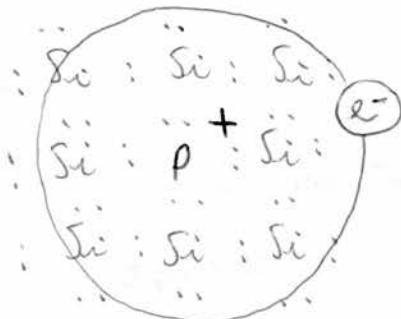
InAs

→ pl. LED-ek készítése

3) Atalékolt (nemzetett felverető)

$\text{Si}(\text{Ge}) + \begin{cases} \text{Al, In, Ga} & - \text{III. osztó} - \text{akceptor} \\ \text{As, P, Sb} & - \text{V. osztó} - \text{donor} \end{cases}$

- donoros nenyésés



a forrásnak 5 elektronja volt a különböző réjén
= In

$1e^-$ ut lead, az a részben bolyongana, de azért éri a P^+ töltéket

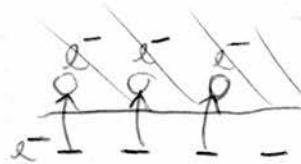


olyan, mint egy H atom, csak az e- "rückő" párban marog \rightarrow ebből egy P^+ dielektronos állapotokból be lehet venni

$$\epsilon_r \gg \epsilon_r = 30$$

$$E = \sim 0,01 \text{ eV}$$

kis energiával
fel lehetséges
genetálni a
vezetői sávba



vezetői sáv

lokális energianívók
a P atomok között



segétek
(valencia) sáv

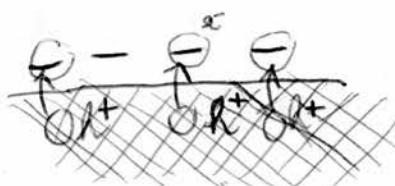


n felverető

- akceptoros nenyésés

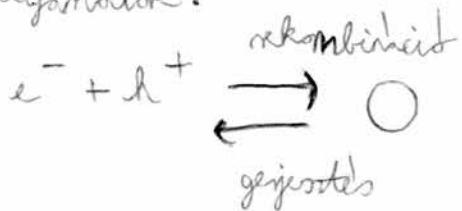


p felverető



- azt, hogy egy felvezető n-egy in díjszabásban, a Hall-effektusral (2. eljárásban) lehet kimeríni.

- folyamatok:



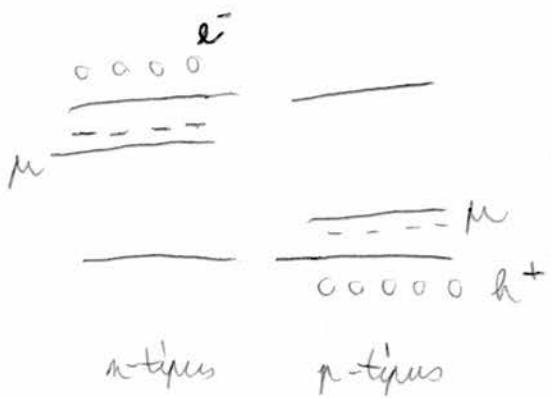
- rekombináció - forrás nélkül

(elhagyja a fell, hogy ki tudjon
grisezni)

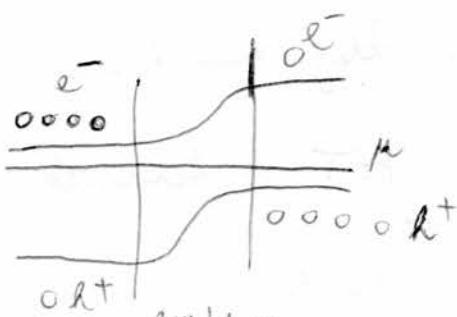
- fotónak nélkül → ki tud jönni a nácsból
→ nem tud ki jönni --||--

dioda (négydioda)

(pn-felvezetők)



kiegészítő
többik a
harmi
potenciál



küntetés

tartomány

difúzió

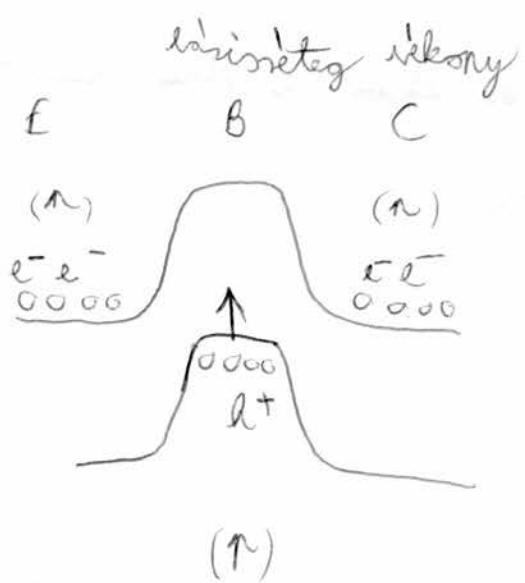
teret, ha elektromos
teret kapcsolunk rá

(elhagy nem működik tel nagy küntetett tartománynak lennie)

transistor (npn, pnp)

E (emitter) B (bázis) C (kollektor)





Kvantum-Koll-effektus

1) rékony növegy kell hozzá

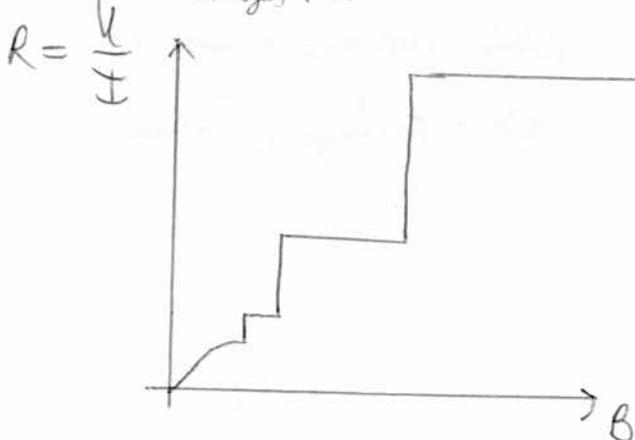
FET → felvezető rékonyteng

2) hideg 1-3 K

3) nagy mágneses ter. $B \sim 10 T$

Hall-effektus: B ter hatására áram irányára merdeges kerülik
(el.Hr) jön létre (L.eff.)!

az az áramra
↓ merdeges fer.



$$R = \frac{h}{e^2} = 25,82 \text{ k} \Omega$$

$$\frac{U}{I} = \frac{h}{e^2} \cdot \frac{1}{N} \quad \text{ahol } N \in \mathbb{Z}$$

$$\underline{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix} \quad \underline{A} = \begin{pmatrix} 0 \\ e \times \underline{B} \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

\nwarrow

$\text{rot } \underline{A} = \underline{B}$

kv. gradientek használhatók

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} + (p_y - e \times B)^2$$

$(+ \frac{\hbar^2}{2m}) \rightarrow$ irányban elágazási a kitérővel, hogy (elosztva) a fiz. modell alapján a masszív energiaszint már nem fejeződik ki

Keressük a megoldást!

$$\Psi(x, y) = \varphi(x) \cdot e^{iky}$$

$$p_y \cdot \Psi(x, y) = \hbar k \Psi(x, y)$$

$$\hat{H} \cdot \Psi(x, y) = \frac{\hbar^2}{2m} + (p_y - e \times B)^2 \varphi(x) \cdot e^{iky} = \frac{\hbar^2}{2m} + (\hbar k - eB)^2 \varphi(x) e^{iky} = E \cdot \varphi(x) e^{iky}$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} + \frac{e^2 B^2}{2m} \left(x - \frac{\hbar k}{eB} \right)^2 \right] \varphi(x) = E \varphi(x)$$

eltolt köreppontú lineáris oscillator!

$$x_0 = \frac{\hbar k}{eB}$$

$$\omega = \frac{eB}{m} \quad E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

\Rightarrow azért kell megteríteni, hogy az e^- köbe-köbe tudjon menni a kristályban

$$0 \leq x < L_x$$

$$0 \leq k < \frac{eBl_x}{\hbar}$$

$L_x, L_y: x$ és y irányú kiterjedés

- degeneráció téma:

$$N = \sum k = \frac{L_y}{2\pi} \int dk = \frac{eBl_x L_y}{2\pi\hbar} = \frac{eBl_x L_y L_z}{\hbar L^2}$$

