

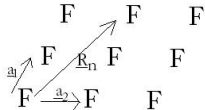
1. Kristályos anyagok

Kristálytan fogalmai: Rácsvektor, translációs vektorok, pontrács, elemi cella, Wigner-Seitz-cella, Szimmetriák: transláció, forgatás, inverzió, inverziós tengely, csúszások. Tércsoport, pontcsoport, reciprok rács és fogalmai

Rácsvektor ($\underline{R}_n$): olyan vektor, mely mentén ha eltoljuk a rácsot, önmagába megy át. (ez a translációs vektor is)

Ez felbontható elemi rácsvektorok lineáris kombinációjára:

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



Az ilyen $\underline{R}_n$ vektorral való eltolását **transzlációs műveletnek** nevezzük. Az ilyen műveletek összessége a translációs csoportot alkot.

Pontrács: pontok olyan háló szerű elrendeződése, amelyben minden kiszemelt pont környezete minden szempontból azonos akármelyik másik pont környezetével.

Kristályszerkezetet akkor kapunk, ha a rács minden pontjában azonos összetételű irányítású atomcsoportot helyezünk el.

Ideális kristály: olyan test, amelynek atomjai rácsszerűen úgy helyezkednek el, hogy létezik három ($\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$) vektor, hogy az atomi elrendeződés minden pontból ugyanolyannak látszik.

Elemi cella: elemi rácsvektorok által kifeszített paralelepipedon. $\underline{a}_1(\underline{a}_2 \times \underline{a}_3)$ Az elemi cella **primitív**, ha csak a csúcsaiban tartalmaz rácsponthoz.

Wigner-Seitz cella: Azon pontok halmaza, melyek közelebb vannak egy adott rácsponthoz, mint bármely másikkhoz. (Ha a kristálynak van valamilyen szimmetriája, akkor ez a WS-cellának is megvan, míg az elemi cellának nincs!)

A határ egyenlete: $\underline{r} \cdot \underline{R}_n = \frac{|\underline{R}_n|^2}{2}$

Reciprok rács: $\underline{K}(h_1, h_2, h_3) = h_1 \underline{b}_1 + h_2 \underline{b}_2 + h_3 \underline{b}_3$, ahol $\underline{b}_1 = 2\pi \frac{\underline{a}_2 \times \underline{a}_3}{(\underline{a}_1 \times \underline{a}_2) \cdot \underline{a}_3} \dots$

$$\underline{a}_i \cdot \underline{b}_j = 2\pi \delta_{ij}; \quad \underline{R}_n \cdot \underline{K}_h = 2\pi \cdot n \quad (n \in \mathbb{Z})$$

Szimmetriák:

1. **Transzláció:** létezik az $\underline{R}_n$ translációs vektor
2. **Forgatás:** (inverz forgatás is megengedett)

Ha egy kiszemelt tengely körüli $2\pi/n$ szögű forgatás egy testet önmagába visz át, akkor az ilyen tengelyt **n-forgású forgástengelynek** nevezik:

$$m \cdot a = a + 2a \cdot \sin(\varphi - \pi/2)$$

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

$$\cos\varphi = (1-m)/2$$

$$\varphi = \arccos((1-m)/2)$$

m	-1	0	1	2	3
φ	$0\pi, 2\pi$	$\pi/3$	$\pi/2$	$2\pi/3$	π
n	1	6	4	3	2

(kvázi kristályoknál - ahol nincs periodikus szerk. - lehet 5 forgású)

3. **Inverzió:** (tükrözés) $\underline{r} = -\underline{r}$
4. **Csúszások:** összetett szimmetria művelet $\rightarrow$ tükrözés, majd a tengely irányába való eltolás (az eltolás a fele a tengely irányába eső ismétlődési hosszának).
5. **Csavartengely:** összetett szimmetria művelet $\rightarrow$ forgatás, majd a tengely irányába való eltolás.

1-5-ig az elemi szimmetriaműveletek matematikai csoportot alkotnak, mivel ezek egymásutáni elvégzése is szimmetriaművelet (csoport szorzás művelete).

A **pontcsoportok** a teljes ortogonális $O(3)$ csoport diszkrét alcsoportjai, és 1-5 műveletek tetszőleges kombinációjából állnak.

230 tércsoport és 32 pontcsoport (7 osztályba sorolva) létezik 3D-ben, 10 pontcsoport 2D-ben

14 Bravais rács létezik 3D-ben, 7 Bravais rács létezik 2D-ben

7 kristályszimmetria:

triklin, monoklin, trigonális, ortorombos, hexagonális, köbös, tetragonális

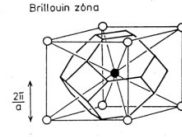
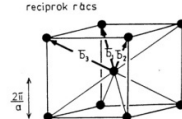
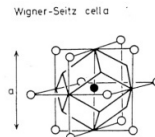
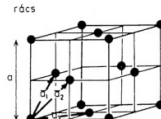
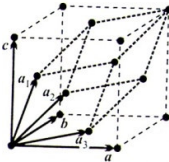
2. Fontosabb kristályszerkezetek

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

1. **Egyszerű köbös (SC):** Po
A WS cellája is kocka.
2. **Lapcentrált köbös (FCC):** Cu, Al, Au, Ag, Ni, Pt
Ez a legsűrűbb rács

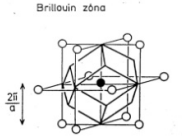
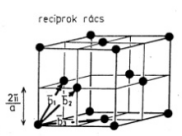
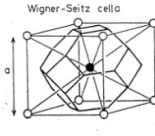
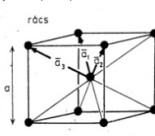
$$\begin{aligned} \underline{a}_1 &= a/2(011) \\ \underline{a}_2 &= a/2(101) \\ \underline{a}_3 &= a/2(110) \\ V_c &= \underline{a}_1(\underline{a}_2 \times \underline{a}_3) = a^3/4 \end{aligned}$$

Az elemi cella:



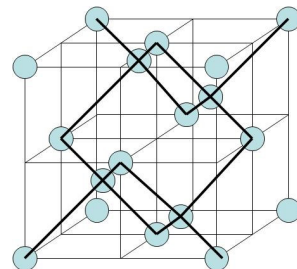
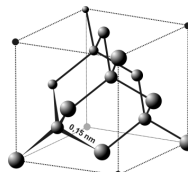
3. **Tércentrált köbös (BCC):** Fe, W, Mo

$$\begin{aligned} \underline{a}_1 &= a/2(-1 \ 1 \ 1) \\ \underline{a}_2 &= a/2(1 \ -1 \ 1) \\ \underline{a}_3 &= a/2(1 \ 1 \ -1) \\ V_c &= \underline{a}_1(\underline{a}_2 \times \underline{a}_3) = a^3/2 \end{aligned}$$

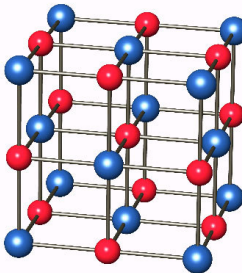


FCC Bz = BCC WS
BCC Bz = FCC WS

4. **Gyémánt rács:** C_{60} , Si, Ge
FCC rács az alapja (és minden második nyolcad kockában van atom).
(tetraéderes szerkezet)



5. **NaCl szerkezet:** (két egymásba tolt FCC)



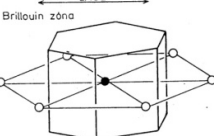
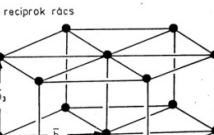
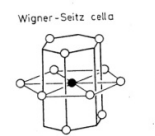
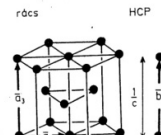
6. **Hexagonális (szoros illeszkedésű szerkezet):** Zn, Nb

4 atom tetraédert alkot.

Ha szabályos ez a tetraéder, akkor teljesen szoros az illeszkedés.

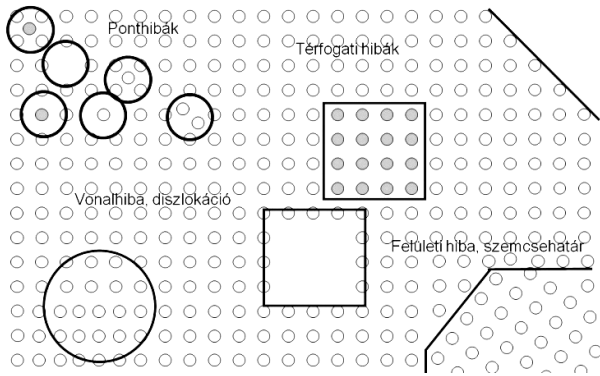
Kiszámolható:

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1,62$$



3. Kristályhibák és nemkristályos szerkezetek

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



0 Dimenziós: Ponthibák (1 atom és annak környezete)

- vakanciák: 1 atom hiányzik (egyensúlyi rácshiba)
- intersticiális atom: 1 atom többlet
- szennyezők: szubsztitucionális vagy intersticiális (pl Me + H)
- (p-típusú: Al, Ga, In ; n-típusú: P, As, Sb)

$$\text{Vakancia várható értéke: } \langle n \rangle = \frac{\sum_{n=0}^N n \binom{N}{n} e^{-\frac{n E_V^F}{kT}}}{\sum_{n=0}^N \binom{N}{n} e^{-\frac{n E_V^F}{kT}}} = \frac{d}{dx} \ln \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} e^{nx} =$$

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

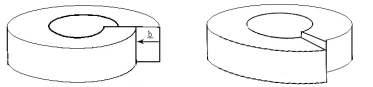
$$x = -\frac{E_V^F}{kT} \text{ és ez jóval kisebb, mint 1. (szobahőn } kT = 25 \text{ meV} < E_V^F = 0,8-1 \text{ eV)}$$

Ez képlet olvadáspontig jó közelítés.

A vakanciák hozzájárulnak a fémekben a diffúzióhoz, és ellenállásként lehet mérni őket (ehhez be kell fagyasztani a vakanciákat...)

1 Dimenziós: Vonalhibák – Diszlokáció

Burgers vektor: ami a kezdő és a végpontot összeköti (hibátlan rácspan ez nullvektor)
b vektor minden pontban uaz. Burgers kör (ábra)



$e \perp b$ – éldiszlok.

$e \parallel b$ – csavardiszlok.

A diszlok. nem egyensúlyi rácshiba, fémekben a koncentráció pl: 10^6 m/m^3 , ha hajtogatjuk, akkor 10^{15} m/m^3 -re is nőhet. (Pl: üst készítés: kalapálás+hőkezelés+... , ha a huzalt hajtogatjuk, az eltörik...)

