

## **Kondenzált anyagok fizikája tételek**

### **1. Kristályos anyagok**

Kristálytan fogalmai: Rácsvektor, transzlációs vektorok, pontrács, elemi cella, Wigner-Seitz-cellák,. Szimmetriák: transzláció, forgatás, inverzió, inverziós tengely, csúszósík. Térkör, pontcsoport, reciprok rács és fogalmai

### **2. Fontosabb kristályszerkezetek**

Egyszerű köbös, lapcentrált köbös, tércentrált köbös szerkezetek. Gyémánt rács, NaCl szerkezet és hexagonális szoros rács.

### **3. Kristályhibák és nemkristályos szerkezetek**

Vakancia, intersticionális atom, szennyezők, diszlokációk, felületi és térfogati hibák, polikristály. Amorf anyagok és folyadékok szerkezete, kvázkristályok és folyadékkristályok

### **4. Szerkezetvizsgálat**

Röntgen, elektron és neutron. Források és detektorok. Szórás kinetikus elmélete, Ewald-gömb. Kristályos és amorf anyag szórása, Rácssíkok és Bragg-feltétel

### **5. Kondenzált anyagok kötése**

Kovalens, ionos és fémes kötés. ?tmeneti fémek kötése. Atomos és molekuláris kötések. Kohézió és adhézió. Atomok közti potenciál

### **6. Rácsrezgések**

Rácsrezgések kristályos és nemkristályos anyagokban. Lokalizált és delokalizált módus. Periodikus anyag rezgései. Egyatomos, kétatomos lineáris lánc. Módussűrűség. Fononok, mint kvázirészecskék.

### **7. Rácsrezgések termikus hatásai**

Rácsrezgések energiája, Debye-fajhő. Kristályos és amorf anyag hőtáplálása, Hővezetés, fonon-fonon kölcsönhatás, direkt és umklapp folyamatok. Diszperziós reláció kimérése, folyadékok dinamikája, Raman szórás

### **8. Elektronszerkezet**

Adiabatikus szétcsatolás, Bloch-tétel, Bloch- és Wannier-függvények

### **9. Kristályos anyag elektronszerkezete**

Kvázi szabad elektronok, kéthullám-közeliítés. Szorosan kötött elektron közelítés. Periódusos rendszer. Nemperiódikus szerkezet, lokalizált és delokalizált elektronok

### **10. Fémek**

?llapotsűrűség, Fermi-nívó, Fermi-felületek. Csoportsebesség, elektronok mozgássebessége, Bethe-Sommerfeld-sorfejtés, elektronfajhő, Pauli-szuszceptibilitás, Transzport tulajdonságok, vezetés, hővezetés, Seebeck és Peltier-effektus. Hall effektus, ciklotron-rezonancia.

### **11. Félvezetők**

Szennyezetlen félvezetők. Elektronok és lyukak, kémiai potenciál. Adalékoltt félvezetők, p-n átmenet, dióda

### **12. Mágneses tulajdonságok**

Atom paramágnesség, Curie-törvény. Atom diamágnesség, Pauli szuszceptibilitás, Landau-diamágnesség,

### **13. Állandó mágneses momentummal rendelkező anyagok:**

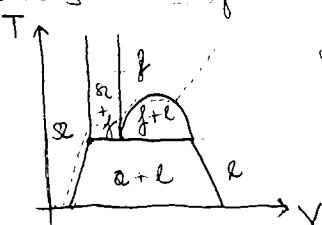
Ferromágnesek, antiferromágnesek, ferrimágnesek, spinüveg. Ferromágneses domének, hiszterézis, Belső tér közeliítés. Curie-Weiss-törvény. Spinhullámok. Antiferromágnesség. Mágneses ellenállás

Kondenzált anyag: szilárd és folyadék halmozállapotú anyagok, nagy sürűségi  
vt szilárd anyagok legtöbbje kristályos, vannak folyadék-kristályok is.

Amorf — kristályos  $\rightarrow$  van átmenet

$\hookrightarrow$  ávegek (sok minden hivatkozó, amibe összefűzve  
vannak a dolgozók)

Fázis diagram:



a folyadék napjain kis helyet foglal el  
a legneműt jól ismerjük:

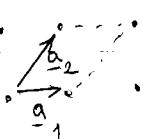
$$pV = nRT \quad \text{ideális gáz}$$

$$U = nC_V T \quad \text{univerzális tel.-el}$$

Kristályos + szilárd anyag: van benne hosszútávú rend  
atomot köntökben

Kristályos anyagok:

$F \quad F \quad F \quad F$       rácsvetktorok / transzlációs vektorok:  
 $F \quad F \quad F \quad F$       amik mentén eltolva néha  
 $F \rightarrow F \quad F \quad F$       változik az elrendezés  $F \rightarrow F$   
 $\dots \quad \dots \quad \dots$       pontrács:



$\hookrightarrow$  vannak benne elemi transzlációs vektorok, amiknek <sup>egész részét</sup> linearis

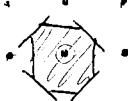
$R_{n_1 n_2 n_3} = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3$  kombinációjából az összes többi eldállítható (valasztjuk)

$\hookrightarrow$  elemi cella:  $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$  által meghatározott parallelepipedon (nem egységteljes)

$\hookrightarrow$  elemi rácsvetktor + bázis ( $F$ ) = rács

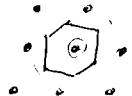
Wigner - Seitz cella:

$\hookrightarrow$  a somrendszerhez hozott  $\cdot \cdot \cdot \cdot \cdot$  felérő merőlegesekből



↳ micsponthoz tartozik

↳ azon pontok halmozára, melyek tözelebb vannak  
egy adott micsponthoz, mint bármely micsponthoz



↳ határa: tét micsponthoz egyenlő távolságú van

$$r_{R_n} = \frac{1 R_n}{2}$$

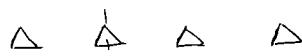
### Szimmetriák

A A, A' tükrözés



trigör → háromsz.

A, A', A



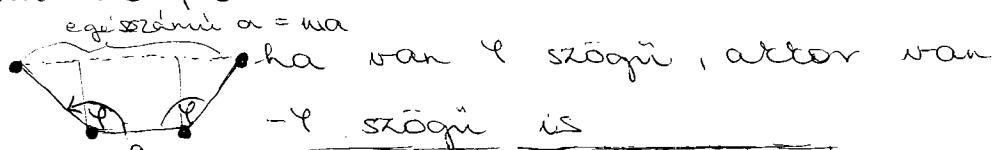
forgata's

A', A A



1) transláció: minden rácsmat van

2) forgata's: van 2es, 3as stb.



$$m\varphi = \varphi + 2\varphi \sin(\varphi - \frac{\pi}{2})$$

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

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

m	-1	0	1	2	3
$\varphi$	$0/2\pi$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{2\pi}{3}$	$\pi$
n	1	6	4	3	2

→ exet

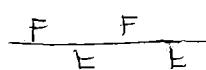
a forgata'sek leterzeti kristályos anyagban

3) inverzió:  $r \rightarrow -r$   $\bar{x}$

összetett szimmetriaműveletek

4) inverziós tengely: pl.:  $\bar{x} = m$  sítra való tükrözés

5) csíkosít



felülvonalsgájú eltolás + tükrözés

Csoporthoz állított a szimmetriaműveletet egy-egy rácsmátrix → exet 1) - 5) lehethet a generátorai

230 tércsoport van, ha minden összefüggő

Pontcsoport: egy pontra vonatkozó szimmetriák

32. fajta csoport van ebbel.

## KONDENZA LT

Van még hét kristályszíntű és 14 Bravais <sup>racs</sup>

→ ha csat az elemi cella szimmetriáit nézzük attor 14 félét van

→ makroszöpítusan + félét színtű van Pontraics... — reciprokraics...

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

$$\underline{G}_h = \underline{G}_{h_1 h_2 h_3} = h_1 \underline{b}_1 + h_2 \underline{b}_2 + h_3 \underline{b}_3$$

Def.:  $\frac{\underline{a}_i \cdot \underline{b}_j}{\underline{a}_i \cdot \underline{b}_j} = 2\pi \delta_{ij}$  biortogonalis rendszerrel alkotott

$$\underline{b}_1 = 2\pi \frac{\underline{a}_2 \times \underline{a}_3}{\underline{a}_1 (\underline{a}_2 \times \underline{a}_3)} \quad \underline{a}_1 = 2\pi \frac{\underline{b}_2 \times \underline{b}_3}{\underline{b}_1 (\underline{b}_2 \times \underline{b}_3)} \rightarrow V_{RC} = V_{BZ}$$

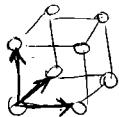
$V_C = V_{WS}$  elemi cella térfogata

$$V_C \cdot V_{RC} = (2\pi)^3 \quad \underline{R}_n \underline{G}_h = 2\pi \text{ egyszerűm} = 2\pi (n_1 h_1 + n_2 h_2 + n_3 h_3)$$

a reciprokraics Wigner - Seitz cellája = Brillouin zóna?

Egyszerűbb (fontosabb) kristályszíntereket:

1)



$\underline{a}_1 = a(1,0,0)$  elemi cella = kocka

$\underline{a}_2 = a(0,1,0)$  WS cella = kocka

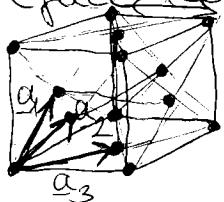
egyszerű kőbös

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

pl: polónium (cázium - flórid)

2) lapcentralt kőbös: pl: réz, alumínium, arany, platina, nikkel stb.

fcc (face centered cubic)



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

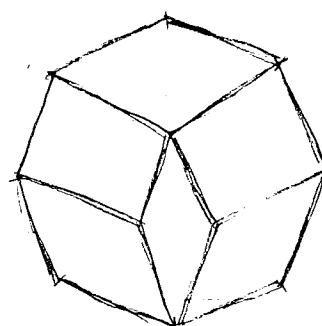
$$\underline{a}_2 = \frac{a}{2}(1,0,1)$$

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

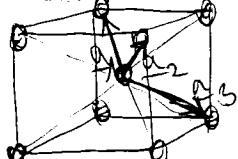
$$V_C = \frac{a^3}{4}$$

WS cella rombododekaéder →

reciprokraics: tércentralt kőbös



3) tércentralt kőbös = bcc (body centered cubic)



pl: vas, wolfram, molibden stb.

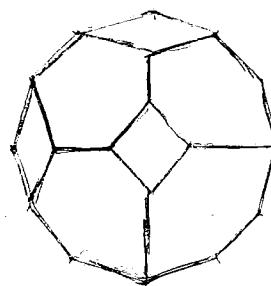
$$\underline{a}_1 = \frac{\alpha}{2} (-1, 1, 1) \quad V_c = \frac{\alpha^3}{2}$$

$$\underline{a}_2 = \frac{\alpha}{2} (1, -1, 1)$$

$$\underline{a}_3 = \frac{\alpha}{2} (1, 1, -1)$$

WS-cell

reciprokals fcc



4) gyémántstruktsz: szén, szilícium, germánium

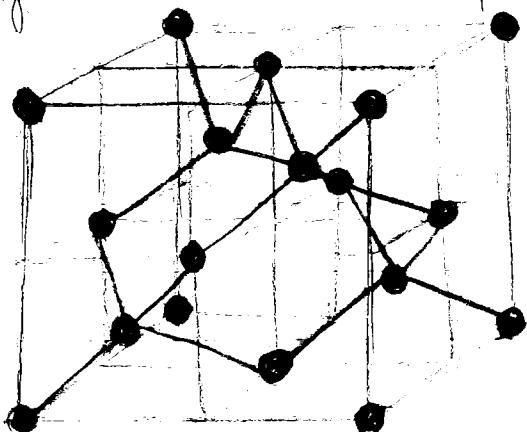
mindnet 4 monoszélja van

fcc pontszík

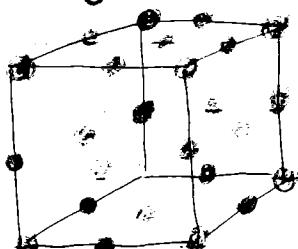
bázis  $C(0,0,0)$

$C_4^0(1,1,1)$

WS cella olyan mint fcc-nel



5) R. NaCl

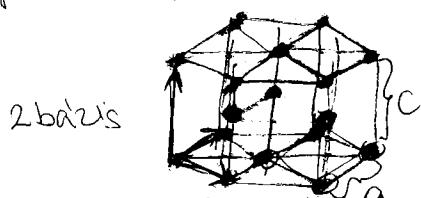


fcc

bázis  $Na(0,0,0)$

$Cl(\frac{\alpha}{2}, 0, 0)$

6) hexagonalis soros illésekben: bcp (hexagonal closed packed) szabályos tetraéderek, ha



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

berillium, kobalt, tafnium, magnézium, cink, cirkonium, titán

(pm) a	Be	Co	Hg	Mg	Ti	Zn	Zr
(pm) c	229	250	326	321	295	266	323
%a	358	407	505	521	469	495	515

Mi a különbség fcc és hcp törmel?



A réteg

B réteg

C réteg

mindig másik a monoszél

ABABABAB hcp

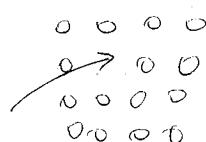
ABCABCAB fcc

egykristály, polikristály  $\rightarrow$  szemcsékKristályhibák:

mindig vannak a kristályban hibák

## ① Ponthibák

-vakancia: hiányzik egy atom  
természetű hiba

vakanciai részma:  $n$ 

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_n \binom{N}{n} n \cdot e^{-\frac{n E_{vac}^F}{kT}}}{\sum_n \binom{N}{n} e^{-\frac{n E_{vac}^F}{kT}}}$$

 $E_{vac}^F$  = elektron energia

$$-\frac{E_{vac}^F}{kT} = :x$$

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

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

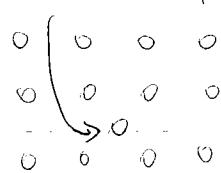
$$= N e^{-\frac{E_{vac}^F}{kT}}$$

• nagyon kicsi  
(kevés van)

nagyon nagy.

$$E_{vac}^F \approx (0,8 - 1) \text{ eV} \quad kT_{\text{min}} = 25 \text{ meV}$$

- interstitialis / rácsköri atom: extra atom a  
rácsban, természetű



$$E_{int}^F = (2-4) \text{ eV} \rightarrow \text{kevés ilyen hiba}$$

elektrozit (nem egysensúlyú folyamá-  
torban teleterhet)

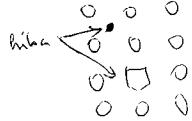
- szennyezők (adaltatott atomok)

$\hookrightarrow$  substituciós szennyezők  $\rightarrow$  cseréje atom helyén  
maisfajta pl: Au - Cu, Ag, Pt

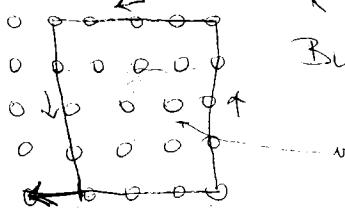
Si - Al, Ge, In, P, Ar

$\hookrightarrow$  interstitialis pl: metal - H, O, C, N  
Fe - C (acél)

↳ nagyon erősen befolyásolja az anyag tulajdonságait pl. rozsdamentes acél, savállás acél



## (2) Vonalhibák (dislokációk)



↳ Burgers vektor  $\underline{b}$



B-vektor meghatároása

$\underline{b}$  mindenkor ugyanaz elágazik a dislokációból

$$\underline{b} = \underline{b}_1 + \underline{b}_2 + \underline{b}_3$$

a vonalhibát jellemzi a Burgers-vektor és a dislokáció vonala → hurok

az anyag két vége közötti

dislokáció continuumelmélete

Taylor

'34-'35 körül

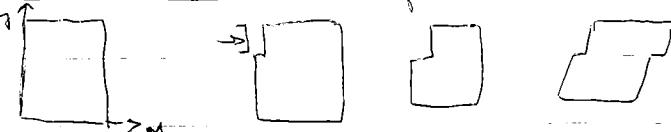
Orovai, Polanyi

egy modellt már 1890 körül Edoardo Volterra

el-dislokáció  $\underline{b} \perp \underline{l}$

csavar-dislokáció  $\underline{b} \parallel \underline{l}$

dislokáció és deformáció:



deformáció  $\epsilon_{xy} = \gamma = \frac{b}{L_y} \frac{x}{L_x}$

1 dislokáció  $\Delta\gamma = \frac{b\Delta x}{L_x L_y}$   $\Delta x$  elmozdulás esetén

több dislokáció

$$\Delta\gamma = \frac{1}{L_x L_y} \sum b_i \Delta x_i = \frac{N}{L_x L_y} \cdot b \overline{\Delta x}$$

dislokáció-sűrűség  $\rho = \frac{N}{L_x L_y} = \frac{N h z}{L_x L_y L_c}$   $\leftarrow$  dislokáció hossza területen

$$\Delta Y = b f \overline{\Delta x} \quad \text{Orován összefüggés}$$

melegítés hatására a dislokációk elszíntelenítésekkel helyítgatásra a drótból a dislokációk elkezdenek csaladgálni, összegabolydnak, egyre több lenne (tömegesebb lesz a anyag  $\Rightarrow$  eltörök)

ha törés a dislokációs  $\rightarrow$  tömör deformáláni fémekben sor dislokációs ( $10^6/\text{cm}^2$ ), Si-crystallyum  $\phi$

### (3) Felületi hibák:

pl. szemcseláthatás  $\rightarrow$  itt tömegesebb török az anyag kis szennyezőkkel lehet stabilizálni

### (4) Térfigeti hibák:

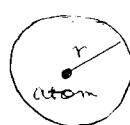
kiválaszt: más anyag szemcséi helyezkedését el az anyagban, megváltottatja a mechanikai tulajdonságokat

türeget

felület (onnan fogva nincs anyag)

A hibák határozzák meg pl. az anyag mechanikai tulajdonságait, ellenállás, hővezetés, hőnyom török. Ha nagyon sor a hiba  $\rightarrow$  amorf anyag

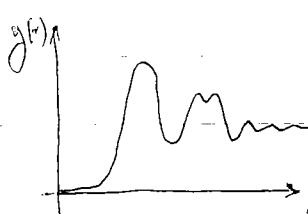
Amorf anyagok  $\leftarrow$  szilárd (pl. türeg)  $\rightarrow$   $\phi$  hosszú török rend felületek



$r$ : távolságon belüli atomok száma:  $N(r)$

$$N(r) = \int_0^r g(r_1) 4\pi r_1^2 dr_1$$

$\uparrow$  radialis eloszlásf. (radf.)