→ a lineáris oscillator Δ mintájába ennyi e- ker

- ha növeljük B -t, csökkennek az energianivelük

⇒ a Fermi-nivo alól kezdődő 2., 3., ... nivót is

⇒ elektronszámug: n nivo a fermi-nivo alatt

$$n = \frac{N_p}{V} = \frac{eB}{\hbar L_z} \cdot \underset{n \in \mathbb{Z}}{\uparrow} \quad (\text{Hall-effektus: } U = \frac{1}{ned} \cdot IB \text{ volt})$$

$$\Rightarrow U = \frac{1}{ned} IB = \frac{1}{\cancel{n} \cdot \cancel{\frac{eB}{\hbar L_z}} \cdot \cancel{e}} IB$$

$$\underline{\underline{\frac{U}{I} = \frac{h}{e^2} \cdot \frac{1}{n}}}$$

n valójában függ B -től, de addig
n-e $\frac{U}{I}$ nem függ B -től

$n \in \mathbb{Z}$

(a spin most nem számít figyelembe, mert csak $\frac{1}{2}$ -es spinűket kell figyelembe venni)

Magneses tulajdonságok

p^+, n^0 magneses momentum a tömegük miatt kisebb mint e^- magneses momentumához képest

Atomi magneségek

- polyaimp. mom. L $\ell^2 \ell(\ell+1)$ $-\ell \leq m \leq \ell$
- spin S $\ell^2 s(s+1)$ $-1/2 - 1/2 \leq m \leq 1/2$
- össimpulsusmom. $\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$ $\ell^2 j(j+1)$ $-1/2 - j \leq m \leq j$

(\rightarrow j által lelegéz

is)

$$\underline{m} = \frac{M_B}{\hbar} (\underline{L} + 2\underline{S})$$

$= g \cdot \underline{J}$

M_B : mennyi magnes mom. tartozik egy

$$E = -g \frac{M_B}{\hbar} \underline{J} \cdot \underline{B} = -g \mu_B m_J B$$

egységes

g : gyromagnes faktor

(Kitérés: para- és diamagneses tulajdonságok)

$$\text{para. } \begin{array}{c} \uparrow E \\ \text{I} \end{array} \rightarrow \underline{m} = I \cdot \underline{F}$$

B rotációra forgatónakik het a magn. momentumra

$$\text{diam. } \begin{array}{c} \uparrow B \\ \text{I} \end{array}$$

ha bekapcsoljuk B -t, nő a fluxus \rightarrow
 \rightarrow Lenz-tv. hatásra ilyen irányba indukál, ami csökkenteni akarja a fluxust)

param. diamagn.

metab. el. $\sqrt{2}$ zármán
volt

atomi O erősen
mag.

Gyengén magneses anyagok

I) Atomi paramagnesésg

$$M = n g \mu_B \langle m \rangle = n \cdot g \cdot \mu_B$$

\uparrow
 e^- -ek
száma

\downarrow
ha tömörítet
magy egyszerűbb
van, nem fog
minden színes
mom. befolyalni

$$\left. \begin{aligned} & \sum_{m=j}^j m \cdot e^{\frac{-g\mu_B m B}{kT}} \\ & \sum_{m=-j}^{-j} e^{\frac{-g\mu_B m B}{kT}} \end{aligned} \right\} = S$$

$$x := \frac{g\mu_B jB}{kT}$$

$$S = \frac{\sum_{m=-j}^j m \cdot e^{\frac{m}{j}x}}{\sum_{m=-j}^j e^{\frac{m}{j}x}} = j \frac{d}{dx} \ln Z(x) \quad \text{ahol } Z(x) = \sum_{m=-j}^j e^{\frac{m}{j}x}$$

$$Z(x) = e^{-x} \cdot \frac{e^{\frac{2j-1}{j}x} - 1}{e^{\frac{x}{j}} - 1} = \frac{e^{x(1+\frac{1}{2j})} - e^{-x}}{e^{\frac{x}{2j}} - 1} = \frac{e^{x(1+\frac{1}{2j})} - e^{-x(1+\frac{1}{2j})}}{e^{\frac{x}{2j}} - e^{-\frac{x}{2j}}} =$$

$$= \frac{sh((1+\frac{1}{2j})x)}{sh(\frac{x}{2j})}$$

$$B_j(x) = \frac{d}{dx} \ln Z(x) = \frac{sh(\frac{x}{2j})}{sh((1+\frac{1}{2j})x)} \cdot \frac{ch((1+\frac{1}{2j})x)}{ch(\frac{x}{2j})} - sh((1+\frac{1}{2j})x) \cdot ch(\frac{x}{2j}) \frac{1}{2j} =$$

Brillouin-fv.
- 95 - $(sh(\frac{x}{2j}))^2$

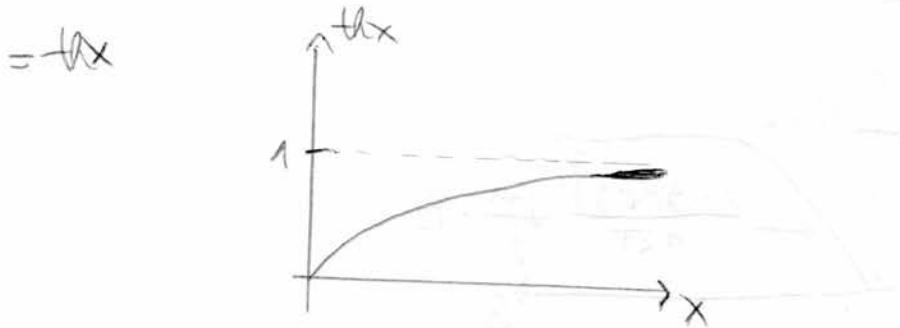
$$B_j(x) = \left(1 + \frac{1}{2j}\right) \text{th}\left[\left(1 + \frac{1}{2j}\right)x\right] - \frac{1}{2j} \text{th}\left(\frac{1}{2j}x\right)$$

$$M = n \cdot g \cdot \mu_B \cdot j \cdot B_j \left(\frac{g \mu_B j B}{kT} \right)$$

Brillouin-fn.

Brillouin-fn.:

$$1) j = \frac{1}{2} \quad B_{1/2}(x) = 2 \text{th}(2x) - \text{th}(x) = 2 \frac{dx}{d(2x)} - \frac{dx}{dx} = x \frac{d^2x + dx}{2dx \cdot dx} - \frac{dx}{dx}$$



$$2) j \rightarrow \infty \quad (\text{Maxwell's eset})$$

$$B_\infty(x) = \text{th}x - \frac{1}{x} \quad \text{Langevin-fn.}$$

$$3) x \rightarrow \infty \quad \lim_{x \rightarrow \infty} B_j(x) = \left(1 + \frac{1}{2j}\right) \frac{x}{2j} = 1$$

$$4) x \rightarrow 0 \quad x \ll 1 \quad \frac{(1+x^2/6)}{(1-x^2/6)}$$

$$\text{th}x = \frac{dx}{dx} = \frac{1+\frac{x^2}{2}}{x + \frac{x^3}{3!}} = \frac{1}{x} \left(\frac{1+\frac{x^2}{2}}{1+\frac{x^2}{6}} \right) = \frac{1}{x} \cdot \frac{1+\frac{x^2}{2} - \frac{x^2}{6}}{1} = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} \quad (\text{Lorentz-ssr})$$

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} B_j(x) &= \left(1 + \frac{1}{2j}\right) \left(\cancel{\frac{1}{1+\frac{x^2}{2}}} + \frac{\left(1 + \frac{1}{2j}\right)x}{3} \right) - \frac{1}{2j} \left(\cancel{\frac{1}{1+\frac{x^2}{2}}} + \frac{\frac{1}{2j}x}{3} \right) = \\ &= \frac{\left(1 + \frac{1}{2j}\right)^2 - \left(\frac{1}{2j}\right)^2}{3} x = \frac{1 + \frac{1}{j}}{3} x = \frac{j+1}{3j} x \end{aligned}$$

M₀

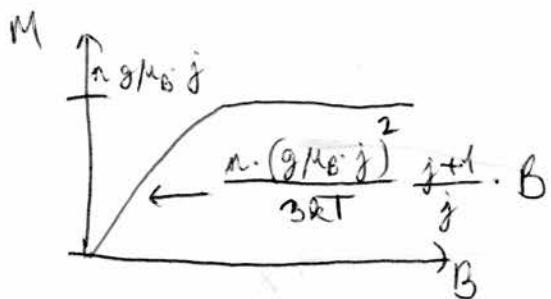
$$M = n \cdot g \cdot \mu_B j \cdot B_j \left(\frac{g\mu_B j B}{kT} \right)$$

1) $j = \frac{1}{2}$ $B_j(x) = \tanh x$

2) $j \rightarrow \infty$ $B_\infty(x) = \coth x - \frac{1}{x}$

3) $x \rightarrow \infty$ $B_j(x) \rightarrow 1$

4) $x \ll 1$ $B_j(x) = \frac{j+1}{3j} x$



kis B-re:

$$M = \frac{n \cdot (g \mu_B j)^2}{3kT} \cdot \frac{j+1}{j} \mu_0 H$$

$$\underline{x = \frac{\partial M}{\partial H}} = \frac{n (g \mu_B)^2}{3kT} j(j+1) \cdot \mu_0 = \frac{C}{T}$$

(susceptibilitás)

Curie - állapot
Curie - téz.
(visszatér!)