Diszlokáció összekötése a deformációval: (b áll.)

$$\epsilon_{xy} = \gamma = \sum \frac{b_i}{L_y} \frac{x_i}{L_x} = b \sum \frac{x_i}{L_x L_y}$$

$$\Delta \gamma = \frac{b \sum x_i}{L_x L_y} = b \frac{N}{L_x L_y} \langle \Delta x \rangle \geq b \frac{N L_r}{L_x L_y L_z} \langle \Delta x \rangle = b \rho \langle \Delta x \rangle \text{ Orován-összefüggés}$$

2 Dimenziós: Felületi hibák – Szemcsehatár (Durvaszemcsés anyagok, finom szemcsés anyagok, mikro/nano szemcsések) Megakasztják a diszlokációt, és a szemcsehatárokon összegyűlhetnek a szennyeződések, így rideg lesz az anyag.

3 Dimenziós: Térfogati hibák – Kiválások (pl csapadék)

– Üreg (Void, pórus)

A fémek ellenállása a hőmérséklettel $\rightarrow 0$ (ez NEM a szupravezetés!!)

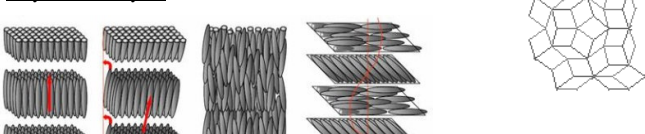
Amorf anyagok: (kistávú rend) r_1 -en belül levő atomok száma:

$$N(r_1) = \int_0^{r_1} g(r) 4\pi r^2 dr \quad (g(r): \text{radiális eloszl. fv.})$$

pl.: Üveg $\text{SiO}_2 + \text{Na}$; Fémüveg $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$

Kvázikristályok: nagy ellenállás + rossz hővezetés (vegypárok főzőedény) Al_6Mn (lehet 5-ös szimmetriájuk)
2D: Penrose rács (nem ismételi önmagát) 3D: Romboéder

Folyadékkristályok:



4. Szerkezetvizsgálat

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

Röntgen:

- (a) Röntgenső karakterisztikus és fékezési sugárzás
Sok fékezési sugárzás, kicsi az energia.

$$eU = \hbar\omega = \hbar c k = \frac{\hbar c}{\lambda}$$

- (b) Szinkrotronsugárzás:
Az e^- -okat fölgyorsítjuk, majd „megrázzuk”, (csak fékezési sugárzás lesz)

Előnye a röntgensőhöz képest, hogy monokróm és nagy intenzitás, de nagy a mérete és drága.

Észlelés: fotólemez, számlálócső, CCD, Imaging Plate

$$\text{Elektron: } eU = \frac{p^2}{2m} ; p = \frac{h}{\lambda}$$

Elektronmikroszkóp (szóródás helyett):

Lencserendszer miatt numerikus apertúra: 10^{-4} - $10^{-5} \rightarrow$ hátrány

Ha k =fókuszátv $\rightarrow$ diffrakció

$$\text{Leképezés: } \frac{1}{k} + \frac{1}{t} = \frac{1}{f}$$

Röntgenhez képest hátrány: bonyolult mintapreparáció; feltöltődik a nemfém minta, elektron erősen kölcsönhat az atommal (erős rugalmas és rugalmatlan szórás), nem elég pontos pl. rácsparaméterek mérésére.

Előny: sokmindent látni vele, szűkítható látótér, korlátozott területű diffrakció

Neutron: reaktorból termikus neutron: $E \sim kT \approx 0.25 \text{ eV}$

$$\frac{1}{2} kT = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m_N} ; p = \frac{h}{\lambda}$$

Előnye: csak a magon szóródik (röntgen a felhőn, elektron az elektrosztatikus potenciálon), gyengén szóródik, a kis rendszámú atomokat is látjuk (izotópokat másképp szórja), spinfüggő (látszik, hogy hogyan állnak a mágneses momentumok az anyagban)

Hátránya: vizsgálatához sok anyag kell

Detektorok: fotólemez, (helyzetérzékelő) számlálócső, CCD, Imaging Plate (emlékező lemez)

Szórás kinetikus elmélete: Fraunhofer interferenciakép (anyag szerkezet-meghatározás)

röntgen $\rightarrow$ Thomson-szórás

- (1) Rugalmas szórás: λ változatlan, $E_{ki} = E_{be}$
- (2) Koherens
- (3) Gyenge szórás: egyenes szórások...

Fraunhofer interferencia:

A bemenő-kimenő hullámszám $= p(r)$: ha nagy, nagy a szóródás, ha kicsi, kicsi a szóródás az adott pontban. (Röntgennél e^- -sűrűség, e-mikroszkópnál e^- pot. sűrűség, neutronnál magsűrűség).

A fáziskülönbség:

$$k_0 r = |k_0| s_1 = \frac{2\pi}{\lambda} s_1 ; \Delta s = s_1 - s_2$$

$$k r = |k| s_2 = \frac{2\pi}{\lambda} s_2 ; \Delta \varphi = \frac{2\pi}{\lambda} (s_1 - s_2)$$

$$\Delta \varphi = (k_0 - k) r \rightarrow A(k) \cong \int \rho(r) e^{i(k_0 - k) r} d^3 r$$

A(k) a szóródás, nem tudjuk mérni. A fenti integrál a sűrűségfv Fourier-transzformáltja.

Intenzitás: $I(k) = |A(k)|^2$ Integrál abszolút érték négyzete (komplex!!).

Autokorr. fv:

$$\langle \rho(r_1) \rho(r_2) \rangle = \langle \rho(r_1 + a) \rho(r_2 + a) \rangle = \langle \rho(0) \rho(r_2 - r_1) \rangle = k(r_2 - r_1)$$

$$\langle I(k) \rangle = \int \rho(r) e^{i(k_0 - k) r} d^3 r$$

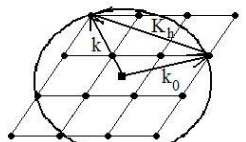
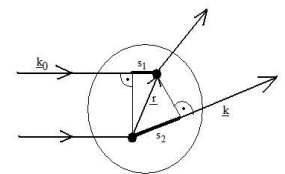
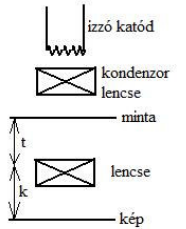
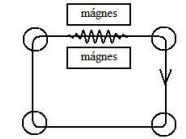
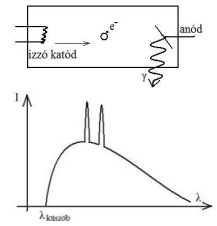
Ewald-gömb: reciprokrácsban berajzoljuk a beeső nyaláb k vektorát, majd húzunk a k vektor kezdőpontjából egy lkl sugarú gömböt, ez az Ewald-gömb.

Folyadék és amorf anyag esetén:

$$\int \int \rho(r_1) \rho(r_2) e^{iA k r_1 - iA k r_2} d^3 r_1 d^3 r_2$$

$$r_1 = r_2 + n \quad d^3 r = d^3 n$$

$$I = \int \rho(n) e^{-iA k n} d^3 n$$



Kristályos anyag esetén: Laue csinálta először.

$$A(\underline{k}) = \int \rho(\underline{r}) e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k}) \cdot \underline{r}} d^3 r \quad ; \quad \rho(\underline{r}) = \rho(\underline{r} + \underline{R}_n) = \rho(\underline{r}')$$

$$A(\underline{k}) = \int \rho(\underline{r}') e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k}) \cdot (\underline{r}' - \underline{R}_n)} d^3 r = e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k}) \cdot \underline{R}_n} \int \rho(\underline{r}) e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k}) \cdot \underline{r}} d^3 r$$

$$\rightarrow A(\underline{k}) (1 - e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k}) \cdot \underline{R}_n}) = 0$$

Azt szeretnénk, ha $A(\underline{k})$ nem (mivel azt keressük), a másik tag viszont nullával lenne egyenlő (megköveteljük az egyenlőséget).

$$(\underline{k}_0 - \underline{k}) \cdot \underline{R}_n = 2\pi \cdot (\text{egész szám}) \quad (\underline{R}_n - \text{rácsvektor})$$

$$(\underline{k}_0 - \underline{k}) = \underline{K}_h \quad (\text{reciprokrács vektor})$$

$$A(\underline{K}_h) \neq 0 \rightarrow \text{elhajlási irány}$$

$$A(\underline{K}_h) = 0 \rightarrow \text{kioltás}$$

$$A(\text{nem } \underline{K}_h) = 0 - \text{nak kell lennie}$$

Laue: nem monokromatikus, hanem fékezési sugárással mért, így több $\underline{k}$, több gömb és a kristályirány is meghatározható.

$$A(\underline{K}_h) = \int_{\text{az egész anyagra}} \rho(\underline{r}) e^{i\underline{K}_h \cdot \underline{r}} d^3 r = \sum_{\text{a cellák száma}} N \int_{\text{egy cellára}} \rho(\underline{r}) e^{i\underline{K}_h \cdot \underline{r}} d^3 r$$

$$\text{Egy cellában: } \rho(\underline{r}) = \sum_a \rho_a(\underline{r} - \underline{r}_a) \rightarrow a = \text{atom, pl: NaCl - nél 2}$$

$$A(\underline{K}_h) = N \cdot \sum_{\text{atom}} \int \rho_a(\underline{r} - \underline{r}_a) e^{i\underline{K}_h \cdot \underline{r}} d^3 r = N \cdot \sum_{\text{atom}} \int \rho_a(\underline{r}) e^{i\underline{K}_h \cdot (\underline{r} + \underline{r}_a)} d^3 r =$$

$$= N \cdot \sum_{\text{atom}} e^{i\underline{K}_h \cdot \underline{r}_a} f_a(\underline{K}_h) = N S(\underline{K}_h)$$

Ahol a fenti $S(\underline{K}_h)$ -t struktúra faktornak nevezzük (egy cellán belül hol vannak az atomok). Ebből az $f_a(\underline{k})$:

$$f_a(\underline{k}) = \int \rho_a(\underline{r}) e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} d^3 r$$

az alakfaktor (1 atom szórásának Fourier-transzformáltja).

Pl ha egy atom kisebb (jobban lokalizált), akkor $S(\underline{K}_h)$ nagyobb.

Rácsfák: ha átmegy 3 rácsponton $\rightarrow$ átmegy ∞ sok rácsponton (mivel rácsvektorok lin. komb.ja is rácsvektor). h_1, h_2, h_3 (nincs közös osztójuk) által megadott sík átmegy $\frac{a_1}{h_1}, \frac{a_2}{h_2}, \frac{a_3}{h_3}$ pontokon. Tételek:

1) h_1, h_2, h_3 sík merőleges a $\underline{K}_{h_1, h_2, h_3} = h_1 \underline{b}_1 + h_2 \underline{b}_2 + h_3 \underline{b}_3$ reciprokrács vektorra.

$$\text{BIZ: } B_{12} = \left(\frac{a_1}{h_1} - \frac{a_2}{h_2} \right) (h_1 \underline{b}_1 + h_2 \underline{b}_2 + h_3 \underline{b}_3) = \frac{2\pi h_1}{h_1} - \frac{2\pi h_2}{h_2} = 0$$

A többi kombinációra is be kell látni ugyanígy.