$\rightarrow$  eb. a sűrűségű rész

atomok átlagos távolsága 2-3 Å

Türeg  $\rightarrow$   $\text{SiO}_2 +$  pl. Na

Ca (magy ne crystallizáljon ki)

K B  $\rightarrow$  pl. jérai / felüveretőkkel

1985. Washington Mn-Al ötvözet (Al<sub>63</sub>Mn Splat cooling)  
felmelegítettek, aztán lefröscsöltek  
tadéltak amorf és kristályosnak látszó részektet

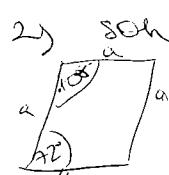
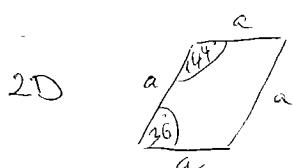
↳ 5-ös szimmetriával

### «kvázi-kristály

↳ ittólévők kvázi-kristály

matematikai modell már ismert volt

↳ Penrose műcs 1) Ei lehet racionális a négyzet

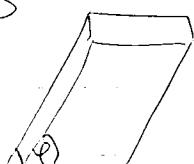


2) soha nem szimmetrikus  
3) bármely pont R sugarú könyeretéhez van 5R

sugaron belül minden

4) hosszú távú irányrend van,  
távolságrend  $\phi$

3D



nemboéder  $\text{tg} \varphi = 2$

2 félle van  $\rightarrow$  kiralitásbeli a térfelület

rosszul teretik a hőt + stabilitás  $\rightarrow$  pl. ipari  
fűződényeknél használják

### Folyadék-kristályok:

1888. Friedrich Reinitzer

-145 °C -ig szilárd

145-178 homályos folyadék

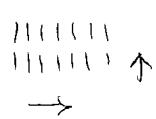
178 - átlátszó folyadék

Otto Lehman  $\rightarrow$  koleszterinusz folyadék-kristály

nematiszus

szimmetrius A

C



hosszútávú rend  $\rightarrow$  ak irányába

60-as években ezekről el használtuk

Szerkezetvizsgálat

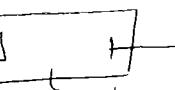
röntgen, elektron, neutron diffracció

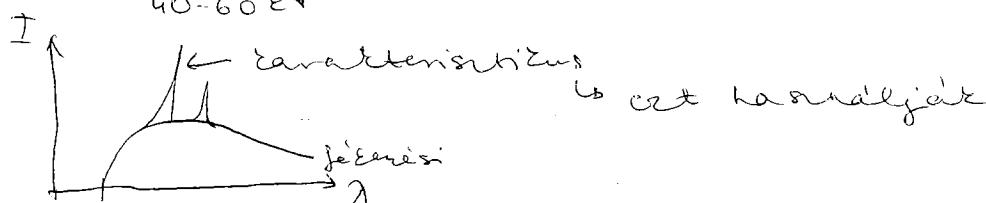
(1) Röntgen-diffráció:

jól megérzékelhető az elektronokat  $\rightarrow$  sugárzás (röntgent)  $\rightarrow$  erték megráz

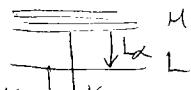
az elektronsűrűséget lehet öröle feldöröléssel atomi méretekben

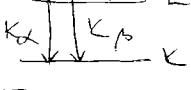
Előállítás: @ hagyományos röntgensűrű (1895)

izot.  anód  $\rightarrow$  felerősítő sugárzás  
rázadó  $\xrightarrow[\text{vakuum}]{\text{hőtől}}$  + karakterisztikus R-sugárzás  
 $40-60 \text{ eV}$

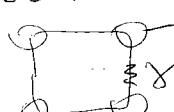


Amplitúdó  $\rightarrow$  gyorsítófelülről határozta meg

  $K_\alpha$ -t használjuk  $\text{Cu} \rightarrow 0,15 \text{ nm}$

  $K_\beta$   $40 \text{ eV} \rightarrow 0,03 \text{ nm}$  általában a gerjesztés

(b) sincrotron  $\rightarrow$  nagy vákuumcsőben mennek

 magneset körbe az elektronok

Wiggler, undulator

előnye  $\rightarrow$  rögtön monokromatikus sugárzást adít el  
nagy intenzitás

hatánya  $\rightarrow$  nagy melet, droga

Eredményei: - fotolémez (2D, de az intenzitást néhányszorosítva)  
- számítáloscopek (eleinte a helyre írt nem

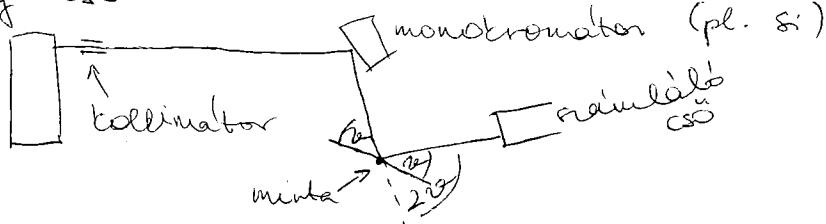
voltak eredmények)

- CCD (hatánya, hogy nem nagy a dinamikája)

- Imaging Plate

$\text{e}^-$ -LVE diffractometer

2kg - cső



a LVE a kis elektronszűrésgű dolgozat jól elvilegítja  
csat a nagyobb szűrésgű látását (csont)  
50 μm-ig megy be a fémbe

## (2) Elektronmikroskop:

60 keV pölt ma 300 keV -ra gyorsítunk

$$cU = \frac{P^2}{2m} \quad P = \frac{h}{\lambda} \quad \lambda = 0,1 \text{ pm}$$

sokkal kisebb mint az atomok talva  
numerikus appestirája 0,001 csat  $\rightarrow$ rossz lencse  
ma cíppen látjuk az atomokat

□ ízzó katód (elektronágyú) - 300 eV

☒ kondenzorlencse  $\rightarrow$  nagyon pici (mm) ~~tervezés~~

— minta  $\rightarrow$  nagyon vékony réteg

☒ nehéz preparálni

—  $\leftarrow$  kép CCD, optikai fluoreszcens emulzióval ... stb.

a beállítás a lencsékre adott árammal stabállyazható

$$\text{ha } \frac{1}{t} + \frac{1}{x} = \frac{1}{f} \text{ akkor kép}$$

$$\text{ha } x = f \text{ akkor diffracziós kép}$$

előnyei: - magas, de nem sűrűs

- sok tülmérső air, sorfele (TEM, HRTEM stb.)

- kis területeket, az anyag részeit meg lehet nézni

- kis hullámhossz

hatánya: - ravaró a sok megalmas szörés

- mintát preparálni

### ③ Neutronodiffráció

- kísérleti atomreaktorokban állítják elő a termikus neutronokat
- $\frac{1}{2}kT = \frac{1}{2}\frac{P^2}{m}$     $P = \frac{\hbar}{\lambda} \Rightarrow \lambda = 0,05 \text{ Å}$    ez is elég rövid atommagot sorolódik → lehetséges pontonról szórócentrum
- ④ spinfügő szövets → mágneses szerkezeteket lehet vele vizsgálni
- ⑤ izotópészterny → mag töltőnyhatása különbség a két izotópnál
- ⑥ csat a magot hatja
- ⑦ gyengén hat kölcsön  $\rightarrow$  söt neutron kell → reaktor kell horzá      nagy minta kell
- ⑧ betontöröbbel leárnyékolni a reaktort
- ⑨ nagyon nagy spallációs neutronforrás  $\rightarrow$  protonok ütővel fémrel.  $\rightarrow$  nagy intenzitású

### Szövets:

Rtg:  $g(r)$  elektronsűrűséget hatja

Electron: elektrostatiskus potenciállal hat kölcsön

Neutron: csat a maggal hat kölcsön

Diagram illustrating the scattering of a neutron by two nuclei. The incident neutron has wave vector  $k$ . The scattered neutron has wave vector  $k'$ . The angle between the incident and scattered wave vectors is  $\theta$ . The distance between the nuclei is  $r$ . The wave number transfer is  $|\underline{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ .

The diagram shows the scattering process and the resulting wave vectors  $k$  and  $k'$ .

Below the diagram, the text reads: "a két fejyít különbsége" and the equation  $s_1 = \frac{(r \cdot \underline{k})}{|\underline{k}_1|}$  is given.

On the left, another equation is shown:  $|\underline{k}_1| = \frac{2\pi}{\lambda}$ .

Below the main text, it says "fázisütközők" and the equation  $\Delta l = \frac{s_1 + s_2}{\lambda} \cdot 2\pi = r(\underline{k}_0 - \underline{k})$  is given.

On the right, there is a set of equations involving  $s_1$ ,  $s_2$ , and  $s_1 + s_2$ :

$$\left. \begin{aligned} s_1 &= \frac{(r \cdot \underline{k})}{|\underline{k}_1|} \\ s_2 &= -\frac{(r \cdot \underline{k})}{|\underline{k}_2|} \\ s_1 + s_2 &= \frac{r}{\lambda} \cdot (\underline{k}_0 - \underline{k}) \end{aligned} \right\}$$

$$\int_{\text{anyag}}^{\text{in } (\kappa_0 - \kappa)} g(r) d^3r = A(\kappa) \rightarrow I = |A(\kappa)|^2 \quad \text{intenzitás}$$

$$I = |A(\kappa)|^2 = \int g(r_1) e^{i(\kappa_0 - \kappa)r_1} d^3r_1 \int g(r_2) e^{-i(\kappa_0 - \kappa)r_2} d^3r_2 =$$

$$= \int g(r_1) g(r_2) e^{i(\kappa_0 - \kappa)(r_1 - r_2)} d^3r_1 d^3r_2$$

$$\langle g(r_1) g(r_2) \rangle = \langle g(r_1 + \alpha) g(r_2 + \alpha) \rangle = \langle g(0) g(r_2 - r_1) \rangle = K(r_2 - r_1)$$

$$I(\kappa) = \int K(r_2 - r_1) e^{-i(\kappa_0 - \kappa)(r_2 - r_1)} d^3r_1 d^3r_2 = \quad \bullet \quad \alpha = r_2 - r_1$$

$$= \int K(r) e^{-i(\kappa_0 - \kappa)\alpha} d^3r_1 d^3r_2 =$$

$$= V \int K(r) e^{-i(\kappa_0 - \kappa)\alpha} d^3r$$

Teh. az ~~sziszta~~ periodikus  $\Rightarrow$  kristály  $g(r) \rightarrow g(r + R_n)$   
relatíve

$$A(\kappa) = \int g(r) e^{i(\kappa_0 - \kappa)r} d^3r = \int g(r + R_n) e^{i(\kappa_0 - \kappa)r} d^3r =$$

$$= \int g(r_n) e^{i(\kappa_0 - \kappa)(r - R_n)} d^3r_n =$$

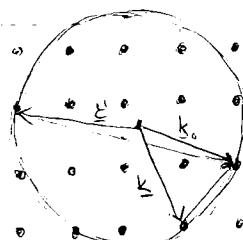
$$= e^{-i(\kappa_0 - \kappa)R_n} \int g(r_n) e^{i(\kappa_0 - \kappa)r_n} d^3r_n$$

$$A(\kappa) (1 - e^{-i(\kappa_0 - \kappa)R_n}) = 0 \quad e^{i(\kappa_0 - \kappa)R_n} = 1$$

$$(\kappa - \kappa_0) R_n = 2\pi \text{ egyszerűen}$$

így jönhet ki az elhajlású irányt  $\Rightarrow \kappa - \kappa_0 = \frac{G}{2\pi}$   
reciprokrácsvettor

Ewald kerékrétezés:



a pontonak van kiterjedése  
ritkál az elemtrízsel

- 1.) kezdőpont kijelölés
- 2.)  $k_0$  be a kp.-ba
- 3.) kört kell rajzolni
- 4.)  $k$  ahol átmegy egy ponton a kör

fogadjuk a kristályt vagy vérint polikristályt stb

Bragg-reflexió az  $\kappa - \kappa_0 = \frac{G}{2\pi}$

ez volt a röntgenfel

eletronnal  $\Rightarrow$  a hullámhossz nagyon kicsi  $\Rightarrow \kappa$  nagy  $\Rightarrow$

$\Rightarrow$  mögön egy síkot lehetnek megfigyelezni a pöttyök nem jó a műcsalitandó mérésére, de síról meg lehet nézni

a kristályos anyagnál az egész szerkezet fel lehet  
körbejárni, a nemkristályos anyagnál kicsi az intenzitás

## CONDENSALT

$$A(\mathbf{g}_h) = \int g(r) e^{i\mathbf{g}_h \cdot \mathbf{r}} d^3 r = \sum_{\text{atom}} g_a(r - r_a) e^{i\mathbf{g}_h \cdot \mathbf{r}} d^3 r =$$

$$g(r) = \sum_{\text{atom}} g_a(r - r_a)$$

$$= \sum_{\text{atom}} \int g_a(r - r_a) e^{i\mathbf{g}_h \cdot \mathbf{r}} d^3 r = \sum_{\text{atom}} \int g_a(r_i) e^{i\mathbf{g}_h \cdot (r_i + \mathbf{r})} d^3 r_i =$$

$$= \sum_{\text{atom}} e^{i\mathbf{g}_h \cdot r_i} \underbrace{\int g_a(r_i) e^{i\mathbf{g}_h \cdot \mathbf{r}_i} d^3 r_i}$$

atom sörási tényező = form. factor  $f(\mathbf{g}_h)$

egy atom söröccentrumnak Fourier-transzformáltja

bíblázatban röntgenre, neutrónra meg lehet ezeket  
balalni

$\uparrow$   
sötéles Fourier-transzformált

$$g_a(r) = b_a \delta(r) \quad \text{Fermi-féle kontakt töltőmű.}$$

$$\uparrow$$

$$\text{sörási hossz} \quad f_a(\mathbf{g}_h) = b_a$$

$A(\mathbf{g}_h) = \sum_a e^{i\mathbf{g}_h \cdot \mathbf{r}_a} f_a = S(\mathbf{g}_h)$  szerkezi tényező = structure factor

csak  $|A|^2$ -t tudjuk mérni  $\rightarrow$  fazisinformációt viszont  
nem nyerni  $\rightarrow$  ma már jól viszont tudjuk számolni  
a szerkezetet

amorf anyagnál a párokrelációk fr. t lehet meghatározni, de azt is nehézen

kiválasztály  $\rightarrow$  pontot látunk, de keveset

### reciprocalcs

teljesít: ha 3 nem egy egymásba eső reciprocán atomok, akkor végtelen sokan atomok

1)  $a_1, a_2, a_3$  sík  $\perp$  a  $\mathbf{g}_h = h_1 \underline{a}_1 + h_2 \underline{a}_2 + h_3 \underline{a}_3$  vektornak

az:  $\mathbf{g}_h \left( \frac{\underline{a}_3}{h_3} - \frac{\underline{a}_1}{h_1} \right) = \frac{h_2 \sqrt{h_1^2 + h_2^2}}{h_3} = 0$

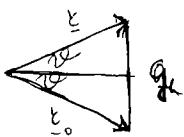
a sík teljes vektorára belátható, hogy  $\mathbf{g}_h$

$h_1, h_2, h_3$  = Miller indexek

2)  $h_1, h_2, h_3$  sík távolságai  $\frac{2\pi}{|\mathbf{g}_h|}$

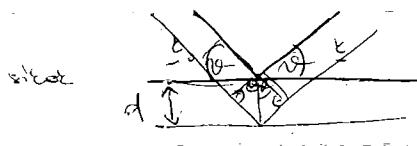
az:  $d = \frac{\underline{a}_1}{h_1} \frac{|\mathbf{g}_h|}{|\mathbf{g}_h|} = \frac{2\pi h_1}{h_1 |\mathbf{g}_h|} = \frac{2\pi}{|\mathbf{g}_h|}$

a teljesítés és a reciprokcsvektor között kapcsolat van



$$2E_0 \sin \theta = |G_h| \Rightarrow 2\frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta = \frac{2\pi}{d} n$$

Bragg-feltétele (  $2d \sin \theta = n\lambda$  )



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

csak akkor van elhajlás, ha jól áll a kristályszík e's er teljesül

### Atomok kötése:

Kovalens kötés: cél - zárt elektronhárj H - H

c...c...c gyémánt, silicium, germaniium tetraéderes  
c szelekete  $\Rightarrow$  napszem end, kew's riba

Ionos kötés: pl. Na<sup>+</sup>Cl<sup>-</sup> kristályraice les belölle  
az is erős kötés

A kovalens és ionos között van átmenet  $\rightarrow$  dative kötés

### Fémek kötés:

$\oplus \cdot \oplus \cdot \ominus \cdot \ominus$  elektronok szabadgörbök az ionok  
közül  $\rightarrow$  körös elektronfelhő  
alteki~, altali föld~, plafonnet  $\rightarrow$  jó veretőt ilyenel  
Átmeneti fémek: sötét terményekkel.



a d elektronok kötnek mint egys kovalens kötés  
és az s elektronok veretnek  
4f 5f fémek (lantaoidek) itt az f elektronok kötnek

Dipol-dipol kötés: poláros molekulák között  
pl. curcor

Induktált dipol: Ezt semleges atom, amit nem teljes  
homogenek  $\rightarrow$  cserélődik a negatív és pozitív fele  
 $V_{indukt} \propto \frac{1}{r^6}$   $\oplus \oplus$  szintenzitánban reagál

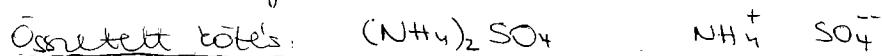
Lennard-Jones potenciál:

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

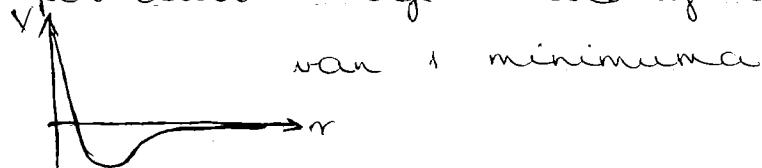
## KONDENZA'LIT

Hidrogén-hid töltés: jég kavolja az üveget

olyan mint a kavolás csat a proton hozzá lebbe

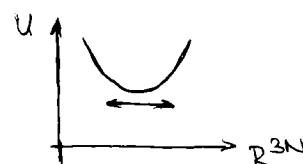


Kétfest potenciál alakja minden időben

Atomok mozgása

Kristálycs anyag:

van egy energie-



minimum, ami tömör reeg  $\rightarrow$  jól közelíthető parabolával  $\rightarrow$  az anharmonikus tagot elkorít pl. a hőtágulást