[első homokkötésekkel → adiabatikus lehűjtésre szintén (eltérő) használjuk mág. térfel, töltések, majd akkor már könnyen kikapcsoljuk a teret → -tiszta állapot]

II) Atomi diamagneségek

$$m_w^2 \cdot g = F \quad g: \text{körpályai száma} \quad (e^- \text{"kezeg" az atom körából})$$

$$m_w (w_0 + \Delta w)^2 \cdot g = F + e \tilde{w}_0 g B \quad (\text{ha lekupoljuk a teret, } w \text{ meghosszabb})$$

$$m_w^2 g + 2m_w \cdot \Delta w \cdot g = F + e \tilde{w}_0 g B$$

$$\Rightarrow \Delta w = \frac{e B}{2m} + \frac{g}{2} (\Delta w^2)$$

- gy.

1 elektron:

$$M_1 = -\frac{e \Delta W}{2\pi} \langle p_i^2 \rangle \pi = -\frac{e \Delta W}{2} \langle p_i^2 \rangle \stackrel{\mu}{=} (\text{magn. momentum})$$

7 elektron:

$$M_7 = -\frac{e \Delta W}{2} \sum p_i^2 = -\frac{7e \Delta W}{2} \langle p^2 \rangle$$

$$20 - \text{law}: \langle p^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle$$

minimális: $\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle \Rightarrow \langle p^2 \rangle = \frac{2}{3} \langle r^2 \rangle$
atomok 3D-rendszer

↓

$$M_7 = -\frac{7e \Delta W}{3} \cdot \langle r^2 \rangle = -\frac{7e^2}{6m} \langle r^2 \rangle B$$

$$M = -n \cdot \frac{7e^2 \mu_0}{6m} \langle r^2 \rangle H \Rightarrow X_d = -\frac{n 7e^2 \mu_0}{6m} \langle r^2 \rangle$$

III) Szabad elektron diamagnesség = Landau-diamagnesség

(klasszikus eset)

a) $H = \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m}$ $Z = \int e^{-\frac{H(p)}{kT}} d^3p d^3r$
Kerniketon energia
billentyűszem

$$F(\text{magadenergia}) = -kT \ln Z \quad M = \frac{\partial F}{\partial B} \quad X = \frac{\partial M}{\partial H}$$

leg jobb

$$\tilde{p} := p - e\mathbf{A}(x)$$

$$\tilde{r} = r$$

jacobi-det:
$$\begin{vmatrix} \frac{\partial \tilde{p}_x}{\partial p_x} & \frac{\partial \tilde{p}_x}{\partial r} \\ \frac{\partial \tilde{p}_y}{\partial p_y} & \frac{\partial \tilde{p}_y}{\partial r} \end{vmatrix} = \begin{cases} \frac{\partial \tilde{p}_x}{\partial p_x} = 1 & \stackrel{!}{=} -e \frac{\partial A_x}{\partial r} \\ \frac{\partial \tilde{p}_y}{\partial p_y} = 1 & \stackrel{!}{=} 0 \end{cases} = 1$$

($6 \times 6 - \infty$ matrix)
 $\det(-\infty) = 0$

↓

Klasszikusan $X_0 = 0$

b) Kvantumosztály:

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{(p_y - eBx)^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} \quad \psi(x,y,z) = e^{ik_y y + ik_z z} \cdot \varphi(x)$$

(szimmetria hatásra a Kvantum-Hall-effektushoz)

$$\frac{p_x^2}{2m} + \frac{(eB)^2}{2m} \left(x - \frac{t k_y}{eB} \right)^2 + \frac{k^2 k_z^2}{2m} \varphi(x) = E \varphi(x) \quad w = \frac{eB}{m} \quad (\leftarrow m\omega_w = eB)$$

Kvantumosztályok: k_z, k_y, n (lin. oscillator)

↓

$$E(k_z, k_y, n) = E(k_z, n) = \omega_w \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$x_0 = \frac{t k_y}{eB}$$

"oscillator egységei"
lökések

kizámlójuk a teljes energiat:

$$E = 2 \sum_{\substack{\uparrow k_y, k_z \\ \text{spin}}} (E(k_z, n) - E_F) = 2 \sum_{k_y, n} (E(k_z, n) - E_F) \sum_{k_z} 1$$

az energiat most

a Fermi-energiához

révess számoljuk

$$\sum_{k_z} 1 = \frac{L_x L_y eB}{2\pi \hbar}$$

(l. K.-Hall-eff.)

$$\sum_{k_z} (E(k_z, n) - E_F) = \frac{L_x}{2\pi} \int_{-k_1}^{+k_1} \left(\omega_w \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - E_F \right) dk_z = \textcircled{*}$$

$$E(k_z, n) < E_F$$

↓

$$\omega_w \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = E_F$$

addig kell integrálni, amíg be marad tölve
az alapotok → ez a Fermi-energia miatt neg

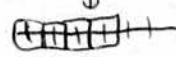
$$\textcircled{*} = \frac{L_x}{2\pi} \left[\left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \right) 2k_1 + \frac{\hbar^2 k_1^3}{3m} \right] = - \frac{L_x}{2\pi} \frac{2}{3} \frac{\hbar^2 k_1^2}{m}$$

$$E = -\frac{e^2 L_x L_y L_z}{(2\pi)^2} \cdot (eb) \frac{2}{3} \frac{\pi}{m} \sum_n k_1^3$$

erste orthogonale Integraleinheit

ausrechnen:

$$\sum_{n=n_1}^{n_2} f(n)$$



Taylor-Zer (2. endig)

$$\int f(x) dx = \sum_{n=n_1}^{n_2} \int_{n-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} f(x) dx = \sum_{n=n_1}^{n_2} \int_{n-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} (f(n) + f'(n) \cdot (x-n) +$$

$$+ \frac{f''(n)}{2} (x-n)^2) dx = \sum_{n=n_1}^{n_2} f(n) + \sum_{n=n_1}^{n_2} \frac{f''(n)}{2} \frac{(x-n)^3}{3} \Big|_{n-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} =$$

$$= \sum_{n=n_1}^{n_2} f(n) + \frac{1}{24} \sum_{n=n_1}^{n_2} f''(n)$$

$$\Rightarrow \sum_{n=n_1}^{n_2} f(n) = \int_{n_1-\frac{1}{2}}^{n_2+\frac{1}{2}} f(x) dx - \frac{1}{24} \sum_{n=n_1}^{n_2} f''(n) = \int_{n_1-\frac{1}{2}}^{n_2+\frac{1}{2}} f(x) dx - \frac{1}{24} \int_{n_1-\frac{1}{2}}^{n_2+\frac{1}{2}} f''(x) dx =$$

$$= \int_{n_1-\frac{1}{2}}^{n_2+\frac{1}{2}} f(x) dx - \frac{1}{24} [f'(n_2+\frac{1}{2}) - f'(n_1-\frac{1}{2})]$$

$$k_1 = \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E_F - \hbar \omega \left(n_2 + \frac{1}{2} \right)) \right]^{1/2} \quad (\text{L. 100. d.h. also})$$

$$n_1 = 0, \quad k_1 = 0 \text{ da } \hbar \omega \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) = E_F$$

$$\Rightarrow n_2 + \frac{1}{2} = \frac{E_F}{\hbar \omega}$$

↑
as oscillations energy maximum is at Fermi-en. adja

$$1) \text{ Vierter Tag: } \Sigma \rightarrow \int \Rightarrow E_0 = - \frac{2V}{15} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot E_F^{-5/2} \quad B=0 \text{ klassischer eset}$$