2) h_1, h_2, h_3 síkok távolsága: $d_{h_1, h_2, h_3} = \frac{2\pi}{|\underline{K}_{h_1, h_2, h_3}|}$ ahol d az origó és a sík távolsága.

$$\text{BIZ: } d = \frac{a_1}{h_1} \frac{K_h}{|K_h|} = \frac{2\pi h_1}{h_1 |K_h|} = \frac{2\pi}{|K_h|}$$

Bragg-feltétel:

$\underline{k} - \underline{k}_0 = \underline{K}_h \rightarrow$ az Ewald - gömbből tudjuk

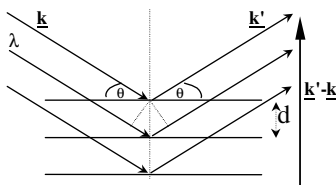
$\underline{k}$ és $\underline{k}_0$ szöge $= 2 \cdot \vartheta$

$$|\underline{K}_h| = 2 |\underline{k}_0| \sin(\vartheta)$$

$$2 \frac{2\pi}{\lambda} \sin \vartheta = \frac{2\pi}{d} n \Rightarrow 2 d_{h_1, h_2, h_3} \sin \vartheta = n \lambda$$

Erősítés csak a fenti esetben van (néha h, k, l -et is szoktak használni az indexelés helyett).

$$\underline{k} = 2\pi/\lambda$$



5. Kondenzált anyagok kötése

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

Elsődrendű (kémiai) kötések: (legerősebbtől a leggyengébbig)

- Kovalens-kötés:** (ált. nem-fémek közt) A kötő-elektronpár a kötésben részt vevő atomok egy-egy elektronjából alakul ki (ritkábban mindkét kötő-elektron egy atomtól származik, ilyenkor datív kötésről beszélünk. pl: CO).
- A kötés lehet 1-szeres (σ), 2-szeres (σ, π) vagy 3-szoros (σ, π, π).
- A részt vevő elemek homogenitásától és elektronegativitásaitól függően beszélünk poláros és apoláros kötésről.
- A kötő elektronok spinjei antiparalellek.
- Zárt e^- -héj alakul ki
- Ionos kötés:** (ált. normális fémek és nem-fémek közt.)
- A kötés kialakulásához magas elektronegativitás különbség kell.
- Az ionokat elektrosztatikus vonzás és taszítás (Pauli elv) rendezi rácsba.
- A Madelung állandó megadja, mennyire vonzzák egymást.
- Zárt e^- -héj alakul ki
- Fémes kötés:** A pozitív atomtörzseket az egész kristályra kiterjedő delokalizált (vegyérték) elektronokból kialakult felhő tartja össze.
- Normális fémek: (alkáli-, nemes-, ...) $\rightarrow$ csak s e^- -ok kötnek
- Átmeneti fémek: (Co, Fe, Mg, Mo, Eu...) $\rightarrow d, f$ e^- -ok is kötnek
 $\rightarrow$ kovalensen tudnak kötni (kemények)
(Fémek kovalens kötésben pl: Fe_2O_3 - rozsdá)

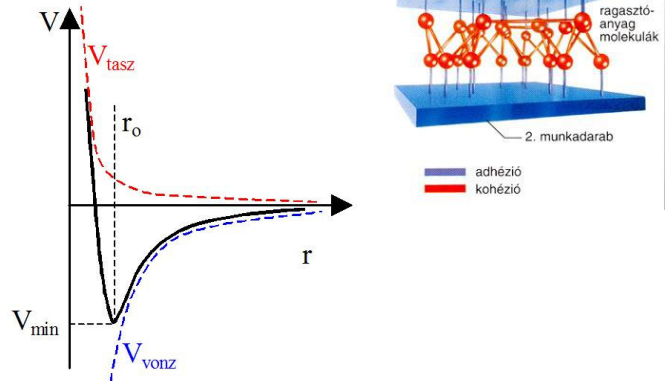
Másodrendű kötések: (molekulák ill. nemesgázok közt)

- H-híd:** Egy elektronhiányos H atom és egy nemkötő-elektronpár között alakul ki. A víz mellett a szerves vegyületekben van fontos szerepe (pl DNS)
- Csak N, O, F -nak elég nagy az elektronegativitása ehhez a kötéshez.
- Dipól-dipól:** A dipól momentummal rendelkező molekulák rendeződnek, és vonzzák egymást (pl. SO_2)
- A kötéshez poláros molekulára van szükség, amihez nem elég a kovalens kötés polárossága. Hiszen ha szimmetrikus a szerkezet, apoláros lesz a molekula (pl.: CO_2).
- Van der Waals:** Apoláros molekulák ill. nemesgázok között alakul ki.
- Nincs állandó dipól momentumuk, de mozgásból adódó van.
(2 fém között is lehet: Casimir-effektus)

Kohézió: azonos anyagok között fellépő vonzó kölcsönhatás.

Adhézió: különböző anyagok között fellépő vonzó kölcsönhatás.
pl.: forrasztás, ragasztás

Potenciál 2 atom között:



PL: Van der Waals kötés potenciálja, Lennard-Jones:

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

6. Rácsrezgések

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

Rácsrezgések:

i-edik atom rezgése: $\underline{r}_i(t)$, egyensúlyi helyzet: $\underline{r}_{i0}$

elmozdulás vektor: $\underline{u}_i(t) = \underline{r}_i(t) - \underline{r}_{i0}$

Egy atom kitérítésére az egész rács rezegni fog.

$$m_i \ddot{\underline{u}}_i = - \sum_j \underline{D}_{ij} \underline{u}_j \quad j = \{1, \dots, 3N_a \text{ (atomok száma)}\}$$

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

$$m_i \omega^2 \underline{u}_i = \sum_j \underline{D}_{ij} \underline{u}_j$$

$$\omega^2 \underline{M} \underline{u} = \underline{D} \underline{u}$$

Ahol $\underline{D}$ $3N_a \times 3N_a$ -s önadjungált, szimmetrikus erőállandó mátrix.

Az $\underline{M}$ mátrix szimmetrikus, diagonális elemei a tömegpontok. De az átrendezésnél $\underline{D}$ -t $\underline{M}^{-1}$ -gyel beszorozva nem lenne szimm. a mátrix, ezért pozitív definit négyzetgyökök:

$$\underline{\underline{M}} = \begin{pmatrix} m_1 & & & \\ & m_2 & & \\ & & m_3 & \\ & & & \ddots \\ & & & & m_{N_a} \end{pmatrix}; \quad \underline{\underline{S}} = \begin{pmatrix} \sqrt{m_1} & & & \\ & \sqrt{m_2} & & \\ & & \sqrt{m_3} & \\ & & & \ddots \\ & & & & \sqrt{m_{N_a}} \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{S}}^2 = \underline{\underline{M}}$$

$$\omega^2 \underline{\underline{S}}^2 \underline{u} = \underline{D} \underline{u} \quad / \cdot \underline{\underline{S}}^{-1}$$

$$\omega^2 (\underline{\underline{S}} \underline{u}) = (\underline{\underline{S}}^{-1} \underline{D} \underline{\underline{S}}^{-1}) (\underline{\underline{S}} \underline{u}) \rightarrow \omega^2 \underline{v} = \underline{C} \underline{v}$$

$$\underline{C}_{ij} = \frac{\underline{D}_{ij}}{\sqrt{m_i m_j}}$$

Ahol $\underline{S}^{-1} \underline{D} \underline{S}^{-1} = \underline{C}$ önadjungált mátrix. A fentiek általános esetben igazak.

Kristályos anyagokban:

$N_a = N_c \cdot s$ ahol N_c a cellák száma.

Általában az elemi cellát adjuk meg:

$$\underline{r}_i = \underline{R}_n + \underline{r}_p, \text{ ahol } \underline{n} = (n_1, n_2, n_3), \quad i = \{n, p\} \text{ és } p: \{1, 2, \dots, S\}$$

Ahol n adja meg, hogy melyik cella, p pedig, hogy hanyadik atom a cellában.

$$\underline{v} = \underline{v} e^{i \underline{k} \cdot \underline{R}_n} \text{ és } \underline{k} = \underline{k} + \underline{K}_n$$

$$\text{Bloch-tétel: } e^{i(\underline{k} + \underline{K}_n) \cdot \underline{R}_n} = e^{i \underline{k} \cdot \underline{R}_n} e^{i \underline{K}_n \cdot \underline{R}_n} = e^{i \underline{k} \cdot \underline{R}_n}, \text{ mivel } \underline{K}_n \cdot \underline{R}_n = 2\pi \cdot (\text{egész szám})$$

k benne van a Brouillen-zónában!

Nemkristályos anyagokban:

lokalizált módus:

delokalizált módus:

Periodikus anyag rezgései:

Born-Kármán (vagy periodikus) határfeltétel: Vagy ugyanaz az elmozdulás, vagy ciklikus határfeltételt veszünk.

$$\underline{v}_n = \underline{v}(\underline{R}_n) \quad \underline{v}(\underline{R}_n + N_1 \underline{a}_1)$$

$$e^{i \underline{k} \cdot \underline{R}_n} = e^{i \underline{k} \cdot (\underline{R}_n + N_1 \underline{a}_1)} \rightarrow e^{i \underline{k} \cdot N_1 \underline{a}_1} = 1$$

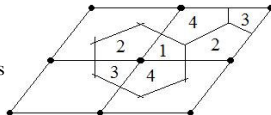
$$\underline{k} \cdot \underline{a}_1 N_1 = 2\pi m_1$$

$$\underline{k} \cdot \underline{a}_2 N_2 = 2\pi m_2$$

$$\underline{k} \cdot \underline{a}_3 N_3 = 2\pi m_3$$

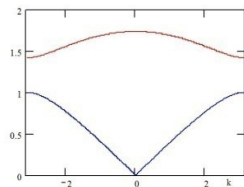
$$\underline{k} = \frac{m_1}{N_1} \underline{b}_1 + \frac{m_2}{N_2} \underline{b}_2 + \frac{m_3}{N_3} \underline{b}_3$$

Reciprok rács



A megoldást egy k vektorral tudjuk jellemezni. N kb. N_a köbgyöke. $N_c = N_1 N_2 N_3 \rightarrow 3$ s db koordináta. A problémát redukáltuk. Kapunk egy ω^2 -et, ami $\omega_k^2(k)$ f-v-e (azaz egy λ : 3 s. 3-es mátrix sajátérték f-v-ében melyik, $\lambda=1, \dots, 3s$). Diszperziós reláció

Egyatomos lineáris lánc:



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

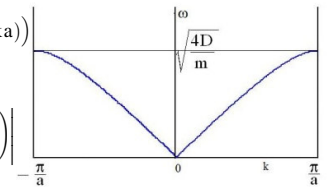
$u_n(t) = A e^{i\omega t} e^{i k a n}$, ahol an az atom helyét adja meg

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

$$m\omega^2 = D(2 - e^{i k a} - e^{-i k a}) = 2D(1 - \cos(ka))$$

$$\omega^2 = \frac{2D}{m}(1 - \cos(ka))$$

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



Kétatomos lineáris lánc:

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

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

$$u_n = A e^{i\omega t} e^{i k a n} \quad ; \quad v_n = B e^{i\omega t} e^{i k a n}$$

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

$$M\omega^2 B = D(2B - (1 + e^{i k a})A)$$

$$\begin{pmatrix} m\omega^2 - 2D & D(1 + e^{-i k a}) \\ D(1 + e^{i k a}) & M\omega^2 - 2D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0$$

Nemtriviális megoldás akkor van, ha a mátrix determinánsa nulla.