Amorf vagy polimerek:

termikus fluktuációk-



val ugrálhat ide-oda ha nem nagy a kölönbség

Rezgésök:

$x_i(t)$ : az i-edik atom helye  $i = 1, 2, \dots, N$

$x_{i0}$ : az egyszerűi helyzete az i-edik atomnak

$x_i(t) - x_{i0} = \underline{u}_i(t)$ : i-edik atom elmozdulása

$$\underline{m}_i \ddot{\underline{u}}_i(t) = - \sum_j \underline{D}_{ij} \underline{u}_j(t) \quad \underline{M}, \underline{D} \text{ simmetrikus}$$

$$\underline{u}_i(t) = \underline{u}_i e^{i\omega t}$$

$$\underline{m}_i \omega^2 \underline{u}_i = \sum_j \underline{D}_{ij} \underline{u}_j \Rightarrow \underline{M} \underline{w} \underline{u} = \underline{D} \underline{u}$$

sajátelőképpenlet ha besorunk  $\underline{M}^{-1}$ -oppel, de akkor már nem lesz öndifjungált a matrix

$\underline{M}$  pozitív definit  $\Rightarrow$  van négyzetes matrix  $\underline{M} = \underline{S}^2$

$$\underline{S}^2 \underline{w} \underline{u} = \underline{D} \underline{u} \quad \underline{S} \text{ és } \underline{S}^{-1} \text{ is öndifjungált}$$

$$\underline{w}^2 (\underline{S} \underline{u}) = \underbrace{\underline{S}^{-1} \underline{D} \underline{S}^{-1}}_{\underline{C}} (\underline{S} \underline{u})$$

$\underbrace{\underline{C}}_{\rightarrow} \text{ s.e.-i kellenek}$

$$\underline{M} = \begin{pmatrix} m_1 & m_1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ m_N & m_N & \dots \end{pmatrix} \rightarrow \underline{S} = \begin{pmatrix} \sqrt{m_1} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{m_2} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \sqrt{m_N} \end{pmatrix}$$

$$\underline{v}_i = \sqrt{m_i} \underline{u}_i \quad w^2 \sqrt{m_i} \underline{v}_i = \sum_j D_{ij} \frac{1}{\sqrt{m_i}} \frac{\sqrt{m_j}}{\sqrt{m_j}} \underline{u}_j$$

$$D_{ij} = \frac{D_{ij}}{\sqrt{m_i m_j}}$$

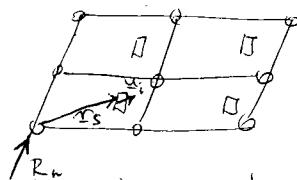
$$w^2 \underline{v}_i = \sum_j C_{ij} \underline{v}_j \quad \text{sajátételezés probléma}$$

tg. csat egyforman atomok a rácsban és periodikus a rács  $\Rightarrow$  csat a rét atom röntgensígvettoraiból (rácsvektor)

fog a  $D$

$$\underline{r}_i(t) = \underline{R}_n + \underline{r}_s + \underline{u}_i(t)$$

$\leftarrow$  cellában melyik atom?  
 $\leftarrow$  melyik cella?



$\underline{R}_n$  is invariant a

Bloch-tétel: rácsvektor irányába eltolásra

rendszerek  $\Rightarrow$  emiatt is exponenciális foggas

$$\underline{v} = \underline{v}_0 e^{i \underline{k} \underline{R}_n}$$

$\uparrow$   $\kappa_p$  hosszú  
3NP hosszú vektor  
 $\uparrow$  atomok rétegek eggyel cellában  
cellák rétege

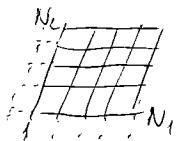
$\kappa$ : valami hullámhossz vektor

$$e^{i(\kappa + q_n) \underline{R}_n} = e^{i \underline{k} \underline{R}_n} e^{i 2\pi \cdot q_n} = e^{i \underline{k} \underline{R}_n} \quad \text{ugyanaz a } \kappa \text{-val eltoljük}$$

(b) hogy valósult, hogy benne van a Brillouin zónában

Periodikus határfeltétel terület fel:

(Born-Kármán)



$$\underline{u}_N = \underline{u}_0$$

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

$n_1 \underline{a}_1, n_2 \underline{a}_2, n_3 \underline{a}_3$  esetén ugyanolyan  
entályt terület mellé

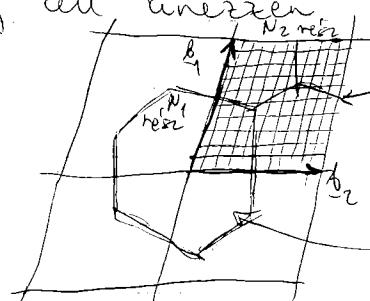
$$\underline{v} e^{i \underline{k} \underline{R}_n} e^{i \underline{k} (n_1 \underline{a}_1)} = e^{i \underline{k} \underline{R}_n} \Rightarrow \underline{k} n_1 \underline{a}_1 = 2\pi \text{ cégör} = 2\pi n_1$$

$$e^{i \underline{k} (n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2)} = e^{i \underline{k} \underline{R}_n} \Rightarrow \underline{k} n_2 \underline{a}_2 = 2\pi n_2$$

$$\underline{k} n_3 \underline{a}_3 = 2\pi n_3$$

$$\underline{k} = \frac{n_1}{N_1} \underline{a}_1 + \frac{n_2}{N_2} \underline{a}_2 + \frac{n_3}{N_3} \underline{a}_3 \quad \text{iggy cell kinezete}$$

reciprokrács



ebben a cellában  
mindegyik pont jól

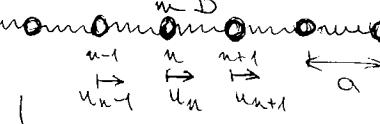
Brillouin-zónán  
belül van

$N_1, N_2, N_3 \in$  vektor = cellulák száma

jó jellemző vektor a módsz. jellemzésére

minden  $\xi$ -hoz 3p  $\omega^2$  sajátértéket kapunk

disperziós reláció:  $w_\lambda(t)$   $\lambda = 1 \dots 3p$

① pl: egyszemélyes lineáris lánca: 0 ->  ... N

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

$$m\ddot{u}_n^{(t)} = -D(2u_n^{(t)} - u_{n+1}^{(t)} - u_{n-1}^{(t)})$$

$$u_n(t) = u_n e^{i\omega t} \quad u_n = A e^{i\omega n}$$

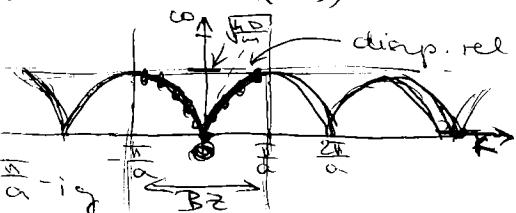
$$m\omega^2 u_n = D(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})$$

$$m\omega^2 A e^{i\omega n} = D(A e^{i\omega n} - A e^{i\omega(n+1)} - A e^{i\omega(n-1)})$$

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

$$\omega^2(k) = \frac{2D}{m} \left(1 - \frac{e^{i\omega a} + e^{-i\omega a}}{2}\right) = \frac{2D}{m} (1 - \cos(\omega a)) = \frac{4D}{m} \sin^2\left(\frac{\omega a}{2}\right)$$

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4D}{m}} \left| \sin\left(\frac{\omega a}{2}\right) \right|$$



$\xi$ -nak csatlakozik  $Bz$  - m belül

van értelme  $\Rightarrow -\frac{\pi}{a} - től \frac{\pi}{a} - ig$

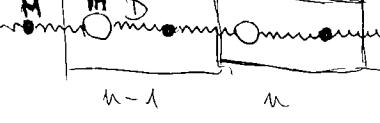
② h.f.:  $l = e^{i\omega N}$   $\omega N = 2\pi m$   $m = \text{egér}$   $k = \frac{2\pi}{a} \frac{m}{N} \rightarrow$  differenciálható

egy kristályos anyagban rezonans (10<sup>8</sup> + sűrű)

disperziós rel. lineárisan indul  $\rightarrow$  hosszihullámink rezgéseik  $\rightarrow$

olyan, mint a hang  $\Rightarrow$  akustikus átg (nem veszi észre a rezort)

ha  $\xi = 0 \rightarrow$  translációs módsz.

② Kitatomos lineáris lánca 

$$m\ddot{v}_n(t) = -D(v_n^{(t)} - v_{n+1}(t)) - D(v_n(t) - v_{n-1}(t))$$

$$M\ddot{v}_n(t) = -D(v_n(t) - v_{n+1}(t)) - D(v_n(t) - v_{n-1}(t))$$

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

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

$$m\omega^2 u_n = D(2v_n - v_{n+1} - v_{n-1})$$

$$m\omega^2 A = D(2A - B - B e^{-i\omega a})$$

Bloch - tételek

$$u_n = A e^{i\omega n}$$

$$v_n = B e^{i\omega n}$$

$$M\omega^2 B = D(2B - A e^{i\omega a} - A)$$

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

$\det \frac{1}{\lambda} = 0$  hogy legyen megoldás

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

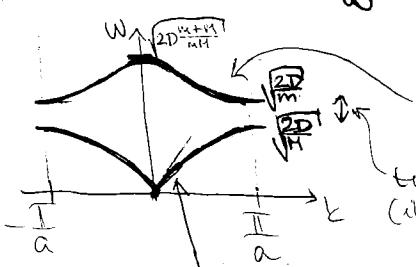
$$= m M w^4 - m w^2 2D - M w^2 2D + \cancel{4D^2 - D^2} - D^2 e^{-ika} - D e^{ika} - \cancel{D^2} =$$

$$= m M w^4 - 2D(m+M)w^2 + 2D^2 - D^2(e^{ika} + e^{-ika}) =$$

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

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

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



Optikai ág  $\rightarrow$  EM törrel a módszer

töltött saló (ilyen frekvenciára nem genjerál)

genjerálható)

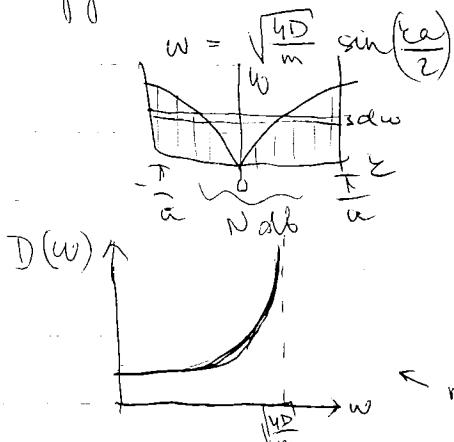
Aktuátorok ág

fonon: rezonancia, a módszer gerjesztését adják, a rácselejtéshez szükséges

frekvenciaspektrum / fononspektrum / módszessűrűség:

$$D(w) \rightarrow \int_{w_1}^{w_2} D(w) dw = \text{módszer sáma, ahol } w_1 < w < w_2$$

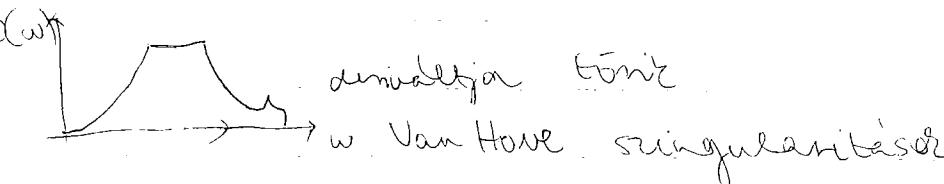
cyclotomos láncra



$$\begin{aligned} D(w) dw &= \frac{D(w) dw}{\text{szélesség}} \cdot \text{szélesség} \\ &= 2 \frac{dw}{\frac{2\pi}{a}} = \frac{2\pi a}{2\pi} \frac{dw}{\sqrt{\frac{4D}{m}} a \cos(\frac{ka}{2})} = \\ &\quad \text{+ simetria} \\ &= \frac{2\pi}{\pi} \sqrt{\frac{m}{4D}} \frac{1}{\sqrt{1 - \sin^2(\frac{ka}{2})}} dw = \frac{N}{\pi} \sqrt{\frac{m}{D}} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{mw^2}{4D}}} dw \end{aligned}$$

mindig vannek singularitásai

3D-ban



deráltja több

w Van Hove singularitások

## KONDENZAINT

(3D) kristály: 3D-s B-zóna

mindig van 3 akusztikus ág  
elemi cellában 1 atom  $\rightarrow$  1 optikai ág  
s atom  $\rightarrow$   $3(3^3 - 1)$  optikai ág

Fonon: rezonansszimmetria

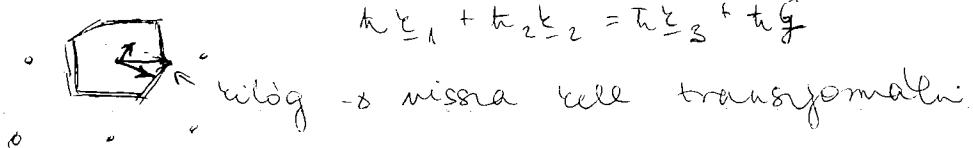
Egy moduláris  $w_i(\xi)$  frekvencia van  $\rightarrow$  függelén  
szabályozó index

$$\hookrightarrow E = \sum_{\xi, \xi \in B^2} t_{\xi} w_i(\xi) (n_i(\xi) + \frac{1}{2}) \quad (\xi, i) \text{ moduláris } n_i(\xi) \text{ fonon van}$$

energiája  $t_{\xi} w_i(\xi)$ , rezonansimpulusa:  $t_{\xi}$

Az energia megnövekedve, rezonansimpulusz többet eredményez,  
mehet, ha útjával, nem mere ideális

$$t_{\xi_1} + t_{\xi_2} k_{\xi_2} = t_{\xi_3} + t_{\xi_4} k_{\xi_4}$$



Nem olyan jó közelítés, mintha ideálisak lennének a fononok (vannak magasabb rendű tagok)  
A fononspektrum tömlettel tudjuk (általánosan 1-re  
normalizálva). Milyen visz w-re?

1 akusztikus ág  $w \approx c/k$

$$D(w) dw = c^3 \epsilon \frac{N}{(2\pi)^3} = \frac{N V_c}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \epsilon^2 dk =$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \epsilon^2 dr = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c^2} \frac{dw}{c} = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c^3} dw$$

3 akusztikus ág

$$D(w) = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{1}{c_1^3} + \frac{2}{c_2^3} \right) \omega^2 = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{1}{c_2^3} \omega^2$$

így indul  $\sim w^2$ -bel a diszp. rel., de az egységhatás  
nem egységteljes

fononok termikus tulajdonságai

fotonok

$$\text{energiája: } E = \sum_i t_{\xi i} (n_i + \frac{1}{2})$$

$$\langle E \rangle = \sum_i t_{\xi i} \langle n_i \rangle + \frac{1}{2}$$

## KONDENZAHL

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_i}{kT}} - 1}$$

Bose-Einstein distribution

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

nagy T  $\Rightarrow kT \gg \hbar\omega_i$ 

$$\operatorname{ch} x = \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} \rightarrow \text{ris } x \text{-re} \quad \frac{1+x+1-x}{1+x-1+x} = \frac{1}{x}$$

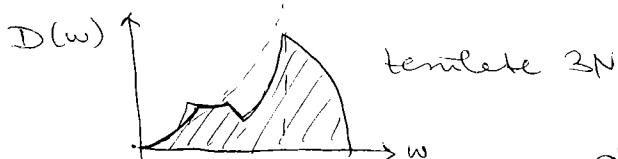
$$\langle E \rangle = \sum_i \frac{\hbar\omega_i}{2} \frac{2kT}{\hbar\omega_i} = \sum_i kT = 3NkT \rightarrow \text{equipartition}$$

(polyadékban nem ír)

$$C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = 3Nk$$

Dulong-Petit szabály

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \sum_i \hbar\omega_i \left( \langle n_i \rangle + \frac{1}{2} \right) = \sum_i \hbar\omega_i \langle n_i \rangle + \underbrace{\sum_i \frac{\hbar\omega_i}{2}}_{\propto} = \\ &= \int \hbar\omega \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} D(\omega) d\omega + E_0 \end{aligned}$$



$$D_D(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{3}{C^3} \omega^2$$

$$\int_0^{\omega_D} D_D(\omega) d\omega = 3N \quad \text{Coriolis termék}$$

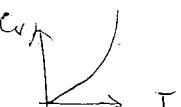
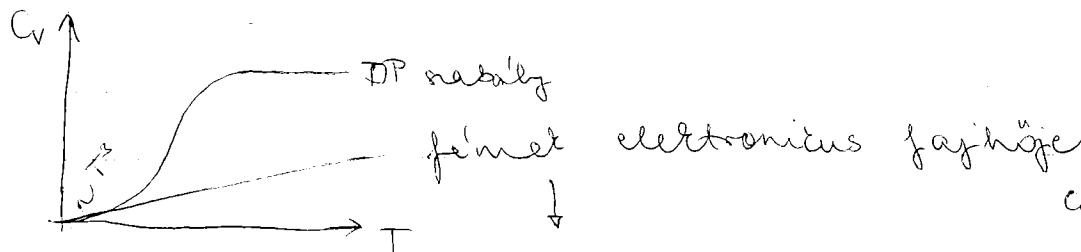
$$\int_0^{\omega_D} \frac{V}{2\pi^2} \frac{3}{C^3} \omega^2 d\omega = \frac{V}{2\pi^2} \frac{1}{C} 3 \omega_D^3 = 3N$$

$$\langle E \rangle = \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \frac{V}{2\pi^2 C^3} \omega^2 d\omega = \frac{V}{2\pi^2} \frac{3}{C^3} \hbar \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega =$$

$$T_c \text{ elérésénél esetben} \quad T_c = \frac{V}{2\pi^2} \frac{3}{C^3} \frac{(kT)^4}{\hbar^3} \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{kT}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \rightarrow \frac{\pi^4}{15} = \frac{V}{2\pi^2} \frac{3}{C^3} \frac{\pi^4}{15} \frac{1}{\hbar^3} (kT)^4$$

$$T_c \text{ negy cselel} \quad e^x = 1+x \Rightarrow \langle E \rangle = 3NkT$$

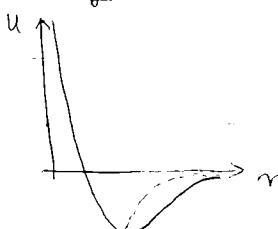
$$\Rightarrow \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{V}{2\pi^2} \frac{3}{C^3} \frac{\pi^4}{15} \frac{1}{\hbar^3} k^4 3T^3$$



	alacsony hőmérsékleten	magas hőmérsékleten
anyag	Na	K
T <sub>D</sub> (K)	158	91
	343	105
	428	630
	225	165
	470	Fe

ez volt a fononfajhő, ami a leglényegesebb alacsony hőmérsékleten fémeknél az electron-fajhő is lényeges:  $c_v = \alpha T + \gamma T^3$  ( $< 10K$ )  
 $\uparrow$   
 $e^-$ -orbél  $\sim$  phononorbél

Hőátigulás már minden a harmonikus közelítéssel  
 ha ennek a részén kívül a hőátigulás



az a törepe merőg a hőmérséklettel.