2) Perturbation B mittig:

$$f(x) = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \left(E_F - \hbar \omega \left(x + \frac{1}{2} \right) \right)^{-3/2} \quad f'(x) = - \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{3}{2} \left(E_F - \hbar \omega \left(x + \frac{1}{2} \right) \right)^{-\frac{5}{2}} \hbar \omega$$

$$\ell^1(n_2 + \frac{1}{2}) = 0 \quad \ell^1(n_1'' - \frac{1}{2}) = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \frac{3}{2} E_F^{1/2} \hbar \omega$$

$$E = E_0 - \frac{V}{8} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \hbar \omega \frac{1}{24} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \frac{3}{2} E_F^{1/2} \hbar \omega =$$

$$= E_0 - \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{1/2} \cdot \left(\frac{\hbar e}{m} B\right)^2 =$$

$$= E_0 - \frac{V}{r^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{1/2} \left(\frac{2\mu_B}{\hbar}\right)^2 B^2 \quad \frac{\hbar e}{2m} = \mu_B \text{ (Bohr-magneton)}$$

$$\mu = \frac{1}{V} \frac{\partial E}{\partial B} = - \frac{1}{24\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{1/2} \left(\frac{2\mu_B}{\hbar}\right)^2 \mu_0 H$$

$$\mu_B = \frac{\hbar e}{2m} \text{ effektiv}$$

$$\frac{\chi}{4} = \frac{\partial \mu}{\partial H} = - \frac{1}{24\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{1/2} \left(\frac{2\mu_B}{\hbar}\right)^2 \mu_0 = - \frac{N}{2V} \cdot \frac{\mu_0^2 \mu_s}{E_F}$$

↑ ^{"keingeschossen"}
↓ ^{mitte}

Coulomb-diam.

Fermi-energiat

Lehlyettertertive

$$\frac{\chi_{pp}}{\uparrow} = \frac{3}{2} \frac{N}{V} \frac{\mu_0^2 \mu_s}{E_F} \quad \leftarrow \text{ith} \quad \mu_0 = \frac{\hbar e}{2m} \text{ effektiv}$$

Pauli-param.

Hár azgyűjtemény "szemelők" a felsorolt mágneses tulajdonságokról a ferromágneses lemezekről. De χ_L -ben mérve effektív tömeg, ami különösen a elektron tömegével \Rightarrow lehet a diamagneses jelenségek a nagyobb.

Allvalós mágneses momentummal rendelkező anyagok

I) Ferromágnes

$$\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$$

(egy irányban állnak az atomi magn. momentumok)

II) Antiferromágnes

$$\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow$$

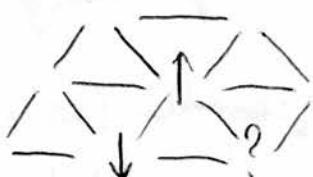
III) Ferrimágnes

$$\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow$$

- ferromágneses és antif.-es tul.

(2 félle magn. mom. van, melyek ellentétesen állnak)

IV) Spinnveg



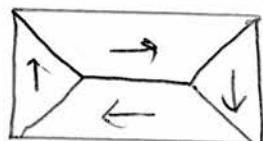
nem tudja, hogyan álljon,
mert a 2 szomszédja ellentétesen áll
= frustráció

I) Ferromágnes

lokálisan mindenben állnak a spinek,

de globálisan nem \rightarrow doménék

$$B = 0$$

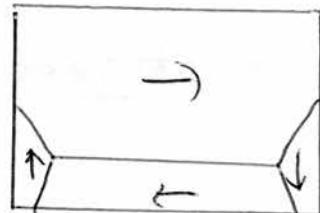


a doménék ugy állnak,
hogy a mágneses kör zároljának

$B \neq 0$

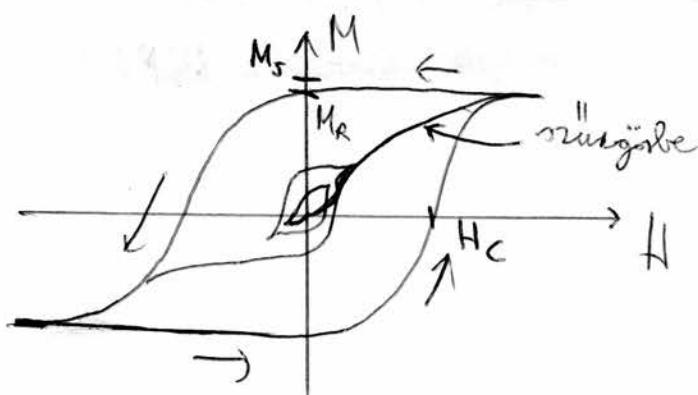
doménal mágnes

domén forgás



polikristályban a nemcsen belül is lehet több domén, eh
a nemcsék is el vonak fordulva egymáshoz képest

doménvisszakötés \Rightarrow Kisszterezi

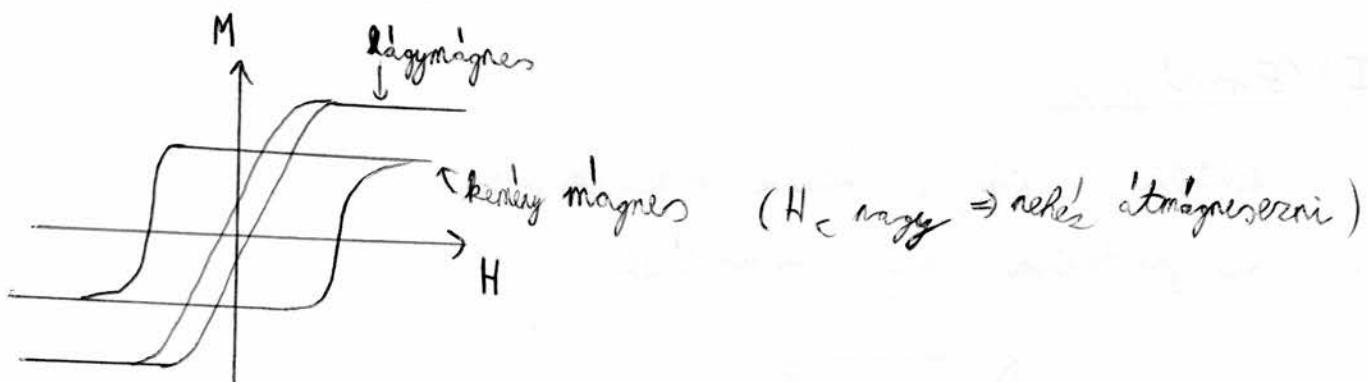


M_s : teljesítési (szaturációs)
mágneserettseg

M_R : maradék (ezmanens)
mágneserettseg

H_c : kericitter erő

(le is lehet mágnesni az anyagot
($H_R=0$ lesz), majd visszamágnesni
H-val (visszakötéssel))

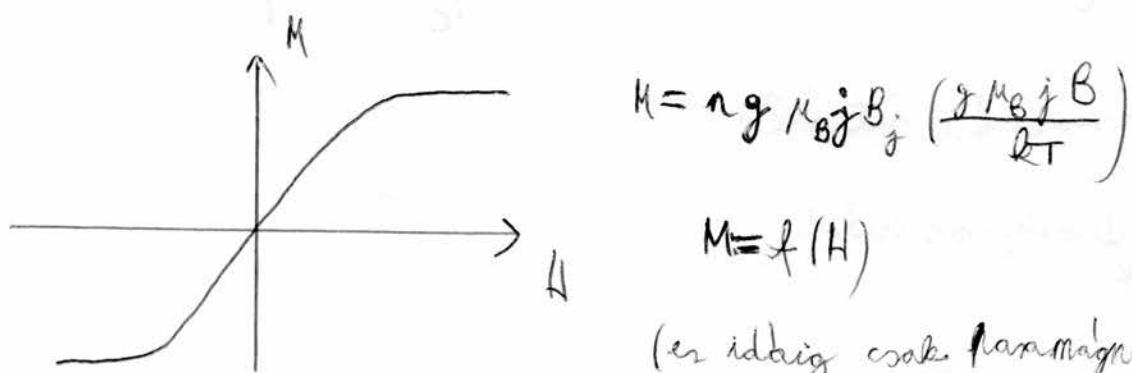


Mi is az alkotó részegység mágneses momentumja?

Báj: a mágneses momentum különbsége (dipol-dipol) teljesíthető, hogy a kölcsönhatás ellenében ferntartva legyen az ellaptható.

Magyarázat: (kisekkelőlesi kölcsönhatás (Pauli-elv)).