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

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

$$\omega^2 = \frac{2D(m + M) \pm \sqrt{4D^2(m + M)^2 - 8D^2 m M (1 - \cos(ka))}}{2mM}$$

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

Nem mindig merőlegesen jön be, csak periodikus határfeltételnél. Optikai ág akkor is optikai ág, ha nincs gerjesztése (optikailag nem gerjeszthető). Mindkét ágat **fononnak** nev. $s=1$ -nél nincs optikai ág, egyébként 3 akusztikus, 3(s-1) optikai ág. Ha $m \rightarrow M$, visszajuk az egyatomos esetet.

Módussűrűség(=fononspektrum): $D(\omega)$

$$\int_{\omega_1}^{\omega_2} D(\omega) d\omega = \omega_1 \text{ és } \omega_2 \text{ közti módusok száma}$$

1atomos láncnál:

A módusok független lineáris oszcillátorok:

k vektor és $\lambda=1, \dots, 3s$.

Annyi lin. oszc. van a Bz-ban, ahány cella van a rácsban.

$$\omega = \sqrt{\frac{4D}{m}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right); \quad d\omega = \sqrt{\frac{4D}{m}} \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \frac{a}{2} dk$$

$$D(\omega) d\omega = 2 \frac{aN}{2\pi} dk = \frac{aN}{\pi} \frac{1}{\frac{a}{2} \sqrt{\frac{4D}{m}} \cos\left(\frac{ka}{2}\right)} d\omega = \frac{N}{\pi} \sqrt{\frac{m}{D}} \frac{1}{\sqrt{a - \frac{m\omega^2}{4D}}}$$

$$E_k(k) = \hbar \omega_k(k) \left(n_k(k) + \frac{1}{2} \right) \quad (n_k(k) \text{ adja meg a fononok számát a módusban})$$

(pl. ha $n=3$, akkor ebben a módusban 3 fonon van)

Energiája: $\hbar \omega_k(k)$, impulzusa (kváziimpulzus): $\hbar \underline{k}$

A fonon kvázirészecske.

Normál folyamat: megmarad a kváziimpulzus, és az eredő $\underline{k}$ vektor benne van a Bz-ban. $\sum \hbar \underline{k}_i = 0$.

Unklapp folyamat: Brillouin zónában nincs benne az eredő k vektor. Addig kell hozzáadni, hogy benne legyen. $\sum \hbar \underline{k}_i = \hbar \underline{K}_n$.

Lineáris diszperzió esetén. (3D-ben $D(\omega)$)

Lineáris diszperzió esetén. (3D-ben $D(\omega)$)

$$D(\omega) d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 k = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk = \frac{V}{(2\pi)^3} \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \frac{1}{c} d\omega$$

$$\text{felhasználtuk, hogy: } \omega = c \left(\frac{k}{c} \right) = ck \Rightarrow d\omega = c dk$$

Teljes $D(\omega)$:

$$D(\omega) = V (2\pi)^2 \left(\frac{1}{c_1^3} + \frac{1}{c_2^3} + \frac{1}{c_3^3} \right) \omega^2 = \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{3}{c^3} \omega^2$$

Az anyag termikus tulajdonságainak nagy részét a fononok adják.

7. Rácsrezgések termikus hatásai

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

Melegítésnél a rezgés vesz fel a hőt (+ hővezetés + ...)

Fononok (amik bozonok) **Energiája:** $E = \sum_i \hbar \omega_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right)$; $\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_i} - 1}$

$$\langle E \rangle = \sum_i \hbar \omega_i \left(\langle n_i \rangle + \frac{1}{2} \right) = \sum_i \hbar \omega_i \left(\frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_i} - 1} + \frac{1}{2} \right) = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} \frac{2 + e^{\beta \hbar \omega_i} - 1}{e^{\beta \hbar \omega_i} - 1} = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} \frac{e^{\beta \hbar \omega_i} + 1}{e^{\beta \hbar \omega_i} - 1} = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} \frac{e^{\beta \hbar \omega_i} + e^{-\beta \hbar \omega_i}}{e^{\beta \hbar \omega_i} - e^{-\beta \hbar \omega_i}} = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar \omega_i}{2kT} \right)$$

Nagy T-re: $\langle E \rangle = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} \frac{2kT}{\hbar \omega_i} = \sum_i kT = 3N_a kT \rightarrow$ Ekvipartíció tétele
 $c_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = 3N_a k$ (vagy c_p) (folyadékokra nem igaz) ↑

Alacsony T-re: $\langle E \rangle = 0$ - a szabadsági fokok befagynak.

Debye-fajhő: (alacsony hőn nem jó az Einstein modell)

$$\langle E \rangle = E_0 + \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{e^{\beta \hbar \omega_i} - 1} = E_0 + \int \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} D(\omega) d\omega ; \hbar \omega_D = kT_D$$

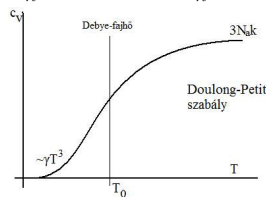
$$D_D(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{3}{c^3} \omega^2 ; (\omega < \omega_D) ; \omega_D = \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N_a}{V}} c ; \left(\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15} \right)$$

$$\int_0^{\omega_D} D_D(\omega) d\omega = \frac{V}{2\pi^2} \frac{3}{c^3} \int_0^{\omega_D} \omega^2 d\omega = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega_D^3}{c^3} = 3N_a - \text{a módusokban a sebesség } c$$

$$\langle E \rangle = E_0 + \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \frac{V}{2\pi^2} \frac{3}{c^3} \omega^2 d\omega = E_0 + \frac{V}{2\pi^2} \frac{3}{c^3} \frac{\hbar (kT)^4}{h^4} \int_0^{\beta \hbar \omega_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx =$$

$$= E_0 + \frac{V}{2\pi^2} \frac{3}{c^3} \frac{\hbar (kT)^4}{h^4} \frac{\pi^4}{15} = E_0 + \frac{V\pi^2}{10} \frac{1}{c^3} \frac{(kT)^4}{h^3} \Rightarrow c_v = \frac{V\pi^2}{10} \frac{1}{c^3} \frac{k^4}{h^3} 4T^3$$

Fémeknél γT^3 -höz jön egy αT járuléka



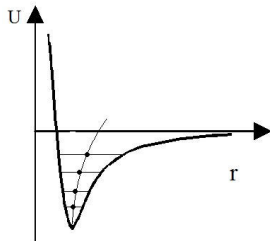
Hőtágulási együttható:

(csak a fononrezgéstől nem tágul)

A hőtágulást a nem lineáris tagok hozzák létre (amiket kihagytunk a sorfejtésből).

Pl: Kvarc- erősen lin. anyag – kevésbé hőtágul

Ahogy jobban rezeg, eltolódik a középpont → hőtágulás.



Hővezetés: (pl a vákuum rövid távon rossz, hosszútávon jó hővezető)

$$Q = \kappa \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{1}{3} c_v u \Lambda \frac{\partial T}{\partial x}, \text{ ahol } u \text{ az átlagsebesség.}$$

Ideális kristályban: $\kappa \rightarrow \infty$

Anharmonikus rácskezhok és fonon-fonon ütközések $\rightarrow \Lambda \sim \frac{1}{T}$

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

$$\underline{k}_1 + \underline{k}_2 = \underline{k}_3 + \underline{G} \Rightarrow \text{Unklapp folyamat (atomos rácsokban)}$$

A hővezetés függ a nagyságtól és a fajhőtől.

Fémeknél: - szennyezőben a fonon vezek

- tiszta fémekben az elektron

$$\text{(Widemann Frane tv.: } w = \frac{1}{LG_{12} T} = w_0 + w_{12} = \alpha T^2 + \frac{\beta}{T} \text{)}$$

(Hőtágulás $\rightarrow$ atomokat eltávolítani akaró anharmonikus tagok.)

8. Elektronszerkezet

Adiabtikus szétszételés, Bloch-tétel, Bloch- és Wannier-függvények

Adiabtikus szétszételés:

Az elektronok úgy látják az atommagokat, mintha állnának, az atommagok meg úgy látják az elektronokat, hogy cikáznak körülöttük kb. felhőszerűen.

Ionok: R_i az összes ion helyzetétől függ.

$$\underline{R}_i \quad \underline{P}_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \underline{R}_i} \quad H = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \frac{\partial^2}{\partial \underline{R}_i^2} + V_i(\underline{R}_i)$$

Elektronok:

$$\underline{r}_i \quad \underline{p}_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \underline{r}_i^2} \quad H = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial \underline{r}_i^2} + v_e(\underline{r}_i) + v_{el}(\underline{R}_i, \underline{r}_i)$$

Az egészet egyesítve:

$$H = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \frac{\partial^2}{\partial \underline{R}_i^2} + V_i(\underline{R}_i) - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial \underline{r}_i^2} + v_e(\underline{r}_i) + v_{el}(\underline{R}_i, \underline{r}_i)$$

$$\Psi(\underline{R}_i, \underline{r}_i) ; H\Psi = E\Psi ; \Psi(\underline{R}_i, \underline{r}_i) = \Phi(\underline{R}_i) \phi(\underline{R}_i, \underline{r}_i)$$

A fenti H egyenletet átrendezve:

$$\left(- \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \underline{R}_i^2} + V_i(\underline{R}_i) \Phi \right) \phi + \left[- \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(2 \frac{\partial \Phi}{\partial \underline{R}_i} \frac{\partial \phi}{\partial \underline{R}_i} + \Phi \frac{\partial^2 \phi}{\partial \underline{R}_i^2} \right) \right] + \left[- \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \underline{r}_i^2} + v_e \phi + v_{el} \phi \right] \Phi = E\Phi\phi$$

1) elektronprobléma (tetszőleges R_i elrendezésben):

$$- \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \underline{r}_i^2} + v_e \phi + v_{el}(\underline{R}_i, \underline{r}_i) \phi = E(\underline{R}_i) \phi$$

2) rácsprobléma:

$$- \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \underline{R}_i^2} + \left(V_i(\underline{R}_i) + E(\underline{R}_i) \right) \Phi = E\Phi$$

Ezt klasszikusan oldjuk meg (fononprobléma).

3) elektron-fonon kölcsönhatás

$$H_{\text{kölcsönhatás}} = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \left(2 \frac{\partial \Phi}{\partial \underline{R}_i} \frac{\partial \phi}{\partial \underline{R}_i} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \underline{R}_i^2} \right)$$

Ehelyett majd megoldjuk az elektronproblémát rácsra.