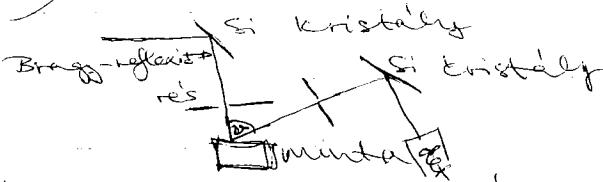
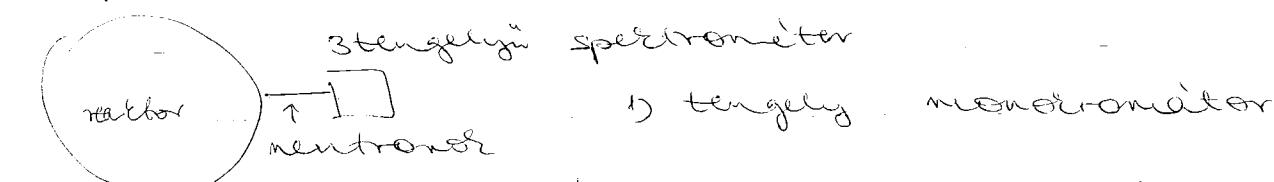
Hővezetés → tilmatat a lineáris erősítésekben  
 fonon - fonon töltőmennyiségek → tétes hibátlan  
 anyagban

$$\text{harmonikus} \quad \text{tilmatat} \quad \frac{\epsilon_2 w_2}{\epsilon_1 w_1 + \epsilon_3 w_3} \quad \hbar \omega_2 + \hbar \omega_3 = \hbar \omega_1 \\ \hbar \epsilon_1 + \hbar \epsilon_3 = \hbar \epsilon_2 + \hbar \epsilon_3$$

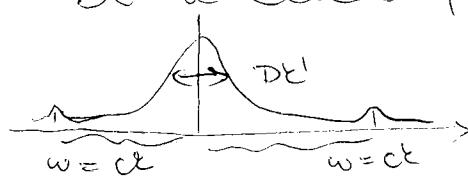
ha  $f = 0$  normálfolyamat

$f \neq 0$  unkapp folyamat

Dispersziós reláció kimerése: neutrondiffrakció



folyadék → DE alkalmával,  $\epsilon - t$  változtatjuk



fenyeget Raman - színáis → jó monosztomatikus  
 más minősű jön ki

ha ezt fotont gerjezt ⇒ néhányszorosan

## KONDENZAT

## Elettronik szilárd testekben

törzselektronok, vegyételelektronok, ~~és~~ szabad e-ök  
 atommagok soraival nagyobbak  $\rightarrow$  állnak  
 $\Rightarrow$  adiabatikus részcsatolás  $\rightarrow$  Körölfűrész

$$m_p = m_n = 1800 \text{ me}$$

$$\text{ionise. } R_I \quad P_I = \frac{k}{i} \frac{\partial}{\partial R_I}$$

$$e = \sigma_i x_i \quad f_i = \frac{t_i}{x_i} \quad \frac{\partial}{\partial x_i}$$

$$H = - \sum_i \frac{\frac{t^2}{2m_i}}{\frac{\partial^2}{\partial R_{-i}^2}} + V_I(R_{-i}) + \sum_i \frac{-\frac{t^2}{2m_i}}{\frac{\partial^2}{\partial r_{ii}^2}} + v_e(r_{ii}) + v_{ei}(R_{-i} - r_{ii})$$

↑                      ↑                      ↗  
 ionot                rölcsonhatásuk       $e^{-i\omega t}$

$-\frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |r_i - r_j|}$

$\Psi(\underline{r}_I, x_i)$  a nullainf.

az adiabatikus szítsatolás a hullámfor. szeret

$$\text{algebra: } \psi(R_i, x_i) = \phi(R_i) \psi(R_{i+1}, x_i)$$

$$\left( - \sum_I \frac{k^2}{2M_I} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial R_I^2} + V_I \Phi \right) \varphi + \left[ - \sum_I \frac{k^2}{2M_I} \left( 2 \frac{\partial \Phi}{\partial R_I} \frac{\partial \Psi}{\partial R_I} + \Phi \frac{\partial^2 \Psi}{\partial R_I^2} \right) \right] +$$

$$+ \int - \sum_i \frac{k^2}{2m_i} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r_i^2} + V_e(r_i) \Psi + V_{eI}(R_I, r_i) \Psi \Big] \Phi = E \Phi \Psi$$

1) először megoldjuk az elektronproblémát

tetraëderes  $\frac{R}{r}$

$$-\sum_k \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + v_e(r_e) + v_{re}(R_E, r_e) \right\} \Psi = E(R_E) \Psi$$

2) rats problem

$$\left( -\sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I} \frac{\partial^2}{\partial R_I^2} + V_I(R_I) + E(R_I) \right) \psi = E \psi \quad \leftarrow \text{classical system}$$

3) elektron-ion reaktionen

$$H_{int} = \left[ -\frac{t^2}{2m_I} \left( 2 \frac{\partial \Phi}{\partial R_I} \frac{\partial \Psi}{\partial R_I} + \Phi \frac{\partial^2 \Psi}{\partial R_I^2} \right) \right]$$

## electronic Hamiltonian

$$H = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \sum_i V(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \rightarrow \text{tobis electron-probleme}$$

$$\text{Energy electron : } H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)$$

a potencial realçado e a rotação

$$H(\gamma \# R_p) = H(\gamma)$$

1 Amesbury

$$\text{eltolás operátora} \quad T(\underline{R}_n) \Psi(\underline{r}) = \Psi(\underline{r} - \underline{R}_n)$$

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

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

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

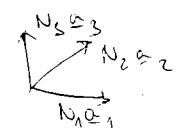
$$\text{Mely: } H T \Psi = E \Psi \quad \Rightarrow \quad T^{-1} H T \Psi = E \Psi \quad \Leftrightarrow \quad H \Psi = E \Psi$$

$$T^{-1} H T = H \quad \Rightarrow \quad H T = T H$$

$$\Psi(\underline{r} + \underline{R}_n) = c_1 \Psi(\underline{r})$$

$$\Psi(\underline{r} + \alpha_1) = c_1 \Psi(\underline{r})$$

$$\Psi(\underline{r} + \alpha_2) = c_2 \Psi(\underline{r})$$



periodikus határfeltétel: anyag mérete

$$\Psi(\underline{r} + N_1 \alpha_1) = \Psi(\underline{r}) \Rightarrow c_1^{N_1} = 1 \quad e^{i \frac{2\pi}{N_1} p_1} = c_1 \quad \text{ahol } 0 \leq p_1 < N_1 \quad \infty$$

$$c_1 = e^{i \frac{2\pi}{N_1} p_1} \quad c_2 = e^{i \frac{2\pi}{N_2} p_2} \quad c_3 = e^{i \frac{2\pi}{N_3} p_3}$$

$$[\Psi(\underline{r} + n_1 \alpha_1 + n_2 \alpha_2 + n_3 \alpha_3)] = e^{i 2\pi (\frac{p_1 n_1}{N_1} + \frac{p_2 n_2}{N_2} + \frac{p_3 n_3}{N_3})} \Psi(\underline{r}) = e^{i \frac{\underline{r}}{\underline{R}_n} \Psi(\underline{r})}$$

$$\underline{R}_n = n_1 \alpha_1 + n_2 \alpha_2 + n_3 \alpha_3 \quad \underline{k} := \frac{p_1}{N_1} \underline{b}_1 + \frac{p_2}{N_2} \underline{b}_2 + \frac{p_3}{N_3} \underline{b}_3$$

$$k \underline{R}_n = 2\pi \left( \frac{p_1 n_1}{N_1} + \frac{p_2 n_2}{N_2} + \frac{p_3 n_3}{N_3} \right)$$

↓  
Bloch-tétel

Nem vettör eddig fogjuk el a degenerált állapotokat:

$$H \Psi_1(\underline{r}) = E \Psi_1(\underline{r}) \quad \Psi_1(\underline{r} + \underline{R}_n) = \lambda_{11} \Psi_1(\underline{r}) + \lambda_{12} \Psi_2(\underline{r})$$

$$H \Psi_2(\underline{r}) = E \Psi_2(\underline{r}) \quad \Psi_2(\underline{r} + \underline{R}_n) = \lambda_{21} \Psi_1(\underline{r}) + \lambda_{22} \Psi_2(\underline{r})$$

$$\begin{aligned} \Psi_a(\underline{r} + \underline{R}_n) &= \lambda_a \Psi_a(\underline{r}) \\ \Psi_b(\underline{r} + \underline{R}_n) &= \lambda_b \Psi_b(\underline{r}) \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \text{diagonális kellek} \\ \underline{k} = 0 \end{array} \right\}$$

Lehet csindáni Bloch-für. -elét

a  $\underline{k}$  benne van a  $\mathbb{R}^2$ -ban  $\rightarrow$  lehet vele jellemzni a

Bloch-für.

Tételek:

1) Különös "k" -hoz tartozó Bloch-für. -ek ortogonálisak

$$\begin{aligned} \int \Psi_{\underline{k}_1}^*(\underline{r}) \Psi_{\underline{k}_2}(\underline{r}) d^3 r &= \int \Psi_{\underline{k}_1}^*(\underline{r} + \underline{R}_n) \Psi_{\underline{k}_2}(\underline{r} + \underline{R}_n) d^3 r = \\ &= \int e^{-i \underline{k}_1 \underline{R}_n} \Psi_{\underline{k}_1}^*(\underline{r}) e^{i \underline{k}_2 \underline{R}_n} \Psi_{\underline{k}_2}(\underline{r}) d^3 r = \\ &= e^{i (\underline{k}_2 - \underline{k}_1) \underline{R}_n} \int \Psi_{\underline{k}_1}^* \Psi_{\underline{k}_2} d^3 r \end{aligned}$$

$$\left(1 - e^{i (\underline{k}_2 - \underline{k}_1) \underline{R}_n}\right) \int \Psi_{\underline{k}_1}^* \Psi_{\underline{k}_2} d^3 r = 0 \quad \checkmark$$

2) Bloch-funktionen sind rein periodisch abstrakt

$$f(\underline{r}) = f(\underline{r} + \underline{N}_1 \alpha_1) = f(\underline{r}) \quad \text{periodisches h.s. Lsg zu}$$

$$f(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}_T} a_{\underline{k}_T} e^{i \underline{k}_T \cdot \underline{r}} \quad \text{3D-S Fourier-son}$$

$$\underline{k}_T = \frac{\underline{P}_1}{N_1} \underline{b}_1 + \frac{\underline{P}_2}{N_2} \underline{b}_2 + \frac{\underline{P}_3}{N_3} \underline{b}_3 \quad P_1, P_2, P_3 \text{ eingesetzt}$$

$$\underline{k}_T = \underline{q}_h + \underline{k} \quad \underline{k} \in BZ$$

$$f(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}_T} a_{\underline{k}_T + \underline{q}_h} e^{i(\underline{q}_h + \underline{k}) \cdot \underline{r}} = \sum_{\underline{k}} \left( \sum_{\underline{q}_h} e^{i \underline{q}_h \cdot \underline{r}} \right) e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}}$$

$$f(\underline{r}) = \underbrace{\sum_{\underline{k}} u_{\underline{k}}(\underline{r}) e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}}}_{+}$$

$$u_{\underline{k}}(\underline{r}) = u_{\underline{k}}(\underline{r} + \underline{R}_n)$$

$$\text{Bild: } u_{\underline{k}}(\underline{r} + \underline{R}_n) e^{i \underline{k}(\underline{r} + \underline{R}_n)} = e^{i \underline{k} \underline{R}_n} (u_{\underline{k}}(\underline{r}) e^{i \underline{k} \underline{r}})$$

minden f. el. Schalltheorie Block-f. eingeschlossen

Bloch-f. El. Schalltheorie:

1) Bloch-El. Schalltheorie:  $u(\underline{r})$  reziproper periodischer f.

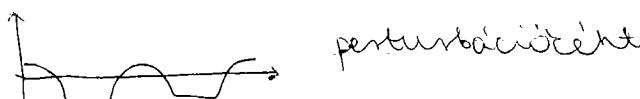
$$u(\underline{r}) e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} \text{ erg. Bloch-f.} = \psi_{\underline{k}}(\underline{r})$$

2) Wannier-El. Schalltheorie:  $\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \sum_{\underline{R}_n} w(\underline{r} - \underline{R}_n) e^{i \underline{k} \underline{R}_n}$   
 Bild:  $\psi_{\underline{k}}(\underline{r} + \underline{R}_n) = \sum_{\underline{R}_m} w(\underline{r} + \underline{R}_n - \underline{R}_m) e^{i \underline{k} \underline{R}_m} = \sum_{\underline{R}_p} w(\underline{r} - \underline{R}_p) e^{i \underline{k}(\underline{R}_n + \underline{R}_p)} =$   
 $= e^{i \underline{k} \underline{R}_n} \sum_{\underline{R}_p} w(\underline{r} - \underline{R}_p) e^{i \underline{k} \underline{R}_p}$

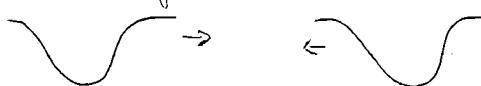
Periodischer Potenzial:



1) unbündeltes Elektron



2) atomar gebundenes elektromagnetisches Feld

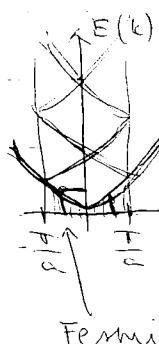


1) Schrödinger-Elektron Modell - Sommerfeld Modell

$$\psi = e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} = e^{i \underline{q}_h \cdot \underline{r}} e^{i \underline{k}_T \cdot \underline{r}}$$

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

## CONDENSUM



alkali fémekre is az a modell

→ egy jöhető ki a salvet, hogy  $k = t$   
azt transzformáljuk a  $BZ$ -be

alapállapotban a sín feléig van  
betölve

- hullámstám + Fermi-energia

$$E_F = \frac{\pi^2 k_F^2}{2m}$$

szabadhőmérséklet  $25 \text{ meV}$  → az elektronoknak ez  
kb. 8 zrns → ismételés, hogy alapállapotban  
vanak

$$E_{T_0} = 2 \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 2 \left( \frac{V}{2\pi} \right)^3 \int \frac{\hbar^2 k^2}{2m} d^3 k = \frac{V}{8\pi^2} \frac{\hbar^2}{m} \int_0^{k_F} k^2 4\pi k^2 dk =$$

vanak spinrel.

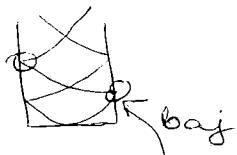
$$= \frac{V}{\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{k_F^5}{5}$$

$$N = 2 \sum_k 1 = 2 \frac{V}{8\pi^3} \int 1 d^3 k = \frac{V}{\pi^2} \int 4\pi k^2 dk = \frac{V}{\pi^2} \frac{k_F^3}{3}$$

atomok száma  
(mind + e<sup>-</sup> + e<sup>+</sup>)

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

Lépjünk többet ...