Egyenlőre ferromerologikus magyarázat



Teh. van ami belül H_c (molekuláris H_c)

$$M = f(H + \lambda M)$$

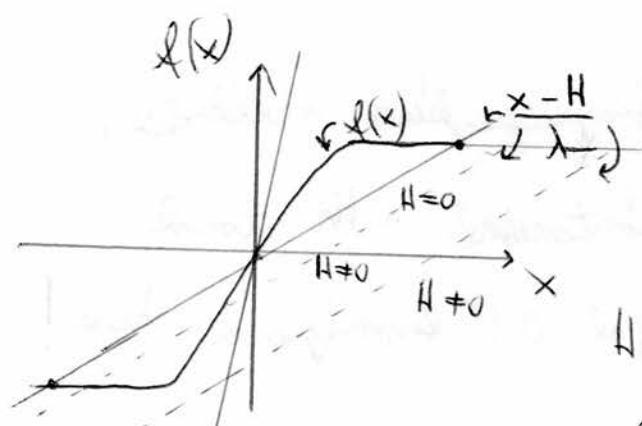
Weiss-tér

$f(x)$: jobb old.

$$x = H + \lambda M$$

$$M = \frac{x - H}{\lambda}$$

bal oldal



H -val tologatjuk a ferde egyenest

\Rightarrow különös M megalkotását mutatunk ki $f(x)$ -ból

$$M = X (H + \lambda M)$$

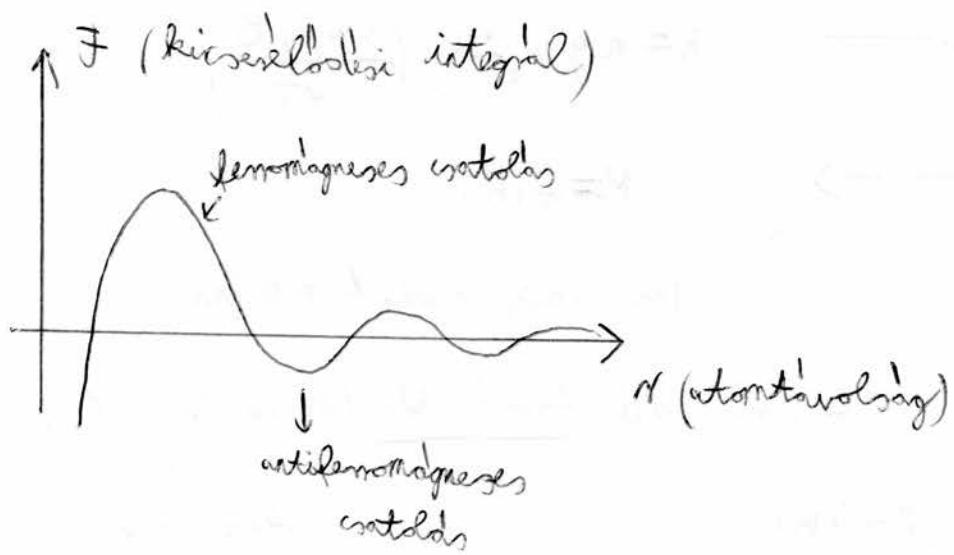
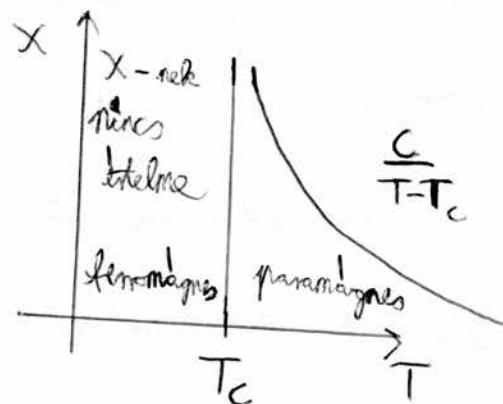
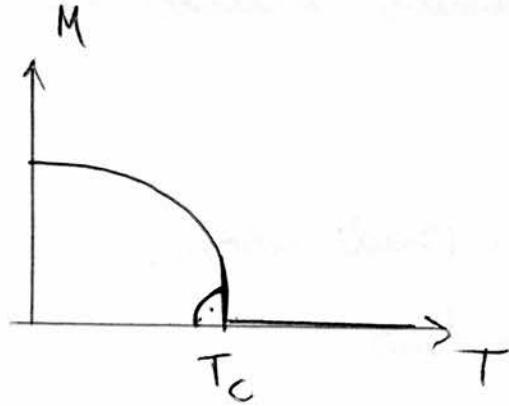
$$M = \frac{X}{1-\lambda} H$$

$$X = \frac{C}{T}$$

$$M = \frac{C}{T-C\lambda} H$$

$$\Rightarrow x = \frac{C}{T-T_c} \text{ ahol } T_c = C/\lambda \rightarrow \text{ez csak } T_c \text{ felélt érvényes!}$$

↑
Curie - Weiss - tw.
+ Curie



érdekeség: Mn-típusban antiferromagnézis viselkedik, de ha minden szennyezőatommal a Mn atomok távolságát megnöveljük (pl. O) ferromagnézis lesz!

Kleinberg - Hamilton - operator

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \underline{S}_i \cdot \underline{S}_j$$

↑
kisebbesi integral (együttelő)

Leggyakoribb modell az Ising - modell: $s_i = \pm 1$

$$H = - J \sum_{(i,j)} s_i s_j \quad \rightarrow J_{ij} \text{ ugyan, mivel elso normálék
vanak}$$

elso normálék

ha $J > 0$, akkor ferromágnes, ha $J < 0$, akkor paramágnes \rightarrow kisebbesi integral

- 1D $T_{\text{canc}} = 0$, tehát nincs ferromágnes megoldása, csak paramágnes
- 2D Ország megoldotta
- 3D Numerikus megoldás

Spin hullámok = magnon - sk

$$H = - J \sum_{ij} \underline{S}_i \cdot \underline{S}_j = - J \sum_{(i,j)\beta} S_{i\beta} S_{j\beta}$$

operatorok

időfüggő Kleinberg - képeken: $iH \frac{\partial A}{\partial t} = [A, H]$
(operator függ az időtől)

$$(S_{n\alpha}, S_{m\beta}) = i\hbar \sum_r S_{nr} \sum_\gamma \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{r\gamma}$$

az atomokat körben.
az imp. műn. / spin
3. komponensekkel adják
az atomokat körben.
atomok, komponensek

$$ik \cdot \frac{\partial S_{n\alpha}}{\partial t} = [S_{n\alpha}, H]$$

j.o.: $\sim H$

$$(S_{n\alpha}, S_{i\beta}, S_{j\beta}) = (S_{n\alpha}, S_{i\beta}). S_{j\beta} + \text{nn.} \quad (A, BC) = (A, B)C + B[A, C]$$

$$+ S_{i\beta} [S_{n\alpha}, S_{j\beta}] = ik S_{ni} \sum_r \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{nr} S_{j\beta} +$$

$$+ ik S_{nj} \sum_r \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{i\beta} S_{nr}$$

!! $\sum_{(j)} \rightarrow$ elvezetők

$$\frac{\partial S_{n\alpha}}{\partial t} = -f \sum_{\beta} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sum_{(j)} [S_{nj} S_{j\beta} + S_{j\beta} S_{nj}]$$

$$\frac{\partial \underline{S}_n}{\partial t} = -f \sum_{(j)} (\underline{S}_j \times \underline{S}_n - \underline{S}_n \times \underline{S}_j)$$

Töltetellesükk, hogy OK-sen ∇ spin 1 irányba 'll (ferromagneses anyag), és ha melegítjük, egy kis periodikus lesz a rendszernben, ami hullám formájában jelenik meg:

operator (hiesel)

$$\underline{S}_n = \underline{S}_0 + \Delta \underline{S}_n$$

$$\underline{S}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

első rendig:

$$\frac{\partial \Delta \underline{S}_n}{\partial t} = -f \sum_{(j)} (\underline{S}_0 \times \Delta \underline{S}_j + \Delta \underline{S}_n \times \underline{S}_0 - \underline{S}_0 \times \Delta \underline{S}_n - \Delta \underline{S}_j \times \underline{S}_0) \quad \text{is többerelektör } 0 \quad (T=0 \text{ homokl. leleten} \sim \text{spinop.})$$

$$-\underline{S}_0 \times \Delta \underline{S}_n - \Delta \underline{S}_j \times \underline{S}_0 = 2f \sum_{(j)} (\underline{S}_0 \times \Delta \underline{S}_j - \underline{S}_0 \times \Delta \underline{S}_n)$$

$$\frac{d \Delta S_n}{dt} = 2 \int \sum_{(j)} S_0 \times (\Delta S_j - \Delta S_n)$$

now:

$$\Delta S_n = \Delta S \cdot e^{ik \underline{R}_n} \quad \leftarrow \text{Bloch-Titel mitte}$$

(ellipsoid symm.)