Bloch-tétel:

(a) nem degenerált:

$$H\phi = E\phi$$

$$\underbrace{H}_{1 \text{ elektron}} = - \frac{\hbar^2 \Delta}{2m_e} + V(\underline{r}) ; \underbrace{H}_{\text{sok elektron}} = - \sum_i \frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m} + \sum_i V(\underline{r}_i) + \sum_{i \neq j} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\underline{r}_i - \underline{r}_j|}$$

$H(\underline{r} + \underline{R}_n) = H(\underline{r}) \rightarrow$ invariáns a rácsperiódusú eltolásra, így:

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

Megjegyzés:

$$H\phi = e\phi ; T \rightarrow \text{lineáris eltolás}$$

$$THT^{-1}T\phi = ET\phi \text{ mivel } THT^{-1} = H \text{ és } HT = TH$$

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

$$T(\underline{R}_n) \phi(\underline{r}) = \phi(\underline{r} + \underline{R}_n) = c_n \phi(\underline{r})$$

Periodikus határfeltétel.

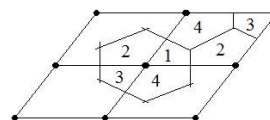
$$\left\{ \begin{array}{l} \phi(\underline{r} + \underline{a}_1) = c_1 \phi(\underline{r}) \\ \phi(\underline{r} + \underline{a}_2) = c_2 \phi(\underline{r}) \\ \phi(\underline{r} + \underline{a}_3) = c_3 \phi(\underline{r}) \end{array} \right\} \left(\begin{array}{l} \phi(\underline{r} + N_1 \underline{a}_1) = \phi(\underline{r}) \\ c_1^{N_1} = 1 \end{array} \right) \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} c_1 = e^{i2\pi \frac{p}{N_1}} \\ c_2 = e^{i2\pi \frac{p}{N_2}} \\ c_3 = e^{i2\pi \frac{p}{N_3}} \end{array} \right\}$$

a fentiek alapján pedig:

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

A fenti egyenlet a Felix-Bloch tétel (1952-ben Nobel-díj).

Reciprokkrács:



(b) degenerált:

A fenti eltolás nem igaz (gond van a skalárszorzással).

$$H\varphi_1(\underline{r}) = E\varphi_1(\underline{r}) \quad ; \quad \varphi_1(\underline{r} + \underline{R}_n) = \lambda_{11}\varphi_1(\underline{r}) + \lambda_{12}\varphi_2(\underline{r})$$

$$H\varphi_2(\underline{r}) = E\varphi_2(\underline{r}) \quad ; \quad \varphi_2(\underline{r} + \underline{R}_n) = \lambda_{21}\varphi_1(\underline{r}) + \lambda_{22}\varphi_2(\underline{r})$$

Főtengelytranszformálva:

$$\varphi_a(\underline{r} + \underline{R}_n) = \lambda_a\varphi_a(\underline{r}) \quad ; \quad \varphi_b(\underline{r} + \underline{R}_n) = \lambda_b\varphi_b(\underline{r})$$

$$\varphi(\underline{r} + \underline{R}_n) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}\varphi(\underline{r}) \quad - \text{Bloch fv.}$$

$$\text{Bloch-fv: } \varphi(\underline{r} + \underline{R}_n) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}\varphi(\underline{r})$$

1) a különböző k-khoz tartozó Bloch-fv-ek merőlegesek:

$$\int \varphi_{k_1}^*(\underline{r})\varphi_{k_2}(\underline{r})d^3r = \int \varphi_{k_1}^*(\underline{r} + \underline{R}_n)\varphi_{k_2}(\underline{r} + \underline{R}_n)d^3r =$$

$$= e^{i(k_2 - k_1)\cdot\mathbf{R}_n} \int \varphi_{k_1}^*(\underline{r})\varphi_{k_2}(\underline{r})d^3r$$

$$(1 - e^{i(k_2 - k_1)\cdot\mathbf{R}_n}) \cdot \int \varphi_{k_1}^*(\underline{r})\varphi_{k_2}(\underline{r})d^3r = 0$$

Az első tag 0, ha $\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 = \mathbf{K}_h$, ami soha nem teljesül, tehát $\mathbf{k}_1$ -nek és $\mathbf{k}_2$ -nek ortogonálisnak kell lennie. Páros és páratlan fv-ek lineárkombinációjából minden „normális” fv. kifejezhető. (Az f-ös tag = 0)

$$f(\underline{r}) = \sum_{\mathbf{k}_T} a_{\mathbf{k}_T} e^{i\mathbf{k}_T \cdot \underline{r}} \quad ; \quad \mathbf{k}_T = \mathbf{K}_h + \mathbf{k} \in Bz \quad ; \quad \mathbf{k}_T = \frac{2\pi p_1}{N_1} b_1 + \frac{2\pi p_2}{N_2} b_2 + \frac{2\pi p_3}{N_3} b_3$$

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

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

f előállítható Bloch-fv-ek lineárkombinációjaként.

Wannier-fv:

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

$$\varphi(\underline{r}) = \sum_{\mathbf{R}_n} w(\underline{r} - \underline{R}_n) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n}$$

Ez a Wannier-előállítás.

$$\varphi(\underline{r} + \underline{R}_n) = \sum_{\mathbf{R}_m} w(\underline{r} - \underline{R}_m + \underline{R}_n) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m} = \sum_{\mathbf{R}_m'} w(\underline{r} - \underline{R}_m') e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_m' + \mathbf{R}_n)} =$$

$$= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \sum_{\mathbf{R}_m'} w(\underline{r} - \underline{R}_m') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m'} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \varphi(\underline{r})$$

9. Kristályos anyag elektronszerkezete

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

Kvázi szabad elektronok:

Az elektronok a fémekben abszolút nulla fokon vannak.

$$e^{i\mathbf{k}_T \cdot \underline{r}} = e^{i\mathbf{k} \cdot \underline{r}} e^{i\mathbf{K}_h \cdot \underline{r}} \text{ ahol: } \mathbf{k}_T \in R_1 \text{ (teljes reciprokrács tér)}, \mathbf{k} \in Bz \text{ és } e^{i\mathbf{K}_h \cdot \underline{r}} = u_{\mathbf{k}}(\underline{r})$$

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_T^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (\mathbf{K}_h + \mathbf{k})^2}{2m} \quad \text{teljes energia: } E_T = 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$$

A 2-es a szumma elé a spin miatt kell és $|\mathbf{k}| < \mathbf{k}_F$ (Fermi hullámszám).

$$Bz\text{-ban } N_c \text{ (cella-)állapot: } \frac{V_B}{N_c} = \frac{(2\pi)^3}{V_c N_c} = \frac{(2\pi)^3}{V} \rightarrow \text{ez tartozik egy állapothoz}$$

$$E_T = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} d^3k = \frac{V}{4\pi^3} \int \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} 4k^2 \pi dk = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\hbar^2}{m} \frac{k_F^5}{5}$$

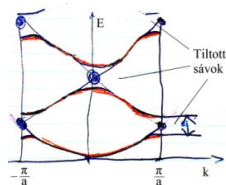
$$N = 2 \sum_{\mathbf{k}} 1, \text{ ahol } |\mathbf{k}| < \mathbf{k}_F$$

$$N = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k = \frac{V}{4\pi^3} \int 4k^2 \pi dk = \frac{V}{\pi^2} \frac{k_F^3}{3}$$

A fentieket átrendezve k_F -et megkaphatjuk:

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

$$\text{Valamint: } \langle E \rangle = \frac{E_T}{N} = \frac{3}{10} \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{3}{5} E_F$$



Kéthullám-közelítés:

$$\varphi_0 = e^{i\mathbf{k} \cdot \underline{r}} \cdot \frac{1}{\sqrt{V}} \text{ (a második tag a normálás miatt)} \quad \varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \underline{r}} e^{i\mathbf{K}_1 \cdot \underline{r}}$$

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\underline{r}), \text{ ahol } U \text{ a periodikus potenciál}$$

$$\varphi = C_0 \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \underline{r}} + C_1 \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \underline{r}} e^{i\mathbf{K}_1 \cdot \underline{r}}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(C_0 k^2 e^{i\mathbf{k} \cdot \underline{r}} + C_1 (\mathbf{K}_1 + \mathbf{k})^2 e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_1) \cdot \underline{r}} + U(\underline{r}) C_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \underline{r}} + U(\underline{r}) C_1 e^{i(\mathbf{K}_1 + \mathbf{k}) \cdot \underline{r}} \right) = E \left(C_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \underline{r}} + C_1 e^{i(\mathbf{K}_1 + \mathbf{k}) \cdot \underline{r}} \right)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} k^2 C_0 + \frac{1}{V_c} \int U(\underline{r}) d^3r C_0 + \frac{1}{V_c} \int U(\underline{r}) e^{i\mathbf{K}_1 \cdot \underline{r}} d^3r C_1 = E C_0$$

$$\frac{1}{V_c} \int U(\underline{r}) d^3r = U_0 := 0 \quad ; \quad \frac{1}{V_c} \int U(\underline{r}) e^{i\mathbf{K}_1 \cdot \underline{r}} d^3r = U_1$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{K}_1)^2 C_1 + \frac{1}{V_c} \int U(\underline{r}) e^{i\mathbf{K}_1 \cdot \underline{r}} d^3r C_0 + \frac{1}{V_c} \int U(\underline{r}) d^3r C_1 = E C_1$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & U_1 \\ U_1^* & \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} + \mathbf{K}_1)^2}{2m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \end{pmatrix} \rightarrow \text{a det legyen 0}$$

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) \cdot \left(\frac{\hbar^2 (\mathbf{k} + \mathbf{K}_1)^2}{2m} - E \right) - |U_1|^2 = 0$$

$$E^2 - E \frac{\hbar^2}{2m} \left[k^2 + (\mathbf{k} + \mathbf{K}_1)^2 \right] + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 k^2 (\mathbf{k} + \mathbf{K}_1)^2 - |U_1|^2 = 0$$

$$E = \frac{\frac{\hbar^2}{2m} \left[k^2 + (\mathbf{k} + \mathbf{K}_1)^2 \right] \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 - 4 \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 k^2 (\mathbf{k} + \mathbf{K}_1)^2 + 4 |U_1|^2}}{2} =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{k^2 + (\mathbf{k} + \mathbf{K}_1)^2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 \left[\frac{k^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{K}_1)^2}{2} \right]^2} + |U_1|^2$$

Messzebb ez a közelítés már nem jó, a többi rendet(?) is figyelembe kell venni.