### Kvázi szabad elektron modell

perturbációs módszerben négy energiatérültségi cella

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

periodikus

öt hullám közelítés

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \frac{2\pi}{\lambda} r}$$

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\frac{2\pi}{\lambda} - \frac{q}{\lambda}) r}$$

$$\psi = c_0 \psi_0 + c_1 \psi_1 = c_0 \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \frac{2\pi}{\lambda} r} + \frac{c_1}{\sqrt{V}} e^{i(\frac{2\pi}{\lambda} - \frac{q}{\lambda}) r}$$

$$H\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{c_0}{\sqrt{V}} (-\frac{2\pi}{\lambda})^2 e^{i \frac{2\pi}{\lambda} r} + \frac{c_1}{\sqrt{V}} (-\frac{2\pi}{\lambda} - \frac{q}{\lambda})^2 e^{i(\frac{2\pi}{\lambda} - \frac{q}{\lambda}) r} \right) + U(r) \left( \frac{c_0}{\sqrt{V}} e^{i \frac{2\pi}{\lambda} r} + \frac{c_1}{\sqrt{V}} e^{i(\frac{2\pi}{\lambda} - \frac{q}{\lambda}) r} \right) = E \left( \frac{c_0}{\sqrt{V}} e^{i \frac{2\pi}{\lambda} r} + \frac{c_1}{\sqrt{V}} e^{i(\frac{2\pi}{\lambda} - \frac{q}{\lambda}) r} \right)$$

$$\frac{1}{V_{cella}} \int_{cella} e^{-i \frac{2\pi}{\lambda} r} d^3 r, \quad \frac{1}{V_{cella}} \int_{cella} e^{-i(\frac{2\pi}{\lambda} - \frac{q}{\lambda}) r} d^3 r$$

$$-\frac{\hbar^2 \frac{2\pi}{\lambda}^2}{2m} c_0 + \frac{c_0}{V_{cella}} \int_{cella} U(r) d^3 r + \frac{c_1}{V_{cella}} \int_{cella} U(r) e^{-i \frac{q}{\lambda} r} d^3 r = E c_0$$

$$\frac{\hbar^2 (\frac{2\pi}{\lambda} - \frac{q}{\lambda})^2}{2m} c_1 + \frac{c_0}{V_{cella}} \int_{cella} U(r) e^{i \frac{q}{\lambda} r} d^3 r + \frac{c_1}{V_{cella}} \int_{cella} U(r) d^3 r = E c_1$$

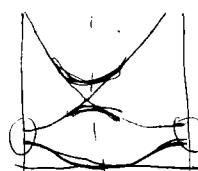
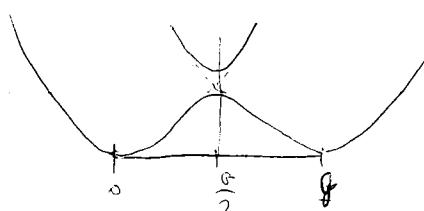
$\frac{1}{V_{\text{cella}}} \int U(r) dr = \text{potencial átlaga} = \text{átlagos } \rightarrow \text{változat} = 0$

$$\frac{1}{V_{\text{cella}}} \int U(r) e^{-i\vec{k}r} e^{-i\vec{q}r} dr = U,$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & U_1 \\ U_1^* & \frac{\hbar^2 (\vec{k}-\vec{q})^2}{2m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}$$

$$E^2 - E \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k}^2 - (\vec{k} - \vec{q})^2) + \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 \vec{k}^2 (\vec{k} - \vec{q})^2 - |U_1|^2 = 0$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\vec{k}^2 - (\vec{k} - \vec{q})^2}{2} \pm \sqrt{\left( \frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 \left[ \frac{\vec{k}^2 - (\vec{k} - \vec{q})^2}{2} \right]^2 + |U_1|^2}$$



jelesedés van ahol a  
tét sav átmérői egymást

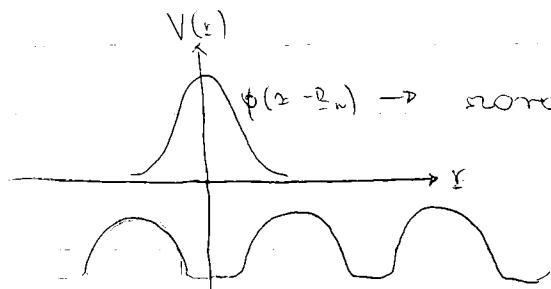
$\Rightarrow$  lezr egy tiltott tartomány a savok között  
jó részletek volt alkali felére

### Szorosan kötő elektron modell (TBA)

$\hookrightarrow$  az atomhoz van szorosan kötve

$\hookrightarrow$  következő fajta közelítés

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \rightarrow \text{periodikus potencial}$$



szorosan van kötve  $\rightarrow$  a félre nézett  
vállalás mint alatt  
minimumot

atomi H:

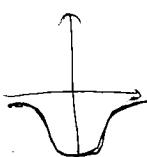
$$H_a = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_a(r)$$

$$H_a \psi = E_a \psi$$

atomi hullámf.  $\rightarrow$  cérkül tervezük

ki a hullámf. - t

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_n c_n \phi(r - R_n)$$



1 db minimum

$$\sum_n c_n \left( -\frac{\hbar^2}{2m} + V_a(\underline{r} - \underline{R}_n) + (V(r) - V_a(\underline{r} - \underline{R}_n)) \right) \psi(\underline{r} - \underline{R}_n) = E \sum_n c_n \psi(\underline{r} - \underline{R}_n)$$

egy hullám mintázat

$$\sum_n c_n [E_a + (V(r) - V_a(\underline{r} - \underline{R}_n))] \psi(\underline{r} - \underline{R}_n) = E \sum_n c_n \psi(\underline{r} - \underline{R}_n) \quad |\psi(\underline{r} - \underline{R}_m)$$

$$\int \phi(\underline{r} - \underline{R}_m) \psi(\underline{r} - \underline{R}_n) dV = \delta_{nm}$$

elhangoljuk az átfedési integrált

$$c_m E_a + \sum_{n \neq m} c_n \int \phi^*(\underline{r} - \underline{R}_m) [V(r) - V_a(\underline{r} - \underline{R}_n)] \phi(\underline{r} - \underline{R}_n) dV = E c_n$$

$$E_a c_m + \sum_{n \neq m} V c_{m+n} = E c_n$$

lehet csak index

$$\begin{pmatrix} E_a & 0 & V & 0 & \dots & 0 \\ 0 & E_a & 0 & V & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \end{pmatrix} = E \quad \text{előirányzott helyezet } V$$

mindig ugyanazt azonon van az elektron  $\Rightarrow$   
tight binding lempége  $\rightarrow$  attudnak ugrálat  
(hopping törje)

$$\psi(\underline{r}) = \sum_n c_n \psi(\underline{r} - \underline{R}_n) = \text{Bloch-fürreirei sorozat}$$

$$= \sum_n e^{i \frac{2\pi}{a} \underline{R}_n} \psi(\underline{r} - \underline{R}_n)$$

$$c_n = e^{i \frac{2\pi}{a} \underline{R}_n}$$

melyet csinál le

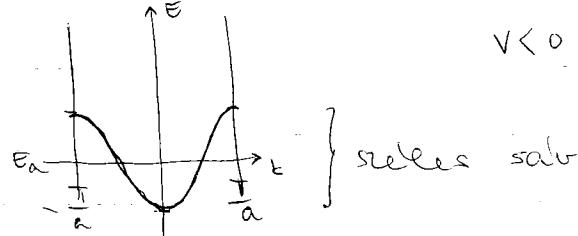
$$E e^{i \frac{2\pi}{a} \underline{R}_n} + \sum_n V e^{i \frac{2\pi}{a} (\underline{R}_n + \underline{k})} =$$

$$= E(\underline{k}) e^{i \frac{2\pi}{a} \underline{R}_n}$$

$$E(\underline{k}) = E_a + V \sum_n e^{i \frac{2\pi}{a} \underline{k}}$$

$$\xrightarrow[a]{V} E_a$$

$$1D \quad E(\underline{k}) = E_a + 2V \cos(k a)$$



lehetnek még más törlítő módszerek

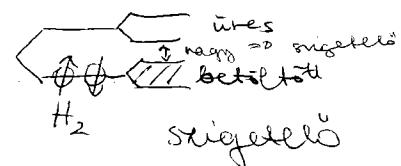
Péridolusos rendszerhidrogén

$\text{H}_2$  ->  $\leftarrow$  szab. a modell  $\rightarrow$  felig van betölthet  $\leftarrow$

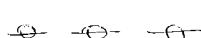
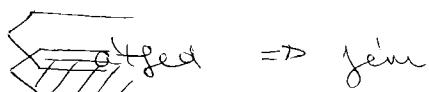
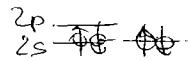


valójúban nem finom

tamen molekulákat alkotnak

szilárd hélium

szilárd hélium nincs 1 atm -ban

litium 2s pályán  $+e^-$ 
 $\leftarrow$  felig  
fém  $\leftarrow$  betölthet
bemillium

így lesznek a többi alkaliák is finom

92 elem van, ami megtalálható a Földön Rio. (Tc)

 $\hookrightarrow$  22 nemfém  $\rightarrow$  6 nemegyér $\hookrightarrow$  többi mind fém

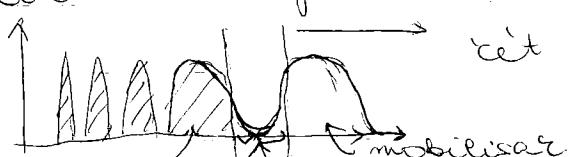
11.05.

A kapacitív ség-
 $(E, E+dE)$  tartományban húny  
alkapot van?  $\rightarrow D(E)dE$ 

kristályos anyagban: első csics magyon kesteny

 $\rightarrow$  legalább 2x alapot  $\Rightarrow$  egyptre szélesítéssel

végezen a deriváltját, ahol nullában vannak

 $\Rightarrow$  melegesen indulnem kristályostban nincsenek lépésen elválik  
sátor a végen.

cét morzgásnak ír

van janka  $\Rightarrow$  át is fedhetet  
nem mobilis

Eristályosban minden állapot megérhető († delocalizált)  
 nem eristályosban nem minden állapot mobilis  
 $\rightarrow$  ezek a localizált állapotek

jelölések:

szabad elektron modell (jö alkuli jelemeire)

= Sommerfeld - modell:

$E(\varepsilon)$  disperziós reláció

$$E = \frac{\hbar^2 \varepsilon^2}{2m}$$
 szabad elektronra

$m = e^-$  effektív tömege (massz)

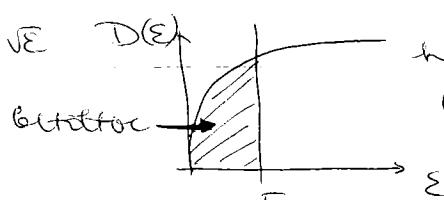
$$\varepsilon = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

számoljuk ki az állapotstűréseget!

$$D(E)dE = \sum_{\varepsilon} \lambda \underset{\varepsilon < E(\varepsilon) < d\varepsilon + \delta}{\text{spin miatt}} = \frac{V}{(2\pi)^3} 2 \int d^3 \varepsilon = \frac{V}{4\pi^3} 4\pi \varepsilon^2 dE =$$

$$= \frac{V}{\pi^2} \frac{2mE}{\hbar^2} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \cdot \frac{1}{4\pi^2 \varepsilon} dE = \frac{V}{\pi^2} \frac{\sqrt{2m^3 h}}{\hbar^3} \sqrt{\varepsilon} dE$$

$$D(E) = \frac{V}{\pi} \frac{\sqrt{2m^3 h}}{\hbar^3} \sqrt{\varepsilon}$$

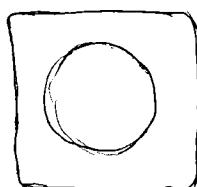


hasonlít 5 fr.-re  
 (előbb a törlés -  
 ben pont 5- fr.)

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

bonyolultabb eset:

BZ:



cellájában 1 atom

$\Rightarrow 2N$  állapot

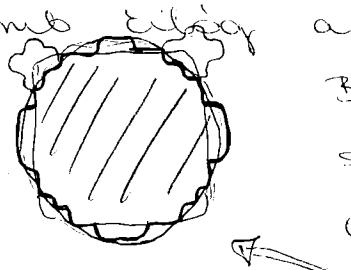
$\boxed{1}$  elektron / atom ad le

görbű felülete a rocka felé ...

görbű felülete a Fermi - felület  $\rightarrow$  belül van betöltve

ha  $\boxed{2}$  elektron / atom (II. főcsoport)

görbű rész



a rockából  $\rightarrow$  törögötök =

BZ határán a disperziós

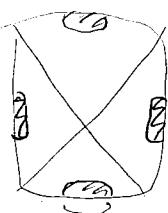
sem sej  $\rightarrow$  ugyanolyan írt

a felületen merőlegesen

Megy

masodik BZ-he betölgye a szabadra rögzített mátrixpon-

teret



Ez sajba török ki a Fermi-felület → átfedhet egymással

ezek a BZ-t periodikusak ⇒ bonyolult Fermi-felület és diszp. rel.

bejönnek íj fogalmak:

csoportsebesség ↔ fázissebesség

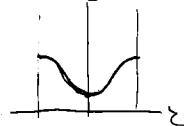
$$N_f = \frac{W}{|\varepsilon|} = \frac{\tau W}{\tau |\varepsilon|} = \frac{E}{\rho} = \frac{1}{h} \frac{E}{|\varepsilon|}$$

(E-hoz adott tartós és arányos művek)  
mintegy

$$\frac{\partial \omega(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{h} \frac{\partial E(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}$$

a részecské sebessége

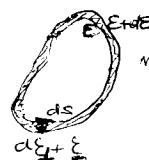
effektív tömeg tensor ≡  $(m)^{-1} = \frac{1}{h} \frac{\partial E}{\partial \varepsilon \partial \varepsilon}$



infexzis pontban az effektív tömeg  $\rightarrow \infty$

állapotszűrésg:  $D(E) dE = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{E-E_0}^{E_0} d\varepsilon$

$E < E(\varepsilon) < E + dE$



nem tudjuk most  $E(\varepsilon)$  diszp. rel.-t

$$\varepsilon = E(\varepsilon)$$

$$* = 2 \frac{V}{(2\pi)^2} \int d\varepsilon \int ds$$

↑ ↑  
felületre felület  
merőleges  $\varepsilon$

$$\frac{\partial E}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = dE$$

scalar szorozat  
merőleges a felületre  
 $|\frac{\partial E}{\partial \varepsilon}| d\varepsilon = dE$

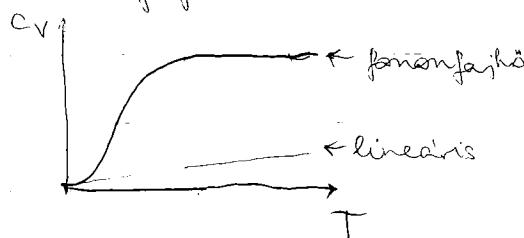
$$= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{ds}{|\frac{\partial E}{\partial \varepsilon}|} dE$$

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

$\propto \nu_{cs}$

- 1D-ben szinguláris
- 2D-ban néprána van
- 3D-ben csupán a dimenzió nem poligonos, a  $D(E)$  folyjt.

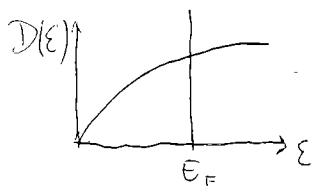
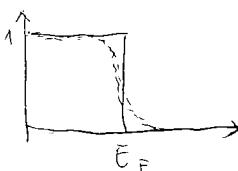
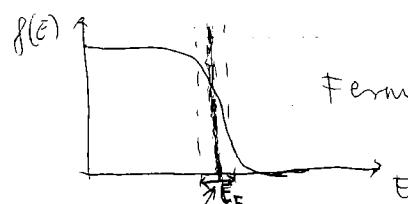
### Elétronfajho:



$$C_V = \alpha T + \beta T^3$$

→ sorral kisebb

## KONDENSÁLT

Betöltés ~~előkészítés~~  $T = 0 \rightarrow \text{ban}$ nem  $T = 0 \rightarrow \text{ban}$ 

Fermi - Dirac eloszlás

$$\text{szélesség} \approx k_B T$$

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}}$$

 $E_F \approx 1-3 \text{ eV}$  fémeknél függően $k_B T \approx 25 \text{ meV}$  szabályozásoknál

$$\Rightarrow E \gg E_F \rightarrow f(E) \rightarrow 0$$

$$\Rightarrow E \ll E_F \rightarrow f(E) \rightarrow 1$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{szélesség} \approx k_B T \\ \text{szélesség} \approx k_B T \end{array} \right\}$$



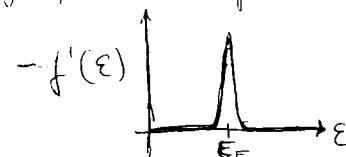
Bethe - Sommerfeld sorfejtés:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} g(E) f(E) dE = \underbrace{g(E) f(E)}_{\substack{\uparrow \\ \text{vagy Fermi - eloszlás} \\ \text{fz.}}} \Big|_0^\infty - \int_0^\infty g'(E) f'(E) dE =$$

$\frac{dG(E)}{dE}$

reiszegesekben  $\frac{dG(E)}{dE} = D(E)$

$$= - \int_{-\infty}^{+\infty} g'(E) f'(E) dE =$$



$f'(E)$ -t sorbafigyjuk  $E_F$  tömörl, mert ugyanis csak ott van

számít

$$= - \int_{-\infty}^{+\infty} g(E_F) f'(E) dE - \int_{-\infty}^{+\infty} g'(E_F) (E - E_F) f'(E) dE - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} g''(E_F) (E - E_F)^2 f'(E) dE =$$

$$= - g(E_F) [f(-\infty) - f(+\infty)] - g'(E_F) \int_{-\infty}^{+\infty} (E - E_F) \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}}} \frac{1}{(1 + e^{\frac{E-E_F}{k_B T}})(1 + e^{-\frac{E-E_F}{k_B T}})} dE + \times$$

$$f'(E) = \frac{-e^{\frac{E-E_F}{k_B T}}}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}}(1 + e^{\frac{E-E_F}{k_B T}})^2} = -\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}}} \frac{1}{(1 + e^{\frac{E-E_F}{k_B T}})(1 + e^{-\frac{E-E_F}{k_B T}})}$$

paritálan  
fz.  $\Rightarrow = 0$ 

$$+ \frac{1}{2} g''(E_F) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(E - E_F)^2}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}}(1 + e^{\frac{E-E_F}{k_B T}})(1 + e^{-\frac{E-E_F}{k_B T}})} dE =$$

$$\frac{E - E_F}{k_B T} = x \quad \text{valtozóval} \\ \text{integralyzik}$$

$$= - g(E_F) + \frac{g''(E_F)}{2k_B T} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(E - E_F)^2}{(1 + e^{\frac{E-E_F}{k_B T}})(1 + e^{-\frac{E-E_F}{k_B T}})} dE =$$

$$= - g(E_F) - \int_0^{E_F} g(E) dE + \frac{1}{2} g'(E_F) (k_B T)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2}{(1 + e^x)(1 + e^{-x})} dx$$

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} g(E) f(E) dE \stackrel{B.S.}{=} \int_0^{E_F} g(E) dE + \frac{\pi^2}{6} g'(E_F) (\xi_B T)^2$$

Eletronfajho állandó elektronszám mellett

$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} D(E) f(E) dE = \int_{-\infty}^{E_F(0)} D(E) dE + \frac{\pi^2}{6} D'(E_F(0)) (\xi_B T)^2 = \\ = \underbrace{\int_{-\infty}^{E_F(0)} D(E) dE}_N + \underbrace{(E_F(T) - E_F(0)) D(E_F(0)) + \frac{\pi^2}{6} D'(E_F(0)) (\xi_B T)^2}_0$$

$$E_F(T) = E_F(0) - \frac{\pi^2}{6} \frac{D'(E_F(0))}{D(E_F(0))} (\xi_B T)^2$$

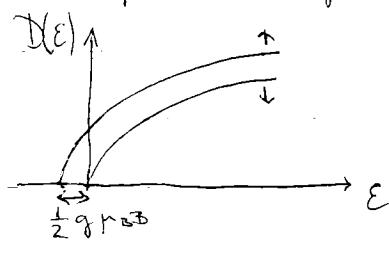
mindegyik hal

$$E(T) = \int_{-\infty}^{+\infty} E D(E) f(E) dE = \int_{-\infty}^{E_F(T)} E D(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (E D(E))_{E=E_F(T) \approx E_F(0)} (\xi_B T)^2 = \\ = \int_{-\infty}^{E_F(0)} E D(E) dE + \underbrace{(E_F(T) - E_F(0)) E_F D(E_F) + \frac{\pi^2}{6} (D(E_F) + E_F D'(E_F)) (\xi_B T)^2}_{-\frac{\pi^2}{6} E_F D'(E_F) (\xi_B T)^2}$$

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

$$C_V = \frac{dE(T)}{dT} = \frac{\pi^2}{3} D(E_F) \xi_B^2 T \quad \text{lineáris fajho, ami csat } D(E_F) - \text{töl jövög} \Rightarrow D(E_F) \text{ mértéke}$$