II
(symmetrische $e^{ik \underline{R}_n}$ -el)

else normalized vector

$$\frac{d \Delta S}{dt} = 2 \int \sum_{(j)} S_0 \times (e^{ik(\underline{R}_j - \underline{R}_n)} - 1) \Delta S$$

$$\square := -\frac{w(k)}{S_0}$$

$$\frac{d \Delta S_x}{dt} = w(k) \cdot \Delta S_y$$

$$\frac{d \Delta S_y}{dt} = -w(k) \Delta S_x$$

} körniges eigenstate

II

$$\frac{d \Delta S_z}{dt} = 0, \Delta S_z = 0$$

spin precessional \Rightarrow tangency

körnig



$$w(k) = 2 \int S_0 \sum_a (1 - e^{ika})$$

his $k = n$

$$\left. \begin{array}{l} \sum_{(j)} \underline{R}_j - \underline{R}_n = \underline{a} \\ \text{else normalized} \end{array} \right\} \text{pl. fcc-iel} \quad 12 \text{ ilgen } \leq \text{van}$$

$$\underline{\underline{w(k)}} = 2 \int S_0 \sum_a \left[1 - \left(1 + ika - \frac{(ka)^2}{2} \right) \right] = \int S_0 \sum_a \left(\frac{ka}{2} \right)^2 \propto k^2$$

$$\Rightarrow w(k) \propto k^2, \text{ bozon (harmonic oscillator is fotondar)}$$

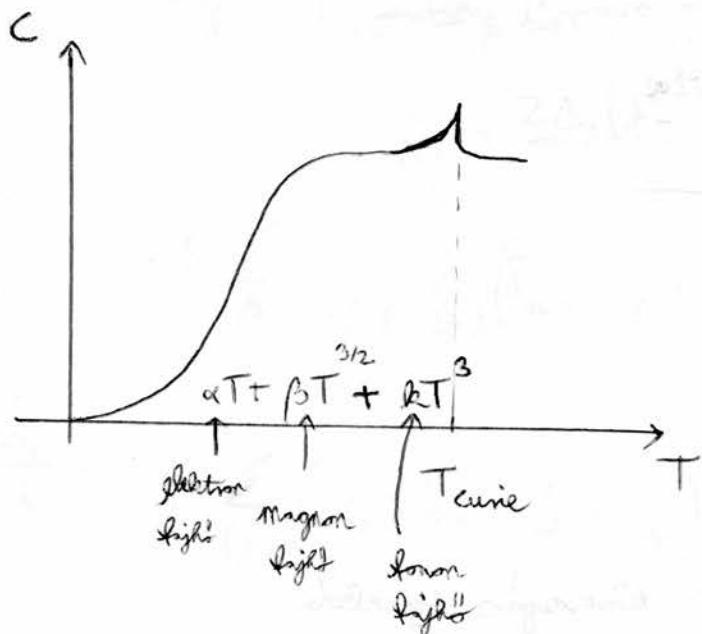
Magnonfysikk

$$E = \sum_k \frac{\alpha k^2}{e^{\frac{\alpha k^2}{k_B T}} - 1} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{4\pi k^2 dk}{e^{\frac{\alpha k^2}{k_B T}} - 1} \propto +^{5/2}$$

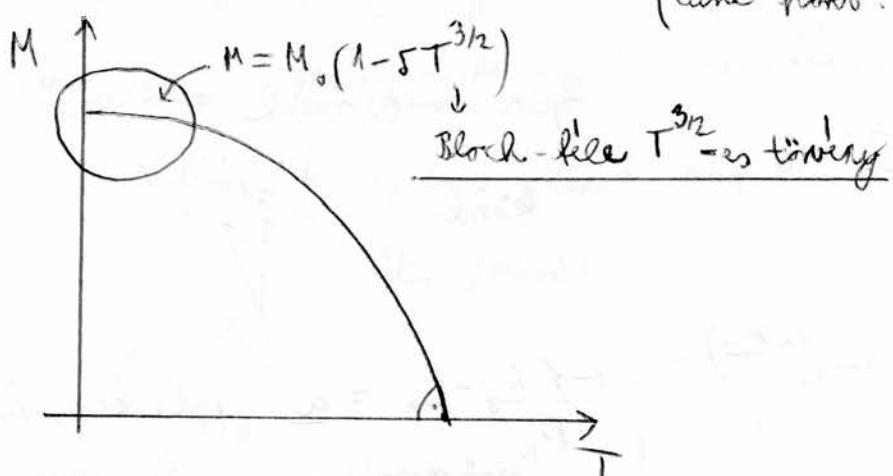
$x = \sqrt{\frac{\alpha k^2}{k_B T}} = \sqrt{\frac{\alpha}{k_B T}} k$

Bose-Einstein-ekspansjon

$$C = \frac{dE}{dT} \propto +^{3/2}$$



(Curie-punkt: mørkende fargestabilitet)



Antiferromagnetikk

itt: magnon-dispersjon $w = \alpha(k)$

$$M_1 = \ell(H + \lambda M_1)$$

a lekke magnetsettning ved aksejon for liten antiparallell magnetisering

$$M_{\downarrow} = -H + \lambda M_{\uparrow}$$

$$M_{\uparrow} = H + \lambda X M_{\downarrow}$$

$$M_{\downarrow} = -X H + \lambda X M_{\uparrow}$$

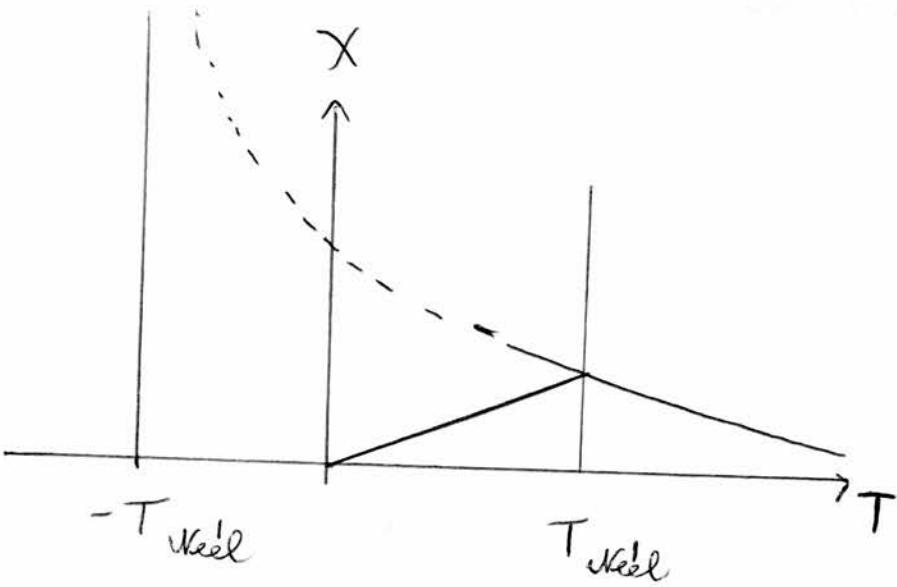
$$\begin{pmatrix} 1 & -\lambda X \\ -\lambda X & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{\uparrow} \\ M_{\downarrow} \end{pmatrix} = X H \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} M_{\uparrow} \\ M_{\downarrow} \end{pmatrix} = \frac{1}{1-(\lambda X)^2} \begin{pmatrix} 1 & \lambda X \\ \lambda X & 1 \end{pmatrix} X H \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{X H}{1-(\lambda X)^2} \cdot \begin{pmatrix} 1-\lambda X \\ \lambda X-1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow M_{\uparrow} - M_{\downarrow} = \frac{2X H (1-\lambda X)}{1-(\lambda X)^2} = \frac{2X}{1+\lambda X} \cdot H = \frac{2c}{T+T_{Kee}} \cdot H$$

$$\Rightarrow X_{\text{anti}} = \frac{2c}{T+T_{\text{Kee}}}$$

$$X = \frac{c}{T} \quad \text{Curie-tr. nach}$$

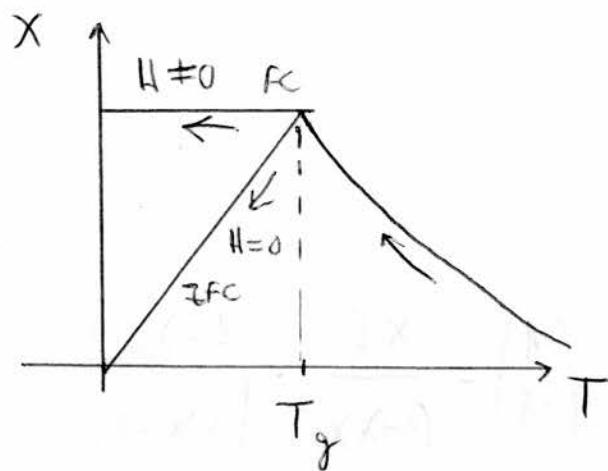


Spinüvegek

Ferromagnetikus polimerek

1) T_g felett paramagnes

2) T_g alatt spinüveg



ZFC: zero-field cooling $\Rightarrow H=0$ -val hűtjük \rightarrow összegző
állapot a spinek