Szorosan kötött elektron modell:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\underline{r}) \quad H_{\text{atomi}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U_{\text{atomi}}(\underline{r}) \quad H_a \phi = E_a \phi$$

$$\psi(\underline{r}) = \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}} \phi(\underline{r} - \underline{R}_{\mathbf{n}}) \rightarrow \text{az origóban nézve úgy, hogy a többi hat rá}$$

$$\sum_{\mathbf{n}} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_a(\underline{r} - \underline{R}_{\mathbf{n}}) + (V(\underline{r}) - V_a(\underline{r} - \underline{R}_{\mathbf{n}})) \right] C_{\mathbf{n}} \phi(\underline{r} - \underline{R}_{\mathbf{n}}) =$$

$$= E \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}} \phi(\underline{r} - \underline{R}_{\mathbf{n}})$$

$$\sum_{\mathbf{n}} E_a c_{\mathbf{n}} \phi(\underline{r} - \underline{R}_{\mathbf{n}}) + [V(\underline{r}) - V_a(\underline{r} - \underline{R}_{\mathbf{n}})] \phi(\underline{r} - \underline{R}_{\mathbf{n}}) c_{\mathbf{n}} =$$

$$E \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}} \phi(\underline{r} - \underline{R}_{\mathbf{n}}) \quad \bigg/ \quad \phi(\underline{r} - \underline{R}_{\mathbf{m}}) \int d^3r$$

Nem elhanyagoljuk, hanem egy nagy számmal szorozzuk az integrált.

$$E_a c_{\mathbf{m}} + \int \phi(\underline{r} - \underline{R}_{\mathbf{m}}) (V(\underline{r}) - V_a(\underline{r} - \underline{R}_{\mathbf{m}})) \phi(\underline{r} - \underline{R}_{\mathbf{n}}) d^3r c_{\mathbf{n}} = E c_{\mathbf{m}}$$

$$E_a c_{\mathbf{m}} + \sum_{h \rightarrow \text{első szomszédok}} V c_{\mathbf{m} + h} = E c_{\mathbf{m}}$$

$$c_{\mathbf{m}} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{m}}}$$

$$E_a e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{m}}} + V \sum_h e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{\mathbf{m}} + h)} = E e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{m}}}$$

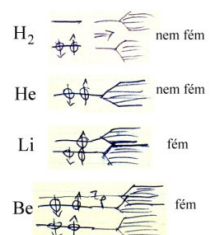
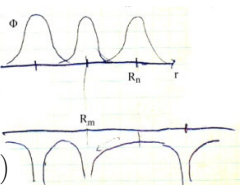
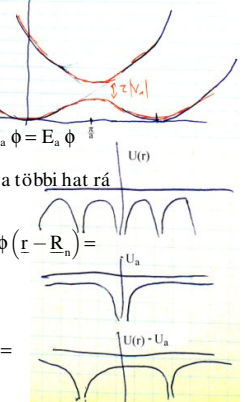
$$E = E_0 + V (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3})$$

$$E = E_0 + 2V (\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3))$$

$$E = E_0 + 2V \cos(ka) \rightarrow 1D - \text{ben}$$

Periódusos rendszer:

Szigetelő: atomonként vagy primitív cellánként páros elektron. Legfelső elektronokkal telt sávot a többi felette lévő sávtól legalább kT energia választja el.
Félvezető: olyan szigetelő, amit a félvezetőtechnológia használ. A fém azért szürke, mert fázishelyesen veri vissza a fényt. A fehér felület össze-vissza.



10. Fémek

Állapotsűrűség, Fermi-nívó, Fermi-felületek. Csoportsebesség, elektronok mozgásegyenlete, Bethe-Sommerfeld-sorfejtés, elektronfajhő, Pauli-szuszeptibilitás, Transzporttulajdonságok, vezetés, hővezetés, Seebeck és Peltier-effektus. Hall effektus, ciklotron-rezonancia

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \rightarrow \text{diszperziós reláció; } E(\mathbf{k}_F) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_F^2}{2m} = E_F$$

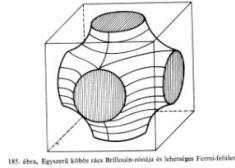
$$D(E) dE = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{E < E(\mathbf{k}) < E + dE} d^3 k = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk = \frac{V}{\pi^2} \frac{2mE}{\hbar^2} \frac{m}{\hbar^2 \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}} dE$$

$$D(E) = \frac{v}{\pi^2} \sqrt{2} \frac{m^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{E} \left(E = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}; dE = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}}{m} dk; dk = \frac{m}{\hbar^2 \mathbf{k}} dE \right)$$

ahol $D(E)$ az **állapot sűrűség**.

$$\text{Csoportsebesség: } v_{\text{csof}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$$

$$\text{Effektív tömegtenzor: } \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}$$



$$\text{Mozgásegyenlet: } \hbar \dot{\mathbf{k}} = \mathbf{e} E + \mathbf{e} (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \left[\frac{\hbar \mathbf{k}}{\tau} \right],$$

ahol az utolsó tag a fékezőerő.

$$D(E) dE = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{E < E(\mathbf{k}) < E + dE} d^3 k = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int dk_\perp dS = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{E(\mathbf{k})=E} \frac{dS}{\left| \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \right|} dE$$

$$D(E) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{E(\mathbf{k})=E} \frac{dS}{\left| \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \right|} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{E(\mathbf{k})=E} \frac{dS}{\hbar |\mathbf{v}|}; \quad \left(\frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} dk_\perp = dE \right)$$

(az e^- rsz.t ~50000K-re kellene melegíteni, hogy klasszikusan viselkedjen)

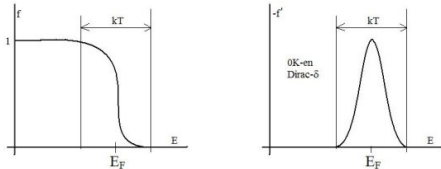
Bethe-Sommerfeld-sorfejtés:

$$I = \int g(E) \cdot f(E, T) dE, \text{ ahol } f(E, T) = \frac{1}{e^{\beta(E-E_F)} + 1} \text{ Fermi-Dirac eloszlás.}$$

$$\downarrow \text{parc.int} \quad ; \quad G'(E) = g(E)$$

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

$f'(E)$ E_F helyen 0 (Dirac- δ miatt) $\rightarrow G(E)$ -t csak E_F helyen kell nézni.



$G(E)$ sorbafejtése E_F körül:

$$I = - \underbrace{\int_{I_0} G(E_F) f'(E) dE}_{I_0} - \underbrace{\int_{I_1} G'(E_F) (E - E_F) f'(E) dE}_{I_1} - \underbrace{\frac{1}{2} \int_{I_2} G''(E_F) (E - E_F)^2 f'(E) dE}_{I_2}$$

$$I_0 = - G(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} f'(E) dE = G(E_F) = \int_{-\infty}^{\infty} g(E) dE$$

$$f'(E) = \frac{-1}{(e^{\beta(E-E_F)} + 1)^2} e^{\beta(E-E_F)} \frac{1}{kT} = - \frac{1}{kT} \frac{1}{(e^{\beta(E-E_F)} + 1)(e^{-\beta(E-E_F)} - 1)}$$

$$I_1 = G'(E_F) \frac{1}{kT} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{E - E_F}{(e^{\beta(E-E_F)} + 1)(e^{-\beta(E-E_F)} - 1)} dE = G'(E_F) kT \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x}{(e^x + 1)(e^{-x} + 1)} dx = 0 \quad (\text{páratlan fv. int. ja})$$

$$I_2 = \frac{1}{2} G''(E_F) \frac{1}{kT} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(E - E_F)^2}{(e^{\beta(E-E_F)} + 1)(e^{-\beta(E-E_F)} - 1)} dE = \frac{1}{2} G''(E_F) (kT)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2}{(e^x + 1)(e^{-x} + 1)} dx = \frac{\pi^2}{6} \frac{1}{2} G''(E_F) (kT)^2$$

$$\text{Tehát } I = \int_{-\infty}^{\infty} g(E) f(E) dE = \int_{-\infty}^{\infty} g(E) dE + \frac{\pi^2}{6} g'(E) (kT)^2 \rightarrow \text{ezt felhasználva:}$$

$$E_{\text{energia}}(T) = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon D(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{\partial \epsilon D(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right)_{E_F} (kT)^2$$

Szigetelőre tesszük, és a kémiai potenciál hőmérséklet-függését nézzük:

$$\begin{aligned} N(T) &= \int_{-\infty}^{\infty} D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon = \int_{-\infty}^{E_F} D(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{\partial D(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right)_{E_F} (kT)^2 = \\ &= \int_{-\infty}^{E_F(T)} D(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} D'(E_F(T)) (kT)^2 = \\ &= \int_{-\infty}^{E_F(0)} D(\epsilon) d\epsilon + \int_{E_F(0)}^{E_F(T)} D(\epsilon) d\epsilon + D' \frac{\pi^2}{6} [E_F(0) + (E_F(T) - E_F(0))] (kT)^2 = \\ &= N + D(E_F(0)) [E_F(T) - E_F(0)] + \frac{\pi^2}{6} D'(E_F(0)) (kT)^2 \end{aligned}$$

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

$$E_{\text{energia}}(T) = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon + \int_{E_F(0)}^{E_F(T)} \epsilon D(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{\partial \epsilon D(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right)_{E_F=E_F(0)} (kT)^2 =$$

$$= E_{\text{energia}}(0) + [E_F(T) - E_F(0)] E_F D(E_F) + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{\partial \epsilon D(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right)_{E_F=E_F(0)} (kT)^2 =$$

$$= E_{\text{energia}}(0) + \frac{\pi^2}{6} D(E_F) (kT)^2, \text{ ahol } D(E_F) \text{ az állapot} - \rho$$

$$\text{Elektronfajhő: } c_v = - \frac{\partial E_{\text{energia}}}{\partial T} = \frac{\pi^2}{3} D(E_F) k^2 T$$

Pauli-szuszeptibilitás:

$$\Delta E = g \mu_B B; g = 2; \mu_B = \frac{e \hbar}{2m}; B = \mu H$$

$$M = \frac{1}{V} (g \mu_B) (N \uparrow - N \downarrow)$$

$$N \uparrow = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D(\epsilon + g \mu_B B)}{2} f(\epsilon) d\epsilon = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D(\epsilon)}{2} f(\epsilon) d\epsilon + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D'(\epsilon)}{2} f(\epsilon) d\epsilon g \mu_B B$$

$$M = \frac{(g \mu_B)^2}{V} \int_0^{\infty} D'(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon B$$

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{(g \mu_B)^2}{V} \mu_0 \int_{-\infty}^{\infty} D'(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon = \frac{(g \mu_B)^2}{V} \mu_0 D(E_F)$$

$$D(\epsilon) = \alpha \sqrt{\epsilon}; D'(\epsilon) = \frac{\alpha}{2 \sqrt{\epsilon}}; \quad \underbrace{N}_{e^- \text{ ok száma}} = \int_0^{E_F} \alpha \sqrt{\epsilon} d\epsilon = \alpha \left(\frac{2}{3} \epsilon^{3/2} \right)_0^{E_F} = \frac{2}{3} \alpha E_F^{3/2}$$

$$D(E_F) = \frac{3N}{2E_F^{3/2}} E_F^{1/2} = \frac{3N}{2E_F}; \quad \chi = \frac{N}{V} \frac{3}{2} (g \mu_B)^2 \mu_0 \frac{1}{E_F}$$

Transzporttulajdonságok:

e^- -ok mozgása fázistérben $\rightarrow$ eloszl. fv.: $f(\mathbf{k}, \mathbf{r})$

$$N = 2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) d^3 k d^3 r; \quad \mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}; \sigma = \frac{1}{\rho} \rightarrow \text{vezetőképesség}$$

$$\mathbf{j}_{\text{elektromos}} = 2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int e \mathbf{v} f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) d^3 k; \quad \mathbf{j}_{\text{ho}} = 2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int (\epsilon(\mathbf{k}) - E_F) \mathbf{v} f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) d^3 k$$

Hővezetés: Wiedemann-Franz - törvény $\downarrow$

$$\mathbf{j}_{\text{ho}} = - \kappa \text{grad} T \quad (\mathbf{j}_{\text{el}} = 0); \quad \kappa = \frac{\pi^2 k^2 T^2}{3e^2} \sigma(E_F) \text{ Lorentz-szám: } L: = \frac{\kappa}{T \sigma} = \frac{\pi^2 k^2}{3e^2}$$

Kereszteffektusok: – **Seebeck-eff.:**

$$\mathbf{E} = S \text{grad} T \quad (\mathbf{j}_{\text{el}} = 0); \quad S = \frac{\pi^2 k^2 T}{3e^2} \left(\frac{\partial \ln \sigma}{\partial \epsilon} \right)_{\epsilon=E_F}$$

Termofesz: hőmérséklet gradienstől lesz télerősség.