### Fémel paramágneses suszeptibilitása (Pauli paramágneses)

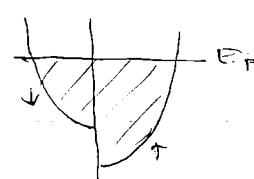


mágneses térfeléles spin  
teljesítéshez:  $\frac{1}{2} g \mu_B B$

$$g = 2 \quad \mu_B = \frac{e \cdot h}{2m} \quad \text{Bohr-magneton}$$

$$M = \frac{1}{2} g \mu_B \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{V}$$

ert legy szintén negatív, legy  $\Rightarrow$  több van  $\uparrow$  mint  $\downarrow$



$T=0$  - ban számoljuk a suszeptibilitást

$$\text{akkor} \quad N_\uparrow = \int_0^{E_F} \frac{1}{2} D(E \pm \frac{1}{2} g \mu_B B) dE = \\ = \int_0^{E_F} \frac{D(E)}{2} dE + \int_0^{E_F} \frac{D'(E)}{2} dE \left( \pm \frac{1}{2} g \mu_B B \right)$$

$\hookrightarrow \frac{N_\uparrow}{2}$

$$M = \frac{1}{2} g \mu_B \sqrt{D(E_F)} \frac{1}{2} (g \mu_B B) = \frac{1}{\sqrt{V}} \left( \frac{1}{2} g \mu_B \right)^2 D(E_F) B$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H}$$

$\sim \sqrt{V}$   
mintha valóban

gyengén mágneses anyag  $\Rightarrow B \approx \mu_0 H$

$\chi = \frac{1}{V} \left( \frac{1}{2} g \mu_B \right)^2 D(E_F) \mu_0$ .  $D(E_F)$  ezrel is mértető

~~$D(E) = \propto \sqrt{E}$~~   $\rightarrow N = \int_{E_F}^{\infty} \propto \sqrt{E} dE = \propto \frac{2}{3} E_F^{3/2}$

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

$$\chi_{\text{Pauli}} = \frac{1}{V} \left( \frac{1}{2} g \mu_B \right)^2 \frac{N}{E_F} \frac{3}{2} \mu_0$$

Eletromos vezetés - Drude modell

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m}$$

$\tau$  - relaxációs idő

$n$  - elektronok száma, amit vezetnek

mi de hogy elektron vezet? csak, amelyik a vezetési sínban van

a Drude-modell nem vezeti figyelembe a kvantumos viselkedést  $\Rightarrow$  ekkor jobb modell

fázister  $f(\xi \approx r)$

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \int f(\xi \approx r) d^3 \xi = \rho(r)$$

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int f(\xi \approx r) d^3 \xi d^3 r = N_{\text{el}} \text{ részecskék száma}$$

áránysúrúséget alkalmi számolni

$$f_{\text{elektromos}} = 2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int f(\xi \approx r) e \xi \cdot v \cdot d^3 \xi$$

spin miatt többség sebeség függ  $\xi$ -ból

$$\text{hőáram } I_{\text{energiája}} = 2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int E(r) v f(\xi \approx r) d^3 \xi$$

$$- E_F f = 2 \frac{1}{(2\pi)^2} \int E_F v f(\xi \approx r) d^3 \xi$$

részecskéáram

$$f_0 = 2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int (E(r) - E_F) v f(\xi \approx r) d^3 \xi$$

a hő alakhatja lejtani az elektronokat

$\Rightarrow$  termofeszültség

Peltier - egynélthető stb.

$f(t \approx)$  - t kell meghatározni:

$$\text{egyensúlyban } f(\varepsilon \approx) = f_0(\varepsilon \approx) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E(\varepsilon) - E_F}{kT}}}$$

$$\text{ittlőzés: } \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \dot{\varepsilon} + \frac{\partial f}{\partial N} \dot{N} = I_{\text{ittlőzés}}$$

$$\dot{\varepsilon} = eE + e(\omega \times B) \quad \dot{N} = \omega$$

→ egypensúlyban 0

leggyorsabb rözelítés a relaxációval rözelítés

$$I_{\text{ittlőzés}} = \frac{1}{e(kT)} (f(\varepsilon \approx) - f_0(\varepsilon \approx))$$

↑ fel foghat tenni, hogy nem függ  $\varepsilon$ -től

$$\frac{Df}{dt} = -\frac{1}{\tau}$$

$$\xrightarrow{\text{operator}} D = \frac{\partial}{\partial t} + [eE + e(\omega \times B)] \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} + \omega \frac{\partial}{\partial N}$$

$$\text{első rözelítés: } f = f_0 - \tau D f_0$$

$$\text{második ...: } f = f_0 - \tau D f_0 + (\tau D)^2 f_0$$

számos ... Bethe - Sommerfeld sorfejtés  $T^2$ -es tagjai

$$\text{bevezetünk egy terort } \Sigma(E) = e^2 2 \left( \frac{1}{2\pi} \right)^3 \frac{1}{h} \int \tau \frac{\frac{e^2 \sigma_0}{1+1}}{E - E_F} dS$$

ezzel minden tűhet jelezni:

$$\text{elektromos vezetés: } \frac{f}{f_{\text{elektromos}}} = \frac{\sigma}{E} \quad \text{korábban } T = \text{áll}$$

$$\text{vezetőcéppesség: } \Sigma(E = E_F) = \sigma$$

$$\text{legtöbbör: } \frac{f}{f_0} = \sigma \frac{I}{E} \quad \frac{f}{f_0} = \frac{1}{\sigma}$$

↑ gyakorlatban ellenállás

$$\text{hövezetés: } \frac{f}{f_0} = -\frac{2}{3} \text{ grad} T \quad (\text{az elektromos } = 0)$$

$$\frac{K}{T} = \frac{\pi k_e^2 T}{3e^2} \sigma(E_F)$$

$$\text{Lorentz - szám: } \frac{K}{T} = \frac{L^2 \epsilon_0^2}{3e^2} = L = 2,45 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W} \Omega}{\text{K}^2}$$

$$\text{Wiedemann - Franz - törzsi } \chi = L T \sigma \quad (\approx 10\% - ban teljesül)$$

↳ ami jól vezethet az jól hövezetés

kerektíptartásról is vanát:

1) termofeszültség

$$E = S \text{ grad} T \quad (\neq 0)$$

$S$  definiciója a Seebeck egyenlőségnél

$$S = \frac{\pi^2 e^2 T}{3e^2} \left[ \frac{\partial \ln \sigma(E)}{\partial E} \right]_{E=E_F}$$

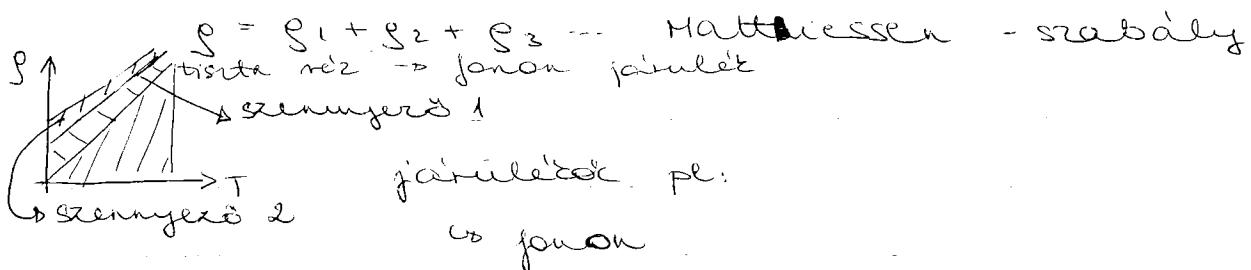
2) Peltier - effektus:

$$\dot{Q} = \Pi j_{\text{elektronos}} \quad (T = \text{du})$$

$$\Pi = TS \quad \text{Onsager - reláció}$$

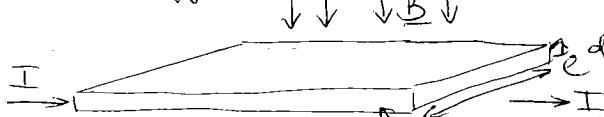
$$\text{Több effektus: } \frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \frac{1}{\tau_3} \dots$$

fajlagos ellenállásokat össze lehet adni



- ↳ szennyező → valószínűlés → diszlokációk, vataanciklák
- ↳ magnon (magneses terjeszték ferromagneses anyagoknál)

Hall - effektus:



$$eE = evB$$

$$E = vB$$

$$U = lE = vBl$$

felváltódir a fal az elhangzás töltéséről miatt

$$j = nev$$

$e^-$  számának növekedése

$$I = evnl$$

felület

$$U = -\frac{I}{cnld} Bl = \frac{1}{cnld} BI = U$$

el. Hall - állandó  $\frac{1}{cn} = R_H$   
merítő

$$\text{localisan: } E = vB = \frac{1}{cn} jB$$

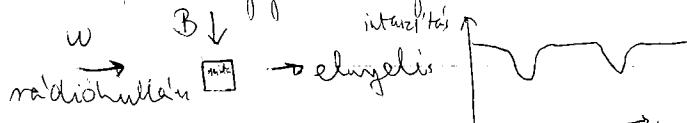
$$E = R_H (\vec{j} \times \vec{B})$$

↳ ez a definíciója

$E(\varepsilon)$  összefüggése a nagy körülésekkel

Fermi - felület elmozdítása: elektron rezonancia:

elektrom. hőmérőtől, nagy magneses törésekkel



mozgásegyenlet  $\vec{m} \vec{v} = e(\vec{v} \times \vec{B})$   $\frac{dE}{dt} = \frac{1}{m} \frac{\partial E}{\partial \vec{v}}$   $\rightarrow$  Fermi-felületre



$$T = \int dE dt = \int \frac{1}{E_{\parallel}} dt_{\parallel}$$

$$dt_{\parallel} = ev_{\perp} B$$

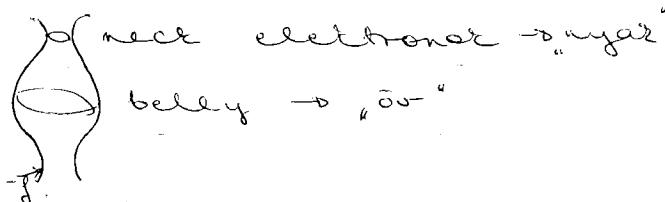


$$T = \frac{e}{cB} \frac{1}{v_{\perp}} dt_{\parallel} = \frac{e}{cB} \int \frac{1}{\frac{1}{v_{\perp}} \frac{\partial E}{\partial v_{\perp}}} dt_{\parallel}$$

$$T = \frac{e^2}{cB} \frac{1}{\Delta E} \int dt_{\perp} dt_{\parallel} = \frac{e^2}{cB} \frac{\Delta S}{\Delta E} \Rightarrow \frac{e^2}{cB} \frac{\partial S}{\partial E}$$

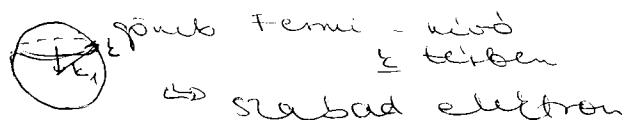
felületváltozás

$$\omega = \frac{2\pi eB}{\hbar^2} \frac{1}{(\frac{\partial S}{\partial E})_{E=E_F}}$$



nagy az elnyelés a  $(\frac{\partial S}{\partial E})_{E=E_F}$  stacionáris értéknél (ahol sor metszet egyformán)

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



$$S = (\epsilon^2 - \epsilon_1^2) \pi = \frac{2\pi E}{\hbar^2} \pi - \epsilon_1^2 \pi$$

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{2\pi \pi}{\hbar^2}$$

$$\omega = \frac{2\pi eB}{\hbar^2} \frac{1}{\frac{2\pi \pi}{\hbar^2}} = \frac{eB}{m}$$

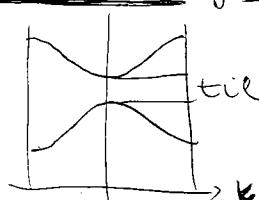
klassz.-an is kiőn a szabad  $\star$  elektron  $m\omega^2 r = e m \omega B$

$$\omega = \frac{eB}{m}$$
 Larmor-frekencia

felületről lehet erre a módszerrel infót szerezni

### Szigetelő és félvezető

$$E(\epsilon)$$



tiltott salv (GaAs)

állapotfügg

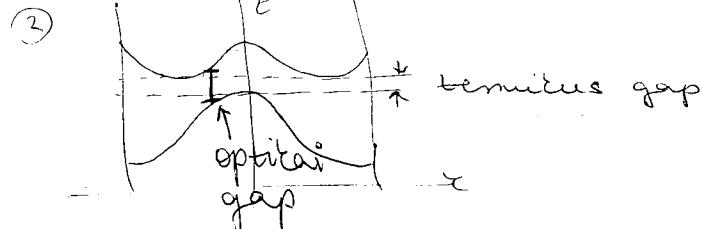
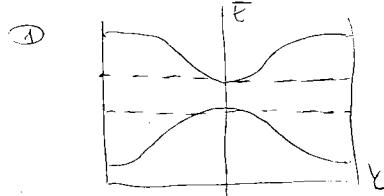


nem lehet közöttük különbséget tenni

félvezető, amit a félvezető technológiához használ gap energiát lehet mérni  $\rightarrow$  mellekítéssel, absorbcionval

① direkt félvezető  $\rightarrow$  Ge ( $0,2$  eV)

② indirekt  $\rightarrow$  Si ( $1$  eV)

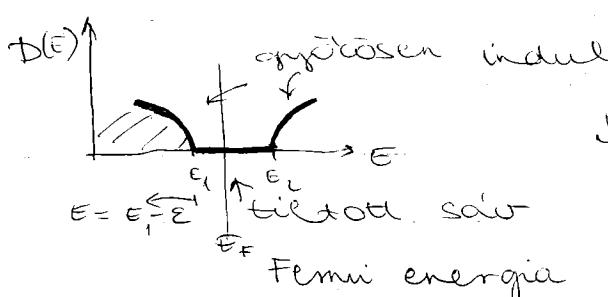


Látható jöny  $1,7$  eV-tól  $\rightarrow$  Si optikai gapje ennek köszönhetően nem ki, mert gyorsabban elektronok száma, de a spin miatt

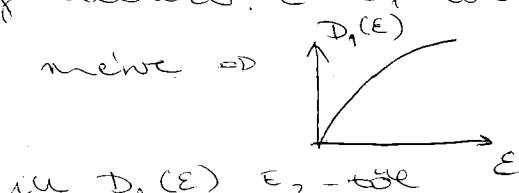
$$N = 2 \sum_{k_i} \frac{1}{1 + e^{\frac{E(E) - E_F}{k_B T}}} =$$

i. a. sávindex, átfut állapotstörésigye  $\Rightarrow$

$$= \int \frac{D(E)}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}} dE = \int_{E_1}^{E_2} dE \frac{D(E)}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}} + \int_{E_2}^{\infty} dE \frac{D(E)}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}} =$$



Ig változás:  $E_1$ -tól legfeljebb megnéha  $\Rightarrow$



$$* = \int \frac{D_1(E)}{1 + e^{\frac{E_1 - E_F - E}{k_B T}}} dE + \int_0^{\infty} \frac{D_2(E)}{1 + e^{\frac{E_2 + E - E_F}{k_B T}}} dE$$

exponensben  $1 - n$  <sup>isgal</sup> <sup>negatív</sup> magasabb <sup>r</sup> sávban van, mert a gap  $\approx 1$  eV negysárgendül a terminus energiára pedig meV negysárgendül

$$\frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}} \approx 1 - e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}$$

$$\int D_1(E) dE = e^{\frac{E_1 - E_F}{k_B T}} \int D_1(E) e^{-\frac{E}{k_B T}} dE \quad \text{az elso tagbol}$$

második tagbol

$$\frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}} \approx e^{-\frac{E - E_F}{k_B T}}$$

$$N = \underbrace{\int D_1(\varepsilon) d\varepsilon}_{\downarrow} - e^{\frac{E_F-E_1}{k_B T}} \underbrace{\int D_1(\varepsilon) e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} d\varepsilon}_{\downarrow} + e^{\frac{E_2-E_F}{k_B T}} \underbrace{\int D_2(\varepsilon) e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} d\varepsilon}_{\downarrow}$$

+  $\infty$  -  $\varepsilon$  nél a legmagasabb függés

$T=0$  --ra  $N = N_F$

$N(T) = N(0)$

$\Leftrightarrow N_F = N_e$

Fermi - energiáról ami a hőmérséklettel valószínűségi vezetési súrban  $e^{-\varepsilon/k_B T}$

szükséges a Fermi - energiáról referenciára

$$e^{-\frac{E_1+E_2-2E_F}{k_B T}} = \frac{\int D_1(\varepsilon) e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} d\varepsilon}{\int D_2(\varepsilon) e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} d\varepsilon}$$

$$E_F = \frac{E_1+E_2}{2} + \frac{1}{2} k_B T \ln \left( \frac{\int D_1(\varepsilon) e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} d\varepsilon}{\int D_2(\varepsilon) e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} d\varepsilon} \right)$$

ez a fontos  $T$  -függés

$T=0$  -ban  $\frac{E_1+E_2}{2}$  -nél van a Fermi - mód

Sommerfeld - modelben volt:

$$D(\varepsilon) = \frac{V}{\pi^2} \frac{m^{3/2}}{h^3} \sqrt{\varepsilon}$$

$= \propto$   $\rightarrow$  megszámolt részbeni

min lesz a hyperbolikus tartomány az  $m^*$  az elektronikai

$$\propto m^{3/2} \int \sqrt{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} d\varepsilon$$

csak a tömegben változtatva a tért integrál

$$E_F = \frac{E_1+E_2}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \left( \frac{m^*}{m_e e^*} \right)$$

az effektív tömeget

$$\frac{m^*}{m_e} = 0,073 \quad \text{Opt}$$

$$\frac{m^*}{m_e} = 0,4 \quad 0,68$$

$$m_{\text{size}}^* = \begin{pmatrix} 0,92 & \text{Indium - foszfid} \\ 0 & 0 \\ 0 & 0,92 & 0 \\ 0 & 0 & 0,19 \end{pmatrix} \quad \text{GaAs}$$

Felvezető vezetése : ha melegítjük

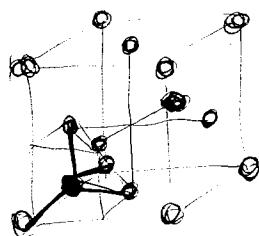
$$\underline{W}_{el} = -\mu_{el} E$$

→ moxgérőnyomás (olyan mint a

$$\bar{N}_h = \mu_h \in$$

$$F = c(\mu_{\text{elast}} + \mu_{\text{anis}})E$$

$$\sigma = e^{(\mu_e - \mu_{\mu}) + \mu_{\text{noise}}} \propto e^{-\frac{E}{kT}}$$



minden Si ionik 4 atom

Si Si Si Si

*V. C.*                    *J. D.*

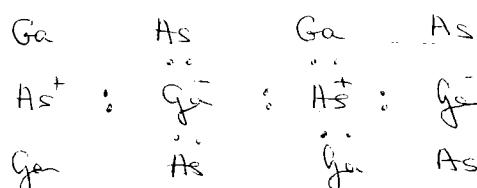
si si si Sei

8 electron egg

atom. Königl., am 1. Februar 1847. ⇒ ers. Königl.