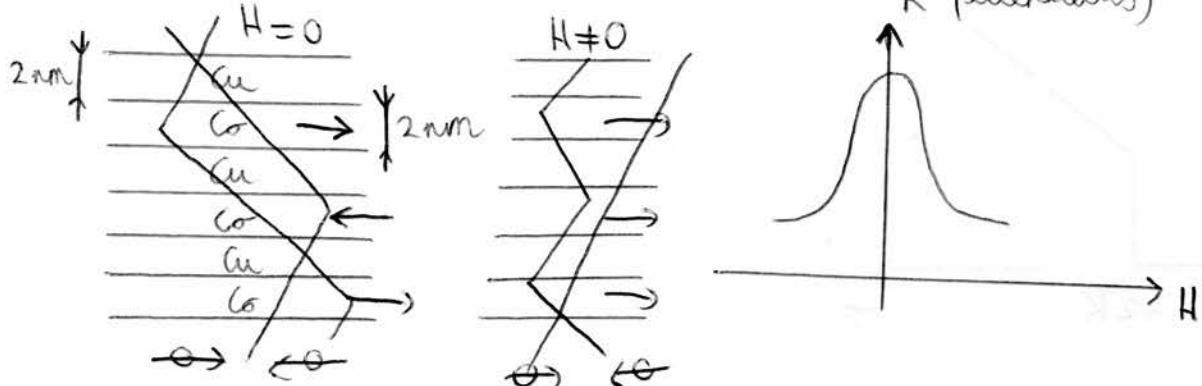
FC: field cooling

spinüveg pl.: Cu + 1-2% Mn

Au + 1-2% Mn

Óriás mágneses ellenállás (Giant magnetic resistance, GMR, spin rezepció)

Multiláncos (akár több mint négy) réteg



Co : ferromágneses \rightarrow a török bekapcsolásával megnő a mágneserettetésgyöktér,

de $H=0$ -nál a működési hőmérséklettel ellentétesen a részterheléssel.

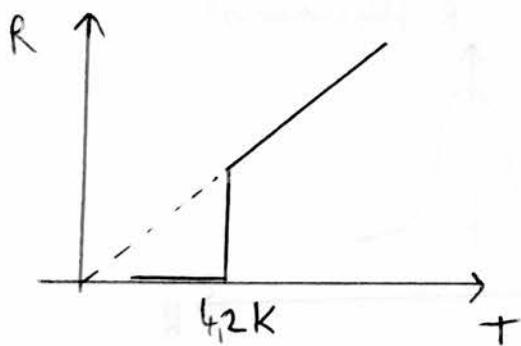
- \rightarrow a különböző spinű elektronok különböző irányú törek
szövöknek! \rightarrow $H \neq 0$ -nál csak az elektronok felső szövökhez =
 \Rightarrow megnő a vezetőképesség
- a mágneses díszszövegek már ilyen technológiával működnék

Bernard Fert
Peter Grünberg } Nobel-díj (2007)

Superconductors

1908 Kammerling Onnes: ceppfolyás He 4,22 K

1911 Hg-t lehűtőtől



Kerámia: $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ $T_c = 90\text{ K}$

Georg Bednorz } Nobel-díj
Alex Müller } 1987 30 K

$R=0$ földszekrényszerűen

$$niw = \gamma E \quad j = \gamma niw$$

$$\frac{m}{\gamma n} \cdot \frac{dj}{dt} = \gamma E$$

$$\frac{dj}{dt} = \frac{\gamma^2 n}{m} E = \frac{1}{\mu \cdot \lambda^2} E$$

$\mu \approx \mu_0$ lesz

$$\text{rot } \underline{H} = \underline{j} \quad \frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} \text{rot } \underline{B} = \frac{dj}{dt} \quad \text{rot } \underline{B} = \frac{1}{\lambda^2} \underline{E}$$

$$\frac{d}{dt} \underbrace{\text{rot rot } \underline{B}}_{=0} = \frac{1}{\lambda^2} \underbrace{\text{rot } \underline{E}}$$

$$\text{grad div } \underline{B} - \Delta \underline{B} = -\frac{\partial \underline{B}}{\partial t}$$

$$\frac{\partial}{\partial \underline{B}} \left(\Delta \underline{B} - \frac{1}{\lambda^2} \underline{B} \right) = 0$$

$$\Delta \underline{B} - \frac{1}{\lambda^2} \underline{B} = \text{állandó} = 0 \quad \text{London - egyenlet}$$

\uparrow
 ez nem trivialis,
 de igaz lehet csak

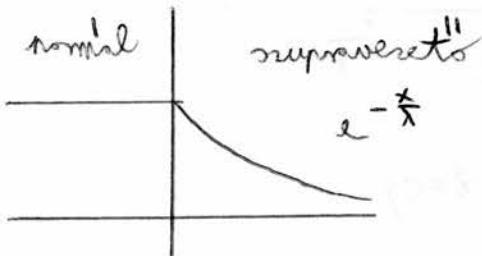
bizonyos dolgokat megmagyarázni



Kivonásra! gondolkozva: tth. $\Delta \underline{B} - \frac{1}{\lambda^2} \underline{B} = 0$

$$\frac{d^2 \underline{B}}{dx^2} = \frac{1}{\lambda^2} \underline{B} \quad \underline{B} = B_1 e^{-\frac{x}{\lambda}} + B_2 e^{\frac{x}{\lambda}}$$

(10 - len)



Meissner - Ochsenfeld - effektus

$\hat{f} = -\frac{1}{\lambda^2} \underline{A}$

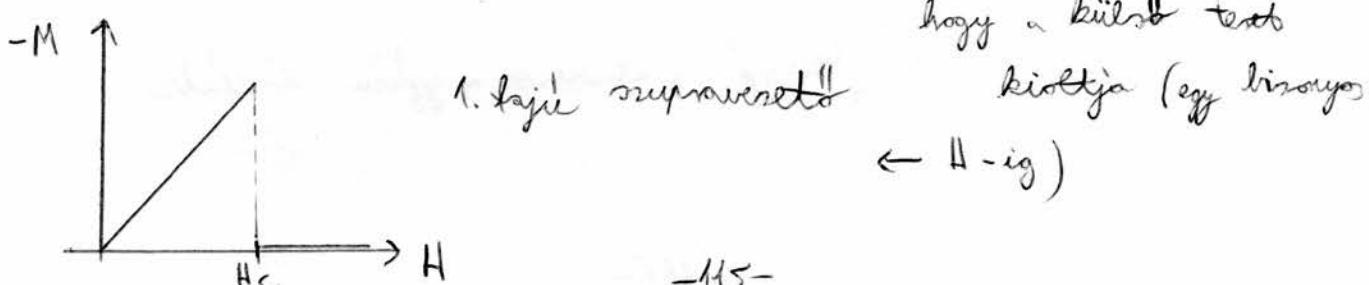
ellett minden kijön $\hat{f} \sim \underline{A}$

$$\nabla \cdot (\mu_0 \hat{f}) = -\frac{1}{\lambda^2} \underline{B} \Rightarrow \nabla \cdot \underline{B} = -\frac{1}{\lambda^2} \underline{B}$$