– **Peltier-eff.:**

$$\mathbf{j}_{\text{ho}} = \pi \mathbf{j}_{\text{el}}; T = \text{áll}$$

Hall-effektus: $R_H \rightarrow$ Hall-állandó.

$$E = R_H \mathbf{j}_B \rightarrow \frac{U}{l} = R_H \frac{1}{ld} B \rightarrow U = \frac{R_H}{d} IB$$

$$e(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = e \mathbf{E}; \quad \mathbf{v} B = \mathbf{E}; \quad \mathbf{j} = en \mathbf{v}$$

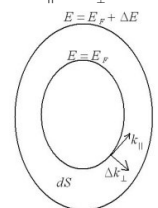
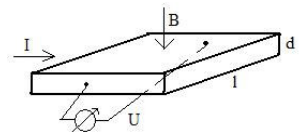
$$E = \frac{1}{en} \mathbf{j}_B \Rightarrow R_H = \frac{1}{ne}; \quad e^- \text{ részecske töltése, } n - \text{ töltés szám/m}^3, \mathbf{v} - \text{ drift sebesség}$$

Ciklotron rezonancia: (mágneses térben a fém hogyan rezonál – MRI, MSR...)

mozgásegyenlet: $\hbar \dot{\mathbf{k}} = e(\mathbf{v} \times \mathbf{B}); \quad \mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}}; \quad T = \oint dt = \oint \frac{d\mathbf{k}_{||}}{k_{||}}; \quad \hbar \dot{\mathbf{k}}_{||} = e \mathbf{v} \cdot \mathbf{B}$

$$T = \oint \hbar \frac{d\mathbf{k}_{||}}{e \mathbf{v} \cdot \mathbf{B}} = \frac{\hbar}{eB} \int \frac{1}{v_{||}} d\mathbf{k}_{||} = \frac{\hbar}{eB} \int \frac{d\mathbf{k}_{||}}{\frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \right)_{||}} =$$

$$= \frac{\hbar^2}{eB \Delta E} \oint k_{||} d\mathbf{k}_{||} = \frac{\hbar^2}{eB} \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{E=E_F}; \quad \omega = \frac{2\pi}{T} = \frac{2\pi eB}{\hbar^2} \frac{1}{\left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{E=E_F}}$$



11. Mágneses tulajdonságok

Atomi paramágnesség, Curie-törvény, Pauli szuszeptibilitás, Landau- diamágnesség,

Atomi paramágnesség:

L - pálya imp.mom.; L^2 SÉei: $\hbar^2 l(l+1)$ L_z : $-\hbar \dots \hbar$
S - spin imp.mom. $\hbar^2 s(s+1)$ S_z : $-\hbar \dots \hbar$
J - össz mom. $\hbar^2 j(j+1)$ J_z : $-\hbar \dots \hbar$

M - mágneses mom. $\underline{M} = \frac{\mu_B}{\hbar} (\underline{L} + 2 \underline{S})$; $\underline{E} = \underline{M} \underline{B} = - g \mu_B \underline{m} \underline{B}$

(ahol g a giromágneses faktor) $-j < m < j$ ($n=N/V$ - atom sűrűség)

$$M_z = n g \mu_B \frac{\sum_{m=-j}^j m e^{-g \mu_B m B}}{\sum_{m=-j}^j e^{-g \mu_B m B}}; S = j \frac{\sum_{m=-j}^j m e^{\frac{m x}{j}}}{\sum_{m=-j}^j e^{\frac{m x}{j}}} = \frac{d}{dx} \ln z(x); z(x) = \sum_{m=-j}^j e^{\frac{m x}{j}}$$

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

$$S = \frac{d}{dx} \ln z(x) = \frac{z'(x)}{z(x)} = \frac{\text{sh} \left(\frac{x}{2j} \right)}{\text{sh} \left[x \left(1 + \frac{1}{2j} \right) \right]} = \frac{\left(1 + \frac{1}{2j} \right) \text{ch} \left[x \left(1 + \frac{1}{2j} \right) \right] \text{sh} \left(\frac{x}{2j} \right)}{\text{sh}^2 \left(\frac{x}{2j} \right)} -$$

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

Ahol $B_j(x)$ a Brillouin-fv.

- 1) $j = \frac{1}{2}$: $B_{\frac{1}{2}}(x) = 2 \text{cth} x - \text{cth} x = 2 \frac{\text{ch}^2(x) + \text{sh}^2(x)}{2 \text{sh} x \text{ ch} x} - \frac{\text{ch} x}{\text{sh} x} = \text{th} x$
- 2) $j \rightarrow \infty$: $B_{\infty}(x) = \text{cth} x - \frac{1}{x}$ (Langevin - fv.)
- 3) $x \rightarrow \infty$: $\lim_{x \rightarrow \infty} B_j(x) = 1$
- 4) $x < 1$:

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

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

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

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

$$\chi = \frac{dM}{dH} = n (g \mu_B)^2 \frac{j(j+1)}{3} \mu_0 \frac{1}{kT} = \frac{C}{T} \rightarrow \text{Curie-törvény (C - Curie együttható)}$$

(A spinek nem hatnak kölcsön!)

Paramágnesen (adiabatikus) lemágnesezés: 0K körül $\rightarrow$ 1K-es gadolinium sót raknak a 4,7K-es He-ba, bekapcsolják a mágneses teret, így forralni fogja a He-ot. Ezután elszívják a He-ot és kikapcsolják a teret, így 1mK-es lesz az anyag.

Atomi diamágnesség:

$$m \rho \omega^2 = F \text{ (ahol } \rho \text{ a sugár)} \quad F + e \rho \omega B = m \rho (\omega + \Delta \omega)^2$$

$$m \rho \omega^2 + m \rho \omega 2 \Delta \omega = F + e \rho \omega B \quad ; \quad \Delta \omega = \frac{eB}{2m}$$

$$M_i = -e \frac{\Delta \omega}{2\pi} \rho_i^2 \pi = -e \cdot \frac{\Delta \omega}{2} \rho_i^2$$

$$M_z = -e \frac{\Delta \omega}{2} \sum_i \rho_i^2 = -ze \frac{\Delta \omega}{2} \langle \rho^2 \rangle = -ze \frac{\Delta \omega}{2} (\langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle) = -ze \frac{\Delta \omega}{3} \langle r^2 \rangle$$

$$M = -n \frac{ze^2}{6m} \langle r^2 \rangle B \quad ; \quad \chi = -n \frac{ze^2}{6m} \langle r^2 \rangle \mu_0$$

Landau-diamágnesség: A pályamomentumból adódik - klasszikusan nem lehet kimutatni. (Szabad e^- -ok mágneses térben körpályán mozognak és csökkentik a külső mágneses teret.)

$$\chi_p = \frac{N}{V} \frac{3}{2} \frac{\mu_e \mu_0}{E_F^{\frac{1}{2}}} \quad ; \quad \mu_e = \left(g \mu_B \frac{1}{2} \right) = \mu_B \quad ; \quad H(p,r) = \frac{(p - eA(r))^2}{2m}$$

$$\hat{H} = \int d^3r \left[\frac{1}{2} \nabla \psi^\dagger \cdot \nabla \psi + \psi^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi + \psi^\dagger \psi A(r) \cdot \nabla \psi \right]$$

$$\underline{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial p} & \frac{\partial \tilde{p}}{\partial r} \\ \frac{\partial \tilde{r}}{\partial p} & \frac{\partial \tilde{r}}{\partial r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{I} & -e \frac{\partial A(r)}{\partial r} \\ 0 & \underline{I} \end{pmatrix} \quad ; \quad \det \underline{J} = 1$$

Kvantumosan:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y - eB\hat{x})^2 + \hat{p}_z^2}{2m} \quad ; \quad \Psi(x,y,z) = e^{i(k_y y + k_z z)} \Phi(x) \quad ; \quad \omega = \frac{eB}{m} \quad ; \quad x_0 = \frac{\hbar k_y}{eB}$$

$$\left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{(\hbar k_y - eBx)^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) = \Phi(x) = E \Phi(x)$$

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

Lin oscz. SÉ.: $\hbar \omega (n+1/2)$ (absz. 0K-en számolunk)

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

$$E = 2 \sum_{k_y, k_z, n} (E(k_z, n) - E_F) = 2 \sum_n \sum_{k_z} (E(k_z, n) - E_F) \sum_{k_y} 1$$

:

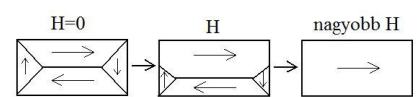
12 Állandó mágneses momentummal rendelkező anyagok:

Ferromágnesek, antiferromágnesek, ferrimágnesek, spinűveg. Ferromágneses domének, hiszterézis, Belső tér közelítés. Curie-Weiss-törvény. Spinhullámok. Antiferromágnesség, spinűvegek. Mágneses ellenállás

- | | |
|---------------------|--|
| 1) Ferromágnes: | ↑↑↑↑↑↑↑↑ (Fe, Ni, Co) |
| 2) Antiferromágnes: | ↑↓↑↓↑↓↑↓ (Cr, Mn) |
| 3) Ferrimágnes: | ↑↑↑↑↑↓↑↑ |
| 4) Spinűveg: | ↑↑↑↑↑↓↑↓ (szilárd oldat - rendezetlen ötvözet) |

Ferromágneses domének:

a két domain határán lesz egy olyan tartomány, ahol a spinek rosszul illeszkednek, és ez a fal energiavesztéset okoz.