Ga As felveretőnek nagyobb rész a szappje

Very leathery fine tanning → LTD etc



## Felvezető anyaga:

IV. oslop Si Ge

$\overline{I}_{\text{II}} - \overline{V}_{\text{III}}$  overlap Ga-P, Ga-As, In-P, In-As

SiC is van

Eset voltak az intrinsik féléretet

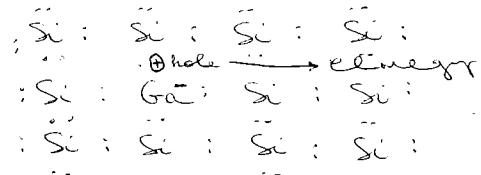
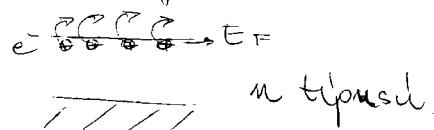
Fönnel az adalitelt / szenájeret / extrinsik  
jelveretek :

Si : Si : Si : Si : Si :  $\text{O}^-$   $\leftarrow$  tetrahedral lone pair dielectric constant  $\epsilon$   $P^+$

: Si : Si : P<sup>+</sup> : Si : enrol

Si : Si : Si : Si :

$P^+$  + növek ~~acceptor~~ <sup>donator</sup> pl: N, As, Sb, P  $\rightarrow e^-$ -t ad le  
~~acceptor~~ donor  $\approx 0,01$  eV  
 ñ eicsi  $\rightarrow$  már a hőm. n. kismed  
 melegben nem működik a felvároto, magyon  
 melegben meg töltetmegy



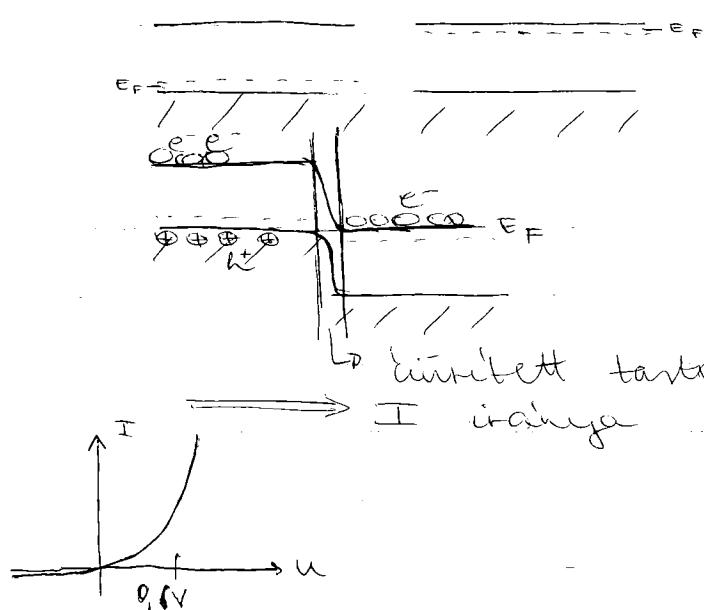
acceptor Al, Ga, In



erőteljes lehet egymás mellé tenni  
 pl. ötvözessel (szeldiffundál a P melegben...)  
 elektron + lyukat recombiniálhat, amíg  
 találkoznak

Kialakul diffúziós feszültség (0,6 V)

P-n átmenet:



a rét Fermi - alak  
 kiemelkedődik

sokszorosított

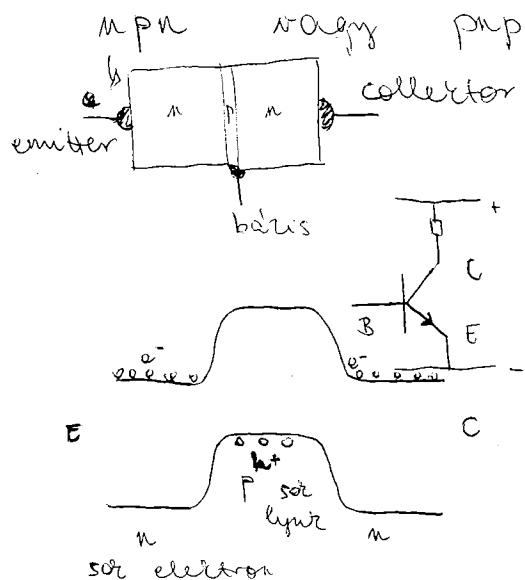
hirtelen tartomány  $\uparrow$

I irányba

előállítás: ~ szilicium nélkülisza zsinór-  
 hosszal - reletivel's

- röcskebanat sem szabad benne lennie
- sennyezést, finet nélküli működésre

Transzistor:



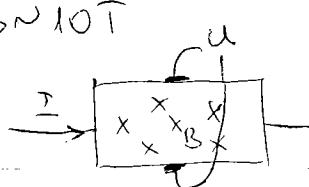
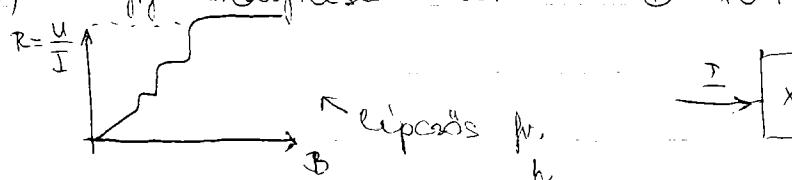
áramerősítési tényező  $\beta \approx 400$   
(jól alkotve)

bázisáram segíti az áramot  
erősítés  $\Rightarrow$  kis teljesítménnyel  
egy nagyot verélünk (növekvő)

FET: a körülötti rétegek nem tudnak átmenni a  
töltést  $\rightarrow$  ellenállásra működik, amit lehet változtatni.

Quantum Hall effect:

- 1) vétoinyújtó  $\rightarrow$  2D (egy atom vastag)
- 2) alacsony hőm  $\rightarrow$  1-3K (nagy szabad üthető)
- 3) nagy mágneses térfeld  $B \approx 10T$



$$R_{\text{max}} = \frac{h}{e^2} = 25,82 \Omega$$

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$\text{lehet: } R = \frac{h}{e^2} \frac{1}{n}$$

$$e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

(experimentális kvantum Hall - effektus  
van fel meg használva ...)

$$\underline{A} = \begin{pmatrix} 0 & xB \\ -x & 0 \end{pmatrix}$$

$$\underline{B} = \begin{pmatrix} 0 & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$H = \frac{(p_x - eA_x)^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{(p_y - exB)^2}{2m}$$

$$H\Psi(x, y) = E\Psi(x, y)$$

$$\Psi(x, y) = e^{ixy} \Psi(x) \quad \text{alakban}$$

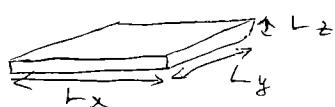
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - exB\right)^2}{2m}$$

$$H\psi = e^{ixy} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + \frac{(\hbar k - exB)^2}{2m} \psi(x) \right) = E e^{ixy} \psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + \frac{(eB)^2}{2m} \left( x - \frac{\hbar k}{eB} \right)^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\omega = \frac{eB}{m} \quad x_0 = \frac{\hbar k}{eB}$$

$$E = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$



$$0 < x_0 < L_x$$

$$0 < z < \frac{eB}{\hbar} L_x$$

$\epsilon$  szinten degenerált állapotok

degenerációs füle  $N = \frac{L_y}{2\pi} \int_{0}^{\frac{eB}{\hbar} L_x} dk = \frac{eBL_x L_y}{2\pi \hbar} = \frac{cBL_x L_y}{h} = \frac{eBV}{hL_z}$

Hall effektus:  $E = R_H I B$



$$R_H = \frac{1}{ne}$$

egy sűrűn töltött  
vezetőben



$$U = \frac{R_H}{L_z} I B \quad \frac{U}{I} = \frac{R_H}{L_z} B$$

Fermi szint előre több  
szinten  $\rightarrow$  Landau szintek

ha csökken  $B$  egyre több szint  $\rightarrow$  folytonos

$$\frac{U}{I} = \frac{1}{neL_z} B \quad n = \frac{N}{V} = \frac{eB}{hL_z} m \leftarrow \text{egy}$$

$$= \frac{h}{e^2} \frac{1}{m} \quad \text{töltött} \quad m = \frac{\text{felfoltott}}{\text{Landau szintek száma}}$$

## Magnesésg

Olyanok magneses anyagaik:

diamagnes  $\chi < 0$   $\mu < \mu_0$

paramagnes  $\chi > 0$   $\mu > \mu_0$

atomok magnesége

elektronok magnesége

fém paramagnesége  $\equiv$  Pauli paramagnesége

$$\chi_p = \frac{N \mu_0 \mu_0}{V E_F^{1/2}}$$

Hi dox mágnessejget? impulzusmomentum

polárismomentum  $L$   $\underline{L}^2$   $L_z$

$$\hbar^2 l(l+1) \quad (-l \dots +l) \tau_h$$

spin  $S$   $\hbar^2 S(S+1) \quad (-S \dots +S) \tau_h$

összmomentum  $J$   $\hbar J(J+1) \quad (-J \dots +J) \tau_h$

$$\underline{M} = \frac{\mu_B}{\hbar} (\underline{L} + 2\underline{S})$$

$$E = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \cancel{\frac{B}{B}} = -g \mu_B m B = -g \mu_B m B = -j \leq m \leq j$$

$$\underline{M} = n g \mu_B \underbrace{\sum_{m=-j}^j m e^{\frac{g \mu_B m B}{\hbar T}}}_{\substack{\text{atom/bérfigye} \\ \cancel{\sum e^{\frac{g \mu_B m B}{\hbar T}}}}} \quad S = \frac{\sum_{m=-j}^j e^{\frac{m x}{\tau_h}} m}{\sum_{m=-j}^j e^{\frac{m x}{\tau_h}}} = \cancel{\int} \frac{d}{dx} \ln Z(x)$$

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

$$= \frac{e^{x(1+\frac{1}{2j})} - e^{-x}}{e^{\frac{x}{\tau_h}} - 1} = \frac{e^{x(1+\frac{1}{2j})} - e^{-x(1+\frac{1}{2j})}}{e^{\frac{x}{\tau_h}} - e^{-\frac{x}{\tau_h}}} = \frac{\operatorname{sh}\left[x(1+\frac{1}{2j})\right]}{\operatorname{sh}\left[\frac{x}{\tau_h}\right]}$$

$$\text{Brillouin - fü.: } B_j(x) = \frac{d}{dx} \ln Z(x) = \frac{d}{dx} \left( \ln \left( \frac{\operatorname{sh}\left[x(1+\frac{1}{2j})\right]}{\operatorname{sh}\left[\frac{x}{\tau_h}\right]} \right) \right) = (1+\frac{1}{2j}) \frac{\operatorname{ch}\left[x(1+\frac{1}{2j})\right]}{\operatorname{sh}\left[x(1+\frac{1}{2j})\right]} - \frac{1}{2j} \frac{\operatorname{ch}\left[\frac{x}{\tau_h}\right]}{\operatorname{sh}\left[\frac{x}{\tau_h}\right]} =$$

$$= (1+\frac{1}{2j}) \operatorname{cth}\left[x(1+\frac{1}{2j})\right] - \frac{1}{2j} \operatorname{cth}\left[\frac{x}{\tau_h}\right]$$

$$1) j = \frac{1}{2} \quad B_{\frac{1}{2}}(x) = 2 \operatorname{cth}(2x) - \operatorname{cth}(x) = 2 \frac{\operatorname{ch}x - \operatorname{sh}^2 x}{2 \operatorname{sh}x \operatorname{ch}x} - \frac{\operatorname{ch}x}{\operatorname{sh}x} \frac{dx}{dx} =$$

$$= \frac{\operatorname{sh}^2 x}{\operatorname{sh}x \operatorname{ch}x} = \operatorname{th}x$$

2) Előszörössé eset  $j \rightarrow \infty$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} B_j(x) = \operatorname{th}x - \frac{1}{x}$$

Langer - fü.

$$3) \lim_{x \rightarrow 0} B_j(x) = 1$$

$x \ll 1$  - rea

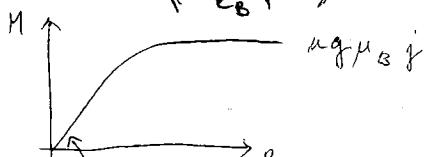
$$\operatorname{cth}(x) = \frac{\operatorname{ch}(x)}{\operatorname{sh}(x)} \approx \frac{1 + \frac{x^2}{2}}{x + \frac{x^3}{6}} = \frac{1}{x} \left( \frac{1 + \frac{x^2}{2}}{1 + \frac{x^2}{6}} \right) =$$

$$\approx \frac{1}{x} \left( 1 + \frac{x^2}{2} - \frac{x^2}{6} \right) = \frac{1}{x} + \frac{x}{3}$$

$$B_j(x) \approx \frac{1 + \frac{1}{2j}}{x(1 + \frac{1}{2j})} - \frac{\frac{1}{2j}}{x \frac{1}{2j}} + \frac{x(1 + \frac{1}{2j})^2}{3} - \frac{x(\frac{1}{2j})^2}{3} =$$

$$= \frac{x}{3} \left( 1 + \frac{1}{j} \right) = \frac{x(1 + \frac{1}{j})}{3j}$$

$$M = mg \mu_B f B_i \left( \frac{g \mu_B f B}{k_B T} \right)$$



$$M \approx n(g/\mu_B)^2 \frac{j(j+1)}{3} \frac{1}{\epsilon_B T} B$$

$$M = \infty H \quad \chi = n(\gamma \mu_B)^2 \mu_0 \frac{f(j+1)}{3} \frac{t}{E_B}$$

Atomi paramagnetici  
susceptibilità

$$\chi = \frac{C}{T} \quad \text{Curie - to.}$$

atmeneti fémek soi jöt ere  $\rightarrow T \rightarrow 0$   $X \rightarrow \infty$

(adiabatisse lemaignescis)

El volt a parlemàgnessegó. Hi havia molts joves a la plaça.

Atomic diamagnetism:

$$m\omega_0^2 \rho = F$$

electron pôrôg a

$$m(\omega_0 + \Delta\omega)^2 g = F + e(\omega_0 + \Delta\omega) g B$$

Marg Löövil

$$m\omega_0^2 g + 2m\omega_0 \Delta w g = F + e\omega_0 g B$$

$$\Delta w = \frac{eB}{2m}$$

i - air electron mettora magnesia momentum

$$\text{hiz. lettre ? } \mu_i = -e^{\frac{\Delta w}{2\pi} S_i^2 \pi}$$

$$\mu_z = \sum_i \mu_i = -e \frac{\Delta\omega}{2\pi} \sum_i g_i^2 \pi = -ze \frac{\Delta\omega}{2} \langle g^2 \rangle$$

$$\langle \dot{y}^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle \quad \langle r^3 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle \quad \Rightarrow \quad \langle \dot{z}^2 \rangle = \frac{2}{3} \langle r^2 \rangle$$

$$\mu_2 = -ze \frac{\Delta\omega}{3} \langle r^2 \rangle$$

$$M = -n \frac{ze}{3} \langle r^2 \rangle \frac{eB}{2m} = -n \frac{ze^2}{6m} \langle r^2 \rangle \mu_0 H$$

atoms diamagnesos susceptibilidade

Se abad electron (femei) diamagnetice susceptibili -

litasa = Laudan diamagnesia

Tc: klassitusaan mincs

$$\underline{B_{12}} : \quad \# = \frac{1}{2m} (p - eA(r))^2$$

$$Z = \iiint e^{-\frac{H}{k_B T}} d^3 p d^3 r$$

$$\left. \begin{array}{l} \tilde{p} = p - eA(r) \\ \tilde{r} = r \end{array} \right\} \rightarrow \text{Jacobi} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial p} & \frac{\partial \tilde{p}}{\partial r} \\ \frac{\partial \tilde{r}}{\partial p} & \frac{\partial \tilde{r}}{\partial r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & \frac{\partial \tilde{p}}{\partial r} \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

$$Z = \iiint e^{-\frac{1}{2m k_B T} \tilde{p}^2} \det J d^3 p d^3 r$$

$\rightarrow$  Jacobi determinans = 1

kibtranszformálta a mágneses teret

$\hookrightarrow$  klasszikusan nincs susceptibilitás

Évantumosan kell számolni!