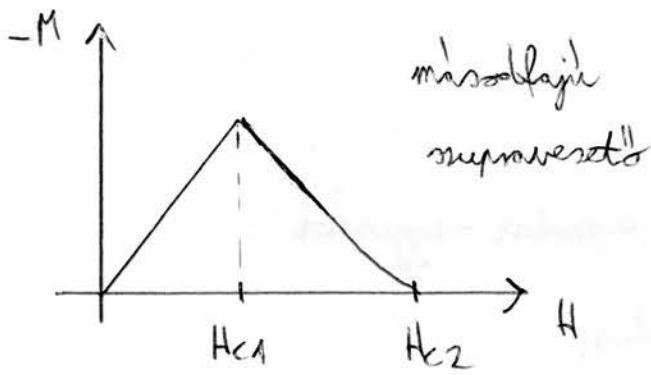
$$X = -1$$

$$\underline{B} = \mu_0 (1+X) \underline{H} = 0$$

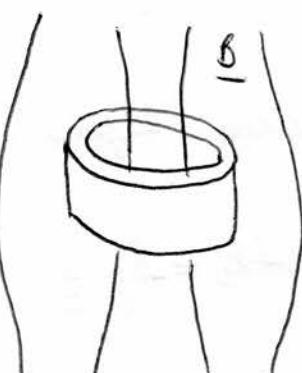
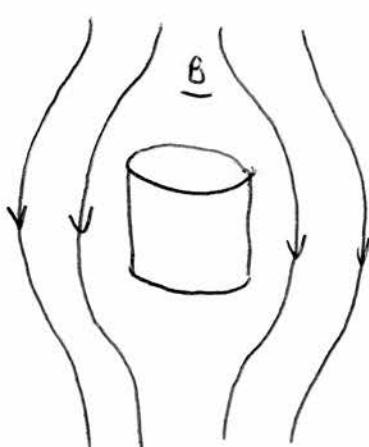
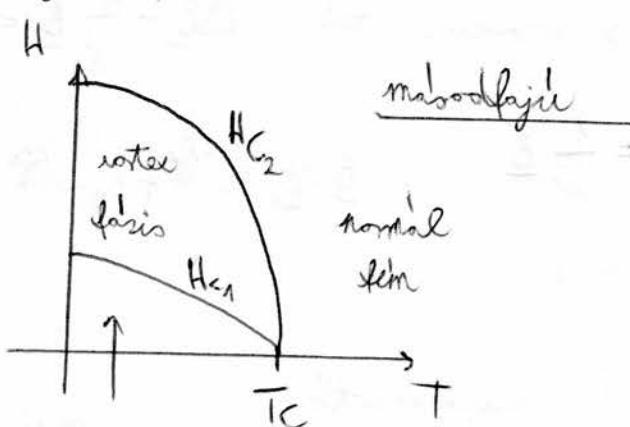
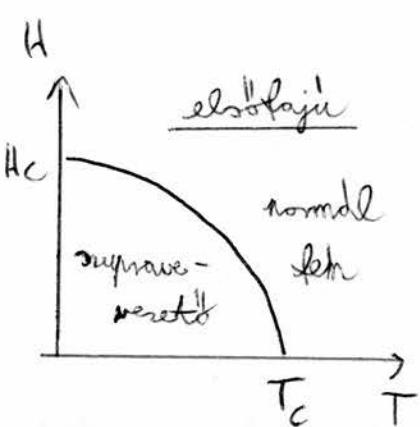
$$\underline{B} = \mu_0 (H+M) \Rightarrow M = -H \quad \text{a mágneszettség mindig abbora, hogy a külső teret}$$



kioltja (egy bizonyos $\leftarrow H$ -ig)



\uparrow az ~magnes terbenyek az anyagba
 "vortexek" alakulnak ki az anyagban (magnes övények), de elinte
 csak kis mértékben felfoghatók) $\rightarrow H_{c1}$ után viszont "elszaporodnak"



tömör anyag \leftrightarrow gyűrű supra-verető falban
 (T alattan)

"befagy" a fluxus a gyűrű közepébe

Fluxus kvantálás

\Rightarrow amikor belül nincs áram

$$\oint \underline{A} d\underline{r} = n \cdot h$$

$$\underline{A} = \underline{m}\underline{v} + q\underline{A}$$

$$q \oint \underline{A} d\underline{r} = nh$$

$$\int \underline{m} \cdot \underline{A} d\underline{l} = \underbrace{\int \underline{B} d\underline{l}}_{\text{fluxus}} = nh$$

fluxuskvantum (mérhető)

$$\phi_n = \frac{nh}{2e} \rightarrow q = 2e \rightarrow \text{nem } e^- \text{-ek}, \text{ hanem}$$

elektronpárok vezetnek

"

\Rightarrow Elektronok Cooper-párokat alkotnak.

Magas hőmérsékletű supervezetők MINDIG másodfajú supervezetők.

Tető - effektus

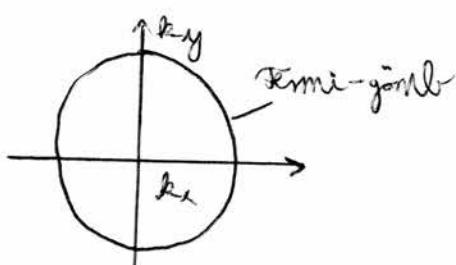
$$T_c \propto \frac{1}{\sqrt{M'}} \quad \rightarrow \text{valami köze lát a hőmérsékletek és a supervezetéshez}$$

\uparrow
az atomok tömege

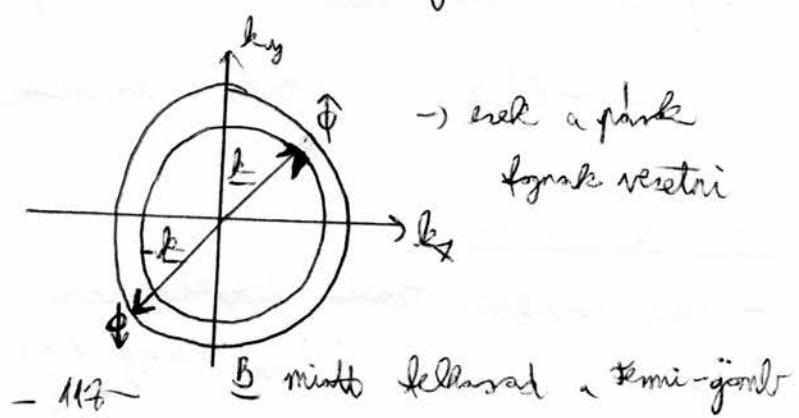
BSC modell (1957) Bardeen - Cooper - Schiffer (1972: Kábel - olj)

e^- - ionon kív. nn - vezetéssel, ami alacsony hőmérsékleten

lényeges

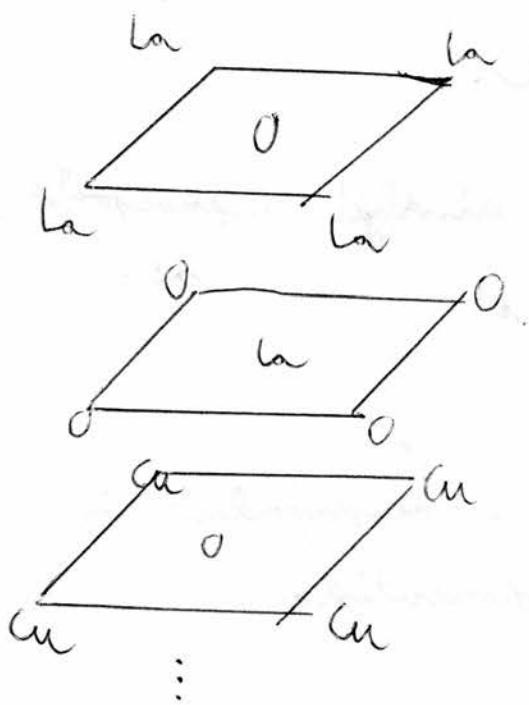
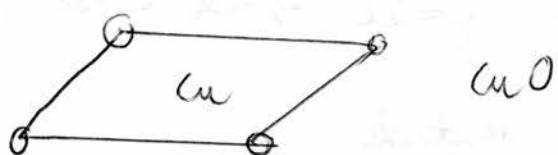


B -tér



Ebből kijön, hogy $\frac{1}{f} \sim \frac{1}{T} \Rightarrow$ London-egyenlet

$\text{La}_{2-x} \text{Sr}_x \text{CuO}_4$: másfajta supervezető, miből arról a BSC
elmélet leír



1) O atom p elektronjai vezetnek ($\text{BCS} \rightarrow$ elektronok)

2) Cu^{2+} spinjeinek antiferromágneses magnonjai adják a
vezetést ($\text{BCS} \rightarrow$ fotonok)

Teltháromlások

- nagy mágneses terék létrehozása
- mágneses terék mérete