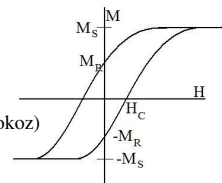
Hiszterézis görbe:

M_S - telítettségi mágneszettség

M_R - Remanens (maradék) mágneszettség

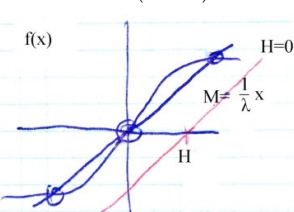
H_C - Koercitív erő (azaz erő, ami 0 mágneszettséget okoz)

(Transzformátor: H_C legyen kicsi)



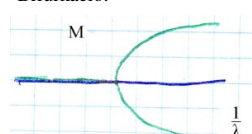
Weiss-elmélet (klasszikus):

$$M = n g \mu_B j B_j \left(\frac{g \mu_B j B}{kT} \right) = f(H + \lambda M), \text{ ahol } \lambda M \text{ a belső mágneses tér}$$



Ha λ -t csökkentjük, csak egy metszéspont lesz.

Bifurkáció:



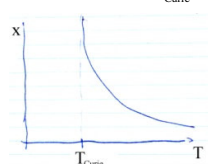
pl Winchester mágnes

$$H = 0 \Rightarrow M = \frac{1}{\lambda} x \quad ; \quad H \neq 0 \Rightarrow M = \frac{1}{\lambda} (x - H)$$

Kis terek esetén sorbafejtés 0 körül:

$$M = \chi_{\text{param}} (H + \lambda M) \Rightarrow M = \frac{\chi_p}{1 - 2\chi_p} H = \frac{C}{T - \lambda C} H \quad \left(\text{felh: } \chi_p = \frac{C}{T} \quad ; \quad C\lambda = T_{\text{Curie}} \right)$$

$$\text{Innen: } M = \frac{C}{T - T_{\text{Curie}}} H \text{ a Curie-Weiss törv. (C a Curie konst.)}$$



$$\text{Hamilton-op: } H = - \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j \quad (J_{ij} \text{ a kicsirélődési } f)$$

Magnon („Spinhullám” - a spinváltozás továbbterjedése):

(Alacsony T miatt lehet ∞ -ig integrálni)

$$\langle n \rangle = \sum_k \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_k} - 1} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{Bz} \frac{k^p}{e^{\beta \hbar \omega_k} - 1} d^3 k = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{k^{p+2} 4\pi}{e^{\beta \hbar \omega_k} - 1} dk$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad ; \quad x = \beta \hbar \omega_k^2 \Rightarrow k = \sqrt{\frac{1}{\beta \hbar \alpha}} x$$

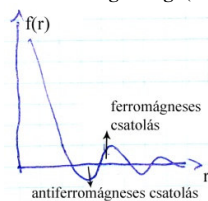
$$= \frac{V}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{\beta \hbar \alpha} \right)^{\frac{p+3}{2}} \int_0^\infty \frac{2\pi x^{\frac{p+2}{2}}}{e^x - 1} \frac{1}{2\sqrt{x}} dx \propto T^{\frac{p+3}{2}} \quad \Rightarrow \quad \langle n \rangle \propto T^{\frac{3}{2}}$$

Ez a Bloch-féle $T^{\frac{3}{2}}$ -es törvény.

$$E_{\text{magnon}} = \sum_n \frac{\hbar \alpha k^2}{e^{\beta \hbar \alpha k^2} - 1} \propto T^{\frac{5}{2}}$$

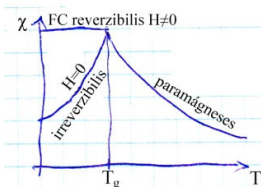
$$C_{\text{magnon}} \propto T^{\frac{3}{2}}; \quad C = \underbrace{a T^3}_{\text{fonon}} + \underbrace{\beta T}_{\text{elektron}} + \underbrace{\gamma T^{\frac{3}{2}}}_{\text{magnon}}$$

Antiferromágnesség: (Curie-Weiss törvényhez hasonlóan lehet számolni)



Paramágnes: $\chi_p = \frac{C}{T - T_c}$;

Antiferromágnes: $\chi_a = \frac{C}{T - T_N}$ (ahol T_N a Néel-hőmérséklet)

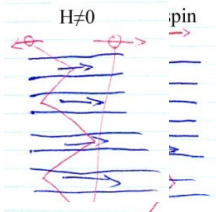
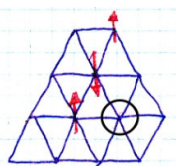


Spinüveg: (pl: Cu – 1-2%Mn vagy Fe; Au – 1-2%Mn vagy Fe)

T_g -ig paramágnes, ez alatt spinüveg.

Frustrációs modell:

a bekarikázott részen nem „tudja”, merre álljon a spin:



pár nm-es rétegek

Az ellentétes irányún törik.

($H \neq 0$ -nál 50%-os az effektus)

13. Szupravezetés

A szupravezetés története. London-elmélet. Első és másodfajú szupravezetők. Fluxuskvantálás, izotópeffektus, magas hőmérsékletű szupravezetők

A szupravezetés története:

1908. Heike Kamerlingh Onnes: He cseppfolyósítása, 4,22 K-en szuperfolyékony.

1986. kerámia, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, $T_c = 90\text{K}$

1987. 30K, Nobel-díj: Johannes Georg Bechart, Karl Axl Müller

London-elmélet:

$$\text{rot } \underline{H} = \underline{j} + \frac{\partial \underline{D}}{\partial t}, \quad \text{de } \frac{\partial \underline{D}}{\partial t} = 0, \text{ mert csak a stat. áramot nézzük}$$

És $\underline{j} = \sigma \underline{E}$ nem érvényes, mert gyorsulnak az elektronok.

$$\underline{m} \dot{\underline{v}} = q \underline{E} \quad \underline{j} = qn \underline{v}$$

Meister-effektus:

$$\frac{d^2 B(x)}{dx^2} = \frac{1}{\lambda^2} \rightarrow B(x) = B_0 e^{\pm \frac{x}{\lambda}} \quad \lambda = q \sqrt{\frac{\hbar m_0}{m}} \rightarrow \text{behatolási mélység}$$

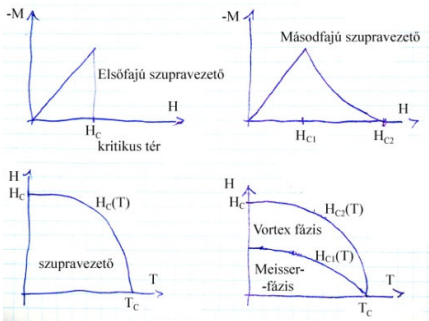
Ha feltesszük, hogy: $\underline{j} = \frac{1}{\mu_0 \lambda^2} \underline{A}$ akkor egyszerűbben jutunk a megoldáshoz.

($\underline{A}$ – vektorpotenciál)

$$\text{rot } \underline{\mu_0 j} = -\text{rot rot } \underline{A}$$

$$-\frac{1}{\lambda^2} \text{rot } \underline{A} = -\frac{1}{\lambda^2} \underline{B}$$

Meister-effektus: a szupravezetőbe „nem megy bele” a tér (B belül 0).

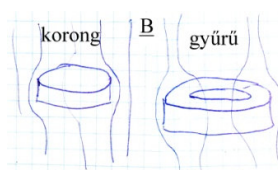


$$\underline{B} = \mu \underline{H} = \mu_0 \mu_r \underline{H} = \mu_0 (1 + \chi) \underline{H} \quad \text{ha } \chi = -1 \rightarrow B = 0$$

A szupravezető szuszeptibilitása $-1 \rightarrow$ tökéletes diamágnes.

A másodfajú szupravezetőknél a kritikus tér után a tér már belemegy a szupravezetőbe (összesűrűsödik $\rightarrow$ örvényvonal $\rightarrow$ belül kiterjed $\rightarrow$ örvények (vortex))

H-T diagram normál fémre és szupravezetőre, meg elsőfajúra és másodfajúra.



A kritikus pont alatt a mágneses tér kikerül a szupravezetőt.

Ha belemegy a mágneses tér a szupravezetőbe a kritikus pont fölött, akkor bennmarad a kritikus pont alatt is, ha 0 tértől hűtjük le, akkor nem lesz közepén tér.

Fluxuskvantálás: Mekkora tér fagyhat bele a lyukba?

Félklasszikus kvantálás:

$$\oint \underline{p} \cdot d\underline{r} = nh \quad ; \quad \underline{H} = \frac{(p - q \underline{A})^2}{2m} = \frac{m v^2}{2}$$

$$m \underline{v} = \underline{p} - q \underline{A} \Rightarrow \underline{p} = m \underline{v} + q \underline{A}$$

A fentiek alapján az első integrálba visszahelyettesítve:

$$nh = \oint (m \underline{v} + q \underline{A}) \cdot d\underline{r}$$

Mivel a szupravezetőknek csak a felületén folyik áram, ezért $m \underline{v} = 0$, így:

$$q \oint \underline{A} \cdot d\underline{r} = q \oint \text{rot } \underline{A} \cdot d\underline{f} = q \int \underline{B} \cdot d\underline{f} = q \Phi$$

$$\Phi = \frac{nh}{q} \rightarrow \text{az anyag fluxusa kvantált}$$

$$\Phi_{\text{mért}} = \frac{nh}{2q} \rightarrow \text{Cooper – párok } (2e^-)$$

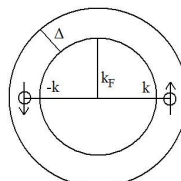
Pinning $\rightarrow$ tűzdelve: csak a pinningelt szupravezetők tudnak lebegni (rajta kell maradni egy konstans körön). Magas hőmérsékleten a szupravezető mindig másodfajú.

Izotópeffektus: Ha nehezebb izotópot veszünk, T_c eltolódik:

$$T_c \propto \frac{1}{\sqrt{M}} \rightarrow \text{csak egyfajta anyagon belül igaz}$$

Mi köze az atomtömegnek a szupravezetéshez (hiszen az elektronok csinálják, nem?)?

1957. BCS-modell: Bardin-Cooper-Schrieffer (1972-ben Nobel-díj)



Másodkvantált formalizmus (nem perturbatív számolás).

Az abszolút értékük nulla lesz (szingulett állapot – lehetne triplett is, de nem az).

Párok alakulnak ki (bozonok lesznek, sokkal nagyobb szabadság $\rightarrow$ az anyagban is mehetnek – az egész anyagon végighalad).

Szupravezetést a fonon-fonon kölcsönhatás és a szabad elektronok hozzák létre $\rightarrow$ magas hőmérsékleten egyik sincs.

Szupravezetők: kis mágneses tér mérésére, nagy mágneses tér előállítására $\rightarrow$ csak addig, amíg bírják a saját mágneses területet, vagy az azt létrehozó áramot, különben felrobban.

Magas hőmérsékletű szupravezetők:

kerámiák $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$; $(\text{LaSr}) \rightarrow \text{La}$

Valószínűleg:

1) Vezető O atom p elektronja (csak a réz síkok vezetnek $\rightarrow$ irányban)

2) Cu^{2+} ionok között antiferromágneses csatolás