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

$$\begin{aligned} \text{u.i. } \int_{n_1 - \frac{1}{2}}^{n_2 + \frac{1}{2}} f(x) dx &= \sum_{n=n_1}^{n_2} \int_{n - \frac{1}{2}}^{n + \frac{1}{2}} f(x) dx = \\ &= \sum_{n=n_1}^{n_2} \int_{n - \frac{1}{2}}^{n + \frac{1}{2}} [f(n) + f'(n)(x-n) + \frac{1}{2} f''(n)(x-n)^2] dx = \\ &\quad \hookrightarrow \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} x dx = \frac{1}{12} \end{aligned}$$

$$= \sum_{n=n_1}^{n_2} \left( f(n) + 0 + \frac{1}{2} f''(n) \frac{1}{12} \right) = \sum_{n=n_1}^{n_2} f(n) + \sum_{n=n_1}^{n_2} \frac{1}{24} f''(n) \approx$$

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

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

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

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left[ p_x^2 + (p_y - eBx)^2 + p_z^2 \right] \quad \mathbb{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}$$

$$\Psi(x, y, z) = e^{i\epsilon_y y} e^{i\epsilon_z z} \psi(x)$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{(eB)^2}{2m} \left( x - \frac{\hbar k_y}{eB} \right)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\omega = \frac{eB}{m} \quad x_0 = \frac{\hbar k_y}{eB}$$

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (x - x_0)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

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

$\Rightarrow \varepsilon_y$  scint degeneració van

teljes energia alapállapotban ( $T = 0K$ )

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

$$0 < x_0 < L_x \Rightarrow 0 < k_y < \frac{eB}{\hbar} L_x$$

$$\sum_{\varepsilon_y} 1 = \frac{L_y}{2\pi} \int dk_y = \frac{L_x L_y}{2\pi \hbar} eB$$

$$\sum_{\varepsilon_z} (E(\varepsilon_z, n) - E_F) \rightarrow \text{csat ha } E(\varepsilon_z, n) - E_F < 0$$

azkorra scimmit  $E(\varepsilon_1, n) = E_F \Rightarrow \varepsilon_1$  definiciója

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2 \varepsilon_1^2}{2m} + \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) = E_F$$

$$\varepsilon_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \left( E_F - \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \right)$$

$$\sum_{\varepsilon_z} (E(\varepsilon_z, n) - E_F) = \frac{L_z}{2\pi} \int_{-\varepsilon_1}^{\varepsilon_1} \left( \frac{\hbar^2 \varepsilon_z^2}{2m} + \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) - E_F \right) d\varepsilon_z =$$

$$= \frac{L_z}{2\pi} \left[ \frac{\hbar^2 \varepsilon_1^3}{3m} + \underbrace{\hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) 2\varepsilon_1 - E_F 2\varepsilon_1}_{-\frac{\hbar^2 \varepsilon_1^3}{m}} \right] = -\frac{L_z \hbar^2 \varepsilon_1^3}{3\pi m}$$

$$E = 2 \frac{L_x L_y eB}{2\pi \hbar} \frac{(-L_z \hbar^2)}{3\pi m} \sum_n \varepsilon_1^3 = -\frac{V}{3\pi^2} \hbar \omega \sum_n \varepsilon_1^3$$

$$\sum_{n=0} \varepsilon_1^3 = \sum_{n=0} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left( E_F - \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \right)^{3/2}$$

$$n_1 = 0$$

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

$$\text{első tag: } \int_{n_1 - \frac{1}{2}}^{n_2 + \frac{1}{2}} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E_F - \hbar\omega(x + \frac{1}{2}))^{5/2} dx =$$

$$= - \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{2}{5} (E_F - \hbar\omega(x + \frac{1}{2}))^{5/2} \frac{1}{\hbar\omega} \Big|_{n_1 - \frac{1}{2}}^{n_2 + \frac{1}{2}} =$$

$$= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{2}{5} \frac{E_F^{5/2}}{\hbar\omega}$$

$$E_o = - \frac{V}{15} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{5/2} \quad \text{szabad elektron energiaja}$$

$$\text{masodik tag: } f(x) = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E_F - \hbar\omega(x + \frac{1}{2}))^{5/2}$$

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

$$f'\left(n_2 + \frac{1}{2}\right) \approx 0$$

$$f'\left(n_1 - \frac{1}{2}\right) = f'\left(-\frac{1}{2}\right) = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{3}{2} E_F^{1/2} \hbar\omega$$

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

$$= E_o - \frac{V}{48\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{1/2} (\hbar\omega)^2$$

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

$$E = E_o - \frac{V}{48\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{1/2} \underbrace{\left(2\mu_B B\right)^2}_{(2\mu_B)^2 \mu_0 H^2}$$

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

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

$$\chi_{LD} = - \frac{N}{2V} \frac{1}{E_F} \mu_B^2 \mu_0 \quad \text{Landau - diamagnesség}$$

$$\chi_{PP} = \frac{3}{2} \frac{N}{V} \frac{1}{E_F} \mu_B^2 \mu_0 = - 3 \chi_{LD} \quad \text{Pauli - paramagnesség}$$

(valójában nem író)

felirben:  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$  m: electron tömeg

$$\chi_{LD} = - \frac{N}{2V} \frac{1}{E_F} \left(\frac{e\hbar}{2m}\right)^2 \mu_0 \rightarrow \text{effektív tömeg } \frac{\text{ell}}{\text{belse}}$$

$$\chi_{PP} = \frac{3}{2} \frac{N}{V} \frac{1}{E_F} \left(\frac{e\hbar}{2m}\right)^2 \mu_0$$

Működés mágneses momentummal rendelkező atomok

- 1) ferromágnesség  $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$   
parciális mágnesek a momentumon

2) antiferromágnesség  $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$

3) ferrimágnesség  $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow$

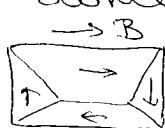
pl: Fe + Mn atomok

4) spinúveg  $\rightarrow$  rendszetben általak  
be a spinet  $\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow$  3D-be-

1) jól felmágneszethető vasban minden spin

egy irányban áll

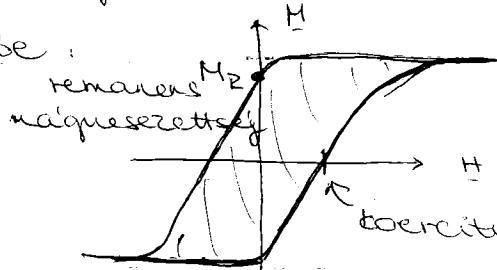
részek  $\rightarrow$  domain terület



$B = 0$  esetben  
felmágneszésre

ámenyal forrás  $\rightarrow$  szélein  
fordulnak a spinet

histerézis görbe:



teljesí mágnes-  
zetttség

ferromágnesség

klasszikus elmélete:

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

$$M = f(H)$$



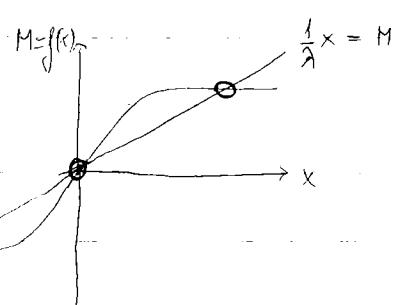
- Weiss  $\rightarrow$  van valami, ami beakarja  
állítani a spinet  $\rightarrow$  belső térfelületen  
pozitív misszonsztolás)

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

$$- ha H = 0 \quad M = f(\gamma M)$$

tülső térfelületen is

vann mágneszettség



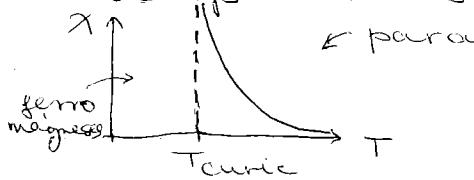
- dipól - dipól kölcsönhatásossal nem lehet meggyarázni  $\rightarrow$  m.k. hőmérséklet szerződhetetlen
- Curie - pont fölött elveszi a mágneserettséget
- Eis H esetén ( $M$  is még van)

$$M = f(H + \lambda M) = \frac{x}{1-\lambda x} (H + \lambda M) = \frac{x}{1-\lambda x} H + \frac{x\lambda}{1-\lambda x} M$$

linearisan indukció fü.

$$M = \frac{x}{1-\lambda x} H = \frac{\frac{C}{T}}{1-\lambda \frac{C}{T}} H = \frac{C}{T-\lambda C} H$$

mágneszenneliség  $\frac{1}{T}$  - vel arányos volt B



Curie - Weiss - tör.  $\rightarrow$  jól teljesül

Mágnesz anyagot Heisenberg - fele operátora:

$$H = \sum_{i,j} (J_{ij} S_i S_j) + \sum_i \mu S_i B$$

egyik és másik spinre

Ising - modell:

$$H = - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \mu B \sum_i S_i$$

csövön keresztben  $S_i (+1, -1)$

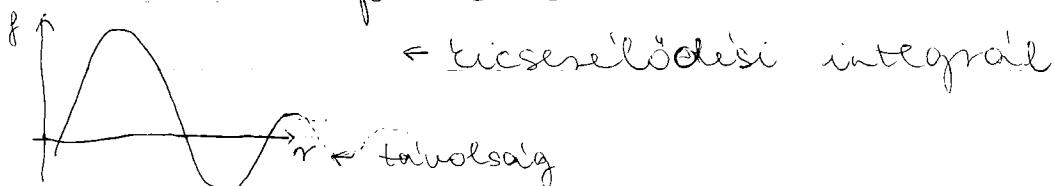
azt akarjuk meghatározni

$$B = 0 \text{ -nál } 1D \text{-ban} \rightarrow T_{\text{Curie}} = 0$$

2D - ban (Orsager) van m.o.

3D - ban csak numerikus m.o.

a kicsereklődési kölcsönhatás okozza beállítani a spineket



$$H = - \sum J_{ij} S_i S_j$$

$\uparrow$   
spinoperátorok (imp. mom.) · skalárcsatorna

$$\rightarrow L_x - L_y - L_z = i\hbar L_z$$

## KONDENZÁLT

$$L_+ = L_x + iL_y \quad L_- = L_x - iL_y \quad [L_+, L_-] = 2L_z$$

alapállapotban minden spin eggy irányban áll  $\rightarrow T=0$  hőm.

Bose = részecskék a magnonok  $\rightarrow$  spinhullámok

$$H = -\int \sum_{\langle i,j \rangle} S_{ix} S_{jx}$$

$\times [S_{nx}, S_{np}] = i\hbar \delta_{nn} \sum_{\beta} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{\gamma}$

$$H = -\int \sum_{\substack{\{p,q\} \\ \beta}} S_{pp} S_{qp} \quad (\text{p,q: melyik atom?})$$

$\beta: x, y, z$

megfelelően:  $i\hbar \frac{d}{dt} S_{nx} = [S_{nx}, H]$

$$[S_{nx}, S_{pp} S_{qp}] = [S_{nx}, S_{pp}] S_{qp} + S_{pp} [S_{nx}, S_{qp}]$$

$$= i\hbar [S_{np} \sum_{\beta} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{\gamma} S_{qp} + S_{nq} \sum_{\beta} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{\gamma p}]$$

$$\frac{dS_{nx}}{dt} = -\int \sum_{\{p,q\}} [ \dots ] = -\int \sum_{\beta} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} [ \sum_{\{q\}} S_{\gamma} S_{qp} + \sum_{\{p\}} S_{pp} S_{nq} ]$$

$$\frac{dS_{nx}}{dt} = -\int \sum_{\{p,q\}, \beta} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (S_{\gamma} S_{qp} - S_{pq} S_{\gamma p})$$

indexekre  $\uparrow$  n' eső szomszédja

linearizálni kell ezt az egyenletet:

$$S_n = S_0 + \Delta S_n$$

$\uparrow$  operátorok

$$S_{nq} S_{pp} = S_{nq} S_{p\beta} + S_{nq} \Delta S_{p\beta} + S_{p\beta} \Delta S_{nq}$$

$$\frac{\partial \Delta S_{nx}}{\partial t} = -\int \sum_{\{p,q\}, \beta} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (S_{\gamma} \Delta S_{pp} + S_{p\beta} \Delta S_{nq} - S_{nq} \Delta S_{p\beta} - S_{p\beta} \Delta S_{nq})$$

$$\frac{d\Delta S_{nx}}{dt} = -2\int \sum_{\{p\}, \beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{\gamma} (\Delta S_{p\beta} - \Delta S_{nq})$$

ez már lineáris egyenletekkel

$$\Delta S_{nx} = \Delta S_{\alpha} e^{i\frac{\varepsilon}{k_B} R_n} \quad (\text{Bloch-tétel})$$

$\alpha$ : eső szomszédvektorok

$$\frac{d\Delta S_{nx}}{dt} = -2\int \sum_{\beta, \gamma} S_{\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \Delta S_{\alpha} (e^{i\frac{\varepsilon}{k_B} \alpha} - 1)$$

$$f_i(\varepsilon) = -2\int S_{\gamma} \underbrace{\sum_{\alpha} (e^{i\frac{\varepsilon}{k_B} \alpha} - 1)}$$

eggn. előbs:  $2(\cos \varepsilon x + \cos \varepsilon y + \cos \varepsilon z - 3)$

$\varepsilon \propto R_n \Rightarrow 2\int S_{\gamma} (\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2 + \varepsilon_z^2) \alpha^2 = \varepsilon^2 \alpha^2$

negyzetesen függ  $\varepsilon$ -től

$$\frac{dSS_\alpha}{dt} = + \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \Delta S_\beta f_\gamma$$

$$\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\delta\epsilon} = \delta_{\beta\delta} \delta_{\gamma\epsilon} - \delta_{\beta\epsilon} \delta_{\delta\gamma}$$

$$\frac{d^2SS_\alpha}{dt^2} = \sum_{\beta\gamma\delta\epsilon} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} f_\gamma \epsilon_{\beta\delta\epsilon} f_\epsilon \Delta S_\delta =$$

$$= \sum_\gamma (f_\gamma f_\alpha \Delta S_\alpha - f_\alpha f_\gamma \Delta S_\alpha)$$

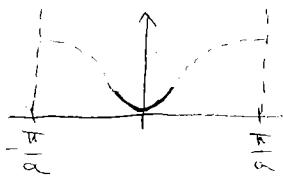
$$\frac{d^2SS_\alpha}{dt^2} = -f^2 \Delta S_\alpha$$

$\uparrow$   
 $\omega^2$

$$\omega(\varepsilon) = 2\pi f S_0 \varepsilon^2$$

feltehető, hogy a  
rainyban állhat  
a spinet leidegett  
x, y moroz  
z rainyin nem moroz

magnon disperziós reláció



$T = 0K$  -nál egy rainy  
kis hőmérsékleten elát-  
sanak a magnoner

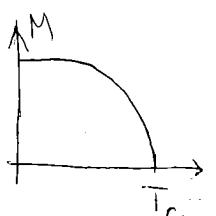
(a mágneses anyag elemi gejestrései)

$\omega = \propto \varepsilon^2$  alattan irány fel  $\rightarrow$  magnoker

$$\text{száma? } n = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{e^{\frac{\hbar \varepsilon}{k_B T}} - 1} d^3\varepsilon = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{e^{\frac{\hbar \varepsilon}{k_B T}} - 1} 4\pi \varepsilon^2 d\varepsilon$$

$$\text{íj változó: } \frac{\hbar \varepsilon^2 x}{k_B T} = x \quad \varepsilon^2 = x \frac{k_B T}{\hbar \alpha}$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{e^x - 1} 4\pi \times \frac{k_B T}{\hbar \alpha} \sqrt{\frac{k_B T}{\hbar \alpha}} \frac{1}{2\sqrt{x}} dx \sim T^{3/2}$$



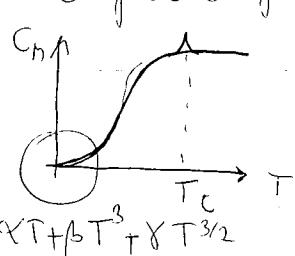
$$M(T) = M_0 - \alpha T^{3/2}$$

(Bloch-tör.)

így induál jól teljesít

magnon fajho:

$$E = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{\hbar \alpha \varepsilon^2}{e^{\frac{\hbar \varepsilon}{k_B T}} - 1} d^3\varepsilon \sim T^{5/2}$$



$$C_M \sim T^{3/2}$$

így induál a fajho

$\rightarrow$  magnonfajho

2) antiferromágneség

$J < 0$  antiferromágneses csatolás

ebben is vannak spinhullámok  $\Rightarrow \omega = \alpha |\varepsilon|$   
lineáris diszp. rel.

$$M_{\uparrow} = f(H + \alpha M_{\downarrow}) \Rightarrow \chi H + \alpha \chi M_{\downarrow}$$

$$M_{\downarrow} = f(H + \alpha M_{\uparrow}) = \chi H + \alpha \chi M_{\uparrow}$$

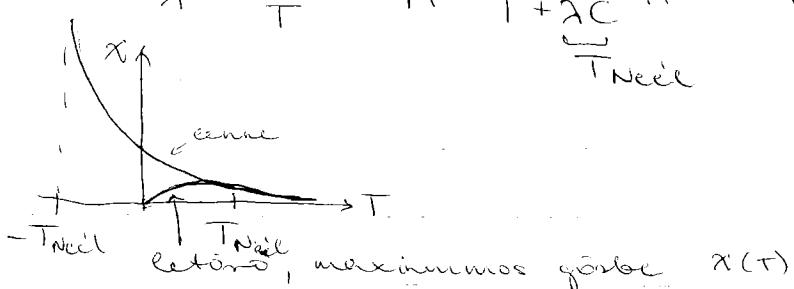
$$\begin{pmatrix} 1 & -\alpha \chi \\ -\alpha \chi & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{\uparrow} \\ M_{\downarrow} \end{pmatrix} = \chi H \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} M_{\uparrow} \\ M_{\downarrow} \end{pmatrix} = \frac{1}{1 + (\alpha \chi)^2} \begin{pmatrix} 1 & -\alpha \chi \\ -\alpha \chi & 1 \end{pmatrix} \chi H \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

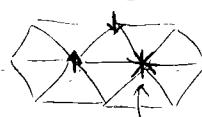
$$M_{\uparrow} - M_{\downarrow} = M \left( \frac{2\chi}{1 + \alpha \chi} H \right)$$

$$\chi = \frac{C}{T} \quad M = \frac{2C}{T + 2C} H$$

ez is csak magas  
hőmérsékleteken



4) Spinúveg : ha az anyag nem tudja el-dönteni milyen a csatolás pl. van elsőrendűl ügy, másodrendűl ügy  
 $\Rightarrow$  rendszertelen csatolás



antiferromágneses csatolás

3. körgörésben

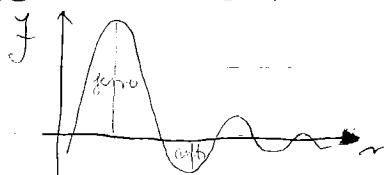
frustrálás

pl. rében révén margin  
aranyban  
vasban

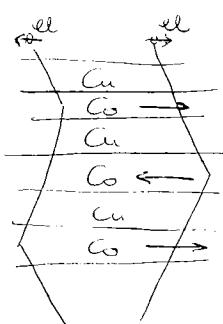
van  $T_c$  hőm, ahol paramágnesessé válik

Óriás mágneses ellenállás!

az anyag ellenállása nagyon!!! negatív. a mágneses térel

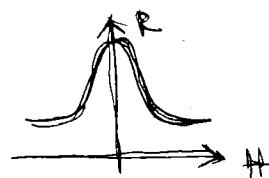


réz - kobalt - réz - kobalt  
nanoszerkezet



$\Rightarrow$  20-40 atom bavolslag

Co antiferromagnesies catala's



(winchester - bar van )

ha van ter new  
sûnôdie ar egne  
fajta elektron  $\Rightarrow$   
lecsôken ar ellenâlla